

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

**Université Djillali Liabes De Sidi Bel Abbès**  
**Faculté de Génie Electrique**  
**Département d'Électronique**



**THESE**

Présentée par

**M<sup>r</sup> KHELIFI Seyf Allah**

Pour l'obtention du diplôme de

**DOCTORAT EN SCIENCES**  
**Option : Microélectronique**

Thème :

**Optimisation des paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire réalisée à  
partir de matériaux ternaires ou quaternaires basés  
sur les semiconducteurs II-VI**

Thèse Soutenue le : 05/04/2017

devant le jury composé de :

M <sup>r</sup> M. Chellali	Professeur	Université de Sidi Bel Abbès	Président
M <sup>me</sup> H. Mansour-Mazari	Professeur	Université de Sidi Bel Abbès	Promoteur
M <sup>r</sup> A. Belghachi	Professeur	Université de Bechar	Co-encadreur
M <sup>r</sup> A. Hamdoune	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
M <sup>me</sup> A. OuldAbbas-Bensaoula	Professeur	Université de Tlemcen	Examinatrice

**Année universitaire 2016-2017**

## *Dédicaces*

*A tous ceux et celles qui me sont chère(s)*

## **REMERCIEMENTS**

Le travail de la thèse de doctorat, a été réalisé au laboratoire de MicroElectronique Appliquée AMEL de l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès.

Je voudrais tout particulièrement exprimer mes sincères reconnaissances et ma profonde gratitude à Madame Z. BENAMARA, Professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès et directrice du laboratoire AMEL, de m'avoir accueilli dans son laboratoire de recherche.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à Monsieur M. CHELLALI, Professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès, qui m'a fait l'honneur d'accepter la présidence du jury de cette thèse.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mes sincères remerciements à Monsieur A. HAMDOUNE et à Madame A. OULDABBAS-BENSAOULA, Professeurs à l'Université Aboubakr Belkaid de Tlemcen, qui ont manifesté l'amabilité d'examiner ce travail.

Je tiens à remercier Madame H. MANSOUR-MAZARI, Professeur à l'Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès, pour avoir encadré ce travail de thèse. Ses orientations et ses discussions scientifiques m'ont été d'une aide considérable, ses conseils judicieux et ses encouragements ont été bénéfiques dans la réalisation de cette thèse.

Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur A. BELGHACHI, Professeur à l'Université Tahri Mohammed de Bechar et Co-encadreur de ce travail de thèse. Il a su m'orienter et me témoigner aide et assistance.

Mes remerciements concernent également les membres du laboratoire de MicroElectronique Appliquée AMEL, ainsi que tous mes amis (es) et tous mes collègues avec qui j'ai travaillé.

# SOMMAIRE

<b>Introduction Générale</b> .....	<b>1</b>
<b>Chapitre I : Rappels, Notions Générales et Système Photovoltaïque</b>	
<b>I.1 Introduction</b> .....	<b>3</b>
I.2 L'énergie solaire.....	3
I.3 Inclinaison de la terre.....	5
I.4 L'interaction photon/semiconducteur.....	5
I.4.1 Diagramme de bande.....	5
I.4.2 Coefficient d'absorption.....	6
I.5 La conversion photovoltaïque solaire.....	7
I.6 Les semiconducteurs.....	8
I.7 Le dopage.....	9
I.8 La jonction P-N.....	12
I.9 La cellule solaire.....	14
I.9.1 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire.....	14
I.9.1.1 Calcul du courant d'éclairement.....	15
I.9.1.1.1 Région neutre de type N.....	16
I.9.1.1.2 Région neutre de type P.....	17
I.9.1.1.3 Région de la zone de charge d'espace.....	18
I.9.1.2 Caractéristique courant-tension.....	19
I.9.1.2.1 Courant de court-circuit $I_{CC}$ .....	21
I.9.1.2.2 Tension à circuit ouvert $V_{CO}$ .....	21
I.9.1.2.3 Facteur de forme FF.....	21
I.9.1.2.4 Rendement de conversion d'énergie $\eta$ .....	22
I.9.1.2.5 La résistance série $R_S$ .....	23
I.9.1.2.6 La résistance shunt $R_{Sh}$ .....	23
I.9.1.3 Modélisation de la cellule solaire.....	23
I.9.1.3.1 Modélisation idéale.....	23
I.9.1.3.2 Modélisation réelle.....	24

I.9.2 Différents types de cellules solaires.....	26
I.9.2.1 Cellule solaire de Première génération.....	26
I.9.2.2 Cellules solaires de deuxième génération.....	26
I.9.2.2.1 Les cellules solaires à couche mince de silicium .....	26
I.9.2.2.2 Les cellules solaires organiques.....	27
I.9.2.3 Cellules solaire de troisième génération.....	27
I.9.2.3.1 Cellules solaires multi-jonctions.....	28
I.9.2.3.2 Puits quantique et bande intermédiaire de cellule solaire (QD-IBSC)...	29
<b>I.10 Conclusion.....</b>	<b>31</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>32</b>
<b>Chapitre II : Propriétés des composés II-VI binaires et ternaires et caractéristiques des cellules solaires à bande intermédiaires</b>	
<b>II.1 Introduction.....</b>	<b>34</b>
II.2 Etude des composés binaires.....	34
II.2.1 Le tellure de cadmium (CdTe).....	36
II.2.2 L'oxyde de Zinc (ZnO).....	39
II.2.3 Tellure de Zinc (ZnTe).....	42
II.3 Les techniques de dépôts de couches minces.....	44
II.4 Principe de dépôt de couches minces.....	45
II.5 Différentes méthodes d'élaboration des couches minces.....	46
II.5.1 La pulvérisation cathodique.....	46
II.5.2 Evaporation sous vide.....	48
II.5.3 L'Epitaxie par Jets Moléculaires.....	49
II.5.4 Ablation laser.....	51
II.5.5 Dépôt chimique en phase vapeur (CVD).....	52
II.5.6 Dépôts physiques en phase vapeur (PVD).....	53
II.5.7 Méthode de sol gel.....	53
II.6 Alliage ternaire des composées binaires II-VI.....	54
II.6.1 Cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) à base de semiconducteur II-VI ternaire : ZnTe(O).....	55
II.6.1.1 Propriétés optiques de ZnTe(O).....	59
II.6.1.2 Propriétés électriques de ZnTe(O).....	62

II.6.2 Techniques de l'incorporation de l'oxygène dans ZnTe.....	63
<b>II.7 Conclusion.....</b>	<b>65</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>66</b>
<b>Chapitre III : Concept de bande intermédiaire et logiciel de simulation SCAPS</b>	
<b>III.1 Introduction.....</b>	<b>68</b>
III.2 Bref aperçu du concept de bande intermédiaire (IB).....	69
III.3 Description de la cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC).....	72
III.4 Recombinaison des porteurs et Modèle de Transport.....	73
III.4.1 Recombinaison par piège.....	75
III.4.2 Recombinaison en volume de type RSH.....	75
III.4.3 Recombinaison en surface.....	76
III.5 Recombinaison des porteurs et Modèle de Transport pour une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC).....	76
III.6 Présentation du logiciel SCAPS.....	81
III.7 Définition d'une cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O).....	85
III.8 Le panneau I(V).....	88
<b>III.9 Conclusions.....</b>	<b>88</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>90</b>
<b>Chapitre IV : Simulation numérique et Résultats obtenus</b>	
<b>IV.1 Introduction.....</b>	<b>91</b>
IV.2 Présentation des deux cellules.....	91
IV.3 Résultats de simulation numérique et interprétations.....	92
IV.3.1 Simulation de l'homojonction $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O).....	93
IV.3.1.1 Etude de l'influence du dopage $N_i$ de la bande intermédiaire (IB) sur les grandeurs photovoltaïques.....	94
IV.3.1.2 Etude sur la caractéristique J-V.....	97
IV.3.1.2 Effet de la position énergétique $E_i$ de la bande intermédiaire sur les grandeurs photovoltaïques.....	98
IV.3.1.3 Effet de la résistance série $R_S$ sur les grandeurs photovoltaïques.....	102
IV.3.1.4 Caractéristique J(V) pour une structure homojonction ZnTe sans et avec oxygène.....	104
IV.3.2 Simulation de l'hétérojonction $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.....	106

IV.3.2.1 Etude numérique des paramètres.....	107
IV.3.2.2 Influence de la densité d'oxygène $N_i$ sur les caractéristique de l'hétérojonction $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.....	108
IV.3.2.3 Rendement quantique.....	110
IV.3.2.4 Effet de l'épaisseur du front ZnTe sur les grandeurs photovoltaïques...	112
IV.3.2.5 Effet du dopage $N_a$ de la couche absorbante ZnTe(O) sur les grandeurs photovoltaïques.....	113
IV.3.2.6 Effet du niveau énergétique $E_i$ sur le rendement de conversion $\eta$ et de la densité du courant de court circuit $J_{SC}$ .....	114
IV.3.2.7 L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur les grandeurs photovoltaïques.....	116
IV.3.2.8 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur la densité du courant de court circuit $J_{SC}$ .....	117
IV.3.2.9 Caractéristique $J(V)$ pour une structure hétérojonction ZnTe sans et avec oxygène.....	117
IV.3.2.10 L'effet de la résistance série $R_s$ sur la densité du courant de court circuit $J_{SC}$ .....	119
<b>IV.4 Conclusion.....</b>	<b>120</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>121</b>
<b>Conclusion Générale.....</b>	<b>123</b>

## *Introduction générale*

Les défis énergétiques auxquels nous sommes confrontés sont sévères. L'industrie mondiale et les besoins quotidiens reposent actuellement fortement sur des sources d'énergie non renouvelables comme le charbon, le pétrole et le gaz naturel, qui finiront par diminuer et ne pourront pas être renouvelées. Consommer constamment ces matériaux entraînera des conséquences environnementales et détruira l'écosystème de notre planète. En revanche, les nombreux types de ressources énergétiques renouvelables telles que l'énergie éolienne et solaire sont constamment renouvelés et ne seront jamais épuisés.

Les enjeux économiques et environnementaux liés à l'énergie poussent au développement des énergies renouvelables. L'apport du photovoltaïque pour la production d'électricité à l'échelle mondiale reste extrêmement faible, surtout au regard de la quantité considérable d'énergie solaire reçue chaque année par la terre. Le développement de la filière solaire apparaît inéluctable, mais reste freiné par des coûts de revient élevés. La filière silicium, qui concerne les cellules de première génération dominant le marché et qui consomment généralement plus de matériaux et donc sont des dispositifs plus coûteux, atteint aujourd'hui des rendements de conversion de l'ordre de 25%, proches de la limite thermodynamique théorique de 32% pour ces systèmes. Les cellules en couches minces qui concerne les cellules de deuxième génération, moins coûteuses et utilisant des structures à couches minces, présentent cependant des rendements inférieurs et/ou des difficultés à adapter leur production à l'échelle industrielle. Les cellules dites de troisième génération, rassemblent des concepts susceptibles d'outrepasser la limite théorique de 32% des dispositifs 'monogap' classiques [1]. Selon les technologies, les rendements de conversion théoriques maximum pourraient être supérieurs à 63%. Les cellules photovoltaïques de III<sup>ème</sup> génération visent à récolter plus d'énergie solaire en réduisant ou en éliminant les effets de perte d'énergie.

L'effet photovoltaïque est le phénomène de génération de différence de potentiel électrique par la lumière. Les photons incidents induisent la transition des électrons d'un niveau d'énergie inférieure à un niveau d'énergie supérieure. Dans la conception pratique des cellules solaires, le champ électrique dans la zone de déplétion (ZCE) d'une diode de jonction P-N est utilisé pour séparer des paires électron-trou excitées, qui sont ensuite collectées par des contacts ohmiques.

La bande interdite du semiconducteur est une considération importante pour les cellules solaires, où un matériau à grande bande interdite est préféré pour une tension de circuit ouvert plus élevée, en raison d'une moindre recombinaison et d'une plus grande barrière de potentiel,



tandis qu'un matériau à faible bande interdite est préféré pour un courant de court-circuit plus élevé, c'est le cas des semiconducteurs de la famille II-VI. Pour un semiconducteur donné, l'augmentation de l'absorbance optique est une autre considération puisqu'elle est liée au courant de court-circuit.

Récemment, les semiconducteurs II-VI ont également attiré beaucoup d'attention. Le rendement le plus élevé atteint actuellement est d'environ 40% [3]. Néanmoins, le processus de fabrication est complexe pour les cellules multi-jonctions et l'adaptation de courant entre différentes sous-cellules doit être assurée afin d'atteindre un rendement élevé. Dans les cellules solaires de troisième génération, des niveaux d'énergie sont insérés dans la bande interdite des matériaux, où un dispositif d'une seule jonction peut fournir un large spectre d'absorption. C'est le concept de la cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC). Il est prometteur dans l'aspect qu'il évite le processus compliqué de conception et de fabrication de cellules multi-jonctions et peut potentiellement atteindre un rendement encore plus élevé.

L'objectif de cette étude est de faire une modélisation d'une cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) en vue d'optimiser les paramètres de sorties de la cellule.

Ce mémoire de thèse se divise en quatre chapitres.

Dans le premier chapitre on va rappeler les notions générales sur la conversion photovoltaïque.

Le deuxième chapitre est consacré aux propriétés physiques et structurales des composés binaires II-VI et leurs diverses technologies. L'intérêt est porté, en particulier, sur le ternaire ZnTeO qui est utilisé dans les cellules solaires à bande intermédiaires. Nous rappellerons le premier modèle développé dans la littérature.

Le troisième chapitre comprend un bref aperçu sur le concept et l'intérêt d'une cellule solaire à bande intermédiaire et la présentation du logiciel SCAPS. C'est ce dernier qui a été choisi pour la simulation des caractéristiques d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC).

Dans le dernier chapitre nous présenterons et discuterons les résultats obtenus sur deux structures étudiées, une cellule solaire homojonction à bande intermédiaire à base de  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) et une cellule solaire hétérojonction à bande intermédiaire à base de  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.

Enfin nous terminerons notre travail par une conclusion générale et des perspectives.

---

[1] N. Rousseau, Thèse de Doctorat, Université de Nantes, France, 2013.

# CHAPITRE I

Rappels, Notions Générales et  
Système Photovoltaïque

## I.1 Introduction

Depuis quelques décennies, la technologie des semiconducteurs a attiré un immense intérêt grâce aux propriétés exceptionnelles qu'ils présentent. Depuis, les matériaux semiconducteurs se trouvent pratiquement dans la plupart des dispositifs électroniques et optoélectroniques. Ils offrent une bonne émission et détection de la lumière et un bon contrôle de conductivité par dopage. Cette discipline, basée sur l'interaction matière-lumière, traite la conversion de l'électricité en lumière, ou vice-versa (sources lumineuses ou détecteurs).

Ce chapitre présente les bases indispensables à la compréhension de notre sujet de recherche. Nous abordons quelques notions sur la source d'énergie solaire et son application dans le domaine photovoltaïque. Le fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs études théoriques, leurs caractéristiques principales. Enfin, un rappel des notions de la conversion photovoltaïque sera donné via les différents types des cellules solaires.

## I.2 L'énergie solaire

Le soleil est une étoile naine qui rayonne de l'énergie : Rayonnement, énergie nucléaire, particules élémentaires, énergie thermique, énergie lumineuse,... etc.

Le soleil est composé de 74% d'hydrogène, de 25% d'hélium et d'une fraction d'éléments plus lourds, il est considéré comme une sphère dont le rayon est d'environ 1.4 million Km, sa température intérieure est de 15 million Kelvin.

Le soleil est la principale source d'énergie de lumière et de chaleur dans le système solaire, ce qui permet la vie sur terre, ainsi la densité thermique à la surface de la terre est en moyenne à 99.97% jusqu'à 99.98% d'origine solaire. L'énergie solaire nous est transmise sous l'aspect ondulatoire bien que ce soit sous son aspect corpusculaire (les photons) que la lumière intervient dans la conversion photovoltaïque [1]. La distribution spectrale solaire est en première approximation celle d'un corps noir porté à une température de 5770 K [2]. L'atmosphère terrestre joue le rôle de filtre et ne laisse passer qu'une partie de ce spectre, qui correspond à des photons possédant une énergie reliée à leurs longueurs d'ondes  $\lambda$ , cette énergie est dans le domaine ultraviolet, le visible, le proche infrarouge, et est estimé par la relation suivante [3] :

$$E(eV) = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.2419}{\lambda(\mu m)} \quad (I.1)$$

où  $h$  est la constante de Planck,  $c$  la vitesse de la lumière et  $\lambda$  sa longueur d'onde. Ainsi, plus la longueur d'onde est courte, plus l'énergie du photon est grande.

Ultraviolet  $0.20 < \lambda < 0.38 \mu\text{m}$

Visible  $0.38 < \lambda < 0.78 \mu\text{m}$

Infrarouge  $0.78 < \lambda < 10 \mu\text{m}$

La notion de AM pour « Air mass » (masse atmosphérique) qui est définie par :

$$AM = \frac{1}{\cos \theta} \quad (\text{I. 2})$$

où  $\theta$  est l'angle que fait le soleil avec son Zénith [4]. On utilise la notion de masse d'air (AM) pour caractériser le degré par lequel l'atmosphère affecte la lumière, ainsi que la séquence d'angle entre le Zénith et le soleil [3].

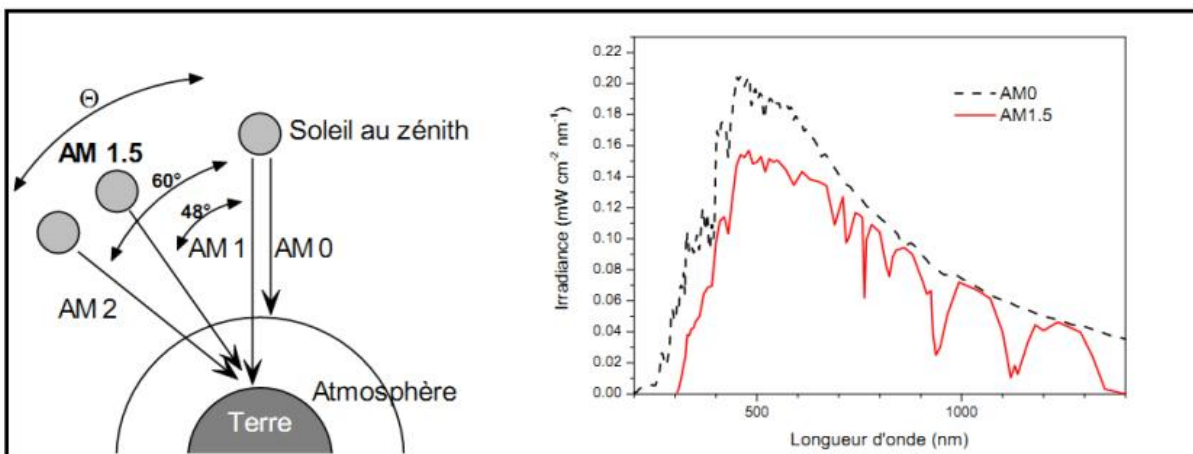
Les différentes valeurs de la masse d'air sont reportées sur la figure I.1.

AM0 : Air masse Zéro à  $1353 \text{ W/m}^2$ , à l'extérieur de l'atmosphère, elle est importante pour les satellites et les applications spatiales.

AM1 : Le spectre de rayonnement quand le soleil est au zénith, l'énergie incidente est de  $925 \text{ W/m}^2$ .

AM1.5 : Spectre de rayonnement à  $\theta = 45^\circ$  avec une énergie totale de  $844 \text{ W/m}^2$ , qui est l'énergie à satisfaire pour les applications terrestre.

AM2 : Spectre de rayonnement à  $\theta = 60^\circ$  avec une énergie incidente de  $691 \text{ W/m}^2$  [3].



**Figure I.1** : Les différentes masses d'air de spectre solaire [3].

### I.3 Inclinaison de la terre

L'angle que fait la direction du soleil avec sa projection sur le plan équatorial est donné par :

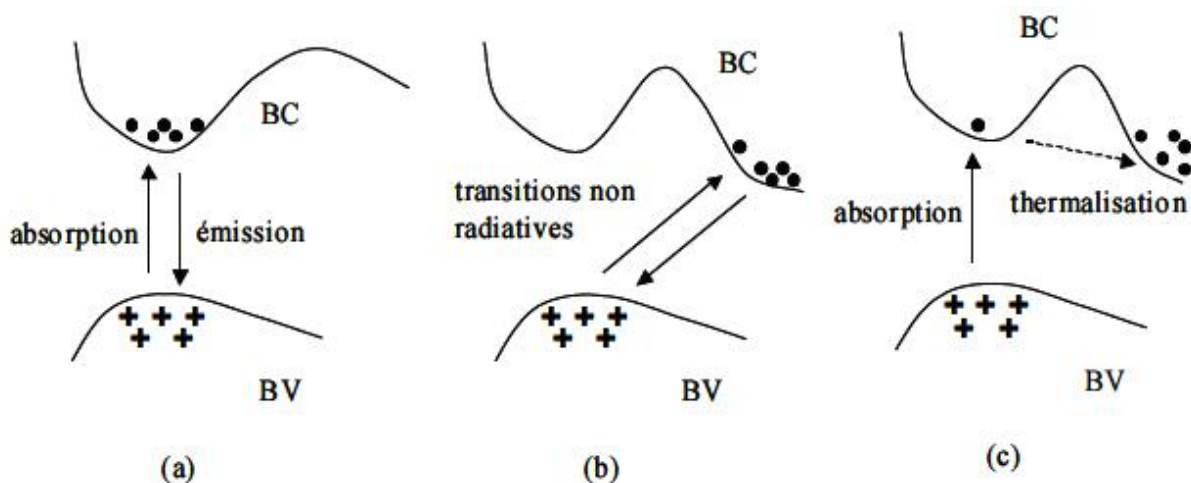
$$d = \arcsin \left[ 0.389 \sin \left[ \left( \frac{360}{365} \right) \times (N - 82) + 2 \sin \left( \left( \frac{360}{365} \right) \times (N - 2) \right) \right] \right] \quad (I.3)$$

où N est le nombre de jours de l'année à partir du premier janvier [5].

### I.4 L'interaction photon/semiconducteur

#### I.4.1 Diagramme de bande

L'écart entre les bandes de valence et de conduction, ou gap, représente une caractéristique fondamentale des semiconducteurs. La figure I.2 présente les différentes transitions possibles selon la nature du gap. Un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction, c'est l'absorption fondamentale. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement.



**Figure I.2** : Transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction. a) Semiconducteur à gap direct, les transitions sont verticales et par suite radiatives. b) Semiconducteur à gap indirect, les transitions sont obliques et non radiatives au premier ordre. c) Absorption directe de photons dans un semiconducteur à gap indirect [6].

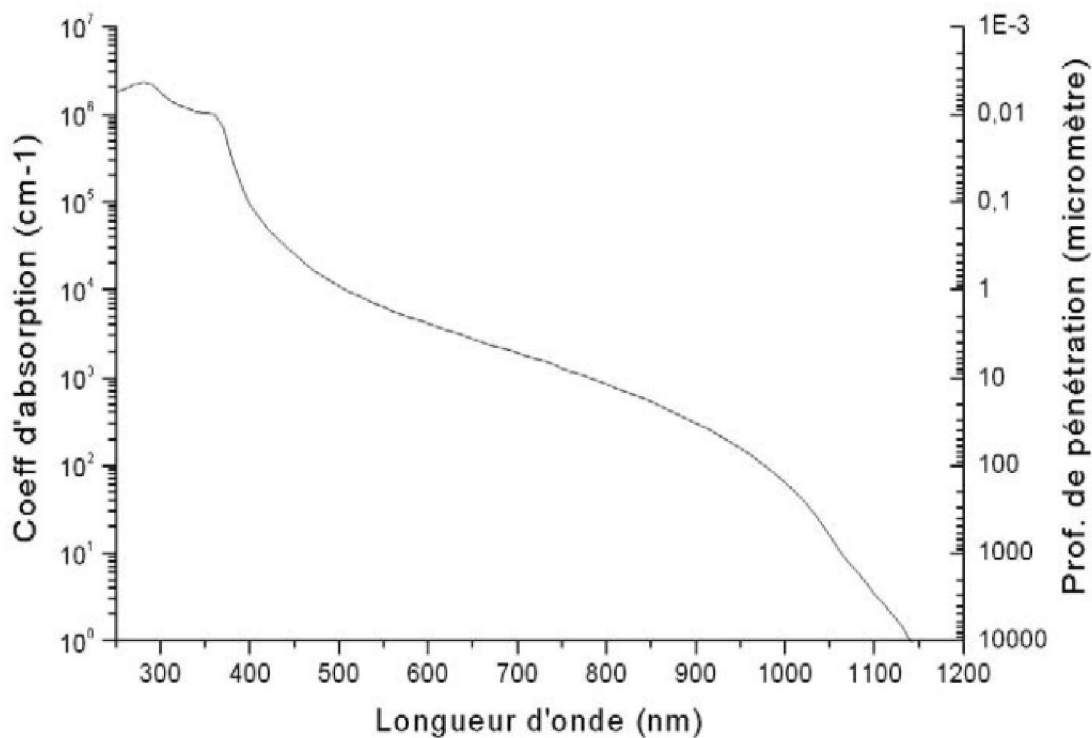
C'est la raison pour laquelle les processus d'absorption ou d'émission de photons, au voisinage du gap fondamental, sont considérablement plus importants dans les matériaux à gap direct que dans les matériaux à gap indirect. La figure I.2 représente les différents types de transitions. Dans le semiconducteur à gap direct (figure I.2 (a)), les transitions électroniques entre les extrema des bandes de valence et de conduction sont verticales, elles obéissent à la règle de conservation des k, et par suite sont radiatives. Dans le semiconducteur

à gap indirect (figure I.2 (b)), les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques et de ce fait non radiatives au premier ordre.

Notons toutefois que dans un semiconducteur à gap indirect, on peut exciter verticalement, c'est-à-dire optiquement, des électrons du sommet de la bande de valence vers le minimum central de la bande de conduction. Les électrons ainsi excités, se thermalisent ensuite dans le minimum absolu de la bande de conduction et peuvent participer aux phénomènes de conduction (figure I.2 (c)) [6].

#### I.4.2 Coefficient d'absorption

L'interaction entre les photons et un semiconducteur se traduit par une caractéristique essentielle du matériau dans le domaine photovoltaïque : le coefficient d'absorption. Il traduit le nombre de photons absorbés par unité d'épaisseur du matériau en fonction de leur longueur d'onde. La figure I.3 nous donne celui du silicium [7]. Comme nous l'avons vu précédemment, ces transitions directes ne sont plus possibles pour des longueurs d'ondes plus grandes. Il faut alors qu'un phonon au moins vienne assister l'électron pour que ce dernier passe dans la bande de conduction. Ceci réduit la probabilité de transition. L'augmentation de la longueur d'onde des photons entraîne donc une diminution du coefficient d'absorption. Lorsque l'énergie du photon devient inférieure à celle du gap du matériau (à l'énergie d'un phonon près), la transition n'est plus possible et le photon n'est pas absorbé [7].



**Figure I.3 :** Coefficient d'absorption du silicium et profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde, d'après [7].

L'interaction photon/électron au sein du semiconducteur se traduit finalement par la génération d'une paire électron-trou, qui modifie localement la conductivité du matériau.

L'interaction du rayonnement avec les électrons du semiconducteur se manifeste selon trois processus distincts [4]:

- ✓ L'absorption fondamentale : un photon peut induire le saut d'un électron, d'un état occupé de la bande de valence vers un état libre de la bande de conduction. Ce processus sera mis à profit dans les capteurs de rayonnement
- ✓ L'émission spontanée : un électron de la bande de conduction peut retomber spontanément sur un état vide de la bande de valence avec émission d'un photon. Ce processus sera mis à profit dans les émetteurs de rayonnements tels que les diodes électroluminescentes.
- ✓ L'émission stimulée : un photon présent dans le semiconducteur peut induire la transition d'un électron de la bande de conduction vers un état vide de la bande de valence, avec émission d'un deuxième photon de même énergie. Ce processus sera mis à profit dans les lasers à semiconducteur.

La cellule photovoltaïque se comportant comme un générateur, il s'agit à présent de séparer les deux types de porteurs pour éviter qu'ils ne se recombinent entre eux, et de les collecter dans un circuit électrique extérieur.

L'absorption est caractérisée par le taux de génération optique noté  $G$ , il s'agit du taux de création de paires électron-trou (en  $\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$ ). Les porteurs minoritaires (électrons dans un matériau de type P et trous dans un matériau de type N) sont métastables et n'existeront, en moyenne, que pour un temps égal à la durée de vie  $\tau$  des porteurs minoritaires. Cette grandeur définit la durée de vie moyenne avant que les porteurs ne se recombinent et est liée à la longueur de diffusion  $L_D$  ainsi qu'au coefficient de diffusion  $D$  du matériau par la relation [7-9]:

$$L_D = \sqrt{D\tau} \quad (\text{I. 4})$$

## I.5 La conversion photovoltaïque solaire

L'effet photovoltaïque est un phénomène physique propre à certains matériaux appelés semiconducteurs qui produisent de l'électricité lorsqu'ils sont exposés à la lumière.

L'effet photovoltaïque est un des effets photoélectriques. Il est mis en œuvre dans les cellules photovoltaïques pour produire de l'électricité à partir du rayonnement solaire. L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien français Antoine Becquerel fin 1839. Il est obtenu par absorption des photons dans un matériau semiconducteur qui génère alors des paires électrons-trous (excitation d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction) créant une tension ou un courant électrique. Albert Einstein expliqua le phénomène photoélectrique en 1912, mais il fallut attendre le début des années 50 pour sa mise en application pratique dans la réalisation d'une cellule photovoltaïque en silicium d'un rendement de 4.5% [9].

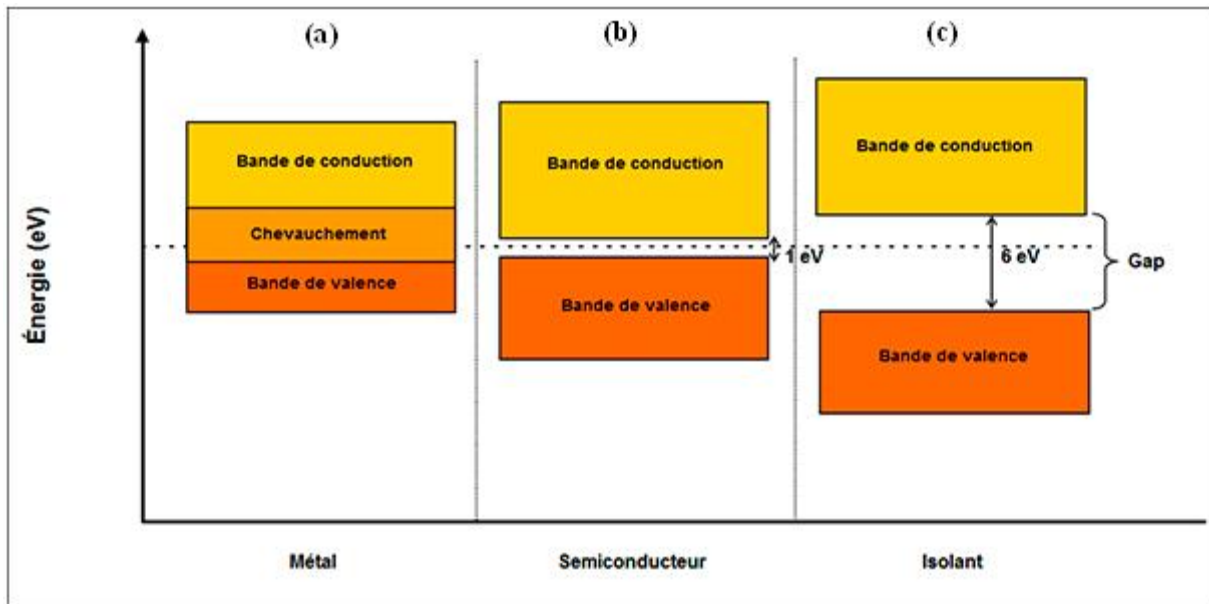
## **I.6 Les semiconducteurs**

Un semiconducteur est intermédiaire entre un métal et un isolant [2]. A  $T=0K$ , il se comporte comme un isolant, mais il conduit l'électricité dès que la température augmente. Sa conductivité augmente avec la température contrairement aux métaux [2].

La structure de bande est analogue à celle des isolants (figure I.4) avec une zone interdite séparant la bande de valence de celle de conduction, mais la largeur de celle-ci est plus faible. À  $T=0K$ , la bande permise occupée la plus haute est complètement remplie : c'est la bande de valence et la bande permise vide la plus basse est la bande de conduction. Lorsque la température augmente, l'énergie d'agitation thermique excite un certain nombre d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction [2]. Comme celle-ci est incomplètement remplie, il y a conduction si l'on applique un champ électrique. à cette conduction d'origine électronique, s'ajoute celle des trous qui sont les places vacantes laissées par les électrons dans la bande de valence. Pour un semiconducteur, la conductivité est d'autant plus grande que le nombre d'électrons dans la bande de conduction est élevé.

Il est possible de faire varier la conductivité des semiconducteurs sur plusieurs ordres de grandeur ce qui rend ces derniers très intéressants pour réaliser des composants électroniques actifs.





**Figure I.4 :** La structure de bande de (a) Métal, (b) Semiconducteur et (c) Isolant [2].

Ces matériaux ont une conductivité électrique intermédiaire entre les isolants et les métaux. Dans un semiconducteur un courant électrique est favorisé par deux types de porteurs: les électrons et les trous.

Un semiconducteur est un solide cristallin dont les propriétés de conduction électrique sont déterminées par deux bandes d'énergie particulières : d'une part, la bande de valence, qui correspond aux électrons impliqués dans les liaisons covalentes ; d'autre part, la bande de conduction, comprenant les électrons dans un état excité, qui peuvent se déplacer dans le cristal.

Ces deux bandes sont séparées par un gap, une bande interdite que les électrons ne peuvent franchir que grâce à une excitation extérieure (par exemple, l'absorption d'un photon). La bande interdite correspond à une barrière d'énergie, dont l'ordre de grandeur est l'électronvolt (eV) [2, 10].

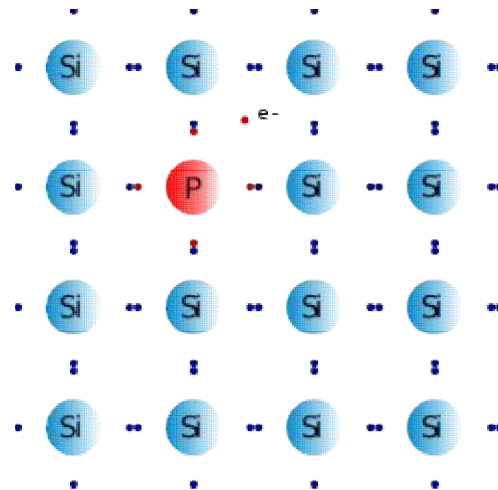
## I.7 Le dopage

Le dopage d'un matériau consiste à introduire dans sa matrice des atomes d'un autre matériau. Ces atomes vont se substituer à certains atomes initiaux et ainsi introduire davantage d'électrons ou de trous. Les atomes de matériau dopant sont également appelés impuretés, et sont en phase diluée : leur concentration reste négligeable devant celle des atomes du matériau initial.

Dans un semiconducteur intrinsèque, ou pur, il n'y a aucun atome dopant. Tous les électrons présents dans la bande de conduction proviennent donc de la bande de valence. Il y a donc autant d'électrons que de trous :  $n = p = n_i$  ;  $n_i$  est la concentration intrinsèque. Tout dopage sert à modifier cet équilibre entre les électrons et les trous, pour favoriser la conduction électrique par l'un des deux types de porteurs.

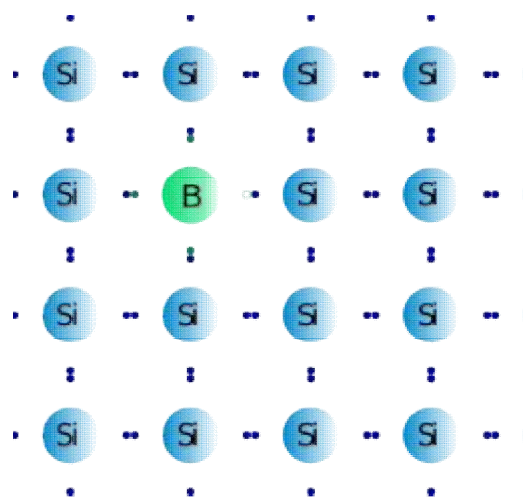
Il existe deux types de dopage :

- Type N : consiste à produire un excès d'électrons qui sont négativement chargés.



**Figure I.5 :** Exemple d'un dopage de type N : le phosphore possède un électron de plus que le silicium [11].

- Type P : consiste à produire une carence en électrons, donc un excès de trous, considérés comme positivement chargés.



**Figure I.6 :** Exemple d'un dopage de type P : le bore possède un électron de moins que le silicium [11].

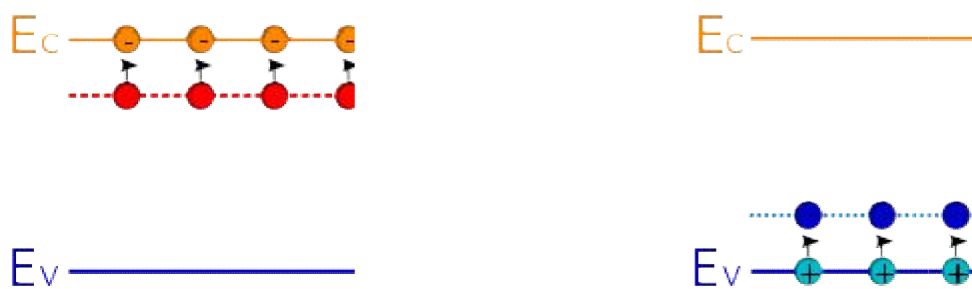
L'atome d'impureté provoque des effets qui dépendent de la colonne qu'il occupe dans la classification périodique de Mendeleïev, par rapport à la colonne de l'atome qu'il remplace.

Si l'atome dopant appartient à la colonne précédente, il manque alors un électron périphérique pour rétablir l'ensemble des liaisons covalentes initiales. Il apparaît alors une carence en électrons, autrement dit un trou. L'atome inséré est dit accepteur (d'électron), car il est capable de recevoir un électron supplémentaire, provenant de la bande de valence. C'est un dopage P.

Si l'atome dopant appartient à la colonne suivante, il possède un électron supplémentaire par rapport à l'atome initial. Les liaisons covalentes initiales sont restaurées, mais un des électrons n'est pas utilisé dans ces liaisons. Il est donc sur un état libre du système. L'atome inséré est dit donneur (d'électron). C'est un dopage N.

Un même atome dopant peut être à la fois donneur et accepteur : il est alors dit amphotère. C'est par exemple le cas du silicium (Si, colonne IV), qui est un dopant de l'Arséniure de gallium (AsGa) : si le Si se met en substitution d'un atome de Gallium (colonne III), il est donneur d'électron. S'il est en substitution d'un atome d'Arsenic (colonne V), il est accepteur.

Le dopage provoque l'apparition de nouveaux niveaux accepteurs et donneurs d'électrons dans la structure de bande du matériau dopé. Ces niveaux apparaissent dans le gap, entre la bande de conduction et la bande de valence. Ainsi, l'énergie nécessaire pour que les électrons passent dans la bande de conduction est bien plus facilement atteinte que dans un semiconducteur intrinsèque.



**Figure I.7** : Schéma de bandes d'énergie d'un semiconducteur type (a) N et (b) P [10].

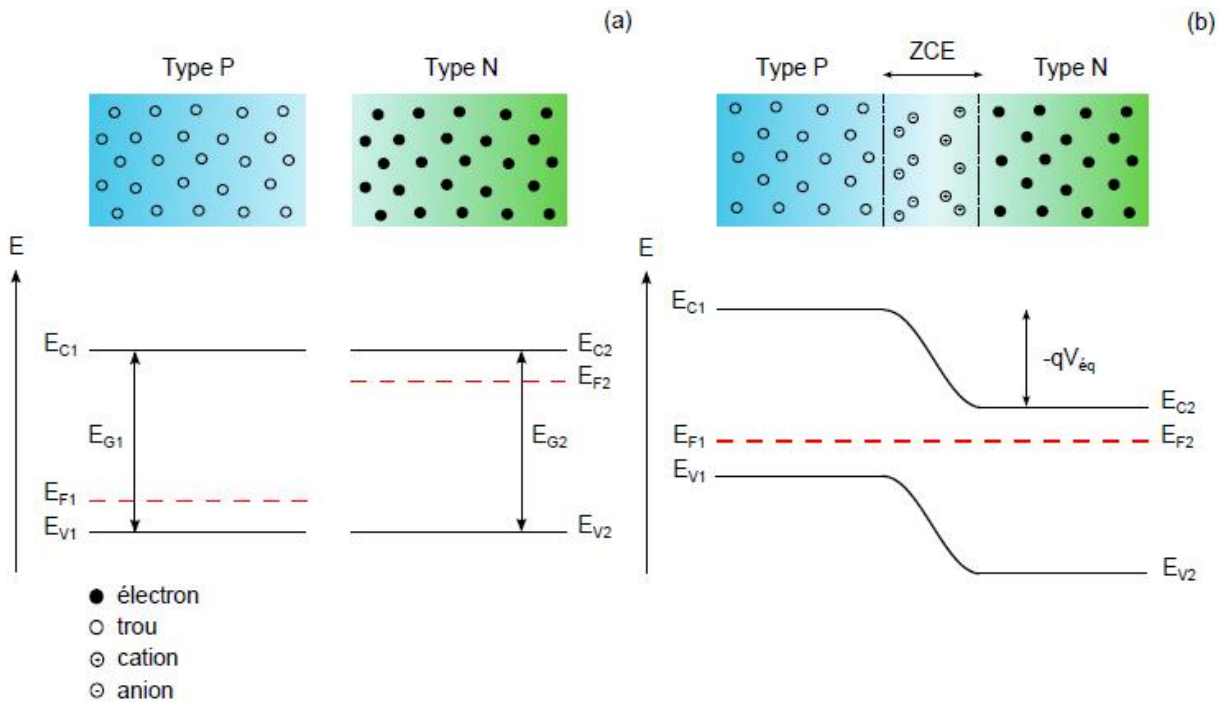
L'élément fondamental dans un système photovoltaïque est la cellule photovoltaïque qui convertit l'énergie reçue par rayonnement solaire en énergie électrique. Pour obtenir une cellule photovoltaïque il faut réaliser une structure de diode (jonction P-N). Une jonction P-N est constituée par la juxtaposition de deux régions de types différents d'un même monocristal

de semiconducteur. La différence des densités de donneurs et d'accepteurs,  $N_d - N_a$ , passe d'une valeur négative dans la région de type P à une valeur positive dans la région de type N. La loi de variation de cette grandeur dépend essentiellement de la technique de fabrication [6].

## I.8 La jonction P-N

Une jonction P-N est créée en juxtaposant un semiconducteur dopé P avec un semiconducteur dopé N. Le niveau de Fermi est situé dans la bande interdite. Dans le cas où ce dernier se situe proche de la bande de conduction ( $E_c$ ) le semiconducteur est de type N, et dans le cas où le niveau de Fermi est proche de la bande de valence, le semiconducteur est de type P.

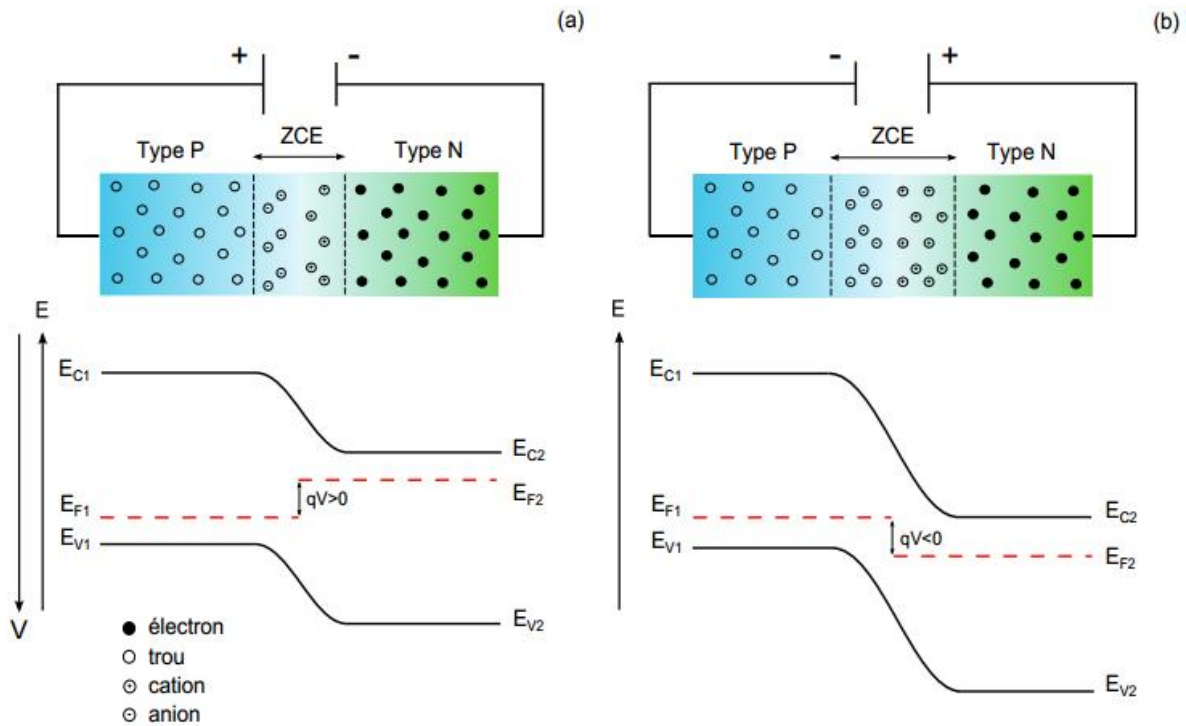
Les électrons majoritaires dans la zone N vont migrer vers la zone P et provoquent l'apparition d'ions chargés positivement du côté N. Inversement, les trous diffusent de la région P vers la région N, provoquant l'apparition d'ions chargés négativement du côté P. Par conséquent, ce mouvement de charges polarise la jonction. Ces charges fixes et de signes opposés introduisent une différence de potentiel aux bornes de la jonction. La zone ainsi créée, où règne un champ électrique non nul, s'appelle zone de charge d'espace (ZCE). La zone N proche de la jonction devient électriquement positive et la zone P devient électriquement négative. Les niveaux énergétiques de Fermi qui étaient inégaux avant contact s'égalisent, ce qui provoque une courbure du diagramme de bande, introduisant une barrière de potentiel  $V_{eq}$  à l'interface. A l'équilibre thermodynamique, les deux courants, courant de diffusion et courant de conduction s'annulent. Le comportement d'un semiconducteur avant et après contact est représenté par un diagramme énergétique (figure I.8 (a) et (b)) [12].



**Figure I.8.:** Diagramme énergétique des semiconducteurs (a) avant le contact (b) après le contact (création de ZCE, l'alignement des niveaux de Fermi ( $E_F$ ), la barrière de potentiel ( $V_{eq}$ ) [12].

Si la jonction n'est pas polarisée,  $V_n - V_p = V_d$ . Si la jonction est polarisée par une tension  $V$ ,  $V_n - V_p = V_d - V$ . où  $V$  est positif pour une polarisation directe et négative pour une polarisation inverse [6].

Lorsque l'on polarise la jonction, on modifie la barrière de potentiel et par suite la diffusion des porteurs d'une région vers l'autre [13]. Une polarisation en direct permet de diminuer la barrière de potentiel entre les deux semiconducteurs jusqu'à une valeur à laquelle les électrons dans la bande de conduction transitent du semiconducteur de type N vers le semiconducteur de type P (figure I.9 (a)) [12]. Au contraire, dans la polarisation inverse, la différence de potentiel aux bornes de la zone de charge d'espace augmente  $V_n - V_p = V_d + |V|$  et la hauteur de barrière de potentiel devient  $(V_d + |V|)$ , les porteurs majoritaires des régions N et P n'ont pas l'énergie nécessaire pour sauter cette barrière de potentiel. La jonction est alors traversée par un très faible courant de saturation  $I_s$ . Ce courant issu du phénomène d'ionisation thermique du silicium, dépend uniquement de la température (figure I.9 (b)).



**Figure I.9:** Diagramme énergétique d'une jonction P-N polarisée en direct (a) et inverse (b) [12].

## I.9 La cellule solaire

### I.9.1 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Le fonctionnement de toute cellule photovoltaïque est basé sur l'existence d'un champ interne afin de séparer les paires électron-trou générées par l'absorption de la lumière [4].

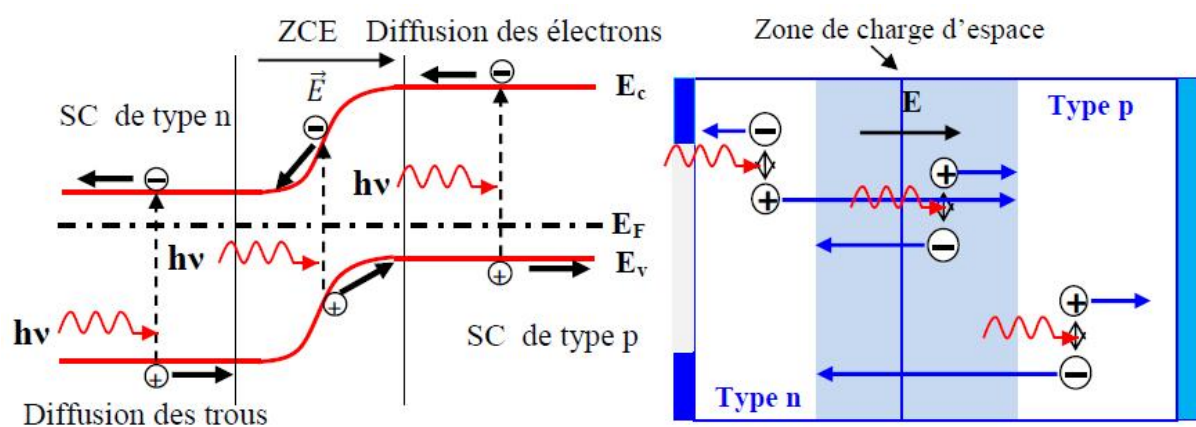
Cette barrière de potentiel peut être créée par:

- ✓ Homojonction : la mise en contact de deux semiconducteurs de même type et de différent dopage P-N
- ✓ Hétérojonction : la mise en contact de deux semiconducteurs de différent type et de différent dopage P-N
- ✓ Diode Schottky : la mise en contact entre un métal/semiconducteur

Le principe de fonctionnement d'une cellule à jonction P-N à homojonction est décrit dans la figure I.10. Les photons incidents créent des paires électron-trou et nous avons deux scénarios possibles suivant le lieu de création des paires électron-trou :

- Si une paire est générée dans une zone électriquement neutre (P ou N), les porteurs diffusent. Si les porteurs minoritaires atteignent la zone de charge d'espace alors ils sont propulsés par le champ électrique dans la zone où ils deviennent porteurs majoritaires. Ces porteurs contribuent ainsi au courant par leur diffusion et il se crée un courant de diffusion.
- Si une paire est générée dans la zone de charge d'espace, l'électron et le trou sont séparés par le champ électrique et chacun est propulsé dans la région où il est porteur majoritaire (région N pour l'électron et région P pour le trou). Ces porteurs donnent naissance à un courant de génération.

Ces deux contributions donnent naissance à un photocourant qui contribue au courant inverse de la diode formée par la jonction. Le courant inverse d'une jonction P-N est fonction des densités de porteurs minoritaires dans les régions neutres de la diode et de la génération de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace. L'éclairement augmente le courant inverse par la création de porteurs minoritaires dans les zones neutres et la génération de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace [4, 9].



**Figure I.10** : Diagramme de bande (schéma de gauche) et structure (schéma de droite) d'une cellule photovoltaïque. Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées [4, 9].

### I.9.1.1 Calcul du courant d'éclairement

Soit une cellule solaire d'épaisseur ( $L$ ) éclairée avec une lumière contenant des photons d'énergie  $h\nu > E_g$  (figure I.11), l'absorption de chaque photon par un électron de valence donnera naissance à une paire électron-trou et toutes les paires photo-générées vont contribuer au courant [14].

On constate trois régions: la région neutre de type N (front ou émetteur), la région neutre de type P (base) et la zone de charge d'espace (zone de déplétion) ZCE.

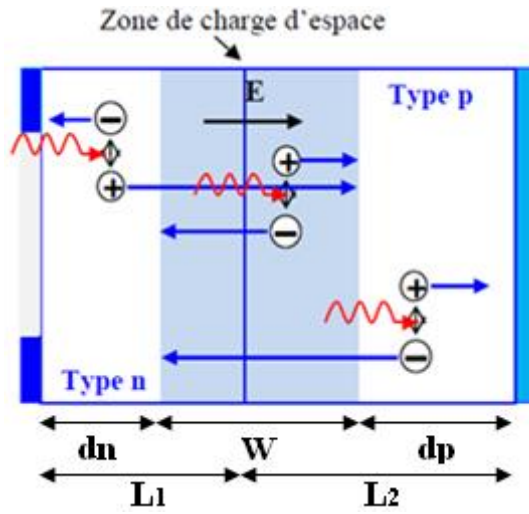


Figure I.11: Représentation d'une cellule solaire à jonction N<sup>+</sup>P [9].

### I.9.1.1.1 Région neutre de type N

La densité de courant des porteurs minoritaires (trous) provient uniquement du courant de diffusion puisque le champ électrique est nul dans cette zone:

$$J_p = -qD_p \frac{d\Delta p}{dx} \quad (I.5)$$

L'équation de continuité est donnée par:

$$\frac{\partial Pn}{\partial t} = D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} - \frac{\Delta p}{\tau_p} + G_{opt} \quad (I.6)$$

où  $\tau_p$  est la durée de vie des trous et  $G_{opt}$  le terme de génération optique. Le terme de génération optique  $G_{opt}$  dû à un mécanisme externe (lumière) s'exprime par:

$$G_{opt} = \alpha \phi (1 - R) \exp(1 - \alpha x) \quad (I.7)$$

où  $\alpha$  est le coefficient d'absorption du semiconducteur,  $\phi$  le flux de photon incident,  $R$  le coefficient de réflexion du semiconducteur,  $x$  la profondeur d'absorption du flux lumineux à partir de la surface du semiconducteur [14].

En régime permanent  $\frac{\partial p_n}{\partial t} = 0$ , alors l'équation I.6 devient:

$$D_p \frac{\partial^2 \Delta p}{\partial x^2} + \alpha (1 - R) \exp(-\alpha x) = 0 \quad (I.8)$$

La solution générale est sous la forme:

$$\Delta p = A' \operatorname{ch}\left(\frac{x}{L_p}\right) + B' \operatorname{sh}\left(\frac{x}{L_p}\right) + \frac{\alpha \phi (1 - R)}{1 - \alpha^2 L_p^2} \tau_p \exp(-\alpha x) \quad (I.9)$$



où  $L_p$  est la longueur de diffusion des trous dans la région N, et elle est fonction de  $\tau_p$ .

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \quad (\text{I. 10})$$

Les constantes  $A'$  et  $B'$  sont déduites des deux conditions aux limites qui se présentent sous la forme suivante:

$$D_p \frac{\partial \Delta p}{\partial x} \Big|_{x=0} = S_p \Delta p \quad (\text{I. 11})$$

À la surface, la recombinaison superficielle provenant des défauts se matérialise par une vitesse de recombinaison  $S_p$ .

$$\Delta p|_{x=d_n} = 0 \quad (\text{I. 12})$$

À la limite de la zone de charge d'espace, tous les porteurs minoritaires en excès sont recombinés.

La densité de photocourant générée dans la zone avant de la jonction, pour  $x = d_n$  est alors [14]:

$$J_p(\lambda) = \frac{q(\alpha L_p)^2 \Phi(1-R)}{1 - \alpha^2 L_p^2} \left[ \exp(-\alpha d_n) - \frac{1}{\alpha L_p} \frac{\left[ 1 + \frac{\alpha D_p}{S_p} \right] - \exp(-\alpha d_n) \left[ \text{ch} \left( \frac{d_n}{L_p} \right) + \frac{D_p}{L_p S_p} \text{sh} \left( \frac{d_n}{L_p} \right) \right]}{\text{sh} \left( \frac{d_n}{L_p} \right) + \frac{D_p}{L_p S_p} \text{ch} \left( \frac{d_n}{L_p} \right)} \right] \quad (\text{I. 13})$$

où  $L_n$ , et  $L_p$  sont les longueurs de diffusion des électrons dans la région P et des trous dans la région N respectivement,  $D_n$ , et  $D_p$  représente les coefficients de diffusion des électrons dans la région P et des trous dans la région N respectivement,  $d_n$ , et  $d_p$  sont les largeurs des régions neutres de type N et de type P respectivement.

### I.9.1.1.2 Région neutre de type P

De la même façon que dans le cas précédent, on calcule la densité de photocourant générée dans la région P [14].

Les conditions aux limites s'expriment comme suit:

- Pour  $x = d_n + W$ , à la limite de la zone de charge d'espace, la densité de porteurs en excès est nulle:  $\Delta n = 0$ .
- Pour  $x = L$ , la face arrière de la cellule solaire doit être une zone de contact ohmique, donc de recombinaison totale.

Si le contact arrière est ohmique, la vitesse de recombinaison peut être considérée comme infiniment grande, alors  $\Delta n = 0$ , et la densité de photocourant généré dans cette zone, avec  $x=d_n+W$  s'écrit [14]:

$$J_n(\lambda) = \frac{q(\alpha L_n)^2 \Phi (1-R)}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \left[ \exp(-\alpha(d_n + W)) + \frac{1}{\alpha L_n} \frac{\exp(-\alpha L) - \exp(-\alpha(d_n + W)) \operatorname{ch}\left(\frac{d_p}{L_n}\right)}{\operatorname{sh}\left(\frac{d_p}{L_n}\right)} \right] \quad (\text{I. 14})$$

Si la vitesse de recombinaison prend une valeur  $S_n$  pour  $x = L$ , la formulation générale de la densité de courant de cette zone s'exprime par:

$$J_n(\lambda) = \frac{q(\alpha L_n)^2 \Phi (1-R)}{\alpha^2 L_n^2 - 1} \left[ \exp(-\alpha(d_n + W)) + \frac{1}{\alpha L_n} \frac{\exp(-\alpha L) \left[ 1 - \frac{\alpha D_n}{S_n} \right] - \exp(-\alpha(d_n + W)) \left[ \operatorname{ch}\left(\frac{d_p}{L_n}\right) + \frac{D_n}{S_n L_n} \operatorname{sh}\left(\frac{d_p}{L_n}\right) \right]}{\operatorname{sh}\left(\frac{d_p}{L_n}\right) + \frac{D_n}{L_n S_n} \operatorname{ch}\left(\frac{d_p}{L_n}\right)} \right] \quad (\text{I. 15})$$

### I.9.1.1.3 Région de la zone de charge d'espace

On admet que les porteurs excédentaires générés se trouvent entraînés hors de cette région par le champ électrique qui y règne, avant qu'ils puissent se recombiner [14]. La densité de photocourant dans cette région est donnée par:

$$J_{dr}(\lambda) = q\Phi(1-R)\exp(-\alpha d_n)[1 - \exp(-\alpha W)] \quad (\text{I. 16})$$

La densité de courant totale d'éclairement (photocourant) en court-circuit pour chaque longueur d'onde de radiation incident est donnée par:

$$J_E = J_{PH} = J_p(\lambda) + J_n(\lambda) + J_{dr}(\lambda) \quad (\text{I. 17})$$

### I.9.1.2 Caractéristique courant-tension

Dans l'obscurité, la cellule photovoltaïque se comporte comme une diode classique et présente une caractéristique courant-tension semblable [6].

La densité du courant est par conséquent donnée par l'expression:

$$J = J_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right] \quad (I.18)$$

où  $I_0$  est la densité du courant de saturation,  $V$  est la tension appliquée,  $n$  est le facteur d'idéalité de la diode,  $q$  la valeur absolue de la charge élémentaire,  $k$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

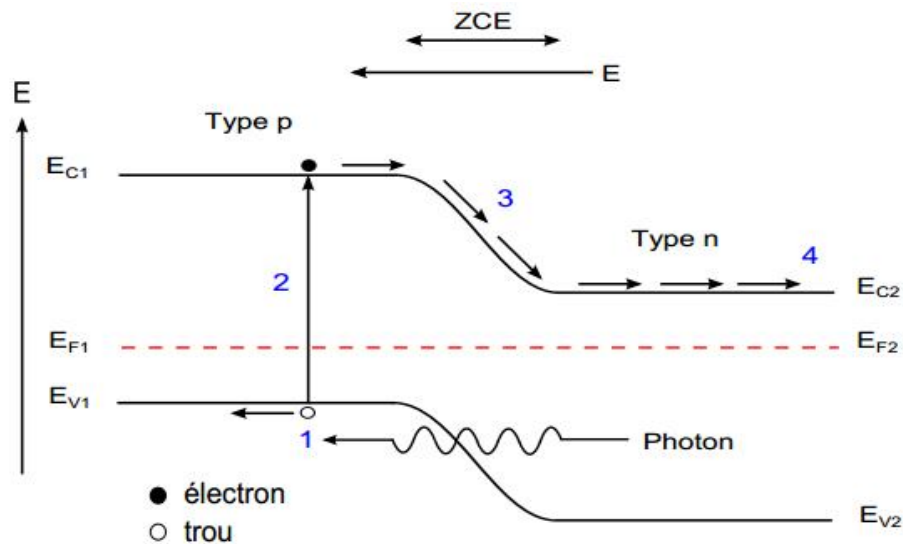
Sous illumination, tout photon pénétrant dans un semiconducteur a une probabilité d'interagir avec le réseau si son énergie est supérieure ou égale à la largeur de la bande interdite ( $h\nu \geq E_g$ ). Une partie des électrons ne revient pas à son état initial, et ils sont libres de se déplacer, les électrons " décrochés " créent une tension électrique continue faible. Une partie de l'énergie des photons est ainsi directement transformée en énergie électrique : c'est l'effet photovoltaïque figure I.12.

La cellule photovoltaïque fournit un courant qui est la somme de deux courants, le courant d'obscurité de la diode qui est direct, résulte de la polarisation du composant et le courant photogénéré  $I_{ph}$ , obtenu par éclairage, contribue au courant inverse de la diode ; le courant total débité par la cellule est donné par l'expression suivante :

$$I = I_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right] - I_{ph} \quad (I.19)$$

où  $I_{ph}$  est le courant photogénéré.

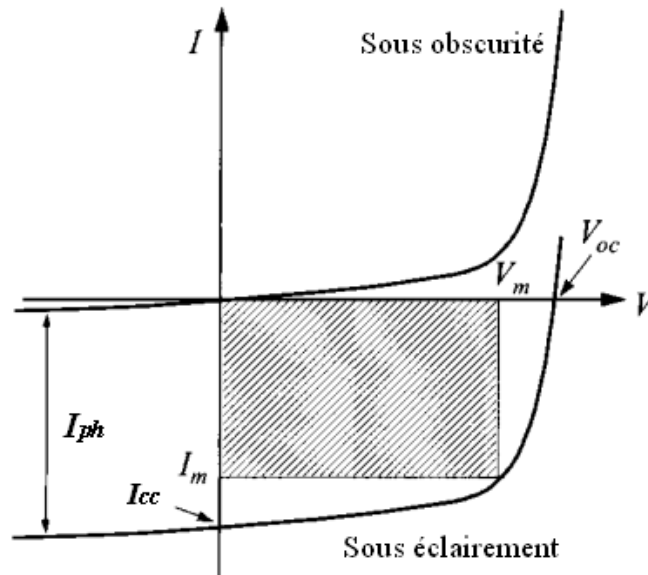
Tandis que si l'énergie du photon est inférieure à la largeur de la bande interdite ( $h\nu < E_g$ ) l'électron revient à son état initial, l'agitation de l'électron se traduit par un échauffement du matériau, l'énergie cinétique du photon est transformée en énergie thermique.



**Figure I.12:** Principe d'un dispositif photovoltaïque sous éclairement, en situation de court-circuit. (1) Absorption d'un photon d'énergie supérieure à la bande interdite de l'absorbeur, (2) Création d'une paire électron-trou, (3) Séparation des charges et (4) Collecte des porteurs [12].

La caractéristique I-V d'une diode sous éclairement (figure I.13) permet la détermination des paramètres suivants :

- Le courant de court-circuit  $I_{CC}$
- La tension de circuit ouvert  $V_{CO}$
- Le facteur de forme FF
- Le rendement de conversion  $\eta$
- Le courant maximal  $I_m$
- La tension maximale  $V_m$
- La puissance maximale  $P_m$



**Figure I.13:** Caractéristiques I-V d'une cellule solaire sous illumination. Détermination de la puissance maximale de sortie est indiquée [15].

#### I.9.1.2.1 Courant de court-circuit $I_{CC}$

Il s'agit du courant obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule (en prenant  $V=0$  dans le schéma équivalent). Il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température [16].

$$I_{CC} \approx I_{ph} \quad (I.20)$$

#### I.9.1.2.2 Tension à circuit ouvert $V_{CO}$

La tension à circuit ouvert est obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul. Elle dépend de la barrière d'énergie et de la résistance shunt. Elle décroît avec la température et varie peu avec l'intensité lumineuse [16].

$$V_{CO} = \frac{kT}{e} \ln \left( \frac{I_{CC}}{I_s} + 1 \right) \quad (I.21)$$

#### I.9.1.2.3 Facteur de forme FF

Le facteur de forme représente l'efficacité de la cellule et peut également renseigner du vieillissement de la cellule, c'est le rapport entre la puissance maximale débitée  $V_m \cdot I_m$  et la puissance idéale  $V_{CO} \cdot I_{CC}$  [2].

$$FF = \frac{I_m \cdot V_m}{I_{cc} \cdot V_{co}} = \frac{P_{max}}{I_{cc} \cdot V_{co}} \quad (I.22)$$

où  $V_m$  et  $I_m$  sont respectivement la tension et le courant correspondant au point de puissance maximale ( $P_m$ ) de la courbe courant-tension (I-V) [17].

#### I.9.1.2.4 Rendement de conversion d'énergie $\eta$

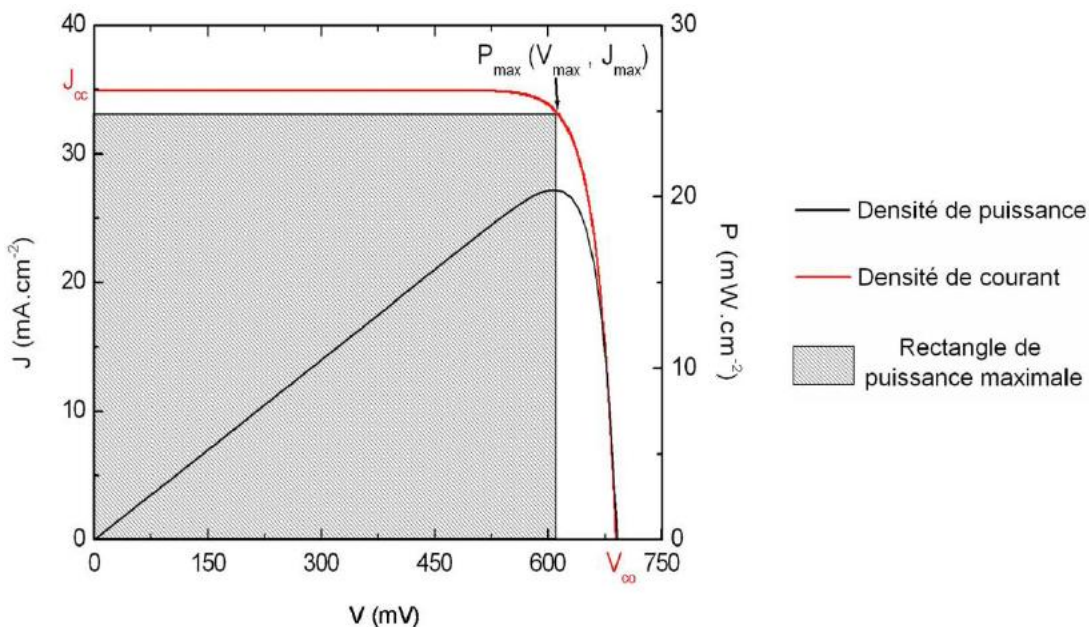
On appelle rendement de conversion  $\eta$  le rapport de la puissance fournie par la cellule sur la puissance incidente (l'éclairement). Il s'exprime selon l'équation (I.23) en fonction des paramètres extraits de la courbe I-V sous éclairement [17].

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{incidente}} = \frac{V_{max} I_{max}}{P_{incidente}} = \frac{V_{co} I_{cc} FF}{P_{incidente}} \quad (I.23)$$

- La puissance incidente correspond au produit.  $p_{incidente} = E \cdot S$ , où  $E$  est l'éclairement ( $W/m^2$ ) et  $S$  la surface de la cellule ( $m^2$ ).

La puissance électrique produite par une diode sous éclairement est égale au produit de l'intensité délivrée et de la tension à ses bornes. Il faut ainsi adapter la charge aux bornes du dispositif afin de le faire fonctionner au point de puissance maximale  $P_{max}$  ( $V_{max}$ ,  $I_{max}$ ) [17].

La figure I.14 représente les caractéristiques I-V et P-V sous éclairement [17].



**Figure I.14 :** Caractéristiques I-V et P-V sous éclairement [17].

Le facteur de forme (FF) de la courbe I-V exprime la différence entre la puissance réelle débitée par la cellule et sa puissance idéale égale au produit  $I_{cc} \times V_{co}$ .

### I.9.1.2.5 La résistance série $R_s$

La résistance série va influencer sur les caractéristiques I-V de la cellule. Cette résistance est liée à l'impédance des électrodes et de la base, il en résulte que la tension  $V$  aux bornes de la cellule est différente de la tension aux bornes de la jonction [19].

La résistance série agit sur la pente de la caractéristique dans la zone où la photodiode se comporte comme un générateur de tension. Elle ne modifie pas la tension de circuit ouvert, et lorsqu'elle est élevée, elle diminue la valeur de courant de court-circuit ( $I_{cc}$ ) [20].

### I.9.1.2.6 La résistance shunt (parallèle) $R_{sh}$

La résistance parallèle rend compte des effets, tels que le courant de fuite par les bords de la cellule, elle est réduite du fait de la pénétration des impuretés métalliques dans la jonction (surtout si cette pénétration est profonde) [15, 20].

L'influence de la résistance parallèle (shunt) sur la caractéristique courant-tension se traduit par une légère diminution de la tension de circuit ouvert, est une augmentation de la pente de la courbe I-V de la cellule dans la zone correspondante à un fonctionnement comme une source de courant. Plus la valeur de la résistance parallèle élevée plus la puissance fournie par la cellule augmente [15].

Pour les cellules de bonne qualité,  $R_{sh}$  est supérieure à 10 k $\Omega$  et  $R_s$  est inférieure à 1  $\Omega$  [15, 20].

L'équation de la caractéristique I-V de la cellule photovoltaïque compte tenu des résistances  $R_s$  et  $R_{sh}$  s'écrit donc [16, 18].

$$I(V) = I_{ph} - I_d - I_{sh} \quad (I.24)$$

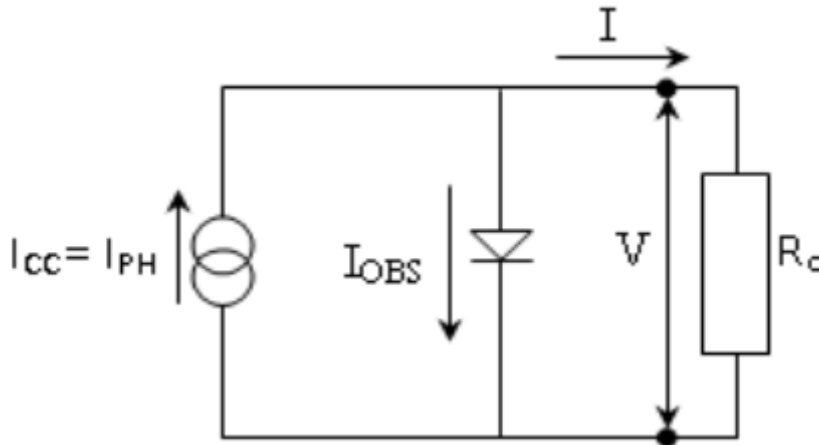
$$I(V) = I_{ph} - I_s \left( \exp\left(\frac{qV + R_s I}{QU_t}\right) - 1 \right) - \frac{V + R_s I}{R_{sh}} \quad (I.25)$$

## I.9.1.3 Modélisation de la cellule solaire

### I.9.1.3.1 Modélisation idéale

Dans le cas idéal, la cellule solaire est modélisée en un schéma électrique équivalent présentant une source de courant de valeur égale au photocourant  $I_{ph}$  (ou courant de court circuit  $I_{CC}$ ) en parallèle avec la diode polarisée en directe (figure I.15).

Dans ce cas, la cellule solaire dont les extrémités sont reliées à une charge extérieure fonctionne comme un générateur de puissance électrique débitant un photocourant dans la charge [14].



**Figure I.15:** Schéma équivalent de la cellule solaire idéale [14].

Le courant débité par la cellule dans le cas idéal ( $n=1$ ) est donné par:

$$I = I_{ph} - I_s \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (I.26)$$

Pour une polarisation nulle  $V = 0$  (court-circuit: charge nulle):

$$I = I_{ph} = I_{CC} \quad (I.27)$$

Pour un courant nul  $I = 0$  (circuit ouvert: charge infinie):

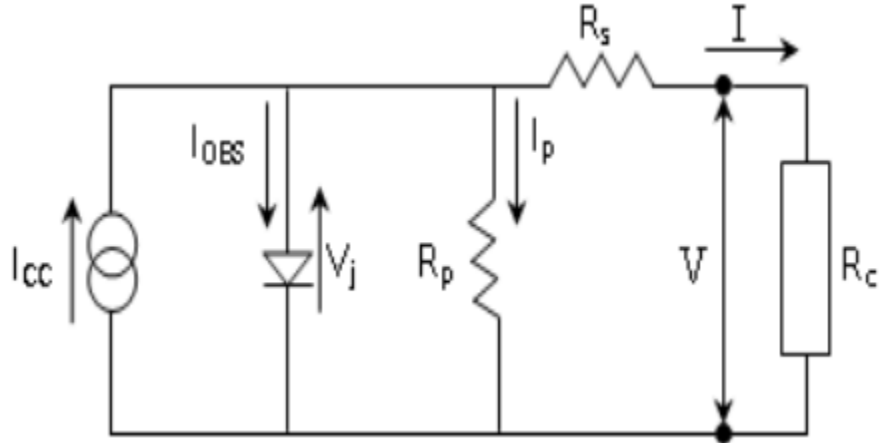
$$V_{CO} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I_{CC}}{I_s} + 1\right) \quad (I.28)$$

### I.9.1.3.2 Modélisation réelle

Dans le cas réel, la cellule solaire est modélisée par un schéma équivalent qui tient compte des effets résistifs parasites dus à la technologie de fabrication. Ces effets sont représentés par deux résistances, une résistance série  $R_s$  représentant les diverses résistances de contacts et de connexions et une résistance  $R_p$  (parallèle ou shunt) en parallèle avec le générateur de courant qui caractérise les courants de fuite traversant la diode et aux effets de bords [14].

Le schéma équivalent de la cellule réelle est représenté sur la figure I.16. Les valeurs respectives des divers éléments du schéma équivalent déterminent les performances de la cellule solaire réelle.





**Figure I.16 :** Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle [14].

Si  $V_j$  est la tension aux bornes de la jonction, l'équation caractéristique de la cellule réelle ( $n \neq 1$ ) est alors donnée par :

$$I = I_{ph} - I_s \left[ \exp\left(\frac{qV_j}{nkT}\right) - 1 \right] - \frac{V_j}{R_p} \quad (I.29)$$

$$V_j = V + R_s I \quad (I.30)$$

avec:

$$I_p = \frac{V_j}{R_p} \quad (I.31)$$

où  $I_p$  est le courant qui circule dans la résistance parallèle  $R_p$  et  $V_j$  la tension de polarisation aux bornes de la diode.

En remplaçant les équations (I.30) et (I.31) dans l'équation (I.29), le courant s'exprime sous la forme:

$$I = I_{ph} - I_s \left[ \exp\left(\frac{q(V + R_s I)}{nkT}\right) - 1 \right] - \frac{(V + R_s I)}{R_p} \quad (I.32)$$

En régime de circuit ouvert:

$$V_{CO} = n \frac{kT}{q} \text{Ln} \left[ \frac{I_{ph}}{I_s} \left( 1 - \frac{V_{CO}}{R_p I_{ph}} \right) + 1 \right] \quad (I.33)$$

Si  $R_p$  prend une valeur assez élevée pour ne pas tenir compte de  $I_p$  et que  $R_s$  a une valeur négligeable, le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert deviennent [14]:

$$I_{CC} = I_{ph} \quad (I.34)$$

$$V_{CO} = n \frac{kT}{q} \text{Ln} \left[ \frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right] \quad (I.35)$$

## **I.9.2 Différents types de cellules solaires**

### **I.9.2.1 Cellule solaire de première génération**

Ces cellules sont typiquement fabriquées en utilisant une plaquette de silicium. Les cellules photovoltaïques de première génération correspondent à la technologie dominante dans la production industrielle de cellules solaires, représentant plus de 86% du marché des cellules solaires.

### **I.9.2.2 Cellules solaires de deuxième génération**

Les Cellules solaires de deuxième génération dites couche mince (Thin-film) sont composées de couches de semiconducteurs dont l'épaisseur est habituellement variée de quelques nanomètres à des dizaines de micromètres, donnant lieu à une diminution de la quantité de matériel utilisé et donc à des technologies moins dispendieuses. Cette propriété est activée par le coefficient d'absorption de semiconducteurs utilisés qui est supérieur à celui du silicium cristallin. Les matériaux généralement utilisés dans la technologie en couche mince sont principalement le tellure de cadmium (CdTe), le diséléniure de cuivre et d'indium CuInSe<sub>2</sub> (CIS),...etc.

Les cellules photovoltaïques en couches minces sont déposées par des technologies telles que CBD (Chemical Bath Deposition), Spin Coating, Spary, Sol Gel, PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition), ... etc.

#### **I.9.2.2.1 Les cellules solaires à couche mince de silicium**

À cause du bas coût du substrat, la technologie à couche mince de silicium amorphe est la plus utilisée. Le silicium amorphe est déposé sur un substrat en verre à basse température par une technique de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition). Le coût des cellules de silicium amorphe est plus faible que les cellules cristallines; Cependant, le rendement des cellules cristallines est supérieur à celui de silicium amorphe (a-Si).

Afin d'augmenter l'absorption dans les cellules solaires à couche mince de silicium amorphe, elles doivent avoir de gros grains, être de bonnes propriétés électroniques et déposées à un taux de croissance élevé ( $> 50 \text{ \AA} / \text{sec}$ ) sur un substrat en verre, qui permet le piégeage de la lumière.

Les techniques utilisées pour le dépôt de silicium à couche mince comprennent: La CVD (chemical vapor deposition), LPCVD (Low-pressure chemical vapor deposition), PECVD (Plasma-Enhanced chemical vapor deposition), pulvérisation et d'autres.

### I.9.2.2.2 Les cellules solaires organiques

Dans les cellules solaires organiques, en raison de leurs faibles constantes diélectriques et une liaison intermoléculaire faible, les résultats d'absorption de photons dans la création d'électron-trou lié, est connu sous le nom d'excitons [4]. Donc ceci est la grande différence avec les cellules solaires inorganiques, où les paires électron-trou sont directement créés. En outre, les cellules solaires organiques exercent un flux de porteurs majoritaires à la place d'un flux de porteurs minoritaires.

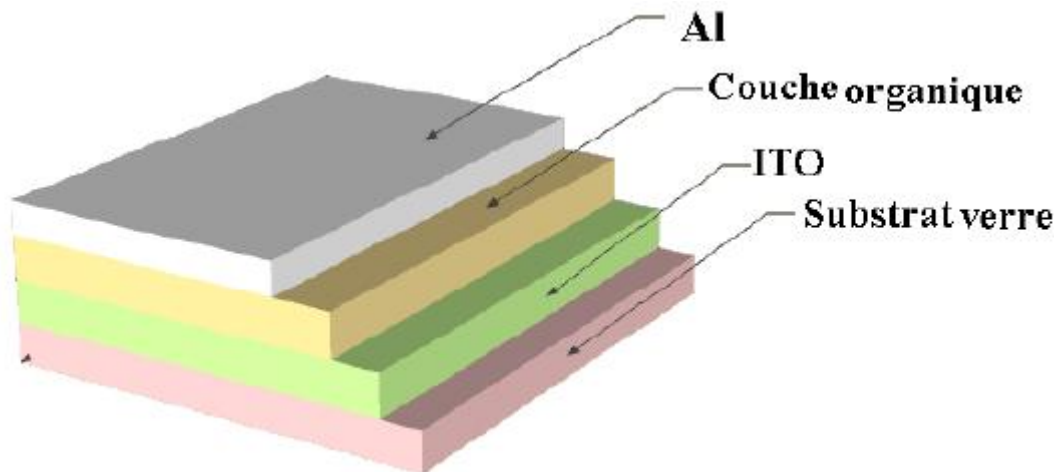


Figure I.17 : Structure monocouche d'une cellule photovoltaïque organique [7].

### I.9.2.3 Cellules solaire de troisième génération

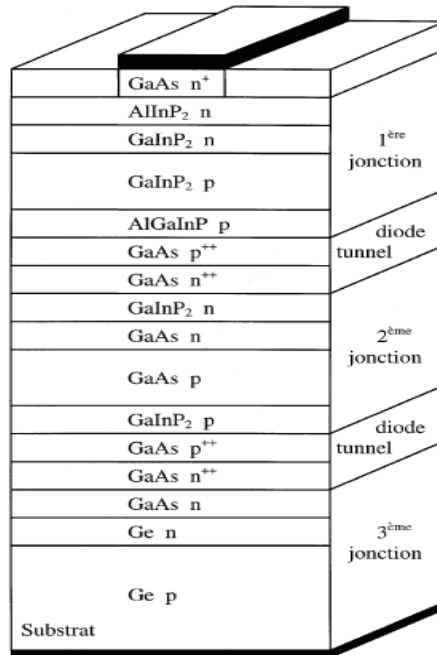
Les cellules photovoltaïques de troisième génération sont largement définies comme des dispositifs semiconducteurs, qui ne reposent pas sur une jonction P-N traditionnelle pour séparer des porteurs de charge photogénérés.

Les cellules solaires de troisième génération sont en mesure de dépasser la limite Shockley-Queisser (Rendement >31%) [21].

Le but de l'approche de la troisième génération est de réduire le coût par Watt de « film mince » technologies de deuxième génération en augmentant l'efficacité des dispositifs photovoltaïques [21].

### I.9.2.3.1 Cellules solaires multi-jonctions

Les dispositifs à jonction unique fonctionnent de façon optimale quand la longueur d'onde égale à la bande interdite, perdant par nature l'efficacité à toutes les autres longueurs d'onde à travers le spectre solaire. Les dispositifs multi-jonctions empilent différentes cellules solaires, avec de multiples bandes interdites accordées afin d'utiliser l'ensemble du spectre (figure I.18) [21].



**Figure I.18** : Cellule multi-jonction (multicolore) [6].

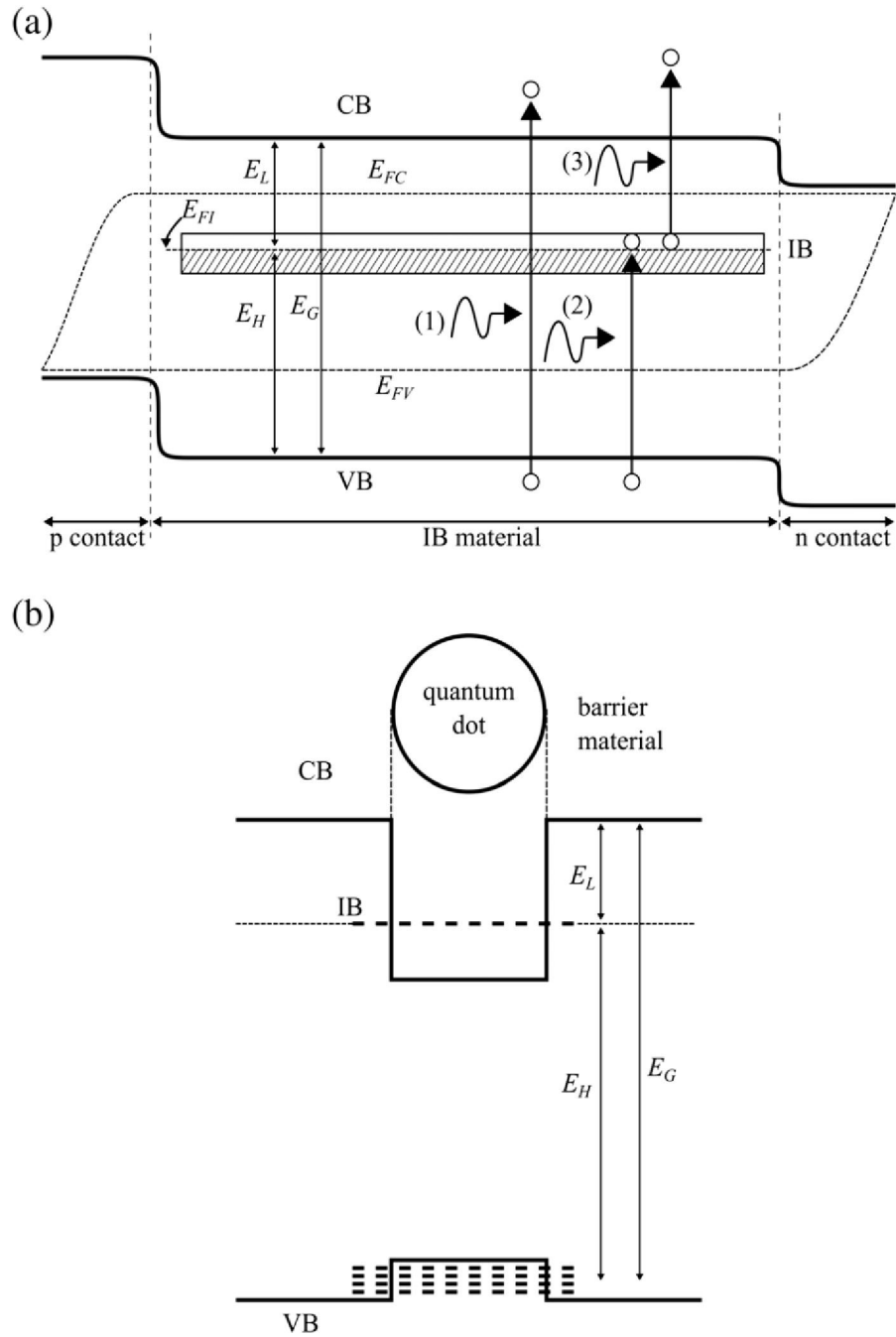
L'objectif des cellules multicolores, ou multi-jonctions, est la réduction des deux principales causes de perte de rendement des cellules à jonction unique, les pertes résultant de la non absorption des photons d'énergie ( $h\nu < E_g$ ) et les pertes thermiques associées à la thermalisation des photoporteurs chauds créés par les photons d'énergie ( $h\nu \geq E_g$ ).

Le concept des piles multicolores est simple: plusieurs cellules avec des gaps différents sont empilées de manière à ce que le rayonnement incident interagisse séquentiellement avec les cellules de gaps décroissants. Les cellules supérieures, à grands gaps, absorbent et convertissent les photons de haute énergie, et transmettent les photons de basse énergie aux cellules sous-jacentes de gaps plus petits. Ces dernières absorbent alors et convertissent les photons de plus basse énergie. Les pertes par thermalisation sont ainsi minimisées car chaque cellule convertit des photons d'énergie  $h\nu \sim E_g$  [6].

### **I.9.2.3.2 Puits quantiques et bande intermédiaire de cellule solaire (QD-IBSC)**

La cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) a été proposée pour augmenter le rendement des cellules solaires. Les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSCs) ont le potentiel de dépasser l'efficacité des cellules solaires à jonction unique grâce à l'absorption de photons d'énergie en dessous de la bande interdite et l'extraction du photocourant subséquent à haute tension. L'absorption de photons en dessous de l'énergie de bande interdite se fait à travers un ensemble de niveaux d'énergie, appelée la bande intermédiaire (IB) situé à l'intérieur de la bande interdite de semiconducteur classique (figure I.19 (a)). En raison de la présence de cette bande, les photons pompe les électrons de la bande de valence (BV) à la bande intermédiaire (IB) (photons " 2 ") et de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (photons " 3 "), en ajoutant ceux classiquement générées par l'absorption de photons d'énergie plus élevés (photons " 1 ") capables de pomper des électrons à partir de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC) [22].

L'utilisation de bande intermédiaire (IB) ou des niveaux d'énergie dans la largeur de bande interdite de semiconducteur a été proposée comme un moyen de fabriquer des cellules solaires avec un rendement pouvant atteindre 63,3% dans des conditions idéales. Ces cellules ont été mises en œuvre avec des puits quantiques qui fournissent des niveaux d'énergie à l'intérieur de la bande interdite (figure I.19 (b)) [23].



**Figure I.19:** (a) Schéma simplifié du diagramme de bande d'énergie d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) sous illumination contenant également la description de son fonctionnement fondamental. (b) Schéma simplifié de bande d'énergie d'un puit quantique (QD) montrant l'équivalence avec la structure de bande d'un IBSC [23].

## **I.10 Conclusion**

La conversion de photons en charges électriques est réalisée au cours de plusieurs étapes qui ont chacune un rôle déterminant dans l'efficacité finale de conversion photoélectrique de la cellule.

Dans ce chapitre, nous avons d'abord présenté un aperçu général de la conversion photovoltaïque en retraçant son historique et ses concepts de bases. Nous avons ensuite décrit les différents processus de l'interaction entre une onde électromagnétique avec un matériau semiconducteur. La physique de la jonction P-N qui est au centre des performances photovoltaïques des dispositifs a été rappelée.

**Bibliographie**

- [1] M. Mesrouk, Mémoire de Magister de l'Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie (2013).
- [2] A. Benyoucef, Thèse de doctorat de Technologie de Belfort-Monbeliard et de l'Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, Algérie (2008).
- [3] S. Ait Adi, Mémoire de Magister de l'Université d'oran, Algérie (2012).
- [4] D. Diouf, Thèse de doctorat de l'Université Paris-Sud 11 (2010).
- [5] S. Abada, Mémoire de Maître es Sciences de l'Université Laval, Quebec (2011).
- [6] H. Mathieu and H. Fanet, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6<sup>eme</sup> ed., Dunod, (2009).
- [7] A. Maoucha, Mémoire de Magister de l'Université de Batna, Algeria (2011).
- [8] A. Yezid, Mémoire de Magister de l'Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, Algérie (2010).
- [9] L. Remache, Thèse de doctorat de l'Université de Mentouri de Constantine, Algeria (2011).
- [10] Z. Pinter, Thèse de doctorat L'institut national des sciences appliquées de Lyon, France (2002).
- [11] A. Chovet, P. masson, Physique des semiconducteurs, Université de Marseille, France (2005).
- [12] J. I. Posada Parra, Thèse de doctorat de l'Université Pierre et Marie Curie Sorbonne, France (2015).
- [13] S. Khelifi, Mémoire de Magister de l'Université de Sidi Bel Abbés, Algeria (2009).
- [14] H. Helal, A. Neffah, Mémoire de Master de l'Université de Sidi Bel Abbés, Algeria (2016).
- [15] S. M. Sze, K. K. Ng, "Physics of semiconductor devices", 3<sup>nd</sup> edition Wiley & Sons, New Jersey (2007).
- [16] Z. Bendjellouli, Mémoire de Magister de l'Université de Bechar, Algérie (2009).
- [17] N. Oleksiy. Thèse de Doctorat de l'Université de Lyon, France (2005).
- [18] M. Bouafia, L. Deblaoui, Mémoire de Master de l'Université Kasdi Merbah, Ouargla, Algeria (2011).
- [19] K. Helali, Mémoire de Magister de l'Université de Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie (2012).



- [20] A. Ould Mohamed Yahya, A. Ould Mahmoud et I. Youm, *Revue des Energies Renouvelables* Vol. 11 N°3, 473-483, (2008).
- [21] X. An, D. A. Carnelli, A. Denisov, L. Di Lillo, D. Sacchetto, S. Saccella, P. Reddi, L. Zheng, *Mémoire de Master de l'université de Grenoble, France*, (2007).
- [22] A. Marti, E. Antolin, P. G. Linares and A. Luque, *Journal of Material chemistry*, 22, 22832-22839, (2012).
- [23] E. Antolin, A. Luque, A. Marti, C. Tablero, *Journal of Physica B*, 382, 320-327, (2006).

## CHAPITRE II

Propriétés des composés II-VI  
binaires et ternaires et  
caractéristiques des cellules  
solaires à bande intermédiaires

## II.1 Introduction

Les semiconducteurs II-VI ont un potentiel pour une variété d'applications, notamment dans les applications optoélectroniques (dispositifs émetteurs et récepteurs de la lumière, les cellules solaires et autres dispositifs) [1]. Les matériaux II-VI ont un intérêt technologique très important à cause de la largeur de la bande interdite qui couvre une large gamme spectrale allant de l'infrarouge jusqu'à l'ultraviolet.

Dans ce chapitre on commencera par la présentation des principaux composés II-VI en rappelant leurs principales caractéristiques et les techniques de dépôts utilisées pour leur fabrication. On passera ensuite à la présentation du composé ternaire ZnTeO, de ses propriétés et de son intérêt dans la réalisation de cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC).

## II.2 Les composés binaires II-VI

Les semiconducteurs II-VI résultent de l'association d'un élément de la colonne II et un élément de la colonne VI du tableau périodique de Mendeleïev (Tableau II.1).

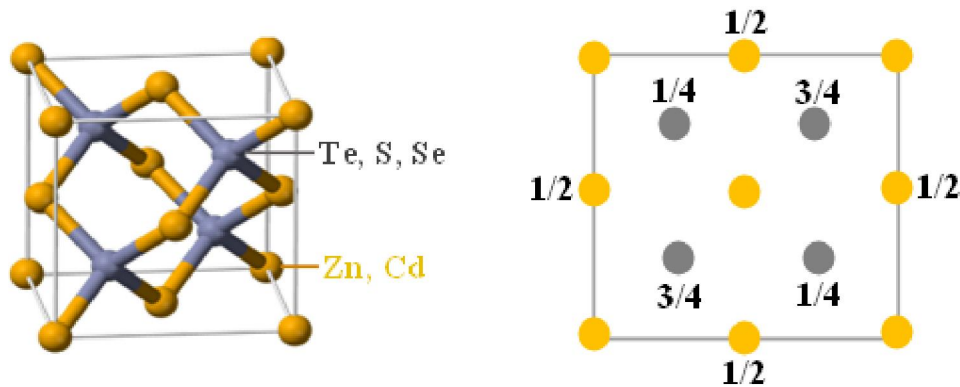
IA-B	IIA-B	IIIB	IVB	VB	VIB	VIIB
Li <sup>Z=3</sup>	<b>Be<sup>4</sup></b>	B <sup>5</sup>	C <sup>6</sup>	N <sup>7</sup>	<b>O<sup>8</sup></b>	F <sup>9</sup>
Na <sup>11</sup>	<b>Mg<sup>12</sup></b>	Al <sup>13</sup>	Si <sup>14</sup>	P <sup>15</sup>	<b>S<sup>16</sup></b>	Cl <sup>17</sup>
Cu <sup>29</sup>	<b>Zn<sup>30</sup></b>	Ga <sup>31</sup>	Ge <sup>32</sup>	As <sup>33</sup>	<b>Se<sup>34</sup></b>	Br <sup>35</sup>
Ag <sup>47</sup>	<b>Cd<sup>48</sup></b>	In <sup>49</sup>	Sn <sup>50</sup>	Sb <sup>51</sup>	<b>Te<sup>52</sup></b>	I <sup>53</sup>
Au <sup>79</sup>	<b>Hg<sup>80</sup></b>	Ti <sup>81</sup>	Pb <sup>82</sup>	Bi <sup>83</sup>	<b>Po<sup>84</sup></b>	At <sup>85</sup>

**Tableau II.1** : Extrait des éléments du tableau de Mendeleïev [2].

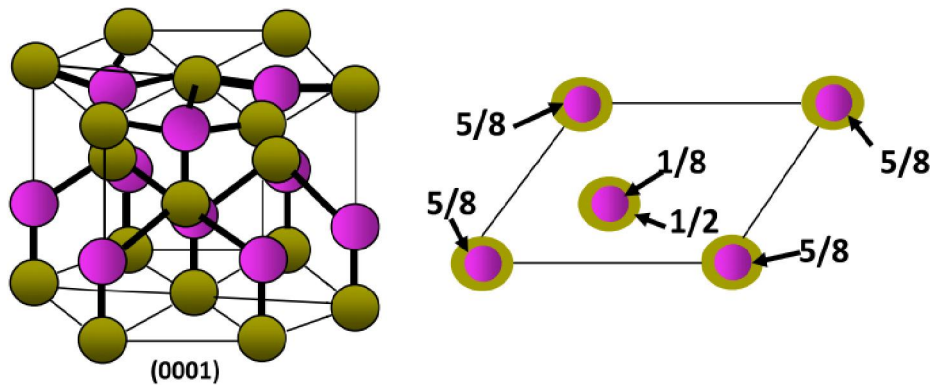
Dans la structure cristalline des semiconducteurs II-VI on trouve que la dernière orbitale s des atomes du groupe II (Zn, Cd, Mg, Be, Hg) ne possède que deux électrons, alors que la couche électronique périphérique des atomes du groupe VI (Te, O, Se, S, Po) contient six électrons de valence, dont deux sur l'orbitale s et quatre sur l'orbite p. Un matériau II-VI comportera donc des liaisons hybrides de type  $sp^3$  où chaque cation (élément II) se retrouve dans un environnement tétraédrique d'anions (élément VI) et inversement. Les liaisons sont polaires, avec un caractère intermédiaire entre la liaison ionique et la liaison covalente [2].

Les semiconducteurs II-VI cristallisent dans la phase cubique zinc blende la figure II.1 et/ou la phase hexagonale Wurtzite la figure II.2. Ces deux types de structure sont formés de l'empilement de plans d'anions et de cations successifs de maille hexagonale. Celle-ci permet

des liaisons  $sp^3$  de symétrie tétraédrique, caractéristiques des liaisons covalentes des semiconducteurs [2].



**Figure II.1 :** La structure cristalline zinc blend (Zn) et projection de la structure sur le plan (001) [3].



**Figure II.2 :** Structure cristalline Wurtzite et projection de la maille élémentaire sur le plan (001) [3].

Les composés binaires et ternaires à base des II-VI sur lesquels porte notre étude sont ceux de la famille des Zinc (ZnTe, ZnSe, ZnS) et de Cadmium (CdTe, CdSe, CdS), présentent des caractéristiques très importantes leur permettant d'être des candidats concurrentiels du silicium pour la conversion photovoltaïque et l'optoélectronique dans le visible. Ils forment une classe de matériaux dont le gap varie de 3.84 eV (ZnS) à 1.44 eV (CdTe) à la température ambiante. Leurs intérêts résident dans leurs forts coefficients d'absorption ainsi que leurs faibles coûts de production [4].

Les gaps de différents semiconducteurs II-VI sont portés dans le tableau (II-2) et sur la figure (II-3).

semiconducteur		Gap (eV)		Nature du gap
		4K	300K	
ZnO	(H)	3.40	-	direct
ZnS	(H)	3.80	3.68	“
ZnSe	(C)	2.82	2.67	“
ZnTe	(C)	2.39	2.26	“
CdS	(H)	2.56	2.42	“
CdSe	(H)	1.84	1.7	“
CdTe	(C)	1.60	1.44	“

C : structure cubique

H : structure hexagonale

Tableau II.2. : Energie du gap des différents semiconducteurs II-VI [5].

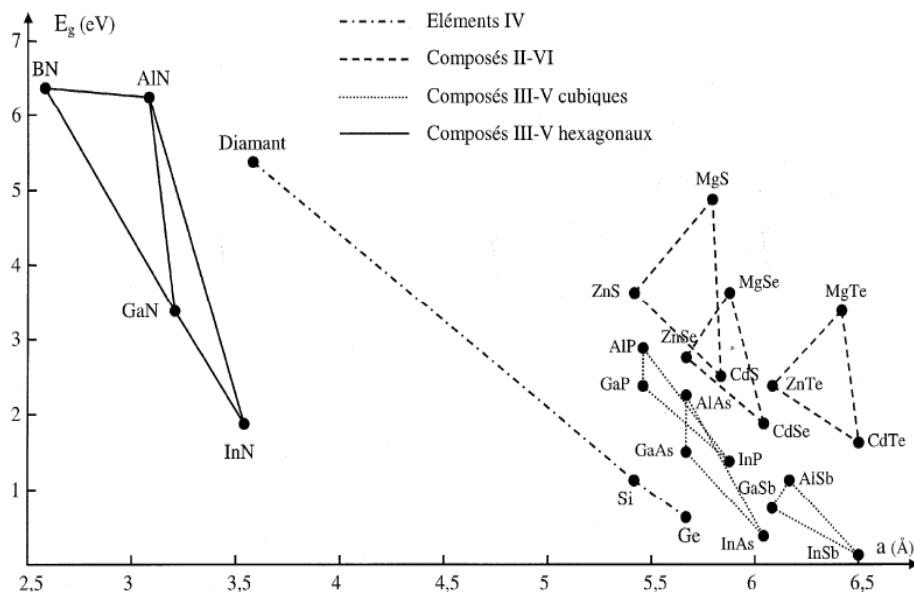


Figure II.3 : Gaps et paramètres de maille [5].

### II.2.1 Le tellure de cadmium (CdTe)

Le CdTe possède la structure Zinc blend qui correspond à deux sous réseaux cubique à face centrées, décalés de  $1/4$  suivant la grande diagonale. On trouve quatre molécules par cellule, chaque élément du composé étant au centre d'un tétraèdre dont les quatre sommets sont constitués par l'autre élément [6], et le taux de remplissage de cette structure est égale 0.34.

Ce matériau binaire a un grand gap direct car le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction correspondent au même vecteur d'onde  $\vec{k}$  au centre de la

zone de Brillouin. C'est la raison pour laquelle les processus d'absorption ou d'émission de photons, au voisinage du gap fondamental sont considérablement plus importants dans les matériaux à gap direct que dans les matériaux à gap indirect [5].

Le CdTe est utilisé dans différentes applications en cellules photovoltaïques en couches minces, il est caractérisé par un grand coefficient d'absorption et une faible perte de puissance.

La figure II.4 présente la structure de bande du composé CdTe qui est calculée par le formalisme de pseudo potentiel [7].

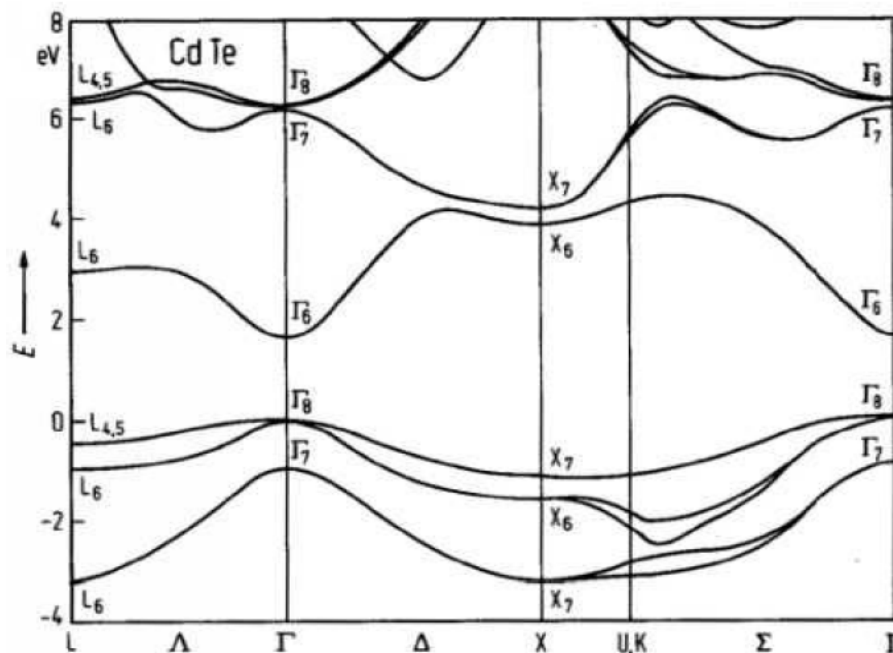


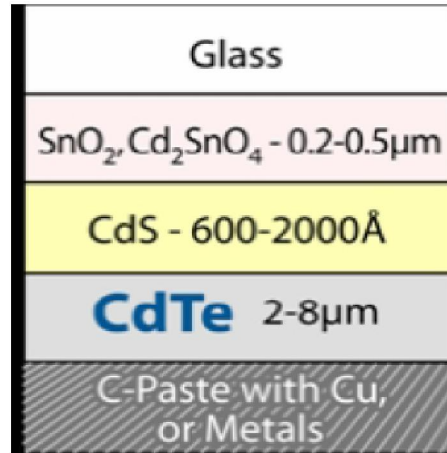
Figure II.4 : Structure de bande du CdTe [7].

Jusqu'à une date récente, il était admis que la filière au CdS/CdTe représentait l'approche la plus prometteuse pour les cellules de nouvelle génération. CdTe paraissait être un matériau idéal pour les cellules solaires en couches minces pour au moins trois raisons :

- Le gap d'énergie est de type direct, aussi le coefficient d'absorption est élevé ( $> 10^5 \text{ cm}^{-1}$  dans le visible) et la couche absorbante ne nécessite plus de quelques micromètres pour absorber 90% du spectre solaire. Autorisant par conséquent l'utilisation des matériaux relativement impurs dont les longueurs de diffusion des porteurs minoritaires ne dépasse pas quelques micromètres.
- La valeur du gap  $E_g = 1.45 \text{ eV}$  est idéal pour la conversion photovoltaïque du spectre solaire.

- De nombreuses méthodes existent pour déposer CdTe avec une vitesse de dépôt très élevée tout en gardant une qualité raisonnable [8].

La figure II.5 représente la structure d'une cellule solaire à base de CdTe [8].



**Figure II.5 :** Cellule solaire à base de CdTe [8].

Le tableau présente les différentes propriétés électroniques d'une cellule solaire à base de CdTe [8].

Propriétés des couches			
	SnO <sub>2</sub>	CdS	CdTe
W [nm]	500	25	4000
$\epsilon/\epsilon_0$	9	10	9.4
$\mu_e$ [cm <sup>2</sup> /Vs]	100	100	320
$\mu_h$ [cm <sup>2</sup> /Vs]	25	25	40
n, p [cm <sup>-3</sup> ]	n: 10 <sup>17</sup>	n: 10 <sup>17</sup>	p : 2x10 <sup>14</sup>
Eg [eV]	3.6	2.4	1.5
Nc [cm <sup>-3</sup> ]	2.2x10 <sup>18</sup>	2.2x10 <sup>18</sup>	8x10 <sup>17</sup>
Nv [cm <sup>-3</sup> ]	1.8x10 <sup>19</sup>	1.8x10 <sup>19</sup>	1.8x10 <sup>19</sup>
$\Delta E_c$ [eV]	0		-0.1

**Tableau II.3:** Les propriétés électroniques d'une cellule solaire à base de CdTe [8].

Le matériau CdTe est intéressant dans la fabrication des cellules solaires de nouvelle génération du fait de sa largeur de bande interdite de 1.45 eV et de sa forte absorption ce qui permet d'atteindre un rendement élevé. Pour constituer une cellule au CdTe, on pose une couche de conducteur transparent sur un substrat de verre, puis on dépose une couche de CdS (sulfure de cadmium) de type N puis une couche de CdTe dopé P, on constitue ainsi une hétérojonction. Les résultats de laboratoire sont très intéressants avec notamment un rendement de 15%. Malheureusement il contient du cadmium, connu pour sa toxicité et déjà interdit dans certains pays [9].

### II.2.2 L'oxyde de Zinc (ZnO)

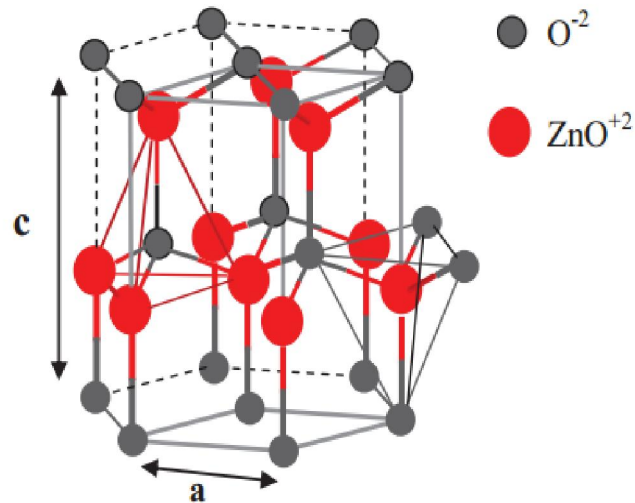
L'oxyde de zinc est un matériau non toxique (contrairement, par exemple, à l'indium dans l'ITO), et est très abondant sur terre, c'est un atout indéniable car il permet de réduire les coûts de production.

Le ZnO est un semiconducteur binaire de large gap appartient à la classe du groupe II-VI, il est transparent dans le visible et dans le proche infrarouge. Il présente un ensemble de propriétés qui permettent son utilisation dans certain nombre d'applications en optoélectronique, photoluminescence, électroluminescence, comme capteur de produit chimique dans les couches minces. Il cristallise sous différentes structures: Le zinc blend et la Wurtzite.

Les films d'oxyde de zinc sont principalement connus sous la structure Wurtzite. Une croissance épitaxiale sur un substrat cubique permet de cristalliser l'oxyde de zinc dans un système cubique de type zinc blend. Sa masse volumique est de  $5.72 \text{ g cm}^{-3}$ , ce qui correspond à une densité moléculaire de  $4.21 \times 10^{22}$  molécules par  $\text{cm}^3$ .

La structure Wurtzite est caractérisée par deux sous réseaux cubiques à face centrées imbriqués, décalés d'un quarts de la diagonale, avec les paramètres de mailles  $a=3.249 \text{ \AA}$ ,  $c= 5.2042 \text{ \AA}$ ,  $c/a = 1.601$ , et un paramètre interne  $u = 0.3832$ . Ce dernier est défini comme étant la longueur de liaison parallèles à l'axe c lorsque le paramètre c est égal à l'unité. La figure II.6 présente la structure Wurtzite de type B<sub>4</sub>, les paramètres de maille de ZnO non intentionnellement dopé dépendent de nombreuses facteurs comme : la concentration des électrons libres, les défauts dans la maille, la présence d'impuretés [10, 11].

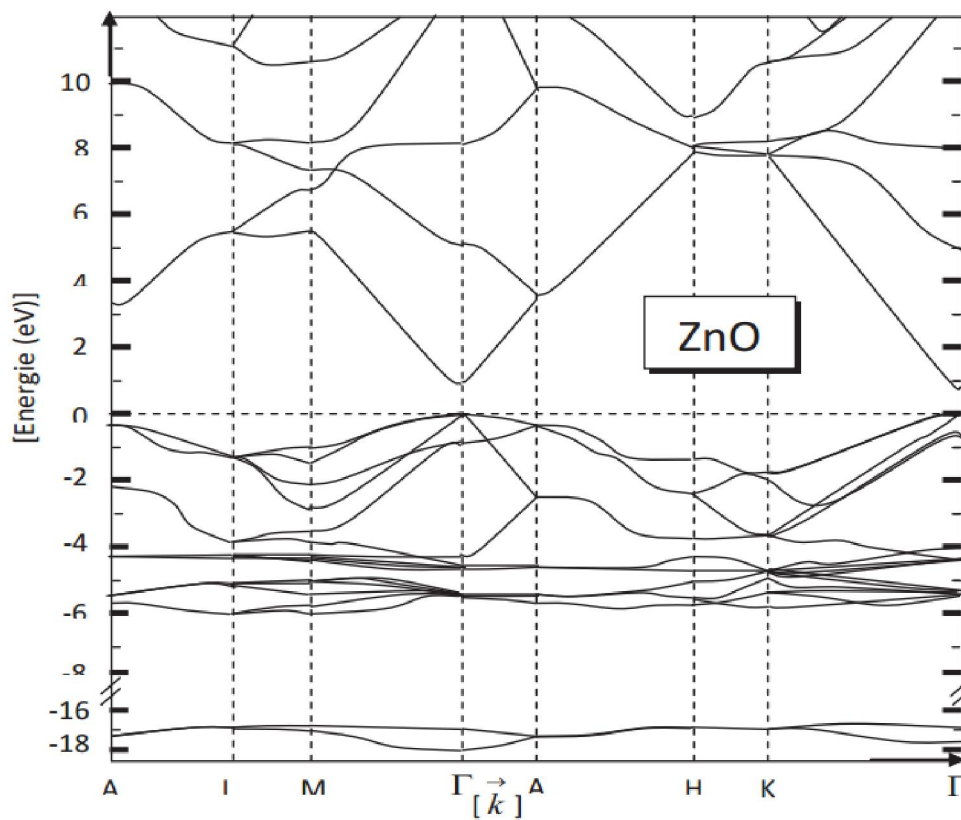




**Figure II.6 :** La structure Wurtzite de ZnO [12].

Dans la structure de ZnO les états 2p de l'oxygène forment la bande de valence et les états 4s de zinc forment la bande conduction et le maximum de la bande de valence situe au point  $\Gamma=0$  de la zone de Brillouin qui correspond à  $k=0$ , indiquant que ZnO est à gap direct.

La figure II.7 illustre une structure de bande Wurtzite de ZnO.

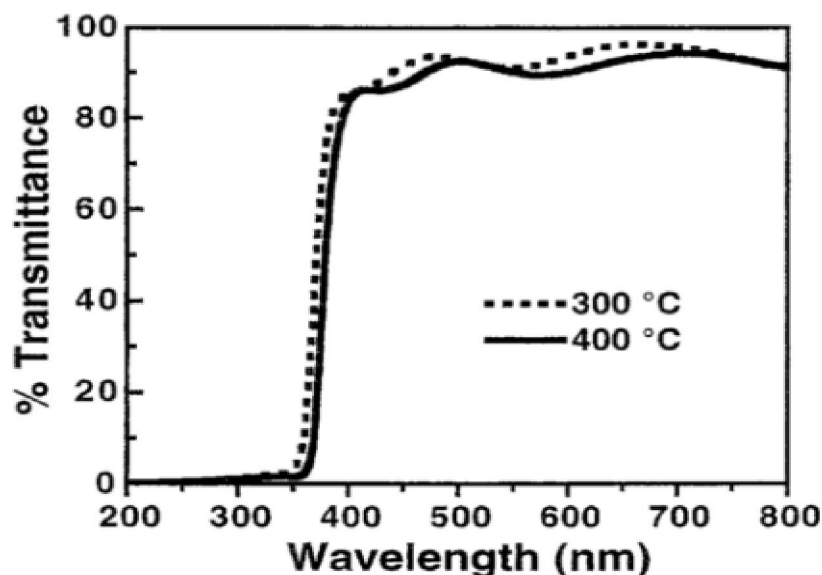


**Figure II.7 :** Structure de bande Wurtzite de ZnO [10, 11].

L'oxyde de zinc a une large bande interdite directe valant 3.37 eV à température ambiante qui lui confère la propriété d'être transparent dans le spectre visible. Il possède une conductivité électrique élevée, la nature de cette conductivité est de type N. Les mécanismes de dopage sont soit substitutionnels soit interstitiels. Ce dopage peut être d'origine des lacunes d'oxygènes et des atomes de zinc en position interstitielles. Mais il semblerait que l'insertion d'hydrogène en position interstitielle peut être la cause de ce dopage non intentionnel.

Dans le cas du dopage substitutionnel, les atomes dopants vont remplacer les atomes de zinc du réseau atomique du ZnO, et donc la création d'une liaison ionique entre deux électrons de leur orbitale externe et les atomes d'oxygène et le reste des électrons de cette orbitale externe vont être cédés dans la bande de conduction.

L'oxyde de zinc peut avoir un dopage type P. Parmi les dopants qui permettent d'obtenir ce type de dopage, il y a l'azote, et le co-dopage azote aluminium. Look et al ont réalisé des films de ZnO de type P, à l'aide d'un dopage à l'azote, présentant une mobilité  $\mu_p$  des trous de l'ordre de  $2 \text{ cm}^2/\text{V.s}$  [10, 13, 14]. L'oxyde de zinc ZnO à un indice de réfraction qui varie entre 1,9 et 2,2 comme propriété optique. Il présente une absorption aux environs de 360 nm, longueur d'onde dans l'ultraviolet, ce qui explique la valeur du gap des films minces de ce matériau. Par contre, il est transparent dans le spectre visible et proche infrarouge comme l'indique la figure II.8.



**Figure II.8 :** Transmission d'un film d'oxyde de zinc recuit pour différentes températures [14].

L'oxyde de zinc émet des photons sous l'excitation lumineuse lorsque son gap est inférieure à l'énergie d'un faisceau lumineux, cette émission est due à la présence des lacunes d'oxygène, ou de zinc, mais elle peut être expliquée par la présence d'impuretés ou d'atomes en position interstitielle. Ces photons ont généralement une longueur d'onde de l'ordre de 550 nm correspondant à la lumière verte [14]. Il peut varier du bleu au rouge, en fonction des défauts et des impuretés [10].

### II.2.3 Tellure de Zinc (ZnTe)

Parmi les semiconducteurs de composés II-VI, le tellure de zinc (ZnTe) est un matériau très prometteur pour les applications de dispositifs optoélectroniques dans la gamme spectrale verte, en raison de sa largeur de bande interdite directe  $E_g=2.29$  eV [15, 16].

Il a été reconnu depuis longtemps que le ZnTe a tendance à être de type P. Dans des conditions standard, il a tendance de cristalliser en structure zinc-blend ayant une constante de réseau  $a = 0.6101$  nm et une densité de  $5.71$  g  $cm^{-3}$ . La conductivité de type N est difficile à réaliser. Les premières couches épitaxiales ZnTe de type N ont été synthétisées en utilisant l'épitaxie en phase vapeur (MOCVD) et l'épitaxie par jets moléculaires (MBE), en utilisant l'aluminium (Al) et le chlore (Cl) en tant que dopant, respectivement, en 1994. Depuis, plusieurs techniques de dopage étaient également à la réussite de dopage de type N, y compris le dopage par laser, avec dopage Al au cours d'une croissance MBE [17].

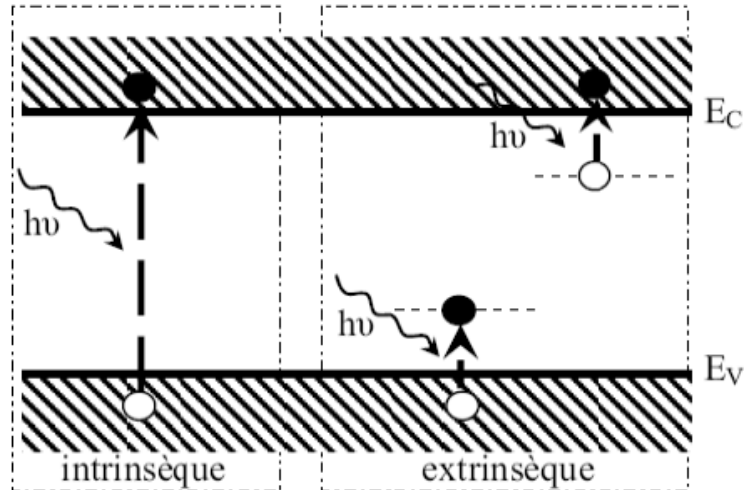
Les couches ZnTe:Al montrent une haute qualité structurale et une concentration en porteur élevée jusqu'à  $n = 4 \times 10^{18} cm^{-3}$  avec une faible résistivité ( $\rho = 0.017 \Omega.cm$ ) [18].

La plupart des recherches ont été concentrées sur le développement de dispositifs émettant de la lumière. En conséquence, une diode électroluminescente de jonction PN émettant de la lumière (LED) avec un rendement de 0,15% a été réalisée en utilisant ZnTe. Dans ce cas, la couche de ZnTe de type n a été fabriquée par diffusion thermique de Al [17].

Le tellure de zinc (ZnTe) est un des éléments importants ayant des propriétés électriques et optiques convenant pour la fabrication de divers dispositifs optoélectroniques tels que les cellules solaires, diodes électroluminescentes (LEDs), photodiodes, photodétecteurs et de nombreux autres dispositifs optoélectroniques. Et aussi ZnTe de type p fortement dopé est une couche tampon apte à former un contact ohmique avec le p-CdTe dans une cellule solaire à base de CdTe / CdS [3, 19].

Le développement d'une cellule solaire à base de ZnTe est une première étape essentielle pour développer une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) basée sur ZnTe.

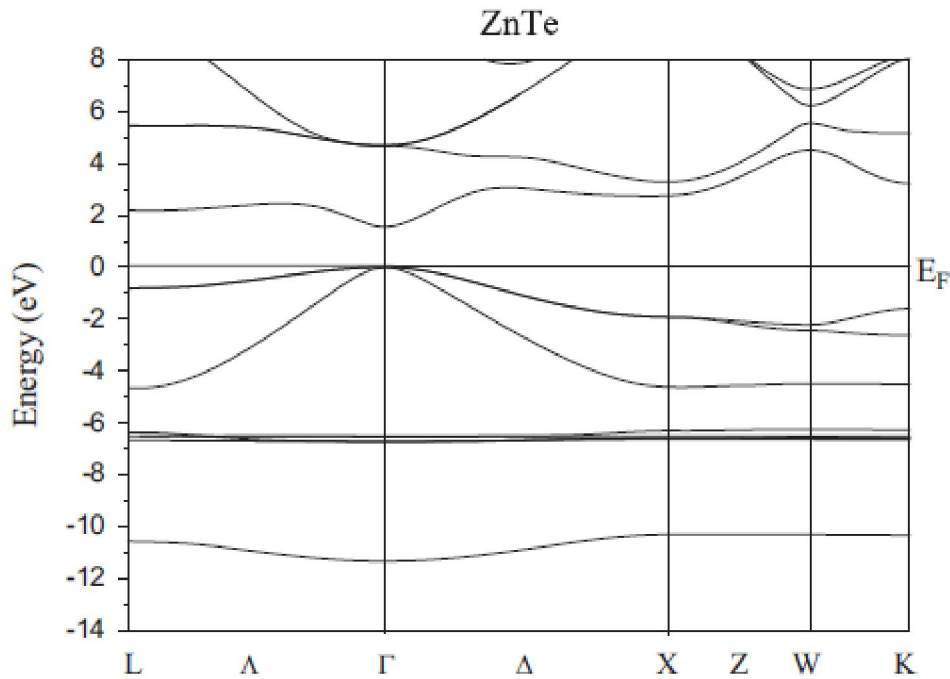
L'absorption optique est la méthode la plus directe pour la détermination du coefficient d'absorption d'un matériau. Dans le processus d'absorption, un photon est absorbé par le semiconducteur. Si l'énergie du photon est supérieure à un certain seuil, des paires électron-trou peuvent être générées dans un semiconducteur par des transitions bande à bande ou par des transitions qui impliquent des états dans le gap, comme nous pouvons le voir sur la figure II.9, où  $h\nu$  est l'énergie d'un photon incident [20].



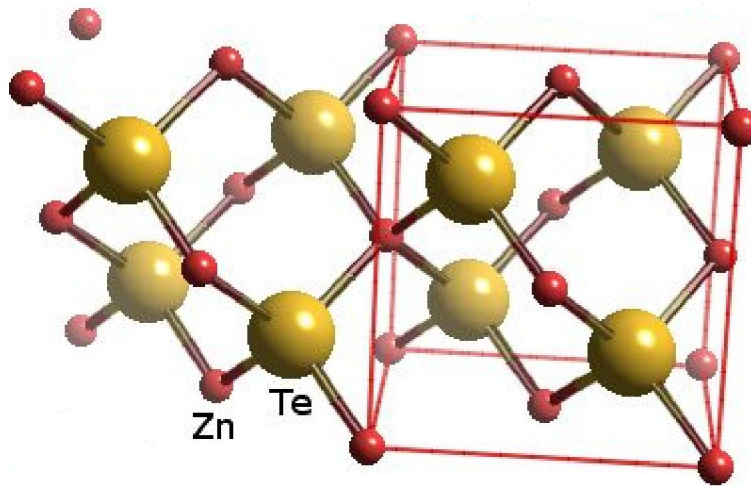
**Figure II.9:** Le processus d'absorption par le semiconducteur [21].

Il excite un électron de la bande de valence qui passe à un niveau plus haut. Ce processus implique généralement une transition bande à bande, comme un électron passe de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC) [20].

Les allures respectives de la structure de bande et de la structure cristalline zinc blend du semiconducteur binaire ZnTe sont représentées sur les figures II.10 et II.11 ci-dessous [22] :



**Figure II.10 :** Structure de bande Zinc-blend de ZnTe [22].



**Figure II.11 :** La structure Zinc-blend de ZnTe [22].

### II.3 Les techniques de dépôts de couches minces

On distingue deux grandes catégories de méthodes d'élaboration de couches minces : les méthodes physiques PVD (Physical Vapor Deposition) telles que la pulvérisation ou l'évaporation et les méthodes chimiques comme la CVD (Chemical Vapor Deposition) [9].

Les méthodes physiques sont en général utilisées dans la recherche, alors que les méthodes chimiques sont utilisées dans l'industrie, car ces méthodes permettent d'obtenir de films de meilleure qualité et avec une vitesse de dépôt plus grande.

Par principe une couche mince d'un matériau donné est un élément de ce matériau dont l'une des dimensions, qu'on appelle l'épaisseur, est faible de telle sorte qu'elle s'exprime en nanomètres et que cette faible distance entre les deux surfaces limites (cette quasi bidirectionnalité) entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques. La différence essentielle entre le matériau à l'état massif et à l'état de couches minces est en effet liée au fait que dans l'état massif on néglige généralement le rôle des limites (les surfaces) dans les propriétés, tandis que dans une couche mince ce sont au contraire les effets liés aux surfaces limites qui sont prépondérants. Il est assez évident que plus l'épaisseur sera faible, plus cet effet de bidirectionnalité sera prononcé. Inversement lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépassera un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés bien connues du matériau massif [23].

La seconde caractéristique essentielle d'une couche mince est que quelle que soit la procédure employée pour sa fabrication, une couche mince est toujours solidaire d'un substrat sur lequel elle est construite. En conséquence, il sera impératif de tenir compte de ce fait majeur dans la conception, à savoir que le support influence très fortement sur les propriétés structurales de la couche. Ainsi une couche mince d'un même matériau, de même épaisseur pourra avoir des propriétés physiques sensiblement différentes selon qu'elle sera déposée sur un substrat de silicium monocristallin, ou un substrat isolant amorphe tel que le verre à titre d'exemple.

Il résulte de ces deux caractéristiques essentielles d'une couche mince la conséquence suivante : une couche mince est anisotrope par construction [23].

### **II.3.1 Principe de dépôt de couches minces**

Pour former une couche mince sur une surface solide (substrat) les particules du matériau du revêtement doivent traverser un milieu conducteur jusqu'à un contact intime avec le substrat.

A l'arrivée sur le substrat une fraction de la particule de revêtement adhère (grâce aux forces de Van der Waals) ou réagissent chimiquement avec le substrat.

Les particules peuvent être des atomes, molécules, ions ou fragment de molécules ionisées. Le milieu de transport peut être solide, liquide, gaz ou vide [23].

**A/ Solide :** dans cette situation le substrat est en contact avec le solide, seuls les particules qui diffusent du solide vers le substrat forment une couche. Souvent il est très difficile d'obtenir des films minces par contact entre solides exemple : la diffusion de l'oxygène de la silice pour former une couche mince  $\text{SiO}_2$  sur un substrat de silicium.

**B/ Liquide :** il est facilement utilisable que le premier cas, car le matériau est plus versatile dans cet état (épitaxie en phase liquide, et électrochimique, sol gel).

**C/ Gaz ou Vide :** dépôt CVD la différence entre le milieu gazeux et le vide est le libre parcours moyen des particules.

Il n'existe pas une méthode standard de dépôt de couche mince qui peut être utilisée dans différentes situations. La préparation de substrat est souvent une étape très importante pour les dépôts de couches minces afin d'obtenir une bonne adhésion.

### II.3.2 Différentes méthodes d'élaboration des couches minces

Les techniques permettant de produire des matériaux en couches minces sont très nombreuses. L'histoire des systèmes et de la technologie de dépôt de matériaux en couches minces a beaucoup évolué depuis les années soixante. Cela peut s'expliquer par la croissance de la demande industrielle de matériaux en couches minces. Parallèlement à la variété des méthodes de dépôt, la nature des matériaux produits en couches minces ne fait que se multiplier : isolants, semiconducteurs, polymères, supraconducteurs, leurs applications s'étendant sur plusieurs disciplines : microélectronique, optique, mécanique, chimie biomédical..... En plus, le développement d'un grand nombre de techniques d'analyse des surfaces, le contrôle de plus en plus précis des paramètres intervenant sur le dépôt et une meilleure compréhension des processus de croissance des matériaux en couches minces a favorisé le développement industriel de ces matériaux. Nous citons, ci-dessous, les techniques les plus connues :

- La pulvérisation cathodique (sputtering).
- L'évaporation sous vide.
- L'Épitaxie par Jets Moléculaires.
- Ablation laser.
- Le dépôt chimique en phase vapeur (CVD).
- Sol gel.
- Spray ultrasonique.

#### II.3.2.1 La pulvérisation cathodique

Les systèmes de pulvérisation cathodique bénéficient d'une très grande popularité en milieu industriel. Ils sont moins performants que le procédé CVD au niveau du nombre de couches traitées simultanément et de la vitesse de dépôt, mais incontestablement, ils sont plus

simples à mettre en oeuvre et ils permettent le dépôt de n'importe quel matériau solide à température ordinaire, surtout des matériaux difficiles à évaporer. Bien entendu, on ne peut pas pulvériser les solides organiques peu stables à cause de l'augmentation de la température.

Les matériaux très volatils posent souvent des problèmes de déficience conduisant à des films non stoechiométriques à cause du système de pompage. Ces mêmes effets sont observés dans le cas de la méthode d'évaporation [24].

En pulvérisation cathodique nous distinguons la pulvérisation simple et la pulvérisation réactive. Dans la pulvérisation simple l'atmosphère de la décharge est chimiquement neutre, c'est-à-dire que l'on produit un vide de  $10^{-6}$  torr. On injecte ensuite le gaz d'argon pur pour créer le plasma. Dans le cas de la pulvérisation cathodique réactive l'atmosphère du plasma est réactive, c'est-à-dire que l'on introduit un certain pourcentage de gaz actif dans l'argon, par exemple de l'oxygène O<sub>2</sub> ou de l'azote N<sub>2</sub>. Dans chacun de ces cas, la cible peut être constituée d'un élément simple ou bien d'un composé. Il existe différents types de systèmes de pulvérisation cathodique, suivant le mode de création du plasma ou la nature de la cible (conductrice ou isolante) : diode à courant continu (DC), diode à courant alternatif (RF), et DC (ou RF) magnétron [24].

La pulvérisation cathodique est un phénomène d'éjection des particules à partir de la surface d'un matériau (cible), lorsque celui-ci est bombardé par un flux de particules énergétiques, afin qu'ils aillent se déposer sur un substrat, situé face à cette cible. Le schéma de principe de la pulvérisation cathodique diode est présentée dans la figure II.12 [24].

Le matériau à déposer est fixé sur la cathode et le substrat sur l'anode. Un gaz de décharge (généralement de l'argon) est alors introduit à une pression comprise entre  $10^{-3}$  et  $10^{-2}$  mbar. Il apparaît une décharge luminescente (plasma) entre les électrodes lorsqu'une haute tension (500 à 5000 V) est appliquée entre celles-ci. La décharge est auto-entretenu grâce à l'émission d'électrons secondaires [12, 24].



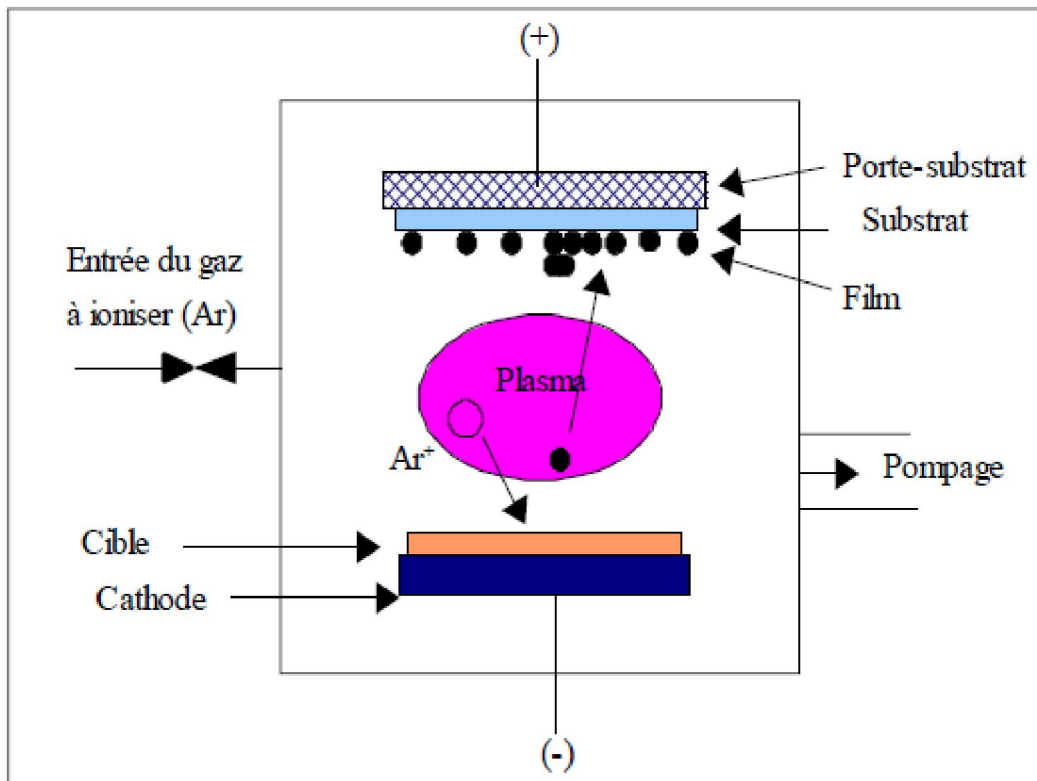


Figure II.12 : Schéma de principe de la pulvérisation cathodique diode [24].

### II.3.2.2 Evaporation sous vide

La vapeur du matériau à déposer est obtenue en chauffant ce dernier, par différents procédés: le four à résistance ou à effet Joule, par induction, par bombardement électronique (figure II.13) et par faisceau laser [24].

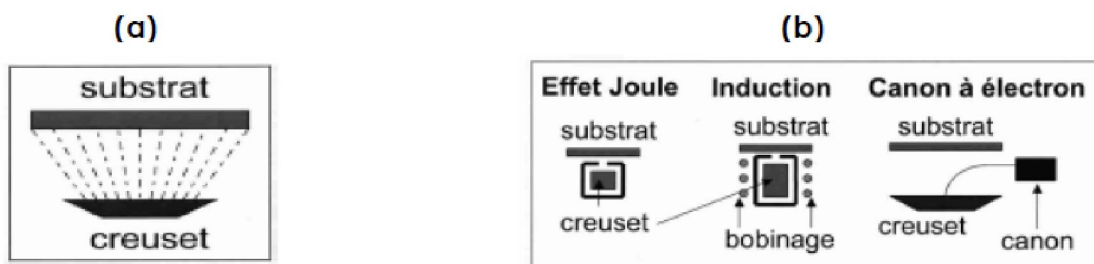


Figure II.13 : (a) Schéma de principe de l'évaporation (b) Les procédés de chauffage en évaporation sous vide [24].

En évaporation, la vitesse de dépôt dépend essentiellement de la pression de vapeur du matériau à évaporer c'est pour ça que le processus de dépôt s'effectue sous un vide secondaire (en général  $10^{-3}$  à  $10^{-5}$  mBar).

Cette technique est applicable notamment pour le dépôt métallique. La température d'évaporation de ce métal étant inférieure à la température de fusion du creuset. La figure II.13 montre le principe de cette technique. Afin d'améliorer l'homogénéité des couches déposées (très faible variations d'épaisseur), on fait tourner en permanence les substrats.

Afin de contrôler l'épaisseur des couches déposées, on utilise une balance à quartz. Le principe de celle-ci consiste à détecter la dérive de la fréquence d'oscillation du quartz par la modification de sa masse lors de la croissance de la couche déposée (le dépôt s'effectue aussi sur le quartz). C'est donc une mesure électrique qu'il faut bien évidemment étalonner. A chaque début d'expérience, la fréquence de référence est redéfinie. En mesurant le décalage de fréquence en fonction du temps, on peut aussi déterminer la vitesse de croissance des couches déposées. Lorsque la pression n'est pas suffisamment basse les dépôts sont peu adhérents et souvent amorphes [23].

Les principaux problèmes rencontrés généralement lors d'une évaporation sont la dissociation des oxydes, la réaction des matériaux à évaporer avec ceux avec lesquels ils sont en contact, les dégazages, la décomposition et les micro-explosions des matériaux à évaporer, la difficulté d'obtenir des couches d'alliages ayant la même composition que l'alliage de départ.

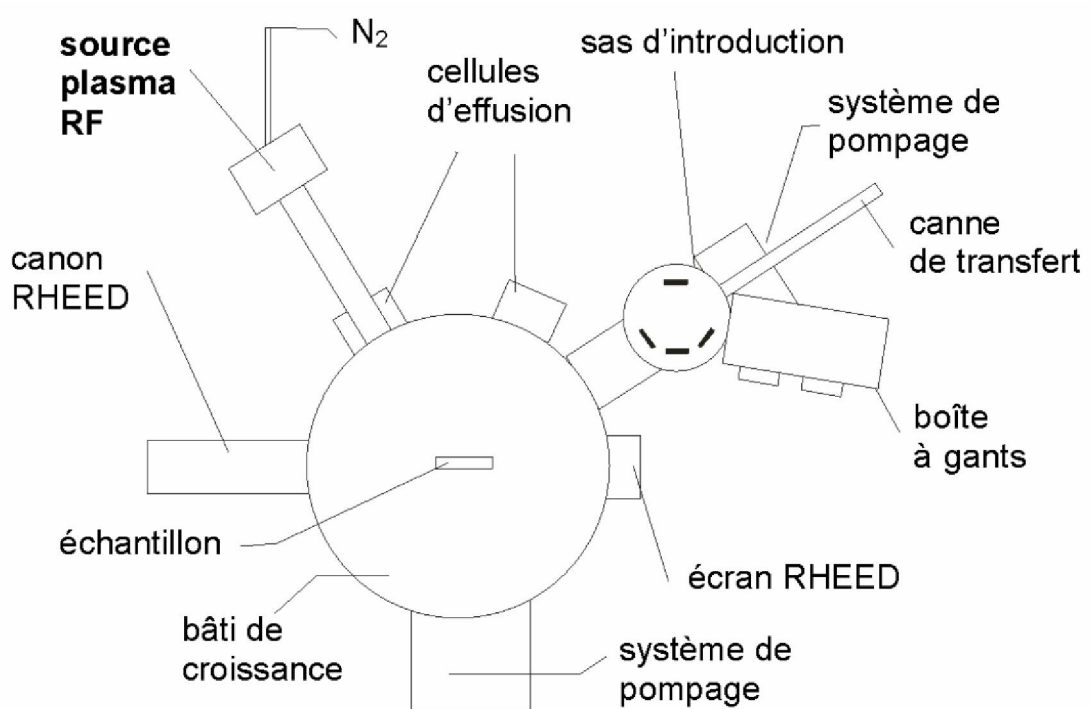
L'évaporation reste parfois une méthode particulièrement appréciée car on élabore ainsi des matériaux purs et d'autant plus purs que la pression est faible, ce qui est le cas pour le procédé d'épitaxie par jets moléculaires. Cependant elle ne convient pas à la fabrication de films hors équilibre thermodynamique [24].

Différentes couches minces de ZnO intrinsèque ou dopé ont été préparées avec succès par évaporation sous vide.

### II.3.2.3 L'Épitaxie par Jets Moléculaires

L'EJM est une technique qui permet de réaliser des dépôts monocristallins. Cette technique a été développée pour la croissance des semiconducteurs (Si, GaAs, CdTe, ZnSe,...) car elle permet de réaliser des homo-épitaxies (matériau A sur support A) à basse température (400-600°C pour Si) contrairement à la CVD (1000°C). On élimine ainsi les problèmes de diffusion des dopants par exemple. En outre, les basses températures d'épitaxie

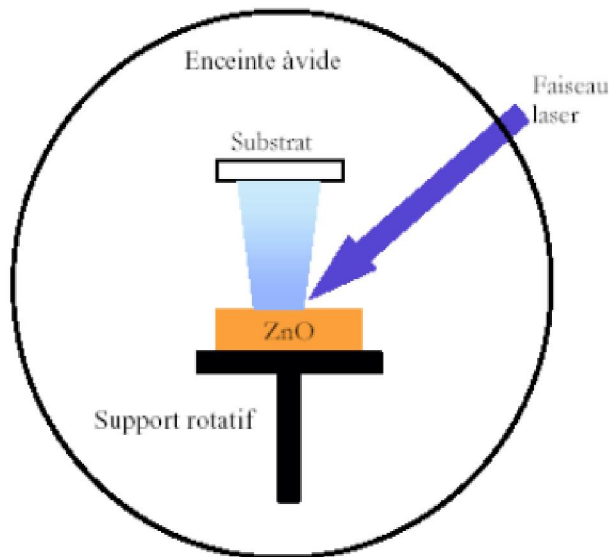
impliquent de travailler avec des vitesses lentes (qq. Å/s) afin de laisser le temps aux atomes arrivant à la surface de migrer par diffusion de surface vers des sites cristallographiques. Pour obtenir des films purs, compte tenu de ces vitesses lentes, il est donc nécessaire de travailler avec des vides très poussés, appelé UHV (Ultra- High-Vacuum). Le principe des dépôts est très simple : il suffit d'évaporer le matériau que l'on veut déposer en le chauffant par effet joule, par rayonnement ou par bombardement électronique (canon à électrons). En outre, sous UHV, le libre parcours moyen parcouru par un atome est très grand, ce qui implique que les flux d'atomes évaporés sont directionnels, les atomes se déplaçant en ligne droite sans aucun choc avant de se déposer sur le substrat. C'est pour cette raison qu'on parle de jets moléculaires ou atomiques. Cette technique permet aussi de réaliser des hétéroépitaxies (dépôt de B sur un support A différent), compte tenu des faibles températures d'épitaxie qui éliminent le mécanisme d'interdiffusion de A et B (contrairement à la CVD). De plus, on dispose d'un grand nombre de moyens de caractérisation in situ qui permettent de contrôler avec une grande précision la qualité chimique (Auger, XPS), et structurale (LEED, RHEED) des dépôts. Cette technique, comme la pulvérisation cathodique, est couramment utilisée pour la synthèse de couches minces magnétiques, schématisée en figure II.14 [12].



**Figure II.14 :** Machine d'Épitaxie par jets moléculaires [25].

### II.3.2.4 Ablation laser

Les dépôts de films minces par cette technique sont réalisés en irradiant par un faisceau laser la surface d'un matériau pour en extraire des atomes qui, évaporés, viennent se condenser sur le substrat (figure II.15) [24].



**Figure II.15 :** Schéma de principe de l'ablation laser [24].

Cette technique est proche de l'Épithaxie par Jets Moléculaires (MBE) puisqu'elle ne diffère de cette dernière que par le moyen d'évaporer le matériau à déposer. La différence avec la MBE est qu'on évapore alors des amas d'atomes. La longueur d'onde du laser dépend du matériau déposé. Elle permet d'obtenir des alliages complexes, dont l'oxyde de zinc, où l'avantage de pouvoir utiliser des pressions d'oxygène élevées et de réaliser des films cristallins de haute qualité avec une vitesse de croissance élevée même à basse température [12, 24].

Les couches de ZnO réalisées par cette technique ont des propriétés structurales, optiques et électriques meilleurs, ceci est dû à la diminution des défauts et à l'augmentation de la taille des grains [24].

La surface de substrat recouverte par le matériau à déposer par cette technique avec une bonne homogénéité est très petite, le manque de fiabilité des lasers et leurs coûts élevés sont les principales limitations de l'ablation laser [24].

### II.3.2.5 Dépôt chimique en phase vapeur (CVD)

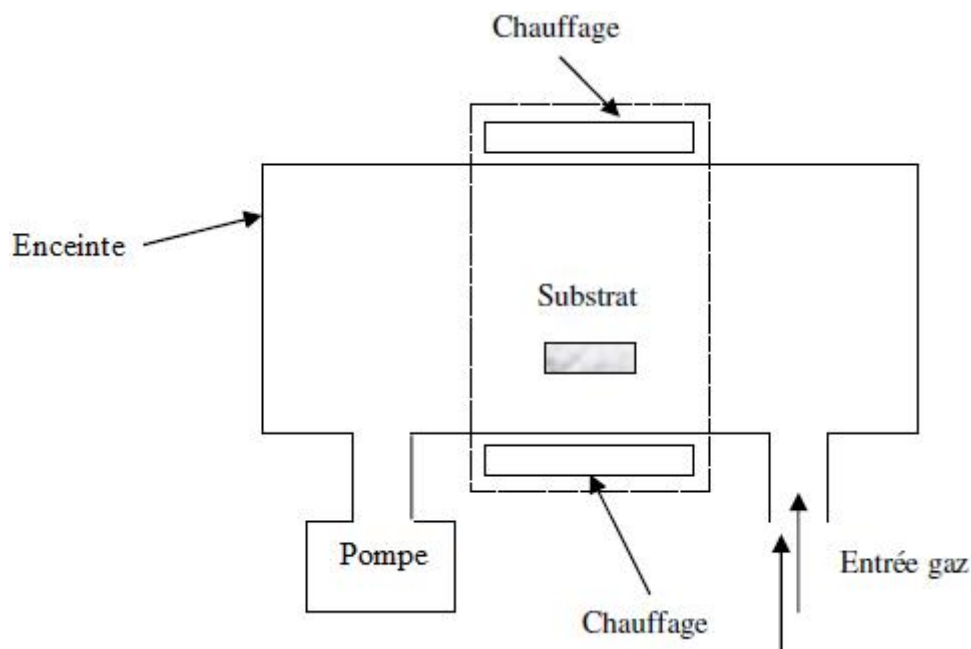
La déposition par les techniques de dépôt chimique en phase vapeur est réalisée grâce à une réaction chimique initiée par des précurseurs gazeux. La réaction est activée par la température du substrat qui fournit l'énergie d'activation nécessaire pour déclencher la réaction chimique (figure II.16) [24]. Les principaux paramètres à contrôler lors des dépôts CVD sont : la nature et la température du substrat, la composition chimique des produits de départ, le ou les flux de gaz, la pression totale et la géométrie de la chambre de réaction.

Parmi les méthodes de synthèse on distingue:

- Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD).
- Le CVD à pression atmosphérique (AP-CVD).
- Le CVD à basse pression (LP-CVD).

Ces procédés permettent d'obtenir des films cristallisés sans avoir recours à un recuit avec des épaisseurs très variables aussi bien sur substrats isolants que conducteurs possédant en plus une excellente adhérence [24].

Les principales faiblesses associées à ces techniques sont la déformation du substrat due au gradient thermique et la diffusion d'impuretés provenant du substrat chauffé [24].



**Figure II.16 :** Schéma de principe de dépôt chimique en phase vapeur (Four à paroi chaud) [12].

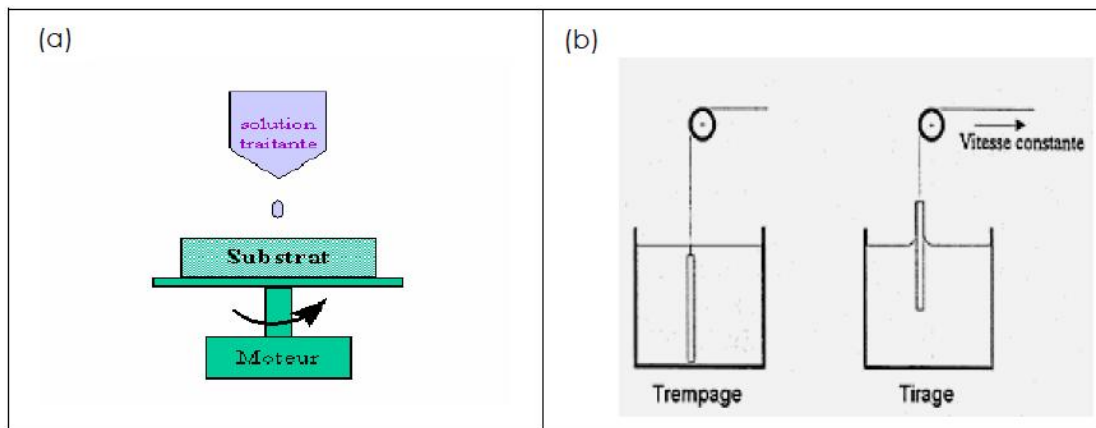
### II.3.2.6 Dépôts physiques en phase vapeur (PVD)

Les procédés de dépôts physiques en phase vapeur regroupent différentes techniques (l'évaporation, l'ablation laser et la pulvérisation sous toutes ses formes). Toutes ces techniques reposent sur le même principe dont le processus comporte trois étapes fondamentales [24]:

- La vaporisation des espèces à déposer,
- Le transport de ces espèces en phases vapeur de la source vers le substrat,
- La condensation de ces mêmes espèces à la surface du substrat et la croissance du film.

### II.3.2.7 Méthode de sol gel

Le procédé sol-gel est une technique assez récente de synthèse de matériaux céramiques à l'état solide sous forme de couche minces par exemple [24]. Il consiste en l'hydrolyse et la condensation de précurseurs chimiques. L'idée de base du procédé sol-gel est simple : un mélange de précurseurs liquides se transforme en un solide par une réaction chimique de type polymérisation à basse température. Deux familles de précurseurs sont fréquemment utilisées: les sels métalliques en solution aqueuse (nitrates, chlorures,...) et les métal-organiques (alcoxydes, acétates,...). Le procédé sol-gel est lorsqu'un substrat est recouvert par une solution, l'évaporation du solvant provoque le rapprochement des espèces chimiques qui, ensuite, peuvent réagir entre elles pour former un film (xérogel). Les techniques les plus utilisées pour le sol-gel sont Le "spin-coating" et le "dip-coating" (figure II.17). Pour le dip-coating, le revêtement de la couche sur le substrat s'effectue par tirage lent (quelques cm/min) et vertical d'un substrat immergé préalablement dans le sol de façon à y déposer une couche mince liquide qui conduira, après évaporation du solvant, drainage du liquide en excès et polymérisation du dépôt, à un film xérogel (gel contenant encore du solvant).



**Figure II.17** : Schéma de principe de sol-gel, (a) spin-coating (b) dip-coating [24].

Le spin-coating consiste à étaler le sol par centrifugation sur un substrat tournant à une vitesse élevée (plusieurs milliers de tours par minute). Ce procédé commence tout d'abord par dépôt d'un excès de sol sur le le substrat immobile, puis ce dernier est mis en rotation, de cet effet le liquide est étalé et l'excès de liquide déposé est évacué. L'évaporation continue du solvant et la polymérisation du dépôt conduit à une couche xérogel tout comme pour le dip-coating [24].

La technique du sol-gel est un processus à basse température qui peut être utilisé pour déposer des films de ZnO intrinsèque ou dopé en utilisant des solvants tels que methoxyethanol ou éthanol / propanol [24].

Cette technique présente l'avantage d'être assez simple à mettre en oeuvre car elle ne nécessite pas d'équipement lourd comme il est facile d'ajuster les quantités des différents constituants du film (Zn, O, Al,...) par le biais du dosage des précurseurs. En contrepartie la stoechiométrie finale de la couche est assez délicate à obtenir. Le principal inconvénient de cette technique est l'épaisseur faible de dépôt qui est de l'ordre (50 nm) après une passe du procédé. Ainsi, une itération des étapes d'étalement et d'évaporation du solvant doit être effectué afin d'obtenir une épaisseur de plusieurs centaines de nanomètres, ce qui multiplie les risques de craquelure car les premières couches déposées subissent tous les recuits successifs d'évaporation ce qui rend difficile le contrôle l'orientation cristallographique [23].

#### II.4 Alliage ternaire des composées binaires II-VI

Il y a actuellement beaucoup d'intérêt à étudier les alliages ternaires II-VI comme matériaux pour des applications en optoélectronique. Ces alliages ont des propriétés

semiconductrices, qui sont particulièrement adaptées pour la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique dans le photovoltaïque [26].

Dans la science des matériaux, les alliages semiconducteurs ternaires sont fréquemment utilisés pour leurs structures de bandes et spécialement la variation de leurs gaps énergétiques en fonction de composition. Récemment, les alliages ternaires II-VI de la forme  $A_xB_{1-x}C$  ont eu un intérêt important en technologie à cause de leurs multiples applications.

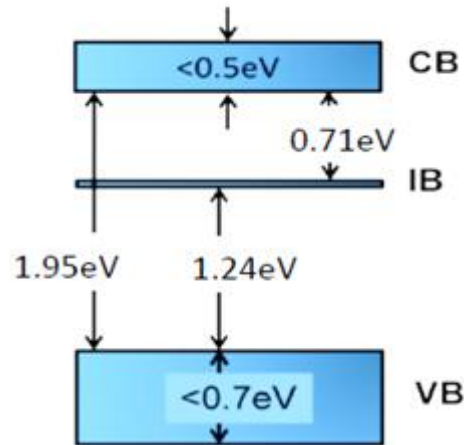
Les alliages semiconducteurs fournissent des moyens naturels d'accorder l'importance de gap d'énergie afin d'optimiser et d'élargir les applications des dispositifs à semiconducteurs.

Le gap d'énergie est connu pour être l'un des paramètres de dispositif les plus importants parce qu'il est fortement relié à la longueur d'onde de fonctionnement des dispositifs optoélectroniques. Pour cela la dépendance du gap d'énergie fondamental en fonction de la composition de l'alliage prend une importance particulière [27].

#### **II.4.1 Cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) à base de semiconducteur II-VI ternaire : ZnTe(O)**

Une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) est un nouveau dispositif photovoltaïque qui pourrait dépasser la limite de l'efficacité des cellules solaires à jonction unique. Dans les cellules à bande intermédiaire, le matériau absorbeur est un semiconducteur à grand gap associé à un matériau présentant un niveau énergétique intermédiaire. Cette structure originale permet d'absorber la lumière à différentes longueurs d'onde, les photons les plus énergétiques sont absorbés entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC), et des photons de plus basse énergie peuvent être absorbés entre la bande de valence et la bande intermédiaire (IB), mais aussi entre la bande intermédiaire et la bande de conduction (figure II-18). L'optimisation de l'absorption des photons du spectre solaire devrait permettre d'accroître le rendement de conversion.





**Figure II.18** : Limite des bandes permises dans une cellule solaire à bande intermédiaire [15].

Pour que cette cellule fonctionne, il faut que la bande intermédiaire soit partiellement remplie. Si la bande est pleine, l'absorption entre la bande de valence et la bande intermédiaire est impossible car celle-ci ne peut plus accepter d'électrons. Si la bande intermédiaire est vide, aucune absorption n'est possible entre elle et la bande de conduction [28].

Le concept de l'introduction de bande intermédiaire pour augmenter le maximum le photocourant a été introduit par Wolf en 1960 [15]. En raison d'une impureté ou un défaut dans la bande interdite, provoqué par des joints de grains, dislocations, ou d'autres imperfections du réseau, qui pourrait agir comme des centres de recombinaison non-radiative pour les porteurs de charges, si elle est à la fois capable de piéger l'électron et le trou. En 1970, Gutter et Queisser [15] ont observé une amélioration du courant de court-circuit dans une cellule solaire de silicium avec impureté. Ils ont découvert que le niveau de Fermi divisé en trois quasi-niveaux de Fermi distincts peut maintenir la haute tension de sortie d'une cellule solaire. Plus tard, la prévision sur la cellule solaire à bande intermédiaire a suggéré que, globalement, leur puissance de rendement de conversion théorique pourrait être jusqu'à 63%, ce qui dépasse largement la limite de Shockley-Queisser. La limite du rendement de conversion est basée sur l'hypothèse que tous les transports des porteurs de charge pour les électrons sans recombinaison non-radiatif des charges, et des bandes de transition d'absorption ne se chevauchent pas avec les autres. La formation de la bande intermédiaire est due à la désadaptation fortement dans les alliages. Des calculs Ab initio ont également été effectués pour identifier les matériaux à bande intermédiaire. La première cellule solaire à bande intermédiaire a été faite par Phillips et al. utilisant de ZnTe dopé avec l'oxygène en 2009 [29].

Une cellule solaire à bande intermédiaire optimale est obtenue dans la condition que l'énergie du photon absorbé couvre la majeure partie du spectre solaire. Dans ces conditions, les bandes interdites entre la bande de valence (BV) et la bande intermédiaire (IB), et entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC) doivent être supérieures à la largeur de la bande de conduction. En outre, la bande interdite entre la bande intermédiaire (IB) et la bande de conduction (BC) doit être supérieure à la largeur de la bande de valence (BV). La bande interdite optimale d'une cellule solaire à bande intermédiaire est représentée sur la figure II.18. La cellule solaire à bande intermédiaire (IB) optimale a une bande interdite totale d'environ 1,95 eV. Les deux sous-bandes interdites sont à environ 0,71 eV et 1,24 eV. La largeur de la bande de conduction (BC) est inférieure à 0,5 eV, et la largeur de la bande de valence est inférieure à 0,71 eV. Par conséquent, tous les photons avec une énergie supérieure à 0,71 eV (longueur d'onde inférieure à 1771 nm) seront absorbés. Cependant, cette structure de bande idéale est très difficile à obtenir dans le dispositif réel [29].

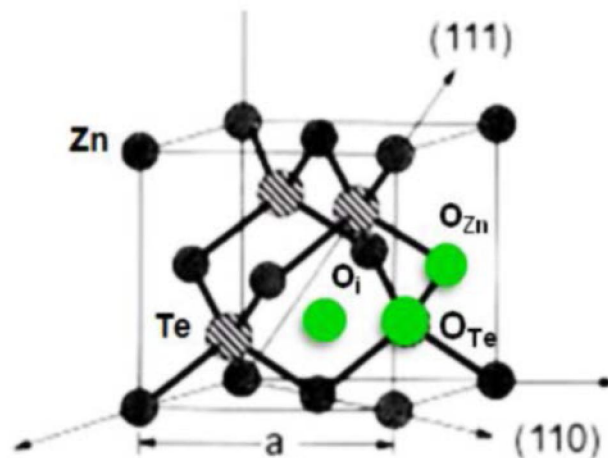
Ce paragraphe se concentre sur un matériau de bande intermédiaire, film mince de ZnTe dopé par l'oxygène. Les matériaux à base de ZnTe ont été étudiés pour diverses applications, tel que des émetteurs de lumière visibles, des détecteurs de rayons X, etc....

La largeur de bande gap de ZnTe est 2.29eV. La plupart des matériaux à large bande interdite, tel que ZnO, sont des semiconducteurs de type N généralement. En revanche, ZnTe a établi un comportement de type P avec le dopage par l'azote. Les caractéristiques de base de ZnTe sont illustrées dans le tableau II.4. En raison de la différence relativement importante de l'électronégativité entre les atomes Te et O, la position de ces atomes à l'intérieur de l'alliage de ZnTe induit par l'oxygène (ZnTeO) est fortement mal adaptée. La présence d'une bande intermédiaire dans ZnTe(O) a été suggérée à la fois théoriquement et expérimentalement. La bande interdite rapportée de ZnTe(O) est de  $\approx 1.9$  eV, avec une bande de défaut de  $\approx 0.5$  eV, qui est très inférieure à la largeur de bande gap d'alliage ZnTe (2.29eV). Par conséquent, Alliages ZnTe(O) avec bandes interdite variables pourraient absorber des photons de différentes longueurs d'ondes de spectre solaire, en particulier dans le domaine du visible. Cette caractéristique rend ce type de matériau très attrayant pour le domaine de recherche des cellules solaires et offre un grand potentiel pour améliorer le rendement de conversion [29].

Le gap à température ambiante	2.29 eV
La structure cristalline	Zinc blende
La densité de Zinc Blend à 300K	5.65 g/cm <sup>3</sup>
La constante du réseau $a_0$ à 300K	0.610 nm
Distance de plus proche atome voisin de Zinc blend. à 300K	0.264 nm
Type du dopage	P-type
Substitution OTe	0.5 eV au dessous $E_c$

**Tableau II.4 :** Caractéristiques de base de monocristal ZnTe [15].

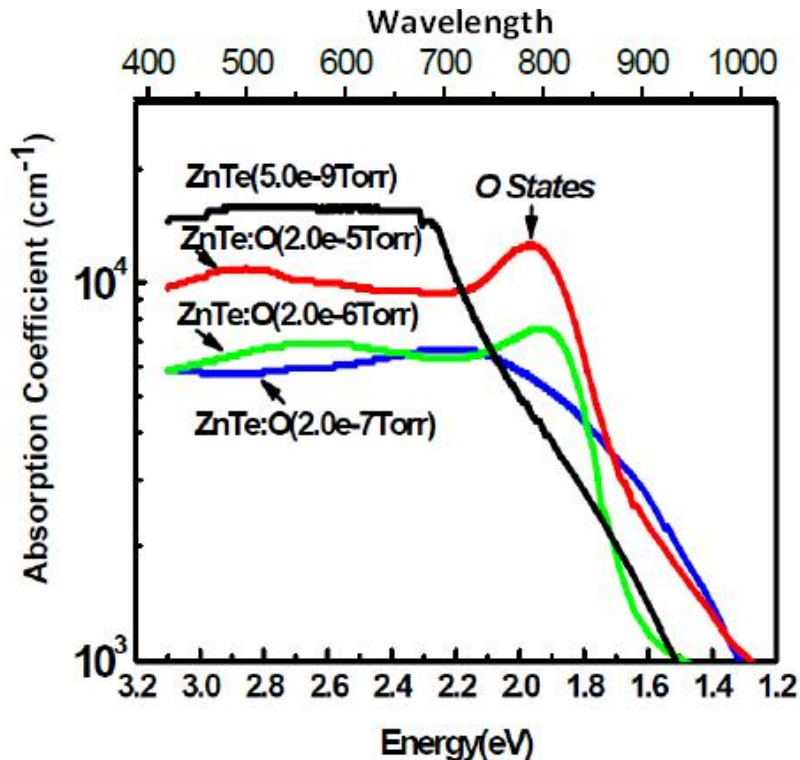
Les films de ZnTe(O) étudiés sont fabriqués par des méthodes d'épitaxie par jets moléculaires (MBE) et dépôt laser pulsé (PLD) [15]. La stoechiométrie de ZnTe(O) déposé sous 30 mTorr d'oxygène a été déterminée comme étant de Zn:Te:O = 0,49: 0,26: 0,25, et que au dessous de 100 mTorr d'oxygène est Zn:Te:O = 0,45: 0,24: 0,31. Le manque de zinc est trouvé dans les échantillons déposés sous la pression d'oxygène plus élevé avec des densités d'oxygène supérieure à  $10^{22}$  cm<sup>-3</sup>. Les emplacements possibles de l'oxygène dans le cristal étudié de ZnTe(O) sont montrés sur la figure II.19 [29].



**Figure II.19 :** Schéma de sites d'oxygène possibles en cristal ZnTe [15, 29].

### II.4.1.1 Propriétés optiques de ZnTe(O)

Les spectres de coefficient d'absorption de ZnTe et ZnTe(O) sont représentés par la figure II.20. Le ZnTe(O) sous la pression de l'oxygène de  $10^{-5}$  Torr a un coefficient d'absorption d'états d'oxygène plus élevé que  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  [15].



**Figure II.20 :** Les coefficients d'absorption de ZnTe et ZnTe(O) avec différent pression d'oxygène [15].

Les spectres de photoluminescence de ZnTe et ZnTe(O) sont présentés dans la figure II.21, et la figure II.22 représente la photoluminescence à l'échelle logarithmique en fonction de l'énergie en eV. La longueur d'onde d'excitation est de 325 nm. Le spectre PL par un matériau ZnTe non dopé indique une bande d'émission avec un maximum à 546 nm ( $\approx 2.3$  eV), tandis que la bande d'émission de ZnTe(O) décale considérablement au rouge avec un maximum à 686 nm (1.8 eV), ce qui correspond bien à la bande PL trouvée dans les défauts d'oxygène en ZnTe. En comparant avec le maximum d'émission avec ZnTe, le décalage important vers le rouge ( $\approx 140$  nm) de la ZnTe(O) est principalement due à des défauts à l'intérieur du cristal. Il peut également être provoqué par le résidu d'oxygène incorporé dans l'alliage pendant le processus de dopage. En outre, l'intensité de l'émission à 686 nm de ZnTe(O) a significativement augmentée, ce qui suggère l'existence de la bande de défauts avec une bande interdite  $E_g \approx 1.8$  eV.

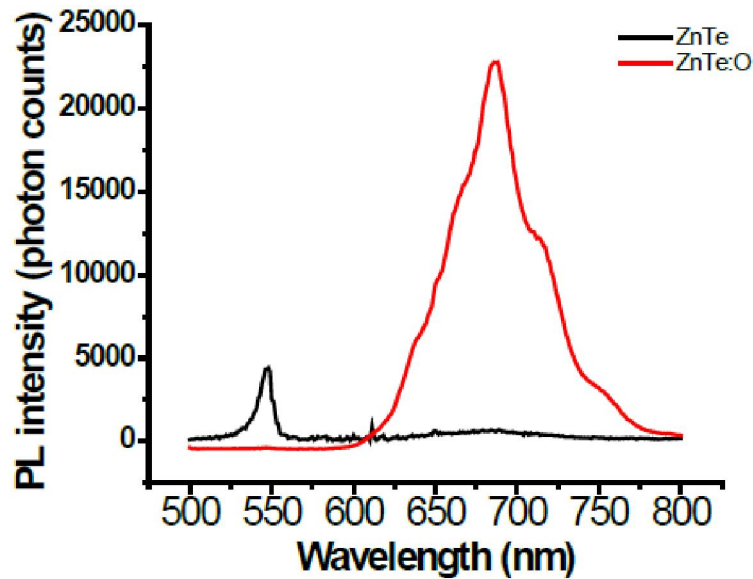


Figure II.21 : Spectres de photoluminescence de ZnTe et ZnTe(O) [29].

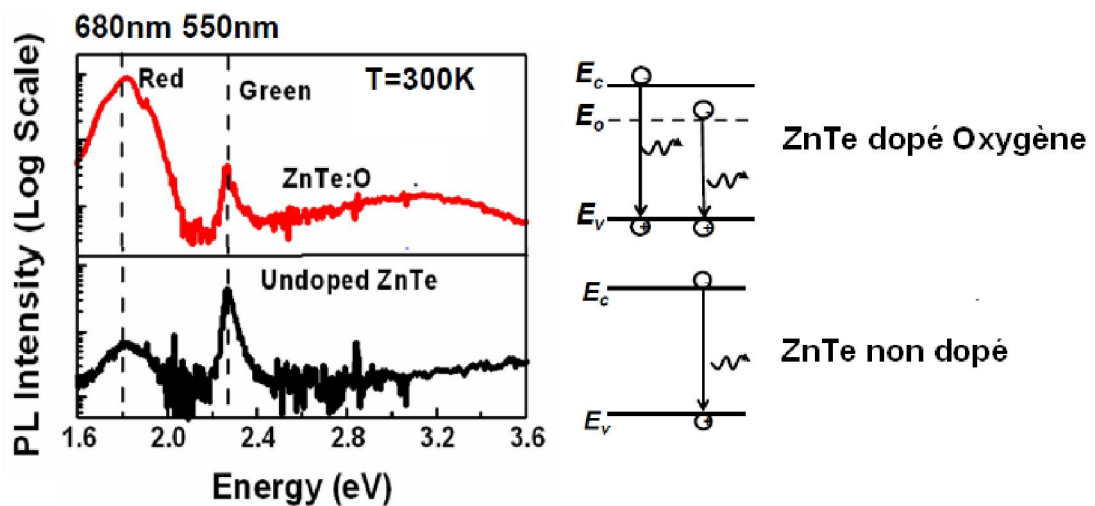
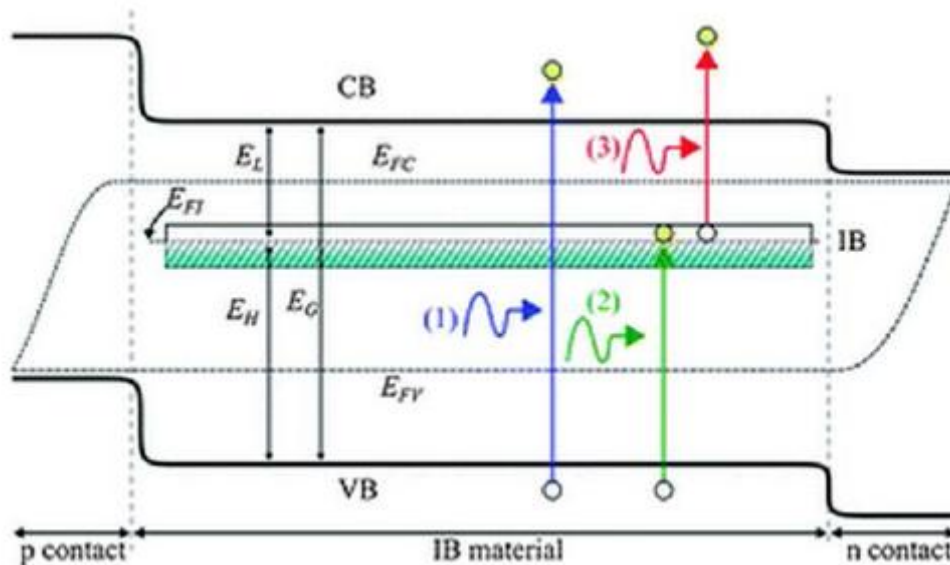


Figure II.22 : Spectres de photoluminescence de ZnTe(O) et de ZnTe (échelle logarithmique) [29].

Une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) est un nouveau dispositif photovoltaïque qui pourrait dépasser la limite du rendement de conversion des cellules solaires monogaps. Dans une cellule solaire à bande intermédiaire, les électrons sont excités dans la bande intermédiaire, comme illustré sur la figure II.23. Les cellules solaires à bande intermédiaires fournissent une augmentation de l'absorption en raison d'absorptions supplémentaires à la fois à partir de la bande de valence (BV) à la bande intermédiaire (IB) et de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (BC). Par conséquent, dans ce type

des cellules, le courant de court-circuit ( $I_{CC}$ ) peut être augmenté, ce qui conduit à une amélioration du rendement de conversion. La limite de Shockley-Queisser des cellules solaires classiques ne permettait pas d'espérer un rendement supérieur à 41%. Mais pour des cellules solaires de troisième génération à bande intermédiaire le rendement de conversion est plus que 63%, rapporté en 1997 [29]. En outre, ils peuvent être facilement fabriqués sur un substrat non cristallin et offrent un moindre coût par unité de puissance.



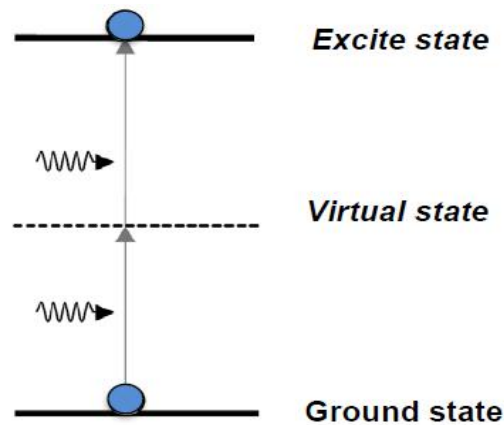
**Figure II.23 :** Schéma de transitions optiques dans les cellules solaires à bande intermédiaire (BC: bande de conduction; IB: bande intermédiaire; BV: bande de valence) [29].

Le concept d'une cellule solaire à bande intermédiaire IBSC dépasse la limite d'efficacité de Shockley-Queisser (SQ) par la récupération des pertes dues à l'existence de la bande intermédiaire tout en maintenant la tension de fonctionnement de SQ. La cellule solaire à bande intermédiaire IBSC utilise la lumière qui a une énergie inférieure à l'énergie de la bande interdite pour générer des porteurs via deux transitions radiatives à travers une bande intermédiaire dans la bande interdite ( $E_G$ ). En supposant que les transitions sont radiatives et aucun contact électrique n'est appliqué, la limite maximale de la tension de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ) reste  $E_G/q$ . Il a été suggéré que l'oxygène induit une bande intermédiaire (IB) dans ZnTe(O) peut être utile pour former une bande absorbante [30]. L'absorption de deux photons est un procédé optique non linéaire, dans lequel deux photons sont absorbés simultanément.

L'énergie de l'atome ou de la molécule excitée est égale à la somme de l'énergie des deux photons.

$$h\nu_1 + h\nu_2 = E \quad (\text{II. 1})$$

où  $h$  est la constante de Planck,  $\nu_1$  et  $\nu_2$  sont les fréquences du photon absorbé et  $E$  est la différence d'énergie entre le niveau d'énergie supérieur et inférieur. Dans le processus de deux photons, la molécule absorbe les photons simultanément, par la médiation de ce qu'on appelle «état virtuel», selon la mécanique quantique. Un schéma représentatif de processus d'absorption de deux photons est présenté par la figure II.24 [29].

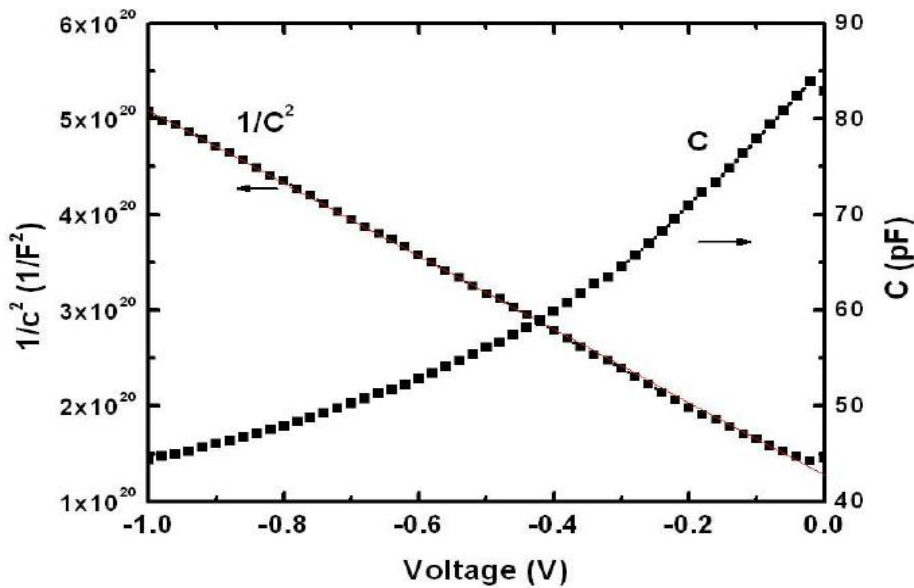


**Figure II.24** : Schéma représentatif d'absorption de deux photons (TPA) simultanément [29].

#### II.4.1.2 Propriétés électriques de ZnTe(O)

Les films de ZnTe déposés par MBE sans dopage intentionnel étaient déterminés à être de type P avec une concentration de trou dans la gamme de  $10^{14}$ - $10^{15}$   $\text{cm}^{-3}$ . Les Mesures capacité-tension (C-V) sur structures  $n^+$ -ZnO/p-ZnTe ont été utilisées pour déterminer ces valeurs en raison de la difficulté de réaliser des contacts ohmiques pour les échantillons avec faible concentration de porteurs. La concentration en électrons de la couche de ZnO est d'environ  $5 \times 10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$ , en fournissant un profil de dopage asymétrique. L'équation (II.2) est utilisée pour déterminer la concentration de porteurs dans ZnTe, où  $q$  est la charge d'un électron,  $\epsilon = 7.4 \epsilon_0$  est la constante diélectrique statique de ZnTe, et  $A$  est la section du dispositif. Des données représentatives pour une jonction avec  $A = 0.01 \text{cm}^2$  sont montrées sur la figure II.25, où une concentration d'accepteur de  $p = 5 \times 10^{14}$   $\text{cm}^{-3}$  est déterminée. Sur la base de la concentration de dopage de fond de type P, le niveau Fermi est d'environ 0,3 eV au-dessus du bord de la bande de valence à la température ambiante sous équilibre thermodynamique [15].

$$N_A = \frac{2}{q\epsilon A^2 d(1/C^2)/dV} \quad (\text{II. 2})$$



**Figure II.25:** Courbes de C-V et  $1/C^2$ -V de la jonction  $n^+$ -ZnO/p-ZnTe [15].

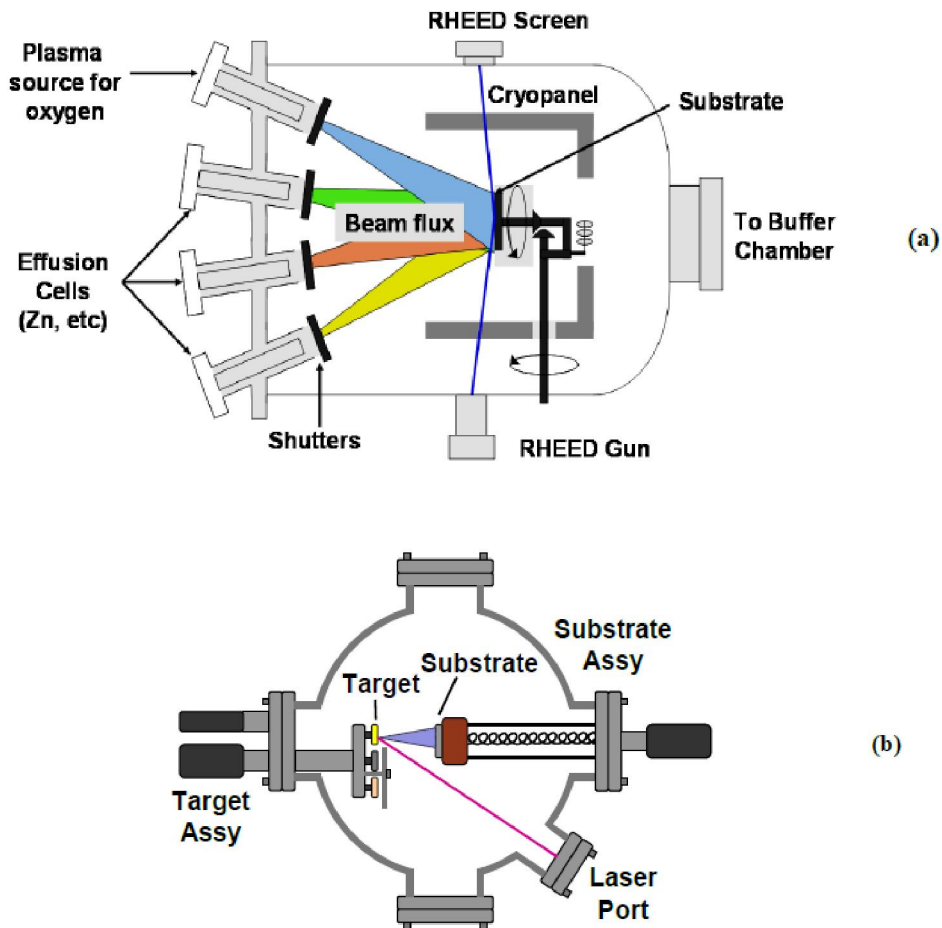
#### II.4.2 Techniques de l'incorporation de l'oxygène dans ZnTe

L'épithaxie par jet moléculaire (MBE) et dépôt par laser pulsé (PLD) ont été utilisés pour le dépôt de ZnTe sous une pression variable de l'oxygène. La combinaison de ces techniques fournit un moyen pour explorer une grande gamme de concentration d'oxygène, où la technique MBE est limitée à une faible pression partielle d'oxygène et la technique PLD ne peut pas fournir l'incorporation contrôlée d'oxygène à basse pression partielle. Les Schémas du processus de PLD et MBE sont présentés dans la figure II.26 (a) et (b), respectivement [15].

Dans la technique de PLD [15], la matière subit une ablation sous un vide poussé à partir d'une cible par un faisceau laser pulsé. Les paramètres de dépôt critiques comprennent la température du substrat, la puissance du faisceau laser, la fréquence de répétition du faisceau laser, et le dépôt à la température l'ambiante. Le matériau d'ablation atteint une énergie cinétique élevée, permettant le dépôt sous une pression partielle d'oxygène relativement élevé. Dans ce travail, les échantillons ont été déposés sur les deux c-plan saphir et substrats GaAs (001) en utilisant une cible de ZnTe, laser excimer KrF ( $\lambda = 248\text{nm}$ , 20ns largeur d'impulsion, 6Hz taux de répétition), température de dépôt de  $300^\circ\text{C}$ , et de vide poussé ( $<5 \times 10^{-6}$  Torr), l'incorporation de nitrogène est étudié dans ce travail comme un contrôle expérimental, permettant une comparaison distincte des différentes espèces chimiques et différente pression partielle de dépôt. Le taux de croissance dans ces conditions



a été modifié, passant d'environ 0.4nm/s à 1.1nm/s, avec une épaisseur de l'échantillon dans l'intervalle de 0.7  $\mu\text{m}$  à 1.9  $\mu\text{m}$  [15].



**Figure II.26 :** Schéma de (a) Faisceau épitaxie par jets moléculaires (b) Dépôt par laser pulsé [15].

La technique de MBE utilise des sources élémentaires distinctes de croissance du matériau sur un substrat chauffé sous ultravide. Contrairement au PLD, la MBE utilise des cellules d'effusion thermiques où la source du flux contient relativement une faible énergie cinétique. En conséquence, la technique de MBE a été utilisée pour étudier la croissance de la couche ZnTe(O) sous faible pression partielle d'oxygène. La croissance par MBE a été réalisée avec une pression de base à proximité de  $10^{-9}$  Torr à une température de substrat de 250 ° C en utilisant du zinc et de la source des cellules d'effusion solides de tellure, et une source de plasma à micro-ondes pour introduire de l'oxygène ou de l'azote. Le débit de l'oxygène ou l'azote allant 1sccm (standard centimètre cube par minute) ont été utilisés, ce qui correspond à une pression partielle jusqu'à  $10^{-5}$  Torr. Les échantillons ZnTe et

ZnTe(O) crûs par MBE ont été effectuées sur substrats GaAs (001), pour fournir un modèle approprié pour le zinc-blend ZnTe avec une faible concentration d'oxygène ou de nitrogène. Le taux de croissance de MBE est dans la gamme de 0,1 ~ 0,4 nm /sec [15].

## II.5 Conclusion

Les composées binaires : CdTe, ZnO et ZnTe, ainsi que l'alliage ternaire ZnTeO sont des matériaux possédant des propriétés très intéressantes pour divers applications optoélectroniques, en particulier pour les cellules solaires photovoltaïques.

A cause de leurs propriétés et caractéristiques intéressantes, les matériaux à base de semiconducteurs II-VI tel que l'alliage ternaire ZnTe(O) sont favorisés à une utilisation dans les cellules solaires à bande intermédiaire comme nous allons le voir dans les chapitres suivants.

Dans ce chapitre nous avons étudié les différentes propriétés des composés binaires (CdTe, ZnO et ZnTe) et ternaire (ZnTe(O)), puis nous avons présenté les différentes techniques de réalisation de ces composés.

---

**Bibliographie**

- [1] C. Tablero, *J. Comput. Mat. Sci.*, 49, 368-371, (2010).
- [2] K. Djebli, *Memoire de magister de l'Université de Mentouri, Constantine, Algérie*, (2011).
- [3] A. Khiati, *Mémoire de Magister de l'Université d'Oran, Algérie*, (2013).
- [4] H. Bellakhder, A. Outzourhit et E.L. Ameziane, *Rev. Energ. Ren. Vol. 2*, 131-139, (1999).
- [5] H. Mathieu and H. Fanet, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6<sup>ème</sup> ed, Dunod, (2009).
- [6] O. Ka, *These de doctorat de l'Université de Paris 6, France*, (1988).
- [7] A. Bahfir, *Mémoire de Magister de l'Université d'Oran, Algérie*, (2010).
- [8] A. M. Ferouani, M. R. Merad. Boudia, K. Rahmoun, *Rev. sci. fond. app.*, vol. 3 N°. 1, 56-65, (2011).
- [9] B. Zouak, *Mémoire de Magister de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie*, (2012).
- [10] L. Schlur, *Thèse de doctorat de l'Université de Strasbourg, France*, (2012).
- [11] S. Ait Adi, *Mémoire de Magister de l'Université d'Oran, Algérie*, (2012).
- [12] S. Abed, *Mémoire de Magister de l'Université Mentouri-Constantine. Algérie*.
- [13] S. Faÿ, *Thèse de doctorat de l'école Polytechnique Fédérale de Lausanne, Suisse*, (2003).
- [14] K. Lagha-Menouer, *These de doctorat de l'Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie*, (2011).
- [15] W. Wang, *These de doctorat de l'Université de Michigan, USA*, (2010).
- [16] C. Ling, L. Q. Zhou, D. Banerjee, H. Jia, *Journal of Alloys and Compounds* 584, 289–294, (2014).
- [17] T. Tanaka, K. M. Yu, P. R. Stone, J. W. Beeman, O. D. Dubon, L. A. Reichertz, V. M. Kao, M. Nishio, and W. Walukiewicz, *Journal of Applied Physics* 108, 024502, (2010).
- [18] J. H. Chang, T. Takai, B. H. Koo, J. S. Song, T. Handa, and T. Yao, *Applied. Physics Letters*, 79, 785, (2001).
- [19] V. I. Kaydanov and T.R. Ohno *Colorado School of Mines Golden, Colorado, NREL/SR-520-41129*, (2007).
- [20] H. Zaari, M. Boujnah, A. El Hachimi, A. Benyoussef, A. El Kenz, *Opt Quant Electron*, s11082-013-9708-y, (2013).
- [21] D. Diouf, *These de doctorat de l'Université Paris Sud 11, France*, (2010).
- [22] A. Gueddim, S. Zerroug, N. Bouarissa, *Journal of Luminescence* 135, 243–247, (2013).

- [23] O. Daranfad, Mémoire de Magister de l'Université Mentouri-Constantine. Algérie.
- [24] S. Rahmane, Thèse de doctorat de l'Université Mohamed Kheider, Biskra, Algérie, (2008).
- [25] D. Selmane, Mémoire de Magister de l'Université Hassiba Benbouali Chlef, Algérie, (2009).
- [26] L. Hannachi, Thèse de doctorat de l'université Université Ferhat Abbas, Setif, Algérie (2010).
- [27] F. Benmakhlouf, These de doctorat de l'Université Mentouri-Constantine. Algérie, (2006).
- [28] N. Rousseau, These de doctorat de l'Université de Nantes, France, (2013).
- [29] J. Zhang, These de doctorat de l'Université de Michigan, USA, (2014).
- [30] C. Chen, These de doctorat de l'Université de Michigan, USA, (2015).

## CHAPITRE III

Concept de bande intermédiaire et  
logiciel de simulation SCAPS

### III.1 Introduction

Les physiciens se proposent de se doter d'outils de modélisation adaptés à la diversité des systèmes envisagés. Il s'agit en premier lieu de créer des outils d'interface permettant aux codes de simulation existant de dialoguer. Ils fourniront une grande modularité dans les modélisations permettant de décrire les éléments de transport d'énergie, de conversion d'énergie, de couplage entre éléments.

Ces outils de modélisation couplés sont extrêmement utiles pour étudier le comportement de dispositifs de conversion d'énergie. Ils le sont tout autant, si ce n'est d'avantage, pour interpréter les résultats expérimentaux. Ainsi, dans le cas des cellules solaires, la simulation de caractéristiques (courant-tension, réponse spectrale, spectroscopie d'impédance, photoluminescence, ...) sont des outils de base pour la progression de la compréhension et l'amélioration des structures.

Parmi ces outils on peut citer le logiciel SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator). En effet, le programme SCAPS permet de résoudre des équations complexes pour des structures composées de couches semiconductrices. Le choix de ces couches est généralement fait à partir d'un profil de dopage arbitraire et d'une distribution énergétique arbitraire des niveaux profonds des donneurs ou des accepteurs sous différents type d'éclairément. Des itérations de résolutions des équations sont faites jusqu'à convergence de l'algorithme. Ce dernier a fait l'objet de plusieurs études qui ont montré sa forte faisabilité pour ce type de structures [1, 2]. Avec SCAPS, il est possible de simuler des structures constituées d'un nombre définis de couches (jusqu'à 7 couches intermédiaires plus les contacts avant et arrière), avec des profils de dopage différents, et avec des distributions énergétiques des niveaux donneurs ou accepteurs. Les résultats simulés et mesurés sont comparés avec un bon accord théorie pratique.

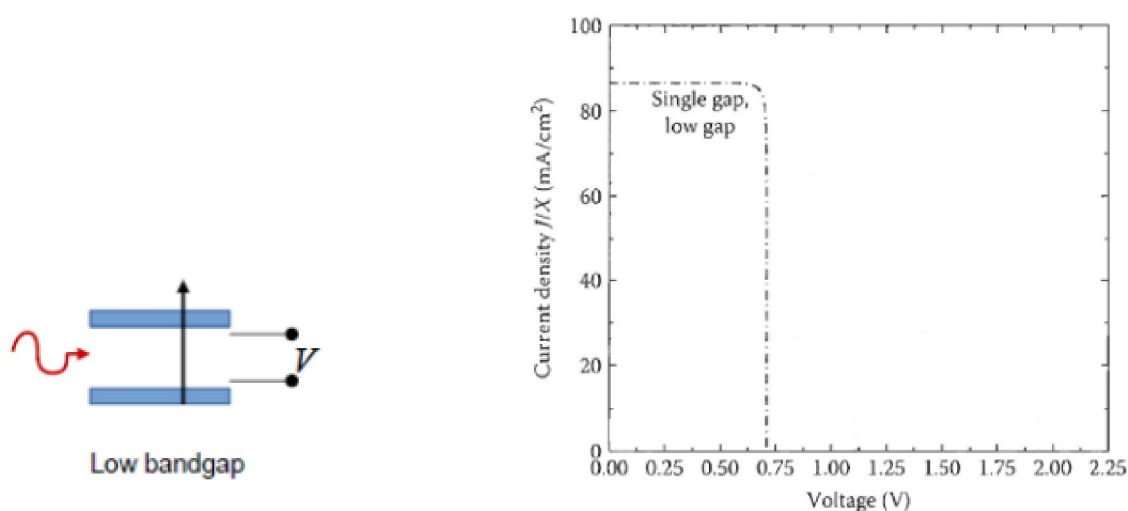
Ce logiciel a été développé par le département d'électronique et informatique des systèmes (ELIS) de l'université de Gent en Belgique. SCAPS-1D 3201 est un simulateur unidimensionnel pour simuler les caractéristiques électriques (DC et AC) des cellules solaires [1].

En principe, n'importe quel programme numérique capable de résoudre les équations de base des semiconducteurs peut être employé pour modéliser les cellules solaires à base de couches minces. Parmi ces programmes de simulation, on cite : SCAPS, PC1D, AFORS-HET, AMPS-1D, .... Le calcul est basé sur l'équation de Poisson, reliant la charge au potentiel électrostatique, et les équations de continuité pour les électrons et les trous.

Cependant, plusieurs options additionnelles doivent être réunies dans le programme surtout pour simuler des cellules solaires à base de couches minces. Le calcul devrait également être capable de prendre en compte la présence de plusieurs couches dans la cellule; le phénomène de recombinaison à l'interface des couches, introduit par les discontinuités dans les bandes d'énergie ( $E_c$  et  $E_v$ ). Il devrait aussi, traiter correctement le problème de recombinaison et les centres de génération-recombinaisons dans les états profonds au sein du volume des couches. Il devrait être aussi capable de calculer et simuler des mesures électro-optiques effectuées généralement sur ce type de cellules, non seulement la caractéristique  $I(V)$ , mais aussi la réponse spectrale et les mesures de capacité  $C(V)$  et  $C(f)$ . Enfin, il devrait fournir la convergence au moins pour les structures les plus communes des cellules à base de couches minces. Toutes ces options sont mises en application dans le programme de simulation SCAPS [2].

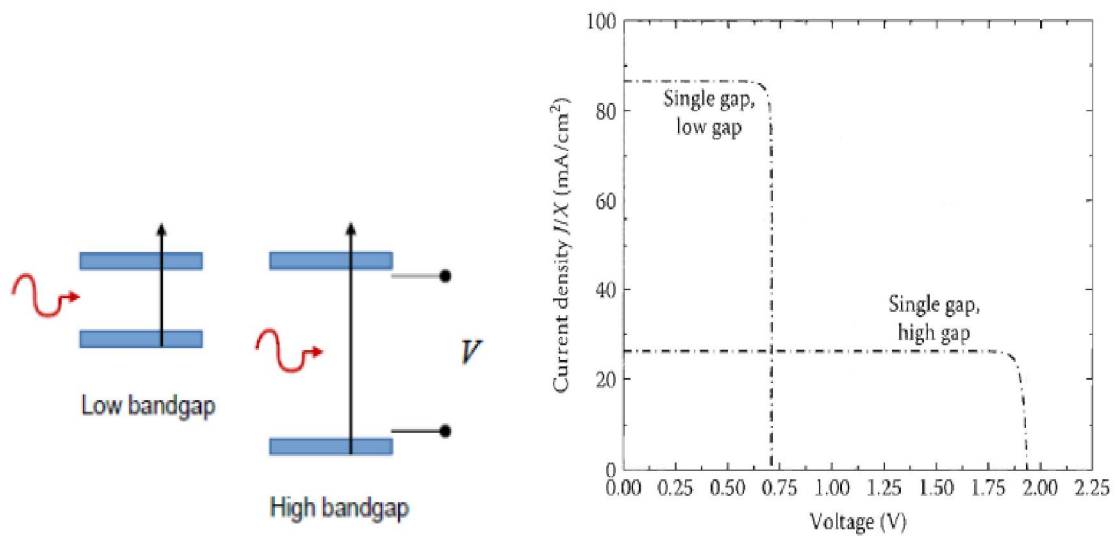
### III.2 Bref aperçu du concept de bande intermédiaire (IB) [3, 4]

Rappelons qu'une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à faible bande interdite,  $E_{G\text{-faible}}$ , présente une densité de photocourant élevée et une faible tension de circuit ouvert comme illustré dans la figure III.1 [3].



**Figure III.1:** Présentation de la caractéristique densité de courant-tension pour une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à faible bande interdite [3].

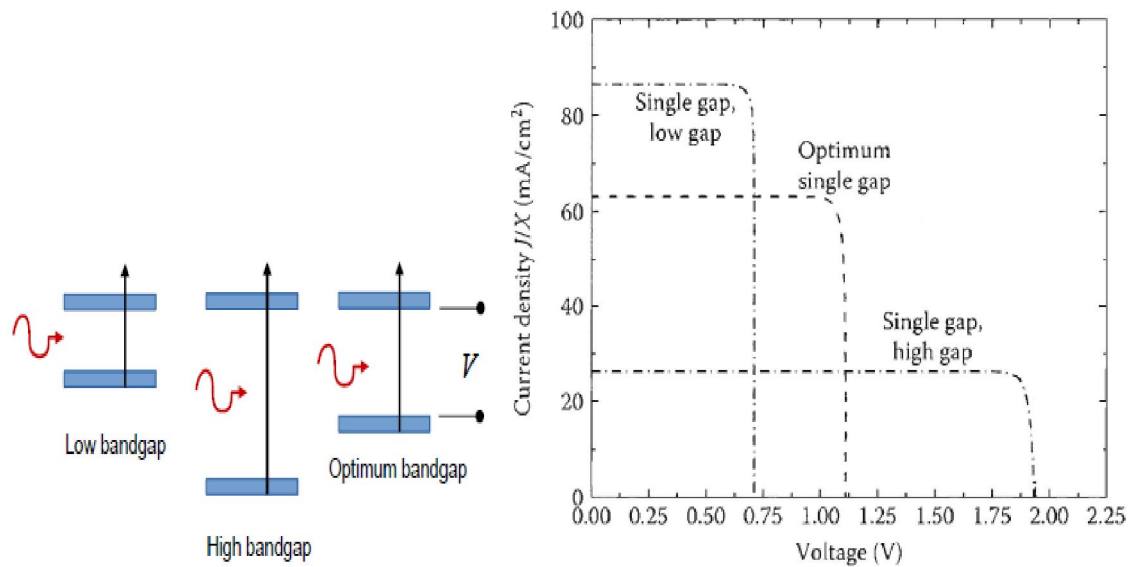
Une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite élevée,  $E_{G\text{-élevée}}$ , présente une densité de photocourant faible et une tension de circuit ouvert élevée comme illustré dans la figure III.2 [3].



**Figure III.2 :** Présentation de la caractéristique densité de courant-tension pour une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite élevée en comparaison avec celle d'un matériau semiconducteur à faible bande interdite [3].

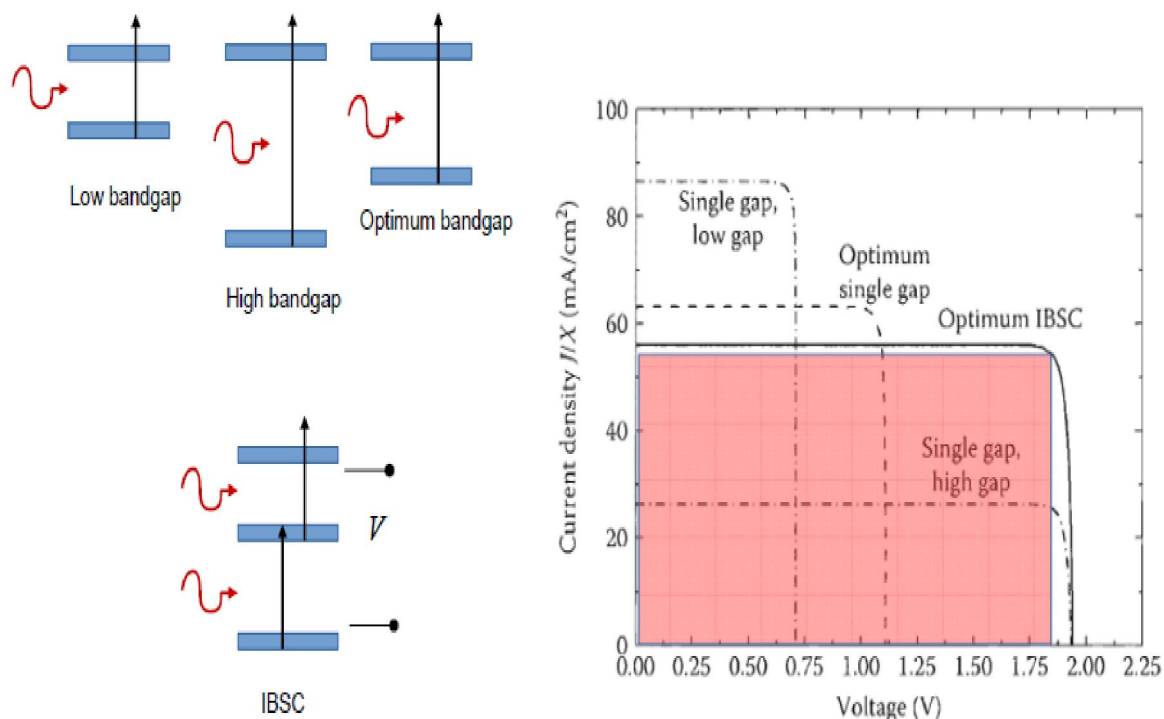
Des meilleurs paramètres, une densité de photocourant optimisée et une tension de circuit ouvert optimisée pourront être obtenues pour une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite optimisée,  $E_{G\text{-optimisé}}$ , cette bande interdite est comprise entre  $E_{G\text{-faible}}$  et  $E_{G\text{-élevée}}$ , ( $E_{G\text{-faible}} < E_{G\text{-optimisé}} < E_{G\text{-élevée}}$ ), comme illustré dans la Figure III.3 [3].





**Figure III.3:** Présentation de la caractéristique densité de courant-tension pour une cellule solaire fabriquée à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite optimisée en comparaison à celles des matériaux semiconducteurs à bandes interdites faible et élevée [3].

L'amélioration des performances des cellules solaires passe aujourd'hui par l'incorporation de nanostructures au sein du matériau semiconducteur. C'est ce qu'on appelle des cellules solaires à bande intermédiaire IBSC. Cette approche permet d'envisager des rendements potentiels de plus de 60% et une densité de photocourant et une tension de circuit ouvert optimisées comme illustré dans la figure III.4 [3].



**Figure III.4:** Présentation de la caractéristique densité de courant-tension pour une cellule solaire à bande intermédiaire IBSC en comparaison avec celles fabriquées à partir d'un matériau semiconducteur à bande interdite optimisée et celles des matériaux semiconducteurs à bandes interdites faible et élevée [3].

### III.3 Description de la cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC)

Le modèle théorique développé par les chercheurs [5-8] pour une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) fonctionnant dans des conditions idéales a prédit que le rendement de conversion maximal est de 63,1% avec les hypothèses suivantes:

- Transitions non radiatives entre deux des trois bandes sont interdits;
- La mobilité des porteurs est infinie;
- Aucun porteur ne peut être extraire de la bande d'impureté;
- La cellule est suffisamment épaisse pour assurer la pleine absorption des photons;
- La perte de l'émission radiative à la face arrière de la cellule est nulle;
- Pour chaque gamme d'énergies seulement l'une des trois longueurs d'absorption est importante;
- L'illumination de la cellule est isotrope ;

Cependant, les conditions de fonctionnement pour les dispositifs réels sont loin d'être les cas idéaux. Par conséquent, un modèle théorique basé sur la physique des dispositifs à semiconducteurs sans tenir compte des hypothèses ci-dessus doit être développé afin de guider la conception de dispositif pour un rendement de conversion maximale.

### III.4 Recombinaison des porteurs et Modèle de Transport

Par définition, la recombinaison est le retour de l'électron de l'état excité à l'état initial ou de la bande de conduction vers la bande de valence, car il ne peut rester dans un état excité que pour un temps faible ( $t < 10^{-8}$  s). Ce retour de l'électron de l'état excité vers l'état stable peut avoir lieu selon plusieurs façons [9]. Lorsqu'un matériau semiconducteur est soumis à une excitation (thermique, lumineuse, etc.), son équilibre est rompu et des porteurs en excès apparaissent. Ces porteurs en excès restent libres jusqu'à ce qu'ils perdent leur énergie, c'est-à-dire qu'ils se recombinent. La durée de vie des porteurs ( $\tau$  en s) dépend de la densité de porteurs en excès ( $\Delta_n$  en  $\text{cm}^{-3}$ ) et du taux de recombinaison ( $U$  en  $\text{s}^{-1} \cdot \text{cm}^{-3}$ ) selon l'équation (III.1) [10].

$$\tau = \frac{\Delta_n}{U} \quad (\text{III. 1})$$

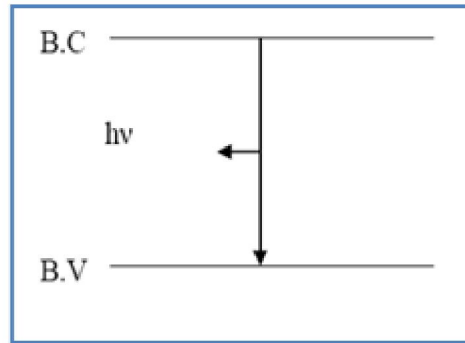
Différents phénomènes de recombinaison existent au sein d'un semiconducteur. Certains, comme les phénomènes Auger et radiatifs, sont intrinsèques au matériau tandis que d'autres dépendent plus de la qualité du matériau.

Dans un semiconducteur à gap direct le mécanisme de recombinaison radiative domine les autres phénomènes. C'est l'inverse de la création d'une paire e-h par un photon : un électron de la bande de conduction retourne dans la bande de valence en cédant de l'énergie sous forme d'un rayonnement optique, en émettant un photon. L'énergie du photon émis étant égale ou proche de celle du gap, il pourra avec une faible probabilité être recyclé et peut créer une nouvelle paire e-h. Pour un semiconducteur à gap direct, les recombinaisons radiatives sont importantes car elles se font sans la participation de phonons. De ce fait, ce mécanisme n'influe pas considérablement sur la durée de vie des porteurs minoritaires. Le taux de recombinaison est proportionnel à la fois au nombre d'électron et au nombre de trous [9, 10]:

$$R = B(pn - n_i^2) \quad (\text{III. 2})$$

Avec :

B est le coefficient de recombinaison radiative.



**Figure III.5 :** Schéma descriptif du processus de recombinaison de type radiatif [9].

En revanche pour un gap indirect, les recombinaisons radiatives sont peu probables. Dans ce cas l'électron doit émettre simultanément un photon et un phonon pour changer d'état.

Selon la relation (III.3), le taux de recombinaisons radiatif.

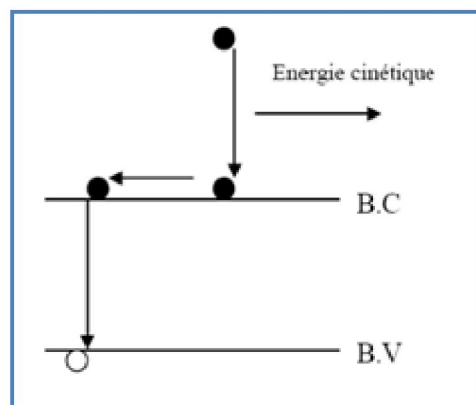
$$U_{rad} = B\Delta_n(N_A + \Delta_n) \quad (\text{III. 3})$$

où B est une constante caractéristique du matériau.

Le processus de recombinaison Auger ( $U_{Auger}$ ) est non radiatif et implique l'interaction de trois particules. L'énergie libérée par la recombinaison d'un électron de la bande de conduction et un trou de la bande de valence est ici transférée à un autre porteur libre (électron ou trou). Ce porteur thermalise, perd ensuite cette énergie en revenant à un état énergétique inférieur proche de la limite de bande. Ce mécanisme de recombinaison (en réalité plus complexe) est dominant à fort taux d'injection et pour de fortes densités de dopants.

Pour de faibles injections, il peut être décrit par la relation (III.4). Il dépend d'un coefficient Auger ( $C_A$  en  $\text{cm}^{-6}.\text{s}^{-1}$ ) qui dépend du type de matériau [10].

$$U_{Auger} = C_A\Delta_n N_A^2 \quad (\text{III. 4})$$

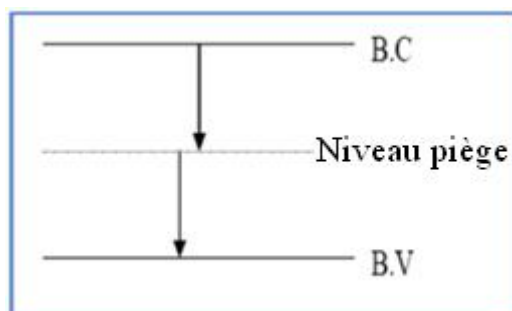


**Figure III.6 :** Schéma descriptif du processus de recombinaison de type Auger [9].

### III.4.1 Recombinaison par piège

Les deux mécanismes précédents ne dépendent que du dopage et pas des défauts et des centres de recombinaison associés. Ils sont souvent masqués par des processus de recombinaison plus efficaces faisant intervenir les niveaux profonds.

Pour le silicium, il y a des niveaux profonds proches du milieu de la bande interdite associés à quelques impuretés courantes. L'électron a tendance à revenir à son état initial dans la bande de valence, en passant par ces niveaux (s'ils existent).



**Figure III.7:** Schéma descriptif du processus de recombinaison par piège [9].

### III.4.2 Recombinaison en volume de type RSH

Le modèle physique décrivant les recombinaisons en volume est basé sur le modèle de Read-Shokley-Hall à un seul niveau piège. Le taux de recombinaison par piège est donné par la relation suivante [9]:

$$R_{RSH} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_n \left( p + n_{ie} e^{-\frac{E_T}{kT}} \right) + \tau_p \left( n + n_{ie} e^{\frac{E_T}{kT}} \right)} \quad (\text{III. 5})$$

où :

$E_T$  Représente l'énergie du niveau piège proche du milieu de la bande interdite,  $\tau_n$  et  $\tau_p$  ont une valeur égale à  $10^3 \mu\text{s}$ .  $n_{ie}$  est la concentration intrinsèque effective donnée par la relation suivante :

$$n_{ie}^2 = pn \exp\left(\frac{\Delta E_{gn} + \Delta E_{gp}}{kT}\right) \quad (\text{III. 6})$$

Elle est due au rétrécissement de la bande interdite pour un semiconducteur fortement dopé, et  $\Delta E_{gn}$ ,  $\Delta E_{gp}$  présentent le rétrécissement de la bande interdite.

### III.4.3 Recombinaison en surface

La surface d'un semiconducteur est un lieu où les recombinaisons sont particulièrement nombreuses, en raison des liaisons non satisfaites des atomes de surface et autres défauts caractéristiques à température constante ( $T=300$  K). Les recombinaisons en surface avant et arrière inhérentes aux densités de dopages selon la relation suivante [9]:

$$S = S_0 \left( \frac{N}{N_{set}} \right)^\alpha \quad (\text{III. 7})$$

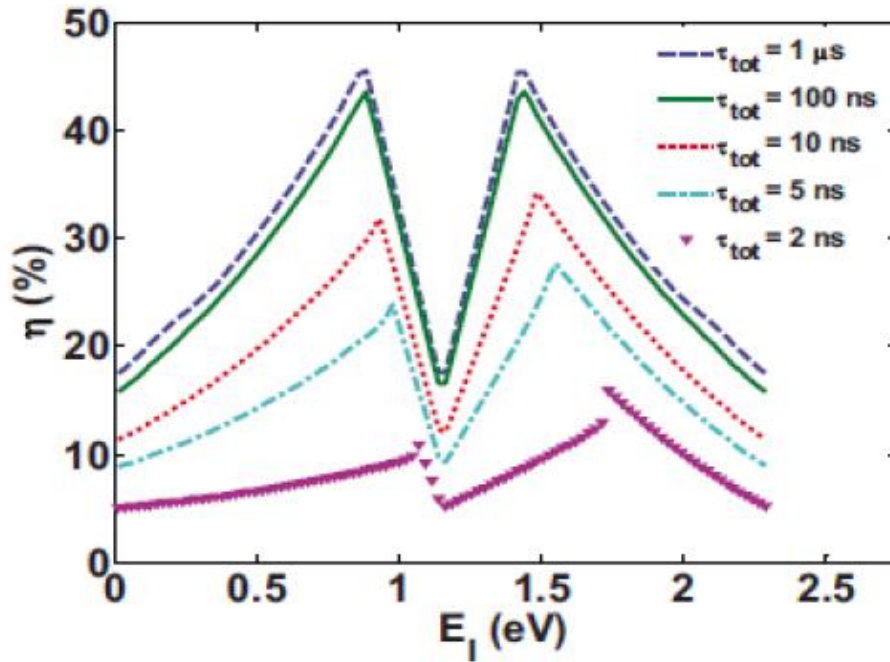
$S_0$ ,  $N_{set}$ , et  $\alpha$  dépendent du traitement de la surface et de la passivation.

La passivation est l'ajout d'une couche de  $\text{SiO}_2$  en surface pour limiter les recombinaisons en surface et combler les liaisons cassées (en surface) lors de la découpe du semiconducteur.

La tension de circuit ouvert maximale d'un dispositif photovoltaïque est en réalité limitée par les mécanismes de recombinaison évoqués ci-dessus.

### III.5 Recombinaison des porteurs et Modèle de Transport pour une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC)

Le phénomène de recombinaison et de transport de porteurs (Carrier Transport and Recombination (CTR)) basé sur la structure de dispositif P-I-N avec les états de bande intermédiaire situés dans la région intrinsèque a été développé par W. Wang et A. S. Lin [5, 6] respectivement pour estimer le rendement de conversion globale selon les paramètres de dispositif tels que le coefficient d'absorption optique, la durée de vie des porteurs minoritaires, le transport de porteur, la densité dans la bande intermédiaire, la position énergétique de la bande intermédiaire. Le modèle conclut que le rendement de conversion se dégrade pour la courte durée de vie des porteurs minoritaires ou une longue durée d'absorption par rapport aux longueurs de diffusion des porteurs minoritaires comme représenté sur la figure III.8 [5].



**Figure III.8:** Rendement en fonction du niveau énergétique de la bande intermédiaire pour différentes valeurs de durée de vie de recombinaison [5].

Comme la mobilité des électrons est généralement plus élevée que la mobilité des trous pour la plupart des matériaux semiconducteurs, une jonction asymétrique  $n^+p$  est la plus couramment utilisée pour un dispositif de cellule solaire. La structure de dispositif de ZnTe(O) sur la base d'une IBSC est défini dans la figure III.9, où la couche  $n^+$  est un émetteur d'électrons et la couche p a été incorporée par des états d'oxygène est considérée comme un absorbeur principal. Les photons sont injectés à partir de la couche  $n^+$ .  $L_p$  est la longueur de diffusion effective des trous à la couche n,  $x_n$  est la largeur de déplétion de la couche n,  $x_p$  est la largeur de déplétion de la couche p et  $L_n$  est la longueur de diffusion effective d'électrons pour la couche p. Le champ électrique statique et le potentiel sont définis par l'équation de Poisson .

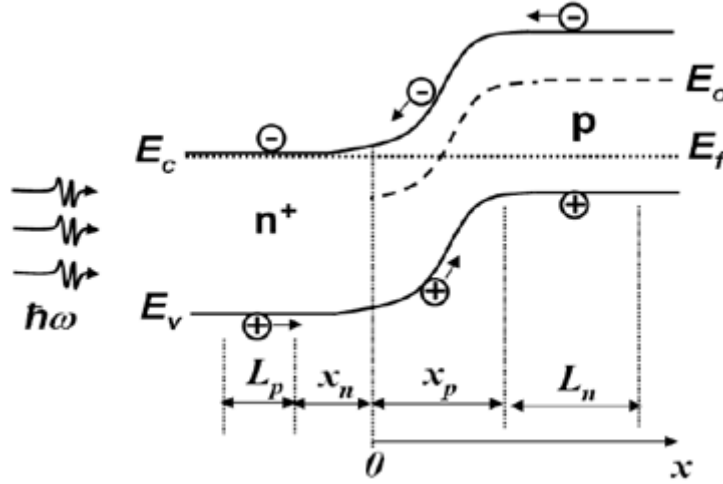
$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{III. 8})$$

où  $V$  est le potentiel électrique,  $\varepsilon$  est la constante diélectrique du ZnTe, et  $\rho$  est la densité de charge définie dans les équations suivantes.

$$\rho = qN_D \quad \text{pour} \quad (-x_n \leq x < 0) \quad (\text{III. 9})$$

$$\rho = -q(N_i + N_A) \quad \text{pour} \quad (0 < x \leq x_p) \quad (\text{III. 10})$$

où  $q$  est la charge électronique,  $N_D$  est la densité de donneur à la région N,  $N_A$  est la densité d'accepteur à la région P, et  $N_i$  est la densité d'électrons dans la bande intermédiaire IB.



**Figure III.9 :** Diagramme de bande d'une jonction asymétrique  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) avec une bande intermédiaire dans la couche p [5].

En outre, la largeur de déplétion de la jonction est déterminée par l'équation suivante en supposant que toute tension externe est appliquée sur la région de déplétion.

$$W = \left\{ \frac{2\varepsilon(V_{bi} - V_a)}{q} \left[ \frac{1}{N_A + N_i} + \frac{1}{N_D} \right] \right\}^{1/2} \quad (\text{III. 11})$$

où  $V_{bi}$  est la tension de seuil de l'homojonction ZnTe  $n^+$ -p,  $V_a$  est la tension en polarisation directe. Evidemment, la zone de déplétion ( $W$ ) va diminuer à cause de l'occupation d'électrons dans la bande intermédiaire (IB), dont la valeur peut être déterminée à partir des équations de continuité de courant à l'état d'équilibre suivantes :

$$\frac{dn}{dt} = -R_{CV} - \frac{n}{\tau_{CI}} + \frac{N_i}{\tau_e} + G_{IC} + G_{VC} + \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = 0 \quad (\text{III. 12})$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{n}{\tau_{CI}} - R_{IV} - \frac{N_i}{\tau_e} - G_{IC} + G_{VI} = 0 \quad (\text{III. 13})$$

$$\frac{dp}{dt} = -R_{CV} - R_{IV} + G_{VI} + G_{VC} - \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = 0 \quad (\text{III. 14})$$

où la durée de vie de recombinaison de la bande de conduction BC à la bande intermédiaire (IB) est  $\tau_{CI}$  et la durée de vie de l'émission thermique de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (BC) est  $\tau_e$ . Le taux de recombinaison radiative de la bande de



conduction (BC) à la bande de valence (BV) est  $R_{CV}$  et de la bande intermédiaire (IB) à la bande de valence (BV) est  $R_{IV}$  est peuvent être définis par  $R_{CV} = B_1 np$ ,  $R_{IV} = B_2 N_i p$ , où  $B_1$  et  $B_2$  sont les coefficients de recombinaison radiative.

Les densités de courant  $J_n$  et  $J_p$  sont définies par les équations de transport de porteurs suivantes:

$$J_n = q\mu_n nE + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (\text{III. 15})$$

$$J_p = q\mu_p pE - qD_p \frac{dp}{dx} \quad (\text{III. 16})$$

où  $D_n$  et  $D_p$  sont le coefficient de diffusion pour les électrons et les trous, respectivement.

Les taux de génération de porteurs par des photons :  $G_{IC}$ ,  $G_{VC}$  et  $G_{VI}$  sont définis dans les équations ci-dessous.

$$G_{CV}(x) = (1 - R)\eta\phi_{CV}\alpha_{CV}\exp(-\alpha_{CV}\cdot x) \quad (\text{III. 17})$$

$$G_{IC}(x) = (1 - R)\eta\phi_{IC}\alpha_{IC}\exp(-\alpha_{IC}\cdot x) \quad (\text{III. 18})$$

$$G_{VI}(x) = (1 - R)\eta\phi_{VI}\alpha_{VI}\exp(-\alpha_{VI}\cdot x) \quad (\text{III. 19})$$

La réflexion ( $R$ ) à l'interface air/semiconducteur est supposée être zéro, et le rendement quantique interne  $\eta$  soit l'unité pour la situation idéale. Dans ces équations,  $\phi_{CV}$ ,  $\phi_{VI}$  et  $\phi_{IC}$  sont les flux de photons dont l'énergie de photons  $E_{ph} \geq E_g$ ,  $E_g \geq E_{ph} \geq E_0$  et  $E_0 \geq E_{ph} \geq E_g - E_0$  respectivement dans le spectre solaire AM1.5.

L'oxygène lié à la bande intermédiaire (IB) couvre de 1,6 eV à 1.9eV au dessus de la bande de valence BV. Les valeurs de  $\phi_{CV}$ ,  $\phi_{VI}$ ,  $\phi_{IC}$  et les densités de photocourant maximum correspondent sont représenté dans le tableau III.1.

	Intensité de flux (No. $\text{Cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$ )	Max. $J_{ph}$ ( $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ )
$\phi_{AM1.5}$	$4.00 \times 10^{17}$	63.9
$\phi_{CV}(E_{ph} \geq 2.29\text{eV})$	$4.6 \times 10^{16}$	7.4
$\phi_{VI}(2.29\text{eV} > E_{ph} \geq 1.6\text{eV})$	$8.6 \times 10^{16}$	13.8
$\phi_{IC}(1.6\text{eV} > E_{ph} \geq 0.4\text{eV})$	$2.48 \times 10^{17}$	38.7

**Tableau III.1** : Flux de photons, les densités de photocourant maximales pour la transition de la BV à BC, de la BV à IB, de l'IB à BC sous AM1.5 [5].

$\alpha_{CV}$  est le coefficient d'absorption de ZnTe au-dessus de la bande interdite. Les coefficients d'absorption de la bande de valence (BV) à la bande intermédiaire (IB)  $\alpha_{VI}$  et de la bande intermédiaire (IB) à la bande conduction (BC)  $\alpha_{IC}$  sont définis dans les équations suivantes :

$$\alpha_{IC} = \sigma_{opt} N_i \quad (III. 20)$$

$$\alpha_{VI} = \sigma_{opt} (N_0 - N_i) \quad (III. 21)$$

où  $\sigma_{opt}$  est la section optique de la bande intermédiaire (IB), et  $N_0$  est la densité de l'oxygène lié à la bande intermédiaire IB.

Les taux globaux de génération de photoporteur pour différentes transitions sont donnés dans ce qui suit :

$$S_{VC} = \int_{-x_n - L_p}^{x_p + L_n} G_{VC}(x) dx \quad (III. 22)$$

$$S_{IC} = \int_0^{x_p + L_n} G_{IC}(x) dx \quad (III. 23)$$

$$S_{VI} = \int_0^{x_p + L_n} G_{VI}(x) dx \quad (III. 24)$$

Étant donné que l'oxygène lié uniquement à la bande intermédiaire (IB) localisé dans la région P, les transitions via la bande intermédiaire (IB) se produisent seulement dans cette région.

Finalement, les courbes J-V peuvent être résolues numériquement à partir des équations de continuité avec les conditions aux limites données par la tension appliquée. Le rendement de conversion global est déterminé par l'équation ci-dessous.

$$\eta_{con} = \frac{J_{SC} \times V_{OC} \times FF}{X P_{AM1.5}} \quad (III. 25)$$

où  $J_{SC}$  est la densité de courant de court-circuit,  $V_{OC}$  est la tension de circuit ouvert, FF est le facteur de forme, X est la période concentrée de la lumière incidente du soleil, et  $P_{AM1.5}$  est la puissance totale du spectre AM1.5. Dans le cas idéal,  $J_{SC}$  est égal au photocourant  $J_{ph}$ , qui se compose de trois parties:  $J_{ph_1}$  générée dans la longueur de diffusion des trous du côté N,  $J_{ph_2}$  produit dans la longueur de diffusion d'électron du côté P, et  $J_{ph_3}$  produit dans la région d'épuisement[5, 6].

### III.6 Présentation du logiciel SCAPS

La simulation numérique des cellules solaires est essentielle, non seulement pour l'interprétation des mesures avancées sur les structures compliquées des cellules, mais aussi pour désigner et optimiser les structures de la cellule.

SCAPS est originellement développé pour les structures de cellules de famille CuInSe<sub>2</sub> et CdTe. Un aperçu de ses principales caractéristiques est donné ci-dessous :

- Jusqu'à 7 couches semiconductrices.
- Presque tous les paramètres peuvent être introduits avec des variations graduées (en dépendance de la composition et la profondeur de la cellule, ex:  $\chi$ ,  $\epsilon$ ,  $N_c$ ,  $N_v$ ,  $v_{thn}$ ,  $\mu_n$ ,  $\mu_p$ ,  $N_a$ ,  $N_d$ , tous les pièges (défauts  $N_i$ ).
- Mécanismes de recombinaison : bande-à-bande (directe), Auger, SRH.
- Les niveaux des défauts : en volume ou à l'interface, en considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux.
- Les niveaux des défauts, type de charge : pas de charge (neutre), monovalent (un seul donneur, accepteur), divalent (double donneur, double accepteur, amphotère), multivalent (défini par l'utilisateur).
- Les niveaux des défauts, distribution énergétique : niveau discret, uniforme, Gauss, sous forme de queue ou bien une combinaison.
- Les niveaux des défauts, propriété optique : Excitation directe par la lumière est possible (connue par effet de l'impureté photovoltaïque, IPV).
- Les niveaux des défauts, transitions métastables entre les niveaux.
- Contacts : Travail de sortie du métal ou régime de bande plate ; Propriété optique (réflexion ou transmission).
- Effet Tunnel, inter-bandes (dans la bande de conduction ou dans la bande de valence),
- Génération : à partir d'un calcul interne ou bien d'un fichier  $g(x)$  fourni par l'utilisateur.
- Illumination : plusieurs types de spectres sont disponibles (AM0, AM1.5D, AM1.5G, AM1.5G édition 2, Monochromatique, etc.).
- Illumination: du côté P ou N.

Le logiciel SCAPS est capable de résoudre les équations de base de la physique des semiconducteurs de base, l'équation de Poisson, les équations de conduction et les équations de continuité pour les électrons et les trous (Eqs. III.26-30):

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{q}{\varepsilon_0\varepsilon_r} \left( p - n - N_A^- + N_D^+ \frac{\rho_t}{q} \right) \quad (\text{III. 26})$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad (\text{III. 27})$$

$$-\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G - R \quad (\text{III. 28})$$

$$J_n = -D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{dV}{dx} \quad (\text{III. 29})$$

$$J_p = -D_p \frac{dp}{dx} - \mu_p p \frac{dV}{dx} \quad (\text{III. 30})$$

où  $\mu_n$ ,  $\mu_p$  et  $D_n$ ,  $D_p$  sont les mobilités et les constantes de diffusion des électrons et des trous respectivement. où  $\varepsilon$  est la constante diélectrique,  $V$  le potentiel électrostatique,  $n$  et  $p$  les concentrations des porteurs libres,  $N_D^+$  et  $N_A^-$  sont les densités des donneurs et d'accepteurs ionisés respectivement.  $J_n$  et  $J_p$  les densités de courants des électrons et des trous respectivement,  $R$  est le taux de recombinaison et  $G$  le taux de génération électron-trou [11].

Le terme de recombinaison dans les Eqs (III.27 et III.28) a une dépendance non-linéaire sur les concentrations des porteurs  $n$  et  $p$ . Aussi le second terme (drift) dans les équations de courant (III.29 et III.30) est non-linéaire, car il contient un produit de deux fonctions inconnues  $n$  (ou  $p$ ) et  $\Phi$ . Finalement les équations semiconductrices sont non-linéaire, pour cela un ensemble de  $3N$  équations non linéaires, Eqs. (III.26-30) sont résolues numériquement dans SCAPS en utilisant l'approche suivante :

- Discrétisation du dispositif : Dans une dimension, la longueur totale de la cellule  $L$  est divisée en  $N$  intervalles et les valeurs du potentiel  $\Phi_i$  et les concentrations des électrons et des trous  $n_i$  et  $p_i$  de chaque intervalle constituent les  $3N$  inconnues du problème.
- Discrétisation des équations (III.26-30) : les équations de base de chaque intervalle  $i$  conduit à  $3N$  équations non-linéaires (discrétisation par la méthode des différences finies).
- Application sur les conditions de limites (contacts et interfaces).
- Résolution par itération en utilisant le schéma de Scharfetter-Gummel [12-14].

La modélisation numérique des cellules solaires est basée sur la résolution de cinq équations essentielles qui gouvernent le comportement des cellules solaires en terme générale,

cinq équations différentielles qui sont : deux équations de courants des porteurs minoritaires, deux équations de continuité pour les minoritaires et la loi de poisson, le couplage de ces équations n'ont une solution analytique si et seulement si :

- Les conditions de l'état stationnaire sont satisfaites.
- Le champ électrique est différent de zero seulement dans la zone de charge d'espace.
- Il y a une faible injection : c'est-à-dire la concentration des porteurs minoritaires est plus petite par rapport à celle des majoritaires.

Les concentrations des dopages sont constantes dans les deux régions N et P [15, 16].

La plupart des simulations peuvent prédire les caractéristiques électriques qui sont associés aux structures et les conditions spécifiques des composants. Dans la simulation la structure des composants est représentée en une dimension, deux dimensions ou bien trois dimensions.

La différence entre les modèles utilisés dans la modélisation des composants, réside dans le degré de la fonctionnalité du modèle, par exemple un tel modèle simple doit résoudre au moins l'équation de poisson pour trouver le champ électrique et le potentiel à l'équilibre thermodynamique, et pour un modèle plus précis il faut que ce dernier contienne toutes les équations motionnées précédemment.

Le principe de fonctionnement de notre simulateur est basé sur les modèles suivants :

Le modèle du courant utilisé est le modèle thermoïnique pour les deux types de porteurs.

$$J_{c,maj} = qv_{th}N_C \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{qV_c}{kT}\right) - 1\right) \quad (\text{III. 31})$$

$$J_{c,maj} = qv_{th}N_V \exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{qV_c}{kT}\right) - 1\right) \quad (\text{III. 32})$$

La hauteur de barrière est calculée en fonction du travail de sortie  $\Phi_m$  du métal, l'affinité électronique  $\chi_e$  et l'énergie de la bande interdite  $E_g$  :

Type-n : l'hauteur de barrière des électrons s'écrit donc :

$$\Phi_B = \Phi_m - \chi \quad (\text{III. 33})$$

Type-p : l'hauteur de barrière des trous :

$$\Phi_B = \chi + E_g - \Phi_m \quad (\text{III. 34})$$

Pour les porteurs minoritaires, le modèle utilisé est la description classique de la recombinaison en surface des porteurs minoritaires. Le courant de porteurs minoritaires est donné par :

$$J_{c,min} = qS_c(c - c_0) \quad (\text{III. 35})$$

où  $c$  dénote la concentration des électrons ou des trous, et  $c_0$  dénote la concentration à l'équilibre thermodynamique

Les densités d'états dans la bande de conduction  $N_C$  et dans la bande de valence  $N_V$ , dépend de la température telle que :

$$N_C(T) = N_{C0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (\text{III. 36})$$

$$N_V(T) = N_{V0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{1.5} \quad (\text{III. 37})$$

où  $T_0$  est la température de référence égale à 300K.  $N_{C0}$  et  $N_{V0}$  sont les valeurs spécifiques à température ambiante.

La vitesse thermique  $v_{th}(T)$  dépend de la température comme suite :

$$v_{th}(T) = v_{th0} \left( \frac{T}{T_0} \right)^{0.5} \quad (\text{III. 38})$$

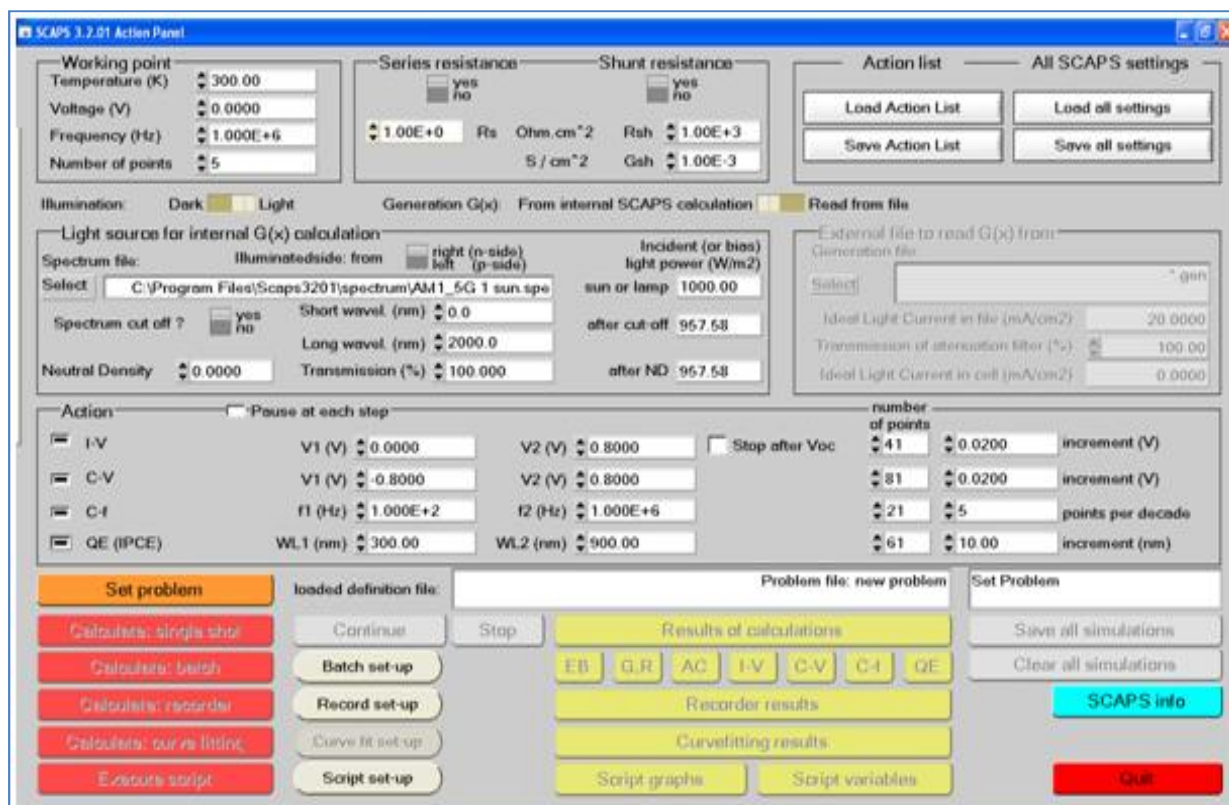
Le coefficient d'absorption optique  $\alpha(\lambda)$  d'une couche avec l'énergie de gap  $E_g$  est donné par :

$$\alpha(\lambda) = \left( A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_g} \quad (\text{III. 39})$$

où  $h\nu$  est l'énergie du photon, et A et B sont des constantes.

Le programme comprend plusieurs panneaux (ou fenêtres, ou dopages). Le panneau principal est « le panneau d'action ». Il autorise de mettre le problème, permet de choisir les calculs exigés, exécuter les calculs, naviguer aux autres panneaux, sauver et mettre en graphe les résultats et quitter le programme [15].

La fenêtre principale du logiciel SCAPS 3201 est présentée sur la figure III.10 ci-dessous.

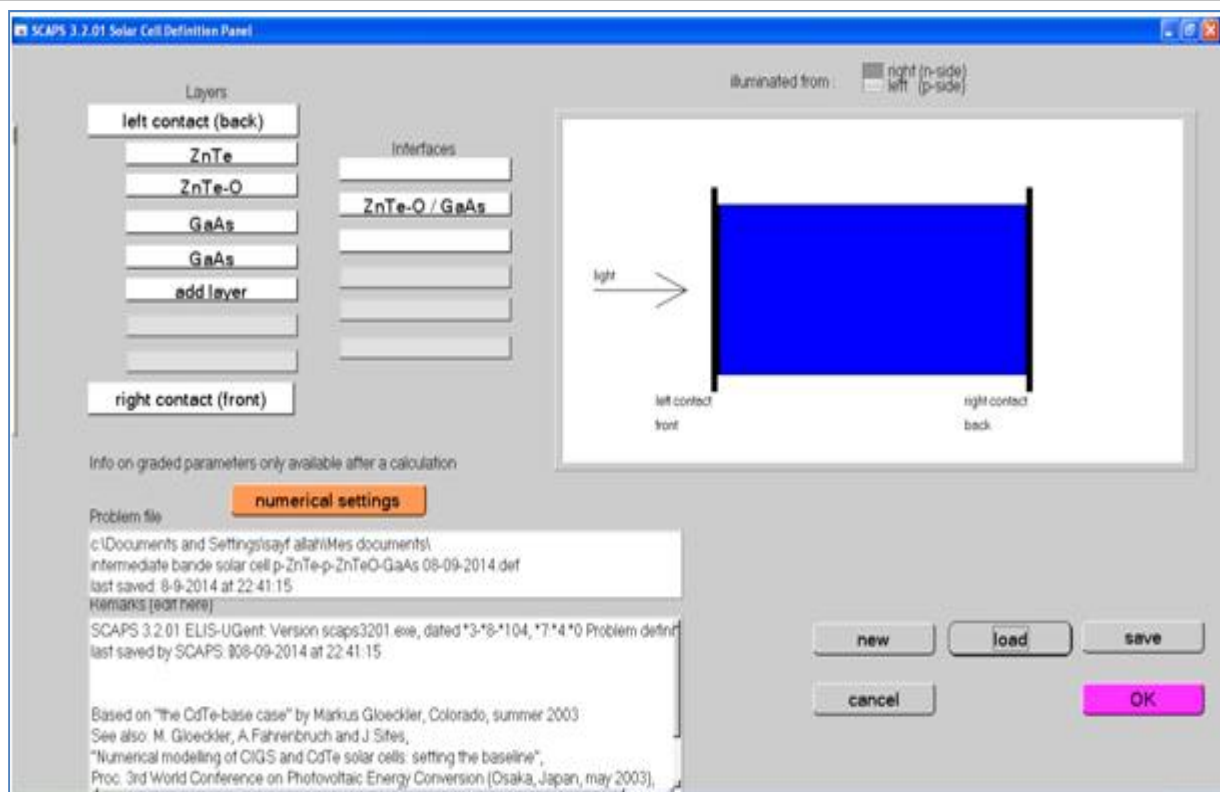


**Figure III.10:** Fenêtre principale du logiciel SCAPS.

Cette fenêtre est appelée "action panel" ce qui permet de poser le problème, d'introduire les paramètres de structure, d'exécuter le programme tout en ayant accès aux résultats par des panneaux : <<Current-density voltage IV, capacitance-voltage CV, capacitance-frequency Cf et Quantum-Efficiency QE>>.

### III.7 Définition d'une cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O)

La méthode recommandée pour introduire une cellule solaire est d'utiliser l'interface graphique du programme. De cette façon on peut introduire interactivement tous les paramètres qui seront contrôlés par SCAPS de manière à ne pas obtenir des valeurs impossibles ou incohérentes.



**Figure III.11 :** Structure d'un échantillon simulé.

La figure III.11 représente la structure d'un échantillon type utilisé dans nos travaux. Dans cette fenêtre, les propriétés physiques ainsi qu'électriques sont définies individuellement pour chaque couche dans l'empilement de l'échantillon. On utilise ici la configuration par défaut pour le "numerical setting".



<b>Paramètre de simulation</b>	<b>valeur</b>
Epaisseur d'échantillon	0.34 $\mu\text{m}$
Hauteur du gap	2.29 eV
Constante diélectrique relative	9.7 eV
Densité effective dans la bande de conduction	$3.75 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$
Densité effective dans la bande de valence	$2.2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
Vitesse thermique d'électron	$2.6 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$
Vitesse thermique de trou	$2.6 \cdot 10^7 \text{ cm/s}$
Mobilité d'électron	$150 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
Mobilité de trou	$50 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
Concentration des trous p	$6 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$

**Tableau III.2** : Paramètres de simulation de la couche absorbante ZnTe(O) [5- 8].

### III.8 Le panneau I(V)

Après les calculs, les résultats sont présentés dans le panneau I(V) tels que :

Le rendement, la densité du courant, la tension de circuit ouvert et le facteur de forme.

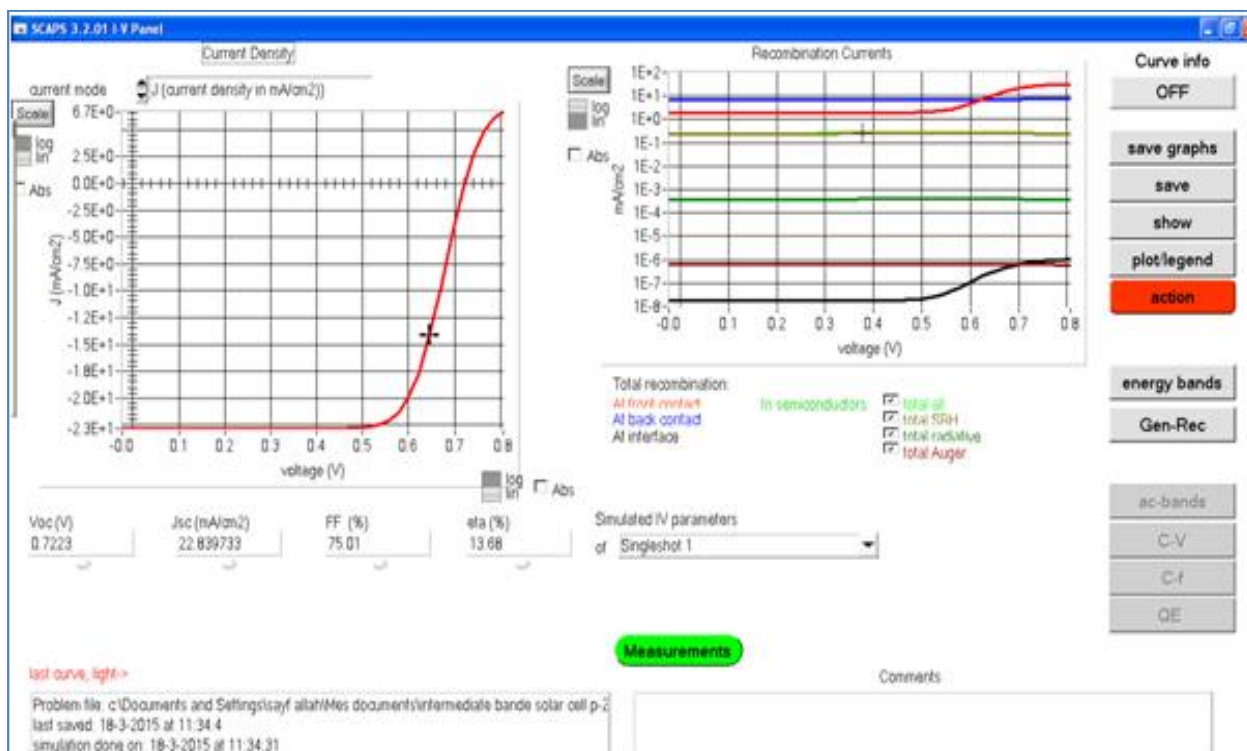


Figure III.12 : Panneau I(V).

### III.9 Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle mathématique établi à partir de la physique des dispositifs semiconducteurs a été présenté. Ce modèle mathématique constitue le socle de la modélisation de tout dispositif à base de semiconducteur et plus particulièrement de cellules photovoltaïques à bande intermédiaire. La résolution des cinq équations aux dérivées partielles : l'équation de Poisson, deux équations de continuités et deux équations de transport sont à la base de la modélisation physique.

Le phénomène de recombinaison et de transport de porteurs ont donné des règles de base pour la conception d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) basée sur ZnTe(O). Ce phénomène est actualisé en incluant des niveaux d'énergies pour l'occupation d'électrons dans la bande intermédiaire (IB), et la dépendance de la durée de vie des porteurs minoritaire avec occupation d'électrons de la bande intermédiaire.

Le phénomène de recombinaison et de transport de porteurs joue un rôle très important dans les caractéristiques physiques d'une cellule solaire à bande intermédiaire.

Le modèle développé va nous permettre de modéliser différentes structures de cellules photovoltaïques telles que la cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O).

---

**Bibliographie**

- [1] C. Hasni, Mémoire de master de l'Université Med Khider Biskra, Algérie (2013).
- [2] Y. Xu, Thèse de doctorat de l'Université de Nantes , France (2014).
- [3] C. del Cañizo, « Characterization of intermediate band materials and solar cells », CHEETA Workshop: Advanced characterization methods for PV Freiburg, January 14th (2016).
- [4] Wladek. Walukiewicz, “New Concepts and Materials for Solar Energy Conversion”, <http://emat-solar.lbl.gov/>
- [5] W. Wang, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA, (2010).
- [6] A. S. Lin, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA (2010).
- [7] J. Zhang, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA, (2014).
- [8] C. Chen, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA, (2015).
- [9] Z. Oghi, Mémoire de master de l'Université Med Khider Biskra, Algérie (2013).
- [10] M. Mohammedi, Mémoire de Magister de l'Universite Abou-Bakr Blekaid, Tlemcen, Algérie (2012).
- [11] S. Boukli Hacène, Thèse de doctorat de l'Universite Abou-Bakr Blekaid, Tlemcen, Algérie (2013).
- [12] S. Khelifi, Mémoire de magister de l'Universite Djillali Liabes, Sidi Bel Abbes, Algérie (2009).
- [13] J. R. Ayres, and N. D. Young. IEEE Proc, 141, 33, (1994).
- [14] R. N. Hall, Physic. Rev, 87, 387, (1952).
- [15] M. Lourassi, Mémoire de magister de l'Universite Djillali Liabes, Sidi Bel Abbes, Algérie (2009).
- [16] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, J Thin Solid Films, 361-362, 527-532, (2000).

# CHAPITRE IV

Simulation numérique et Résultats  
obtenus

## IV.1 Introduction

Jusqu'à une date récente, il était admis que la filière au ZnTe/ZnTe(O) représentait l'approche la plus prometteuse pour les cellules solaires de nouvelles générations. ZnTe paraissait être un matériau idéal pour les cellules solaires en couches minces pour plusieurs raisons [1, 2] parmi lesquelles :

- Le gap d'énergie est de type direct
- La valeur du gap permettant d'être des candidats pour la conversion photovoltaïque et l'optoélectronique dans le visible
- Un grand coefficient d'absorption.

Dans ce chapitre, nous allons faire une étude, par simulation, sur les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC) à base des semiconducteurs II-VI (ZnTe).

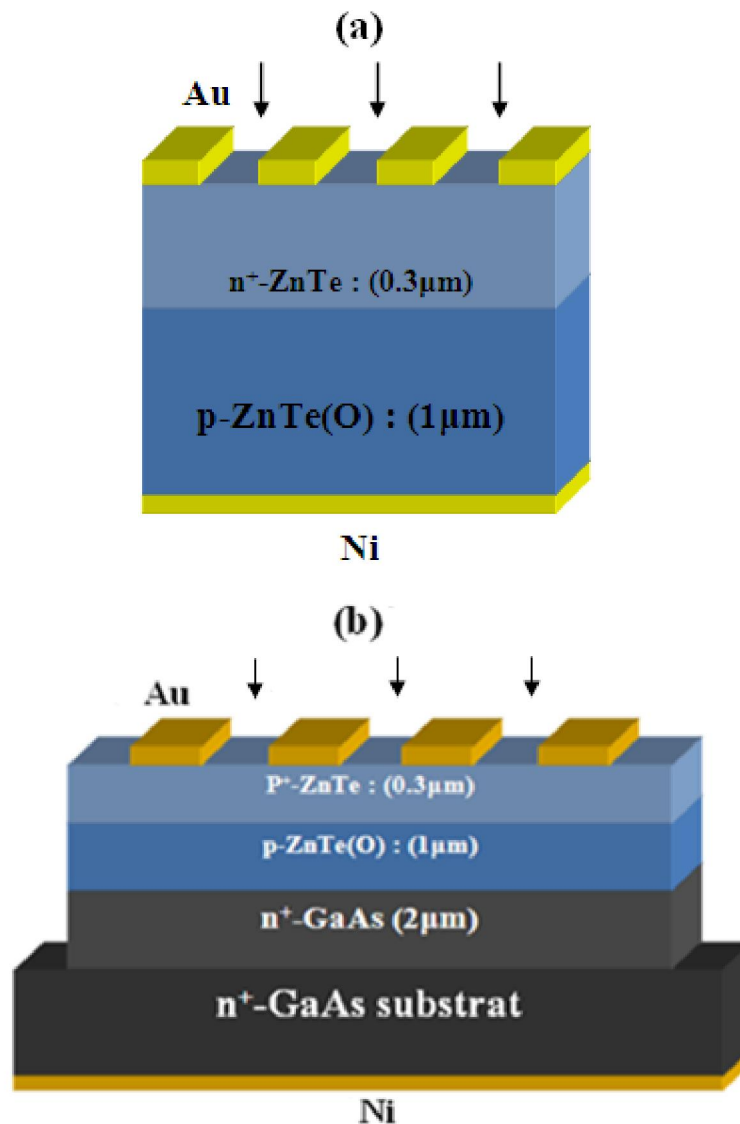
Les résultats de simulation de l'incorporation de l'oxygène (O) formant une couche ZnTeO, seront donnés en effectuant une étude de l'influence de l'incorporation de l'oxygène sur les paramètres de sortie de la cellule photovoltaïques.

Nous étudierons les caractéristiques des cellules solaires à bande intermédiaire à base de ZnTe(O). Nous montrerons que cette dernière pourra être une solution prometteuse pour l'obtention d'un courant de court circuit important et un rendement de conversion plus élevé par rapport à une cellule solaire de ZnTe sans bande intermédiaire. Une comparaison entre les deux cellules (sans et avec bande intermédiaire (IB)) sera faite, en montrant l'intérêt d'introduire l'oxygène comme une bande intermédiaire pour la conversion photovoltaïque [3].

Notre travail se divise en deux parties. Une première partie, sera consacrée à la simulation d'une cellule solaire homojonction à bande intermédiaire ( $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)), et au cours de la deuxième partie, nous optimiserons une cellule solaire à hétérojonction à bande intermédiaire  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.

## IV.2 Présentation des deux cellules

L'étude de l'influence de l'oxygène sur les performances de la cellule solaire à bande intermédiaire sera réalisée en utilisant deux structures représentées sur la figure IV.1 (a) et IV.1 (b) respectivement.



**Figure IV.1 :** Géométrie des deux cellules solaires à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) (a) Homojonction n<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTe(O), et (b) Hétérojonction p<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTe(O)/n<sup>+</sup>-GaAs.

### IV.3 Résultats de simulation numérique et interprétations

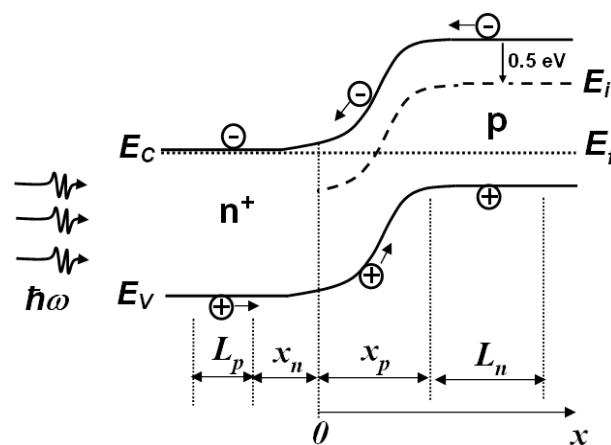
Le fonctionnement de la cellule solaire à bande intermédiaire dépend d'un grand nombre de paramètres. Ces paramètres liés aux matériaux utilisés et à la géométrie de la cellule sont interdépendants, ce qui rend indispensable l'étude de l'influence de tous ces paramètres. Cette étude permettra ainsi de déterminer les paramètres critiques et importants dans le fonctionnement de ce type de cellule et donc l'optimisation des performances de celle-ci. Pour étudier l'influence d'un paramètre, nous allons le faire varier sur un intervalle donné tout en fixant tous les autres paramètres. Cette démarche sera suivie pour étudier l'influence de chacun des paramètres sur les performances de la cellule solaire à bande intermédiaire.

Pour chaque variation d'un paramètre donné, nous avons généré les caractéristiques courant-tension  $J(V)$  sous l'éclairement AM1.5 afin d'extraire les caractéristiques de sortie : la densité de courant de court-circuit  $J_{SC}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$ , le facteur de forme FF et le rendement de conversion  $\eta$  de la cellule.

Nous allons d'abord étudier l'influence de l'incorporation de l'oxygène comme une bande intermédiaire dans la couche absorbante de ZnTe(O) notamment en faisant varier la concentration  $N_i$  de l'oxygène, le niveau d'énergie  $E_i$  de l'oxygène dans la bande interdite de ZnTe, l'épaisseur de la couche absorbante, la concentration  $N_a$  de la couche absorbante, et l'épaisseur de la couche émettrice. Puis, nous nous concentrerons sur la couche de ZnTe(O) en étudiant l'effet de l'introduction de l'oxygène sur les performances de la cellule. L'impact de la présence de l'oxygène aux homojonctions  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) et aux hétérojonctions  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs sera aussi observé. Nous avons considéré les effets parasites comme la résistance série et la résistance shunt qui influencent nettement sur les performances de la cellule [4].

### IV.3.1 Simulation de l'homojonction $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)

Puisque la mobilité des électrons est habituellement plus rapide que la mobilité des trous pour la plupart des matériaux semiconducteurs, une jonction asymétrique de  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) est la plus utilisée généralement pour un dispositif de cellule solaire. La structure du dispositif de ZnTe(O) présentant un niveau énergétique intermédiaire (IBSC) est définie sur la figure IV.2, où la couche de  $n^+$ -ZnTe est un émetteur d'électron et la couche p-ZnTe(O), où se réalisent les états d'incorporation d'oxygène, est considérée comme absorbeur principal [5-7]. Des photons sont injectés du côté de la couche de  $n^+$  [8].



**Figure IV.2 :** Diagramme énergétique d'une cellule solaire homojonction à bande intermédiaire à base de  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O).



où  $L_p$  est la longueur de diffusion des trous dans la région de type n,  $x_n$  est la largeur de la zone de charge d'espace de la couche de type n,  $x_p$  est la largeur de la zone de charge d'espace de la couche de type p, et  $L_n$  est la longueur de diffusion des électrons dans la région de type p.

Le champ électrique et le potentiel sont définis par l'équation de poisson.

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{IV. 1})$$

où  $\phi$  est le potentiel électrique,  $\varepsilon$  est la constante diélectrique de ZnTe, et  $\rho$  est la densité de charge définie dans les équations suivantes.

$$\rho = qN_D(-x_n \leq x < 0) \quad (\text{IV. 2})$$

$$\rho = -q(N_i + N_A)(0 < x \leq x_p) \quad (\text{IV. 3})$$

où  $q$  est l'unité de charge électronique,  $N_D$  est la densité des donneurs de la région de type n,  $N_A$  est la densité des accepteurs à la région de type p et  $N_i$  est la densité d'électrons dans la bande intermédiaire (IB) [8].

#### IV.3.1.1 Etude de l'influence du dopage $N_i$ de la bande intermédiaire (IB) sur les grandeurs photovoltaïques

Le taux d'occupation par les électrons dans la bande intermédiaire est le paramètre le plus critique pour déterminer la condition de fonctionnement d'une cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O).

Le rendement de conversion est extrêmement dépendant de la section efficace de capture des électrons, et de la densité de ces états. La valeur optimale de la densité de bande intermédiaire est dans l'intervalle de  $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  et  $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  où le rendement de conversion est presque double par rapport à celle d'une cellule solaire sans bande intermédiaire.

La structure de la cellule solaire à base de ZnTe(O) à bande intermédiaire (IBSC) que nous avons étudié, est une homojonction  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O), où les états d'oxygène sont incorporés dans la couche p comme un principal absorbant avec une concentration  $N_i = 2.10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , les épaisseurs et les concentrations de différentes couches sont comme suivant:  $N_D = 2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ,  $d = 0.3 \text{ }\mu\text{m}$  pour la couche émettrice  $n^+$ -ZnTe,  $N_A = 2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ,  $d = 1 \text{ }\mu\text{m}$  pour la couche absorbante p-ZnTe(O).

Les principaux paramètres physiques utilisés pour la simulation sont donnés dans le tableau IV.1.

Paramètres physiques	ZnTe	ZnTe(O)
$E_g$ (eV)	2.29	2.29
$\chi$ (eV)	3.7	3.7
$\epsilon$	9.70	9.70
$\mu_e$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	300	150
$\mu_t$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	100	50
$N_c$ (cm <sup>-3</sup> )	$1.176 \times 10^{18}$	$1.176 \times 10^{18}$
$N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	$1.166 \times 10^{19}$	$1.166 \times 10^{19}$

**Tableau IV.1** : Constantes physiques spécifiques du ZnTe et ZnTeO.

Les valeurs des paramètres technologiques (épaisseur et dopage), position énergétique  $E_i$ , et concentration d'oxygène  $N_i$  donnant un rendement optimal de la cellule solaire à bande intermédiaire vont montrer dans le tableau IV.2.

Paramètres technologiques	Valeurs par défaut	Etendu de variation
position énergétique $E_i$ (eV)	0.51	0.3-0.8
Concentration d'oxygène $N_i$ (cm <sup>-3</sup> )	$2.10^{21}$	$1.10^{19}$ - $10^{22}$
Epaisseur du front n <sup>+</sup> -ZnTe (μm)	0.3	0.1-0.5
Dopage du front n <sup>+</sup> -ZnTe (cm <sup>-3</sup> )	$2.10^{18}$	$2.10^{18}$
Epaisseur de la couche absorbante p-ZnTeO (μm)	1	0.5-1.5
Dopage de la couche absorbante p-ZnTeO (cm <sup>-3</sup> )	$2.10^{16}$	$10^{14}$ - $10^{17}$

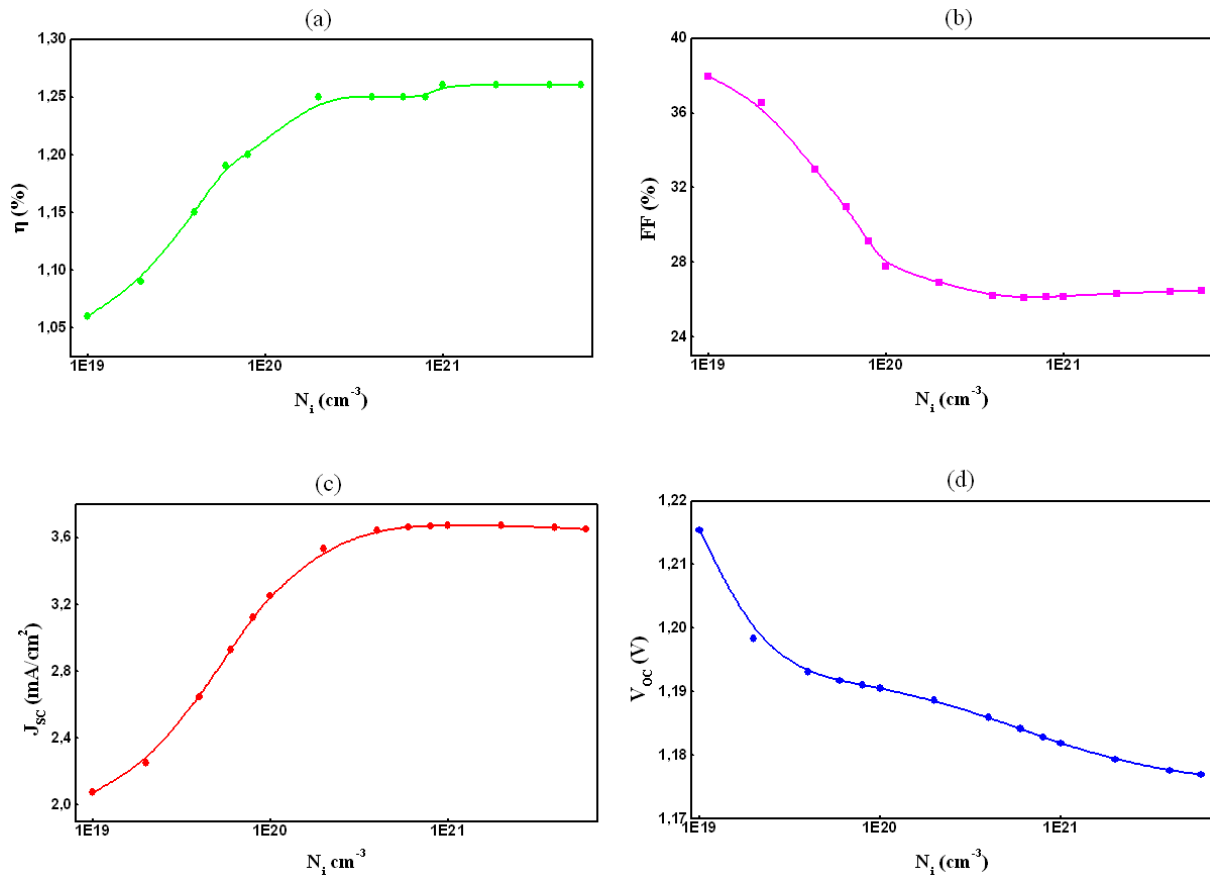
**Tableau IV.2** : Valeurs des paramètres de la simulation numérique pour la structure n<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTeO.

---

L'approche d'une cellule solaire à bande intermédiaire basée sur une jonction simple  $n^+ \text{-ZnTe/p-ZnTe(O)}$  offre une perspective attrayante de réaliser un rendement plus élevé. Pour mieux connaître la valeur optimale de la concentration d'oxygène (couche intermédiaire)  $N_i$ , nous avons fixé le niveau de la couche intermédiaire  $E_i$  à 0.51 eV au dessous du minimum de la bande de conduction  $E_c$ , et par la modélisation on déduit les paramètres de sortie tels que : le rendement de conversion électrique  $\eta$ , le courant de court circuit  $J_{SC}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  et le facteur de forme FF.

La densité du courant (J) de la cellule augmente en raison de l'absorption supplémentaire dans la bande intermédiaire (IB) [9], mais la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) diminue parce que la durée de vie des électrons se dégrade avec l'existence des états non occupés dans la bande intermédiaire (IB).

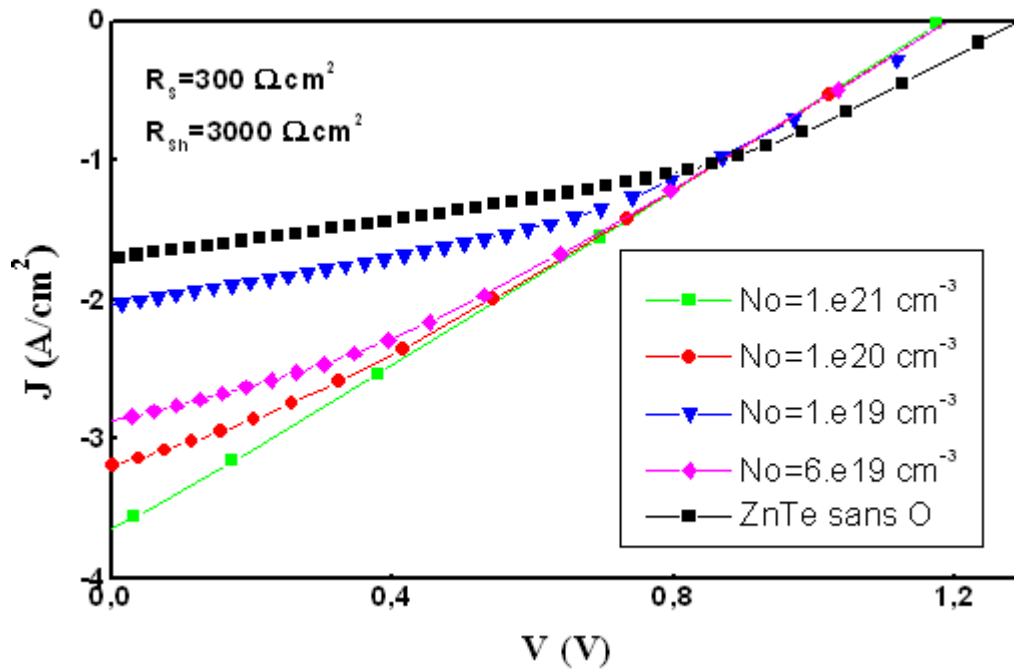
La diminution de la tension de circuit ouvert est due à l'élévation des recombinaisons non radiatives, et l'occupation de porteurs dans la bande intermédiaire abaissant la position de niveau de Fermi [10], Dans la cellule homojonction  $n^+ \text{-ZnTe/p-ZnTe(O)}$  où la bande intermédiaire (IB) se trouve dans la région de type p, la bande intermédiaire est presque demi pleine dans la région de déplétion et presque vide dans la région de diffusion à l'équilibre. La tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  et le facteur de forme FF diminuent comme indiqué dans la figure IV.3. Le facteur de forme diminue en raison de mécanisme suivant: Le pourcentage de photocourant généré dans la région de déplétion est plus élevé pour une cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) que celle d'une cellule solaire de ZnTe sans bande intermédiaire [6, 7, 11-14].



**Figure IV.3** : Variation des paramètres photovoltaïques ( $\eta$ , FF,  $J_{SC}$ ,  $V_{OC}$ ) en fonction de densité d'états d'oxygène  $N_i$  (avec  $R_S=300 \Omega \cdot \text{cm}^2$  et  $R_{Sh}=3000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ ).

#### IV.3.1.2 Etude sur la caractéristique J-V

La valeur optimale de la densité des états de la bande intermédiaire (IB)  $N_i$  est estimée d'abord puisque c'est le paramètre primaire pour déterminer la performance d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC). L'effet du dopage par l'oxygène dans la couche absorbante sur la caractéristique  $I(V)$  dans la cellule solaire à bande intermédiaire est présenté par la figure IV.4, la densité du courant de court circuit  $J_{SC}$  augmente en comparaison avec une homojonction de ZnTe sans bande intermédiaire (IB).



**Figure IV.4:** Caractéristique  $J(V)$  de la cellule solaire à base de ZnTe(O) pour différentes densité d'oxygène  $N_i$  avec  $E_i=0.51$  eV.

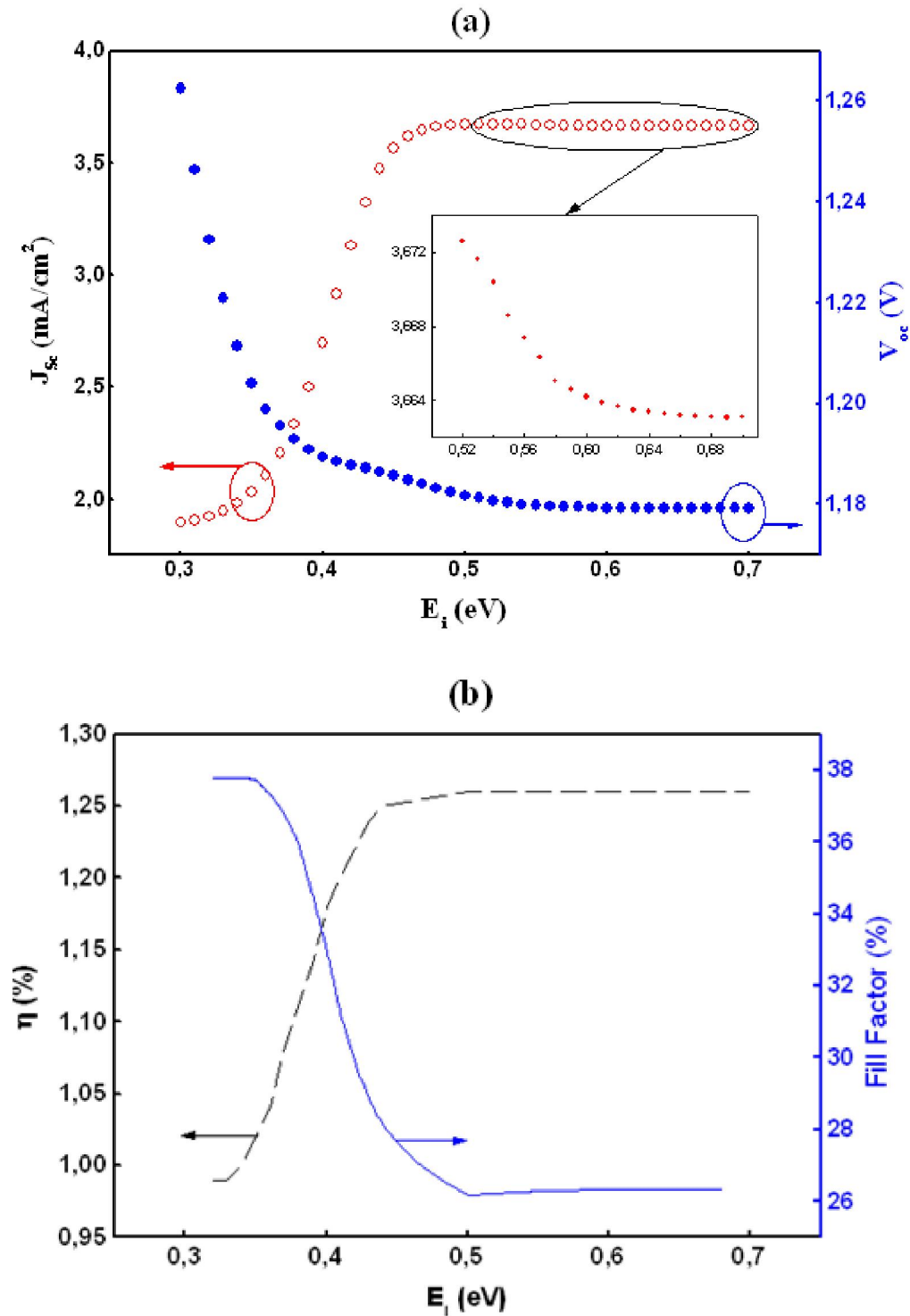
### IV.3.1.3 Effet de la position énergétique $E_i$ de la bande intermédiaire sur les grandeurs photovoltaïques

Compte tenu de différentes évolutions du rendement de conversion  $\eta$  et du courant de court circuit  $J_{SC}$  en considérant  $R_s = 300 \Omega \cdot cm^2$ , les valeurs optimales de la densité d'états d'oxygène et la position énergétique de ces états sont  $2 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  et  $0.51$  eV respectivement ce qui correspond à un rendement de conversion de  $1.26\%$  et un courant de court circuit  $J_{SC}$  de  $3.67 \text{ mA/cm}^2$  comme on peut le déduire dans la figure IV.5, où la figure IV.5 (a) présente l'évolution de la densité du courant de court circuit  $J_{SC}$  et la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  avec  $E_i$  et la figure IV.5 (b) représente le rendement de conversion  $\eta$  et de facteur de forme FF avec  $E_i$ .

La figure IV.5 (a) montre que lorsqu'on augmente la position énergétique de la bande intermédiaire (IB) de  $0.3$  eV à  $0.51$  eV, la densité du courant de court circuit augmente de  $1.89 \text{ mA/cm}^2$  à sa valeur maximum  $3.67 \text{ mA/cm}^2$ , et après  $0.51$  eV elle diminue.

La figure IV.5 (b) représente la variation de  $\eta$  et FF en fonction du niveau d'énergie de la bande intermédiaire (IB)  $E_i$ , on remarque que lorsqu'on augmente le niveau d'énergie (la position de la bande intermédiaire dans la bande interdite)  $E_i$  de  $0.3$  eV à  $0.51$  eV le rendement de conversion  $\eta$  augmente de  $0.99\%$  à sa valeur maximum  $1.26\%$  puis il diminue au delà de  $0.51$  eV. Les résultats de simulation illustre que la meilleure valeur du niveau

d'énergie (position énergétique)  $E_i$  de la bande intermédiaire (IB) est 0.51 eV en comparaison avec la cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O) conventionnelle [15]. La position énergétique de la bande intermédiaire a une forte influence sur le rendement de conversion de la cellule solaire.



**Figure IV.5 :** Variation de (a)  $J_{sc}$  et  $V_{oc}$ , (b)  $\eta$  et FF en fonction de la position énergétique de la bande intermédiaire  $E_i$ .

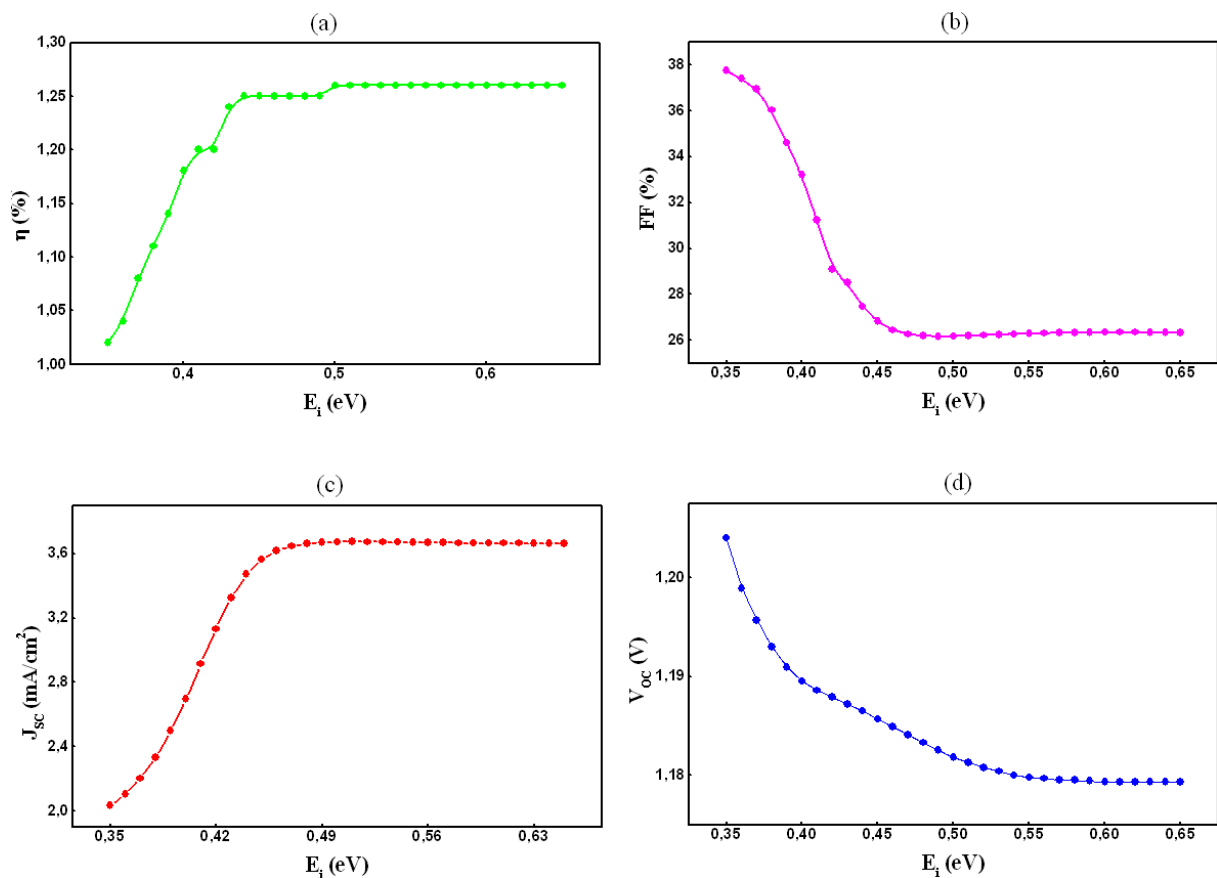
---

L'émission forte pour le défaut de l'oxygène dans la bande interdite de la couche p-ZnTe(O) dénote une transition fortement radiative et donc une caractéristique souhaitable d'une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) [15, 16].

L'approche d'une cellule solaire à bande intermédiaire basée sur une simple jonction n<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTe(O) offre une perspective attrayante pour aboutir à un rendement de conversion plus élevé. Les résultats de simulation prouvent que sous une illumination standard AM 1.5, les valeurs des facteurs parasites dégradant le rendement de conversion incluent la résistance série et la résistance shunt dans le dispositif ce qui ont été déterminés pour être à l'ordre de  $R_s = 300 \Omega \cdot \text{cm}^2$  et  $R_{sh} = 3000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ , respectivement.

L'étude de ce type de cellule par simulation permettra de mieux comprendre son fonctionnement et de dégager les paramètres déterminants pour l'obtention de hauts rendements.

Par les résultats de simulation nous avons constaté que la valeur optimale de la position énergétique (le niveau d'énergie)  $E_i$  de la bande intermédiaire est à 0.51 eV au-dessous de minimum de la bande de conduction  $E_c$ . Le niveau d'énergie est déterminé par la différence de l'électronégativité entre l'atome d'oxygène et de tellure. Les valeurs optimales de  $J_{SC}$ ,  $V_{OC}$ , et  $\eta$  sont 3.67 mA/cm<sup>2</sup>, 1.18 V et 1.26 %, respectivement (voir figure IV.6). La bande intermédiaire (IB) ouvre le chemin pour l'absorption des photons de faibles énergies et la production de photocourant [14, 16, 17].

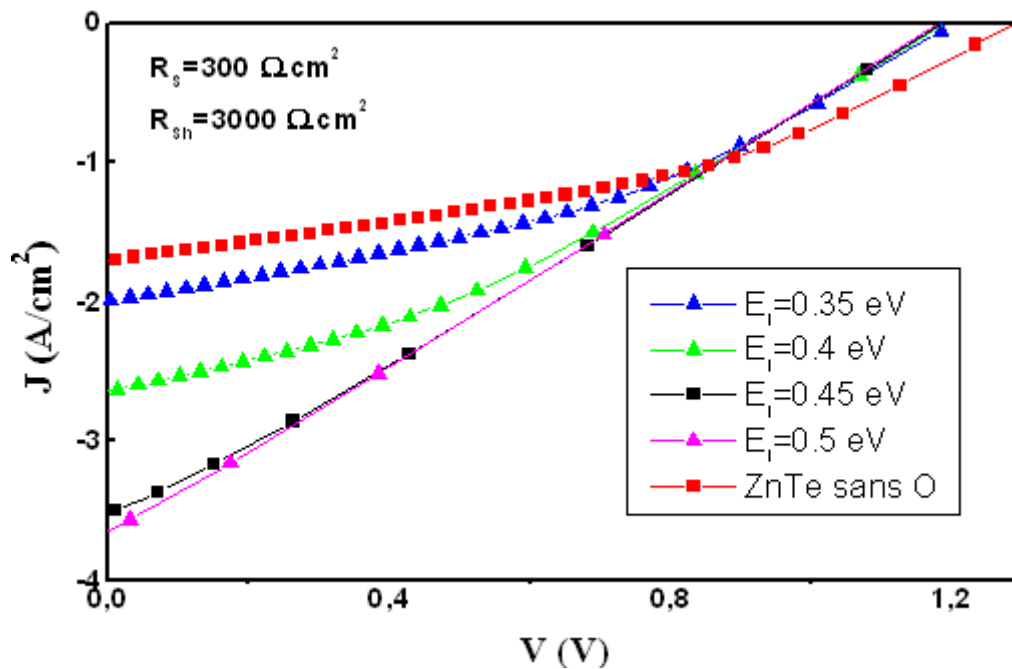


**Figure IV.6 :** Influence de la position de la couche intermédiaire sur les performances de la cellule solaire homojonction ZnTe(O) ; (a) Le rendement de conversion ( $\eta$ ); (b) Le facteur de forme (FF); (c) La densité du courant de court-circuit ( $J_{sc}$ ), et (d) La tension en circuit ouvert ( $V_{oc}$ ).

La densité du courant de court circuit ( $J_{sc}$ ) est plus élevée pour une cellule solaire à base de ZnTe(O) (Avec oxygène) en comparaison à celle d'une cellule solaire à base de ZnTe (sans oxygène) comme illustre la figure IV.7. La densité du courant de court circuit  $J_{sc}$  est approximativement double, et est compatible à un grand nombre de porteurs photogénérés et à une large réponse spectrale. La réduction dans la tension de circuit ouvert peut être due à un certain nombre de facteurs, y compris l'augmentation de la recombinaison non radiative et de l'occupation de porteurs dans la bande intermédiaire (IB) abaissant le niveau de Fermi.

On peut dire aussi que la densité du courant de court circuit ( $J_{sc}$ ) augmente en raison de l'absorption additionnelle de la bande intermédiaire (IB), mais la tension de circuit ouvert ( $V_{oc}$ ) diminue parce que la durée de vie se dégrade avec l'existence des états non occupés dans la bande intermédiaire (IB).



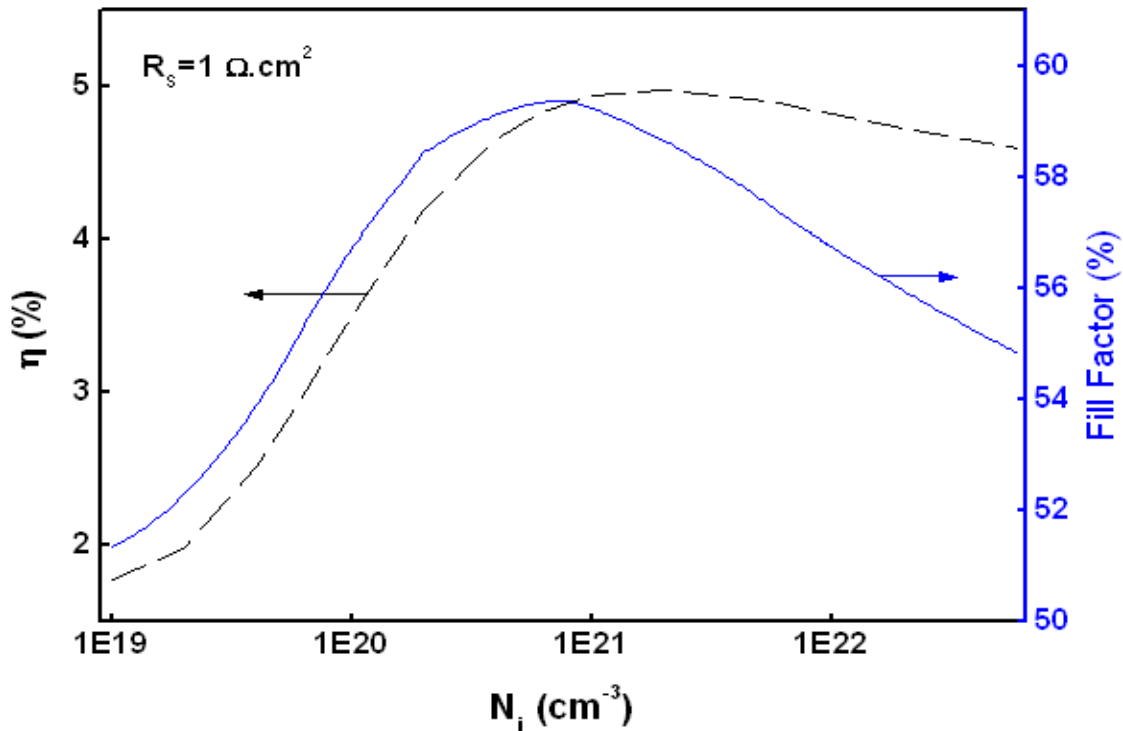


**Figure IV.7:** Caractéristique  $J(V)$  de la cellule solaire à base de ZnTe(O) pour différents niveaux d'énergies  $E_i$ .

#### IV.3.1.4 Effet de la résistance série $R_s$ sur les grandeurs photovoltaïques

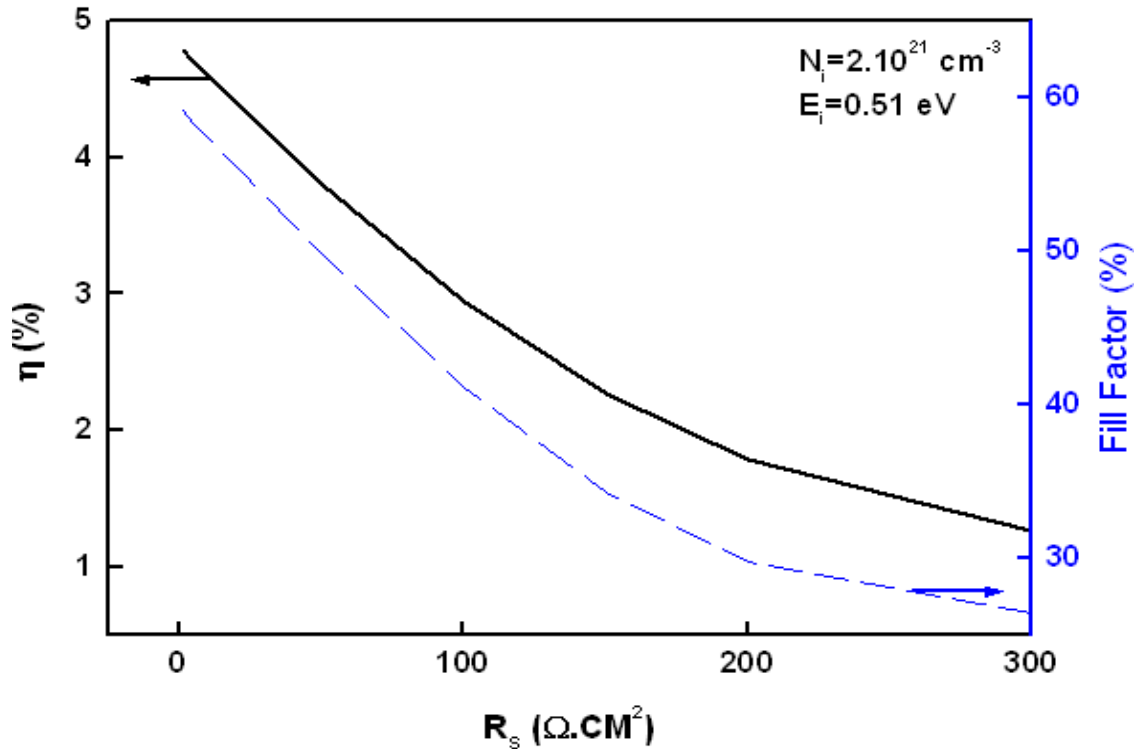
Notre objectif est d'optimiser la cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) en considérant les effets du dopage par oxygène sur la performance de la cellule. À cet égard, la structure conventionnelle d'une cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) indique que la concentration d'oxygène doit être supérieure que  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  en raison de la forte possibilité de former des sites interstitiels d'oxygène dans le matériau ZnTe.

La figure IV.8 représente la variation du rendement de conversion  $\eta$  et le facteur de forme FF en fonction de la densité des états d'oxygène dans la bande intermédiaire (IB)  $N_i$ . La figure montre que lorsqu'on augmente la densité d'oxygène ( $N_i$ ) de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ , le rendement de conversion  $\eta$  augmente de 1.78% à sa valeur maximum 4.98%, et au-delà de  $2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  il diminue. Les résultats de simulation montrent que la valeur optimale de la concentration d'oxygène est  $2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ .



**Figure IV.8 :** Variation du rendement de conversion et de facteur de forme en fonction de la concentration d'oxygène  $N_i$ .

L'effet des paramètres parasites comme la résistance série  $R_s$ , où sa valeur est clairement une limitation importante, montre que la cellule solaire conventionnelle à bande intermédiaire ZnTe(O) fournit un rendement de conversion  $\eta$  presque de 5% avec  $R_s = 1 \Omega \cdot \text{cm}^2$ . La figure IV.9 représente la variation du rendement de conversion  $\eta$  et le facteur de forme FF avec la résistance série  $R_s$  varier de  $300 \Omega \cdot \text{cm}^2$  à  $1 \Omega \cdot \text{cm}^2$ . Le rendement de conversion  $\eta$  croît de 1.78% jusqu'à sa valeur maximum 4.98% quand la résistance diminue.

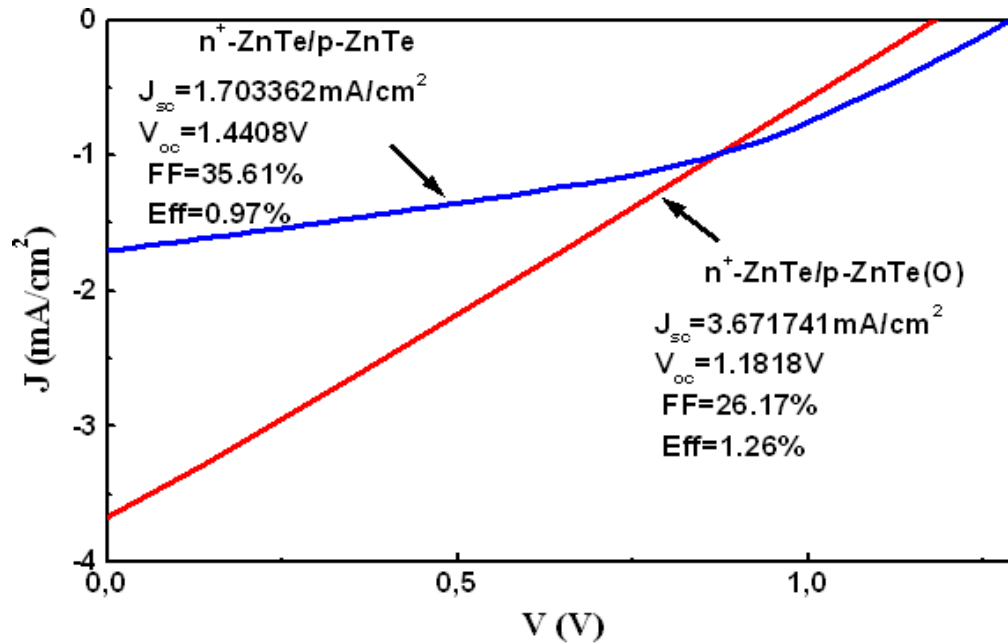


**Figure IV.9 :** Variation du rendement de conversion et de facteur de forme en fonction de la résistance série  $R_s$ .

#### IV.3.1.5 Caractéristique J(V) pour une structure homojonction ZnTe sans et avec oxygène

Pour voir l'effet du dopage par l'oxygène dans la couche absorbante p-ZnTe sur les caractéristique J(V) de la cellule solaire à bande intermédiaire, nous avons optimisé la cellule solaire homojonction sans oxygène  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe et avec oxygène  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) avec les mêmes paramètres physiques et technologiques, nous considérons que les résistances séries et shunt sont respectivement de  $R_s = 300 \Omega \cdot \text{cm}^2$  et  $R_{sh} = 3000 \Omega \cdot \text{cm}^2$  [15].

La figure IV.10 représente les caractéristiques courant-tension de la cellule solaire homojonction sans oxygène  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe et avec oxygène  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) calculé par SCAPS.



**Figure IV.10 :** Caractéristique  $J(V)$  d'une homojonction ZnTe/ZnTe(O) (sans et avec dopage par l'oxygène) sous l'éclairement AM 1.5 (avec  $R_S=300 \Omega \cdot \text{cm}^2$ ,  $R_{Sh}=3000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ ,  $N_i=2 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$  et  $E_i=0.51 \text{ eV}$ ).

Dans la figure IV.10 on remarque que le rendement de conversion est au maximum presque 30% d'augmentation pour des concentrations d'oxygène plus que  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  par rapport à celle d'une homojonction ZnTe sans oxygène.

Le tableau IV.3 résume les résultats obtenus par notre simulation, où ZnTe est la cellule solaire à bande intermédiaire sans oxygène (n<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTe), et ZnTe(O) est la cellule solaire à bande intermédiaire avec oxygène (n<sup>+</sup>-ZnTe/p-ZnTe(O)).

		$J_{sc}$ (mA/cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	$\eta$ (%)
Simulation	ZnTe	1.70	1.44	35.61	0.97
	ZnTe(O)	3.67	1.18	26.17	1.26

**Tableau IV.3 :** Les résultats de simulation des paramètres d'une cellule solaire homojonction avec  $R_S=300 \Omega \cdot \text{cm}^2$ ,  $R_{Sh}=3000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ .

En conséquence, la couche absorbante de ZnTe(O) d'une cellule solaire homojonction a une importante perspective pour achever à un rendement de conversion plus élevé [9]. Ces résultats sont aussi obtenus dans la référence [15].

### IV.3.2 Simulation de l'hétérojonction $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs

L'une des options clés à accomplir pour avoir des bonnes caractéristiques de sorties d'une cellule solaire est la présence des défauts dans le matériau. On peut distinguer les défauts volontairement introduits dans le matériau (par exemple par dopage où les impuretés sont ajoutées de façon contrôlée pour modifier la conductivité, le type de porteurs de charge,...etc) et ceux créés de façon non contrôlée (par exemple des lacunes du réseau, ...etc). La présence d'un défaut dans un réseau cristallin modifie la distribution des états électroniques en fonction de l'énergie, et donc affecte le transport des porteurs de charge.

Ces défauts jouent un rôle important dans le transport des charges car ils agissent sur leur mouvement en les capturant ou en libérant et rendent incontrôlables les paramètres électriques du matériau et ceux des dispositifs qui l'utilisent. Ils ont donc une influence certaine sur les performances d'une cellule solaire.

Nous rappelons l'état de l'art des connaissances sur les défauts qui sont électriquement actifs (pièges) dans le cas des matériaux ZnTe(O), où l'oxygène se considère comme une bande intermédiaire dans la bande interdite de ZnTe [18-20].

Dans la zone de déplétion, tous les électrons et les trous générés par le dopage ou par une excitation par les photons sont balayés par le champ électrique. La durée de vie d'électrons de la bande intermédiaire dans la zone de déplétion est plus grande que celle de la région de diffusion de la zone p sous éclairage AM 1.5. Le taux d'occupation dans la région de diffusion est moins que 0.01%, presque vide [8]. Cependant, la bande intermédiaire dans la zone de déplétion est presque demi pleine.

La largeur de la zone de charge d'espace, la longueur de diffusion d'électrons, le coefficient d'absorption, et le taux de photoporteurs sont tous dépendants de l'occupation de la bande intermédiaire par les électrons. Dans une jonction asymétrique, la largeur totale de la zone de déplétion est presque égale à la largeur d'épuisement dans la région de type p. c.à.d. la largeur de la zone de charge d'espace s'étend vers la région la moins dopée [21].

La présence de la bande intermédiaire dans la région de type p indique que le photocourant se produit principalement dans cette région, avec l'augmentation de la concentration d'électrons dans la bande intermédiaire, toute la région d'épuisement se rétrécit. La bande intermédiaire devrait être presque 50% remplie afin d'équilibrer l'absorption par cette bande [16].

### IV.3.2.1 Etude numérique des paramètres

Pour toutes les modélisations SCAPS de notre étude, nous avons insérés un ensemble de paramètres physiques qui sont donné dans le tableau IV.4.

Paramètres physiques	ZnTe	ZnTe(O)	GaAs
$E_g$ (eV)	<b>2.29</b>	<b>2.29</b>	<b>1.42</b>
$\chi$ (eV)	<b>3.7</b>	<b>3.7</b>	<b>4.07</b>
$\epsilon$	<b>9.70</b>	<b>9.70</b>	<b>13.13</b>
$\mu_e$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	<b>300</b>	<b>150</b>	<b>8500</b>
$\mu_t$ (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	<b>100</b>	<b>50</b>	<b>400</b>
$N_c$ (cm <sup>-3</sup> )	<b><math>1.176 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>1.176 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>4.45 \times 10^{17}</math></b>
$N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	<b><math>1.166 \times 10^{19}</math></b>	<b><math>1.166 \times 10^{19}</math></b>	<b><math>7.72 \times 10^{18}</math></b>

**Tableau IV.4:** Paramètres physiques utilisés pour la simulation d'une cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O) [5, 8, 21-23].

Le tableau (IV.5) regroupent respectivement les paramètres technologiques tels que la position énergétique de la bande intermediaire  $E_i$ , la concentration d'oxygene  $N_i$ , l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O).

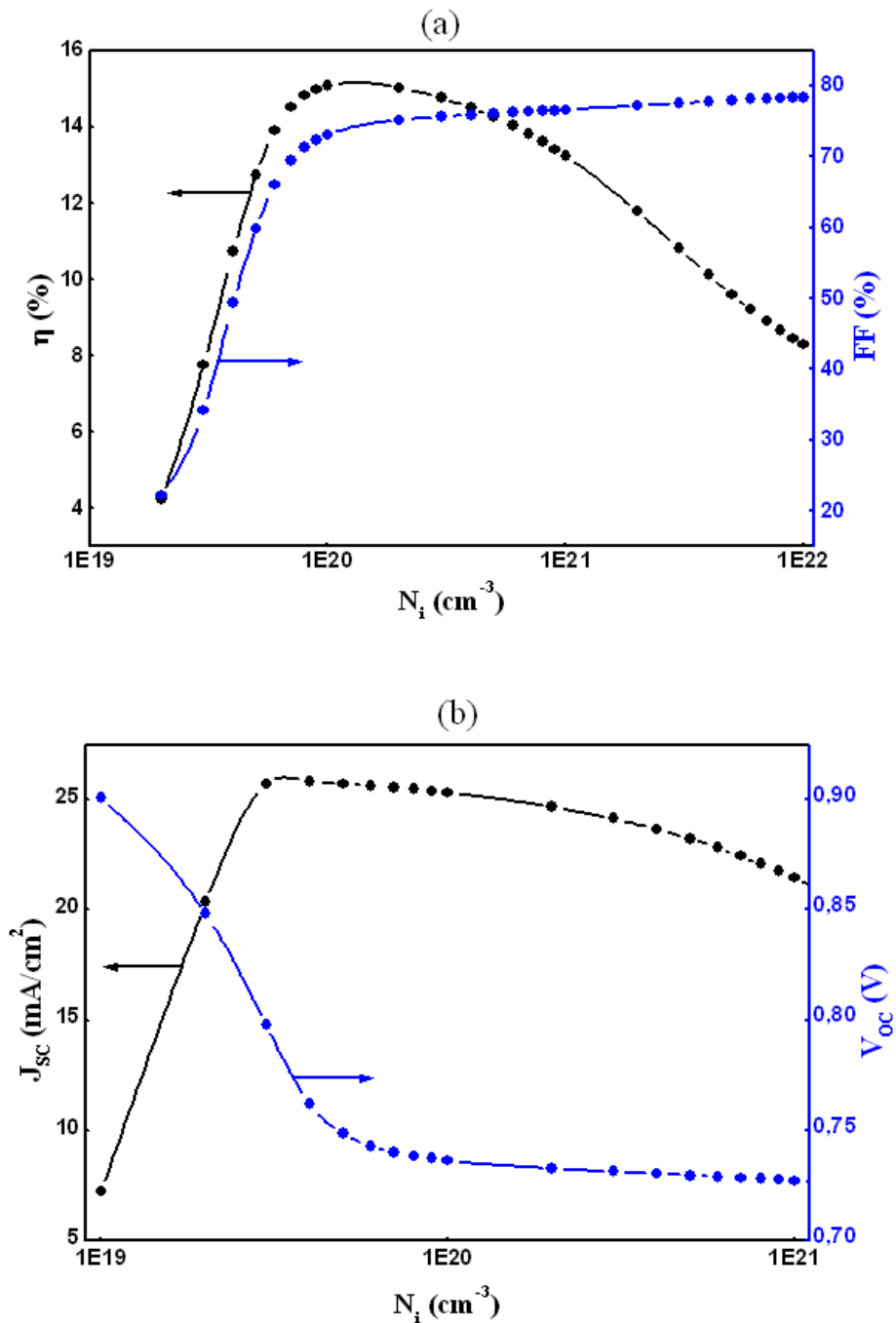
Paramètres technologiques	Valeurs par défaut	Etendu de variation
position énergétique $E_i$ (eV)	0.48	0.2-0.8
Concentration d'oxygène $N_i$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1.10^{20}$	$1.10^{19}$ - $10^{22}$
Epaisseur du front $p^+$ -ZnTe ( $\mu\text{m}$ )	0.08	0.02-0.25
Epaisseur de la couche absorbante $p$ -ZnTeO ( $\mu\text{m}$ )	0.34	0.05-1
Dopage de la couche absorbante $p$ -ZnTeO ( $\text{cm}^{-3}$ )	$6.10^{14}$	$10^{14}$ - $10^{17}$
Epaisseur de la couche GaAs ( $\mu\text{m}$ )	2	2
Dopage de la couche GaAs ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.10^{18}$	$2.10^{18}$

**Tableau IV.5:** Valeurs des paramètres utilisés pour la modélisation et la simulation numérique de la cellule solaire à base de ZnTe(O).

#### IV.3.2.2 Influence de la densité d'oxygène $N_i$ sur les caractéristique de l'hétérojonction $p^+$ -ZnTe/ $p$ -ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs

La bande intermédiaire doit être métallique (Partiellement remplie d'électrons) pour assurer une bonne absorption de photons dans les transitions de la bande de conduction vers la bande de valence. Évidemment, une augmentation de la densité d'oxygène ( $N_i$ ) se traduit également par une augmentation du photocourant, conduisant à l'amélioration du rendement de conversion et une diminution de la tension de circuit ouvert. À cet égard, une structure typique d'une cellule solaire à bande intermédiaire à base de ZnTe(O) indique que la densité d'oxygène  $N_i$  peut être supérieure à  $10^{19} \text{cm}^{-3}$  en raison de la forte possibilité de former des sites interstitielles d'oxygène dans ZnTe [15]. Figure IV.11 (a, b) présente le rendement de conversion ( $\eta$ ) et le facteur de forme (FF), la densité du courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ) et de la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) de la cellule solaire, respectivement, en fonction de la densité d'oxygène ( $N_i$ ). La figure IV.11 (a) illustre la variation de  $\eta$  et FF en fonction la densité d'oxygène ( $N_i$ ), l'augmentation de la densité d'oxygène de  $2.10^{19} \text{cm}^{-3}$  à  $1.10^{20} \text{cm}^{-3}$ , entraîne une augmentation du rendement de conversion de 4.24 % à sa valeur maximum, 15.28 %, et au-delà de  $1.10^{20} \text{cm}^{-3}$  nous avons remarqué une légère diminution du rendement de la cellule. La simulation montre que la valeur optimisée de la densité d'oxygène ( $N_i$ ) est  $1.10^{20} \text{cm}^{-3}$  pour avoir une amélioration de plus de 100% du rendement de la cellule par rapport à une

cellule hétérojonction à base de ZnTe sans bande intermédiaire (IB). La simulation prédit très bien la valeur de la densité d'oxygène ( $N_i$ ) sur des cellules conventionnelles à base de ZnTe(O), ces résultats nous permettent de valider notre modèle de simulation car ils sont aussi obtenus par les travaux de W. Wang et al [15].



**Figure IV.11:** Variation (a) Du rendement de conversion, de facteur de forme et (b) La densité du courant de court circuit, la tension en circuit ouvert en fonction de la concentration d'oxygène  $N_i$ .



La figure IV.11 (b) montre la variation de la densité du courant de court circuit ( $J_{SC}$ ) et de la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) en fonction de la densité d'oxygène ( $N_i$ ). Elle montre que, quand on augmente la densité d'oxygène ( $N_i$ ) de  $2.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à  $5.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , la densité du courant de court circuit  $J_{SC}$  augmente et après  $5.10^{19} \text{ cm}^{-3}$  elle tend à diminuer. Par les résultats de simulation, il a été constaté que la valeur optimale de la densité d'oxygène est  $5.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . L'effet de la densité d'oxygène a attiré beaucoup d'attention comme une approche car il est le paramètre principal pour déterminer la performance d'une cellule solaire à bande intermédiaire en introduisant des mécanismes d'absorption par des sous-bandes dans la bande interdite. L'absorption de photons par les sous bandes fournit un photocourant supplémentaire, en même temps, cela peut donc exciter les électrons piégés et aussi ils peuvent contribuer à l'amélioration du photocourant.

L'augmentation de la densité d'oxygène ( $N_i$ ) engendre une diminution de la tension de circuit ouvert. La diminution de la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  pourrait être causé par un certain nombre de facteurs, y compris l'existence d'états non occupés dans la bande intermédiaire, la présence de la recombinaison non-radiative SRH associée à des centres de recombinaison profonds causées par des impuretés et des imperfections et de l'occupation des porteurs dans la bande intermédiaire abaissant la position du niveau de Fermi [10].

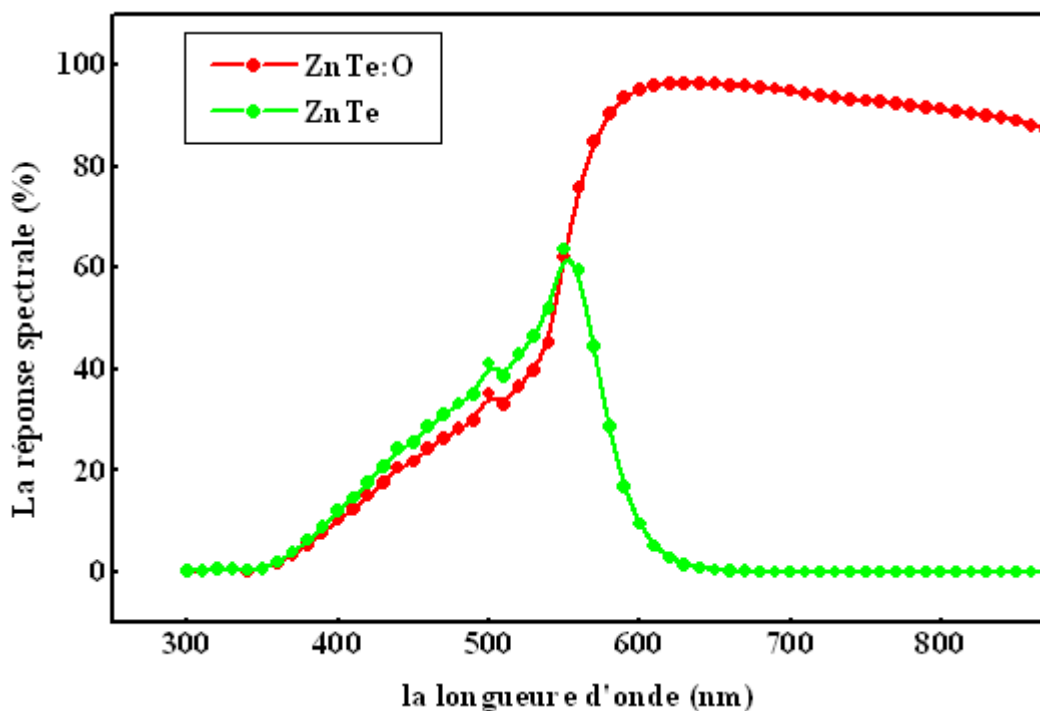
La valeur optimale de la densité d'oxygène ( $N_i$ ) de la bande intermédiaire résulte non seulement de l'équilibre entre la recombinaison et la génération de porteurs, mais aussi par la différence entre le rétrécissement de la largeur de la zone de déplétion et l'augmentation de l'absorption. Cependant, le maximum du rendement de conversion se produira quand le photocourant d'électrons et de trous produit par la bande intermédiaire sont tous à un maximum, et la légère diminution de la tension de circuit ouvert au delà de la valeur optimale est due à l'augmentation du courant de recombinaison radiative via la bande intermédiaire.

#### IV.3.2.3 Rendement quantique

Enfin, nous avons également simulé le rendement quantique en fonction de la longueur d'onde. Le rendement quantique externe,  $EQE$ , est défini comme le rapport du nombre de photons émis par la diode, au nombre de porteurs traversant la jonction, un  $EQE$  de 100% indique que chaque photon incident donne lieu à un électron qui contribue aux flux. La figure IV.12 illustre l' $EQE$  en fonction de la longueur d'onde. Bien sûr, nous voulons une cellule solaire a l' $EQE$  le plus élevé possible sur un large spectre [21, 24].

Le rendement quantique interne,  $IQE$ , est défini comme le rapport du nombre de photons créés à la jonction, au nombre de porteurs qui traversent cette jonction. Contrairement à l' $EQE$ , les photons qui sont perdus par réflexion ou par transmission ne comptent pas.

D'après le rendement quantique  $QE$  montré dans la figure IV.12, la réponse spectrale pour une hétérojonction  $p^+-ZnTe/p-ZnTe(O)/n^+-GaAs$ , où  $p-ZnTe(O)$  est une couche absorbante, présente un pic au longueur d'onde de 550 nm, l'émission forte est due au défaut d'oxygène existant dans la bande interdite de  $ZnTe$  qui montre une forte transition radiative, donc une caractéristique souhaitable pour une cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC) [15].



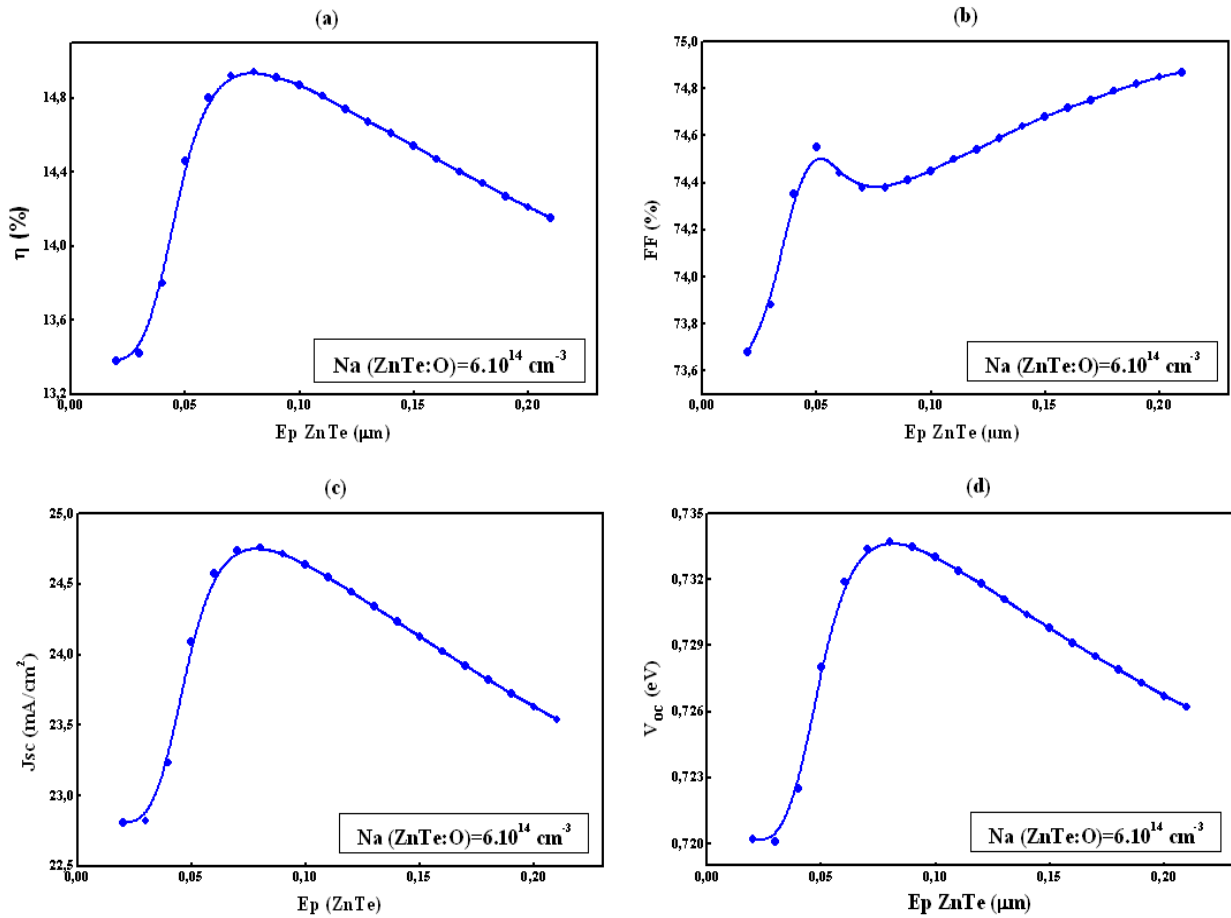
**Figure IV.12 :** Rendement quantique en fonction de la longueur d'onde d'une cellule solaire à bande intermédiaire  $p^+-ZnTe/p-ZnTe(O)/n^+-GaAs$ .

L'existence de la bande intermédiaire fournit une large réponse spectrale au spectre solaire par l'intermédiaire de trois transitions optiques (de la bande de valence à la bande de conduction, de la bande de valence à la bande intermédiaire, et de la bande intermédiaire à la bande de conduction) et par conséquent un rendement plus élevé [15].

L'obtention de trois transitions optiques non seulement fournit un rendement plus élevé et une augmentation du spectre solaire mais réduit également des déperditions d'énergies dues à la relaxation thermique des porteurs optiquement excités.

### IV.3.2.4 Effet de l'épaisseur du front ZnTe sur les grandeurs photovoltaïques

L'influence de l'épaisseur du front ZnTe sur les grandeurs de sortie dans la cellule solaire est présentée par la figure IV.13.



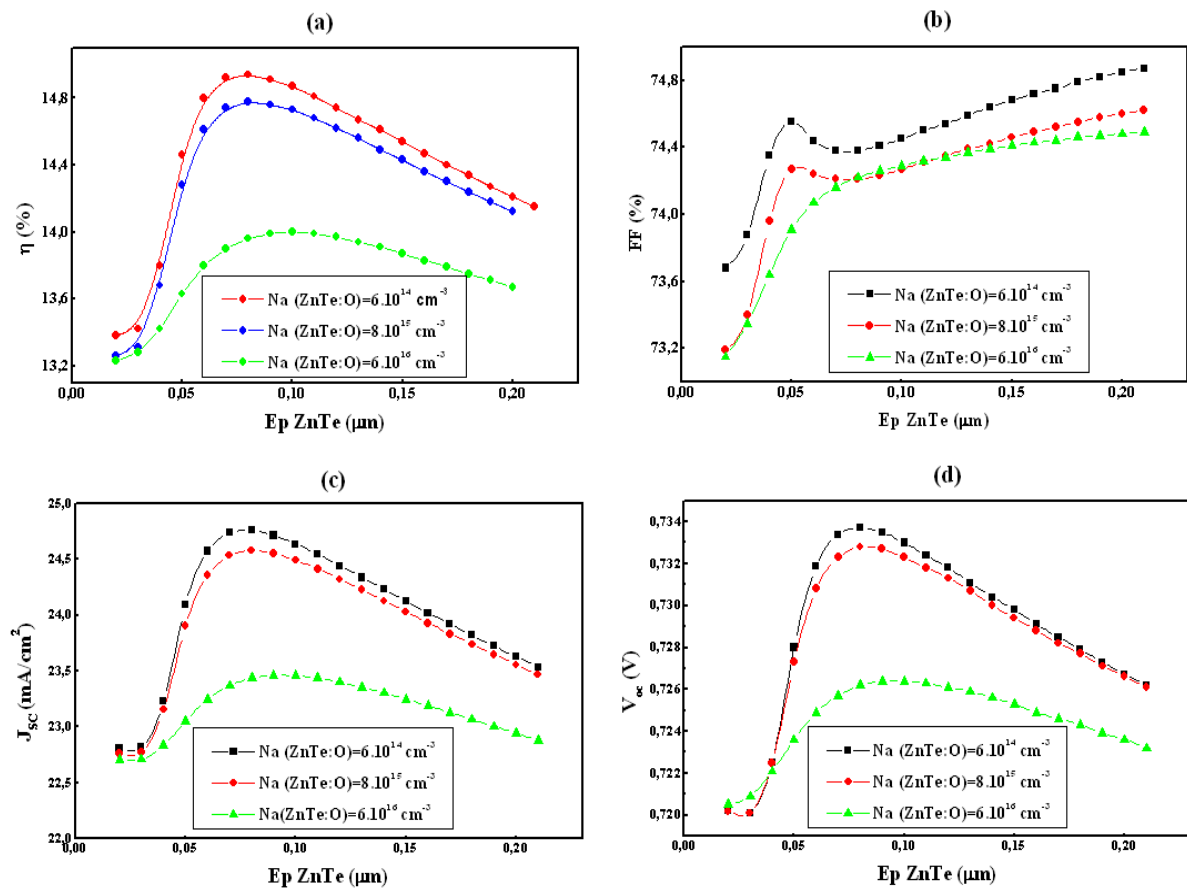
**Figure IV.13 :** Influence de la profondeur de la couche émettrice (front) ZnTe sur les performances de la cellule solaire à bande intermédiaire  $p^+$ -ZnTe/ $p$ -ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs; (a) Le rendement de conversion  $\eta$ ; (b) Le facteur de forme FF ;(c) La densité du courant de court-circuit  $J_{SC}$  et (d) La tension du circuit ouvert  $V_{OC}$ .

On remarque que les grandeurs photovoltaïques : la densité de courant de court circuit  $J_{SC}$ , la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$ , et le rendement de conversion  $\eta$  sont au maximum pour une épaisseur de l'ordre de  $0.08 \mu\text{m}$  pour une hétérojonction à bande intermédiaire à base de  $p^+$ -ZnTe/ $p$ -ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs, ceci peut être expliqué par le fait que les porteurs minoritaires photogénérés par les courtes longueurs d'onde parviennent facilement à atteindre la zone de déplétion (ZCE) et par suite peuvent contribuer au photocourant total. Mais si l'épaisseur du front croît, ces photoporteurs se recombinent avant d'atteindre cette zone.

On peut dire que l'augmentation de l'épaisseur de l'émetteur a une influence sur la profondeur de la zone des charges d'espace car elle ne permet pas la diffusion des porteurs photogénérés qui ont une longueur de diffusion faible et par conséquent diminué le photocourant.

#### IV.3.2.5 Effet du dopage $N_a$ de la couche absorbante ZnTe:O sur les grandeurs photovoltaïques

La figure IV.14 montre que le rendement prend presque la même configuration que la variation du courant en fonction de l'épaisseur de l'émetteur ZnTe et on remarque qu'il prend sa valeur optimale pour une épaisseur  $d=0.08 \mu\text{m}$  et un dopage de la couche absorbante ZnTe(O) de  $6.10^{14} \text{cm}^{-3}$ .



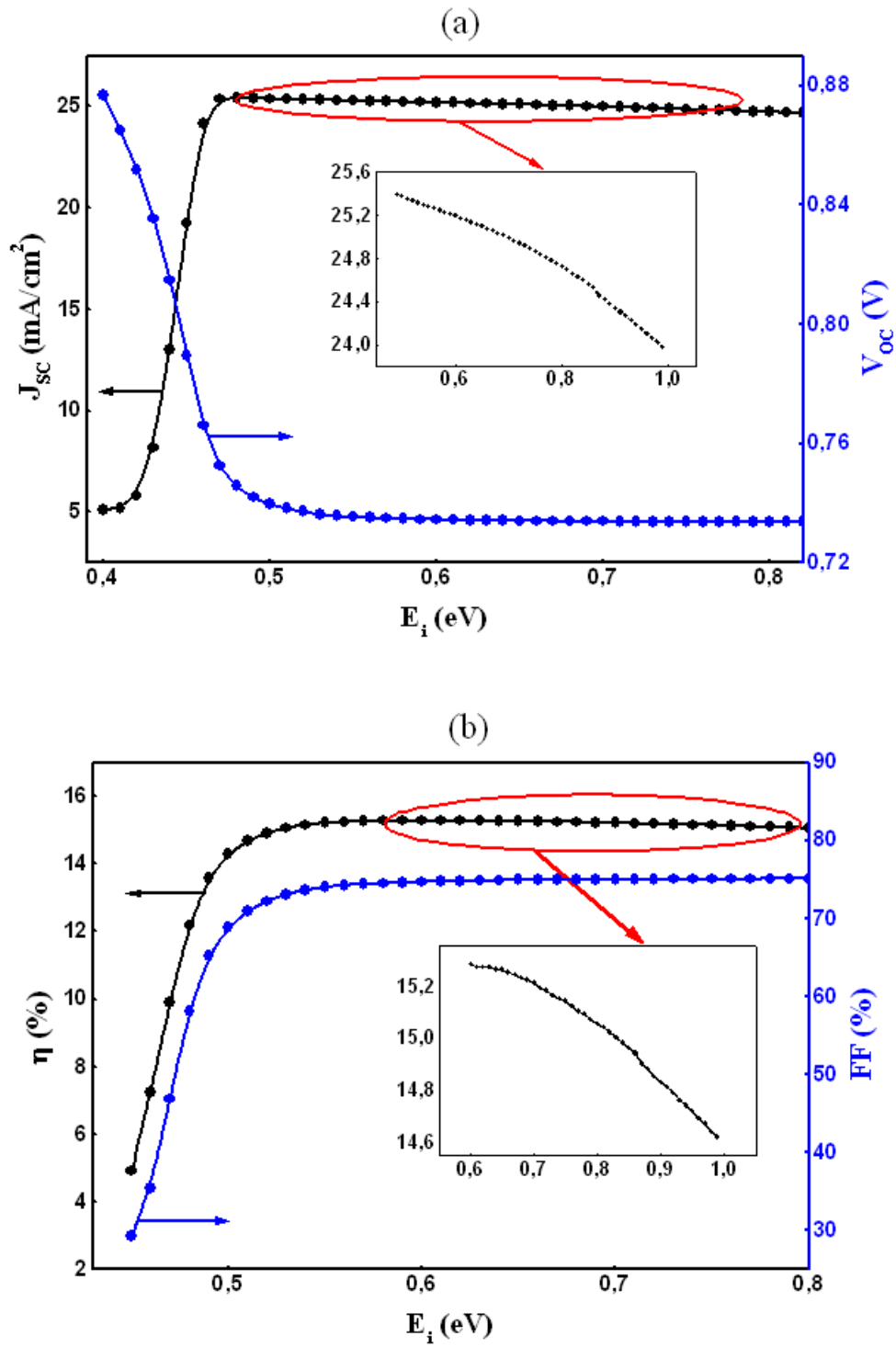
**Figure IV.14 :** Variation du rendement en fonction de l'épaisseur du front ZnTe pour différentes concentration de la couche ZnTe(O).

Avec une couche de ZnTe(O) faiblement dopée de type p et de bande intermédiaire fortement dopée (densité des états d'oxygène), la transition entre la bande de conduction et

la bande de valence disparaît, tandis que la transition correspondant à la bande intermédiaire augmente. Ce comportement peut être expliqué par le système de piégeage existant dans la bande intermédiaire qui est fortement dopée (forte densité des états d'oxygène), en même temps le taux de recombinaison de la bande de conduction (BC) à la bande de valence (BV) due à la faible concentration de trous.

#### **IV.3.2.6 Effet du niveau énergétique $E_i$ sur le rendement de conversion $\eta$ et de la densité du courant de court circuit $J_{SC}$**

Les effets du niveau d'énergie de la bande intermédiaire (IB) est illustré dans la figure IV.15. La figure IV.15 (a) présente la variation de la densité du courant de court circuit ( $J_{SC}$ ) et la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) en fonction de niveau d'énergie de la bande intermédiaire (IB). Il est clair que lorsqu'on augmente la position énergétique de la bande intermédiaire  $E_i$  de 0.4 eV à 0.48 eV, la densité du courant de court circuit augmente de 5.10 mA/cm<sup>2</sup> à sa valeur maximum 25.40 mA/cm<sup>2</sup> puis subit une légère décroissance. La figure IV.15 (b) montre la variation du rendement de conversion et de facteur de forme en fonction de niveau d'énergie de la bande intermédiaire ( $E_i$ ), il montre que lorsque on augmente le niveau d'énergie de 0.45 eV à 6 eV au-dessous de la bande conduction  $E_c$ , le rendement de conversion  $\eta$  augmente de 4.91 % à sa valeur maximum 15.28 %, et au-delà de cette valeur il diminue. Il est clair que dans une cellule solaire à bande intermédiaire, la densité du courant de court circuit augmente par l'absorption des photons à faible énergies qui ont une énergie inférieure à l'énergie de la bande interdite via la bande intermédiaire [13, 25]. Toutefois, la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ) diminue puisque l'existence des états non occupés dans la bande intermédiaire réduit la durée de vie d'électron. En effet, par l'insertion d'une bande intermédiaire (IB) dans la couche absorbante de la structure, on peut améliorer la densité du courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ). Le photocourant supplémentaire se produit lorsque les électrons en excès sont excités de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction ( $E_c$ ), ce qui conduit à un rendement de conversion amélioré significativement [26, 27]. Il a été constaté par nos résultats de simulation que la valeur optimisée du niveau d'énergie de la bande intermédiaire ( $E_i$ ) est comprise entre 0,4 et 0,8 eV au-dessous du minimum de la bande de conduction du ZnTe.



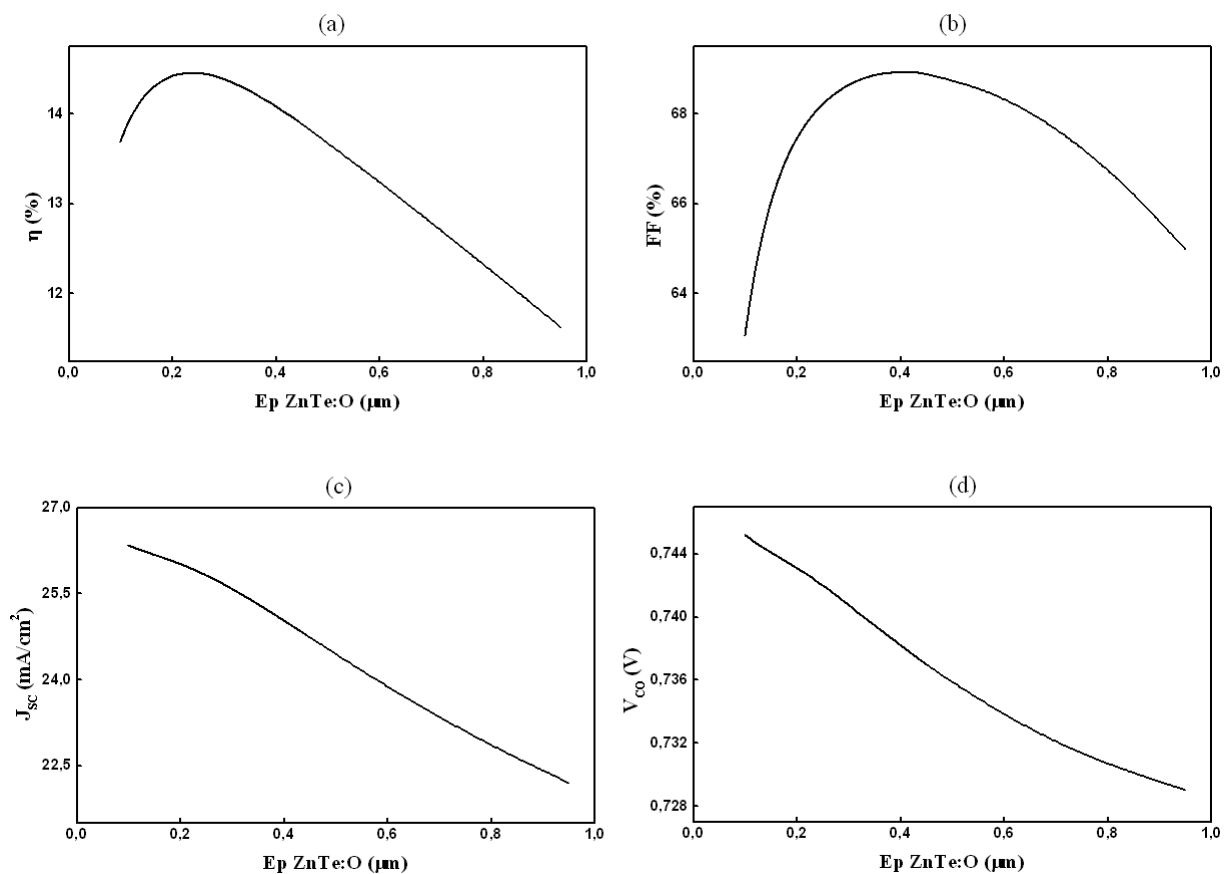
**Figure IV.15 :** Effet de la position énergétique  $E_i$  sur (a) La densité du courant de court circuit  $J_{sc}$ , la tension en circuit ouvert; (b) Le rendement de conversion  $\eta$ .

D'après la figure IV.15, la densité du courant de court-circuit  $J_{sc}$  augmente jusqu'à un palier à une valeur autour de 0.45-0.50 eV, après cette valeur le courant décroît. Le rendement de conversion  $\eta$  croit jusqu'à une valeur de la position énergétique de 0.53 eV au-dessous de

la bande de conduction  $E_c$ , après cette valeur il y a une légère décroissance. Ce qui explique une augmentation de l'absorption, et un taux de photogénération correspondant liés à la transition de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction pour compenser ceci, le même comportement a été rapporté dans les références [15, 25, 28, 29].

#### IV.3.2.7 L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur les grandeurs photovoltaïques

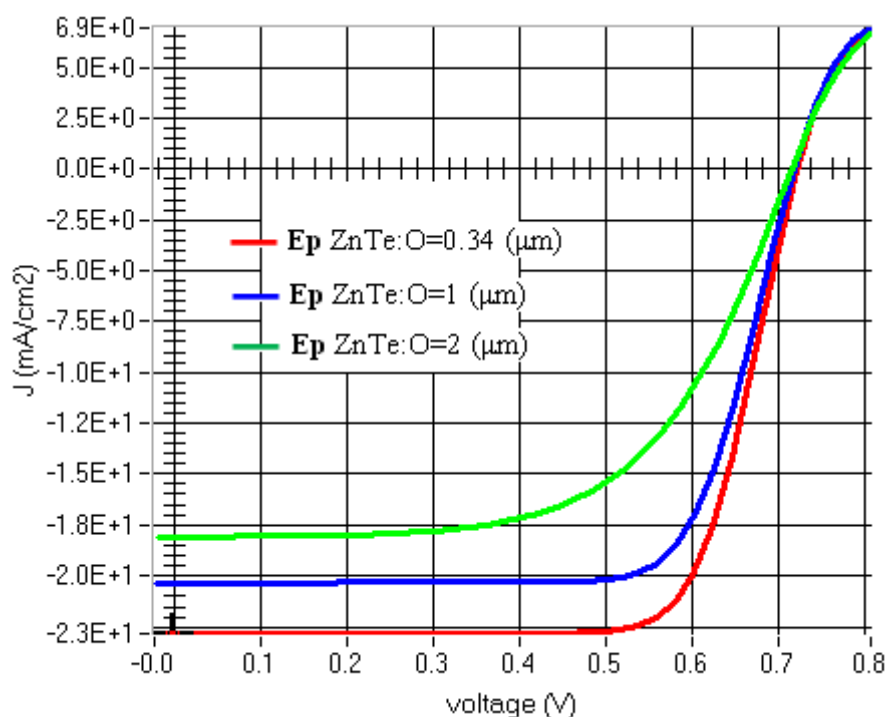
Le rendement de conversion est amélioré par la réduction de l'épaisseur de la couche p-ZnTe(O) (figure IV.16), ce qui explique une augmentation de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires dû à une amélioration de la durée de vie des porteurs minoritaires. La couche absorbante ZnTe(O) est la partie de la cellule dans laquelle les photons vont être convertis en paires électrons-trous [10]. Cependant, l'augmentation de l'épaisseur de la couche, conduit à un fort mécanisme de recombinaison non-radiative et une diminution dans le rendement de conversion.



**Figure IV.16 :** Effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur (a) Le Rendement de conversion. (b) Le facteur de forme (c) La densité du courant de court circuit (d) La tension en circuit ouvert.

### IV.3.2.8 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur la densité du courant de court circuit $J_{SC}$

Nous étudions l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O) sur la caractéristique  $J(V)$  (figure IV.17). On a intérêt d'avoir une épaisseur de la couche ZnTe(O) la plus faible possible, pour un bon photocourant et un meilleur rendement. Ceci s'explique par le fait que les porteurs minoritaires photogénérés par les courtes longueurs d'ondes, parviennent facilement à atteindre la zone de charge d'espace, par contre si l'épaisseur de la couche absorbante est importante, ces photoporteurs se recombinent avant même d'atteindre cette zone.

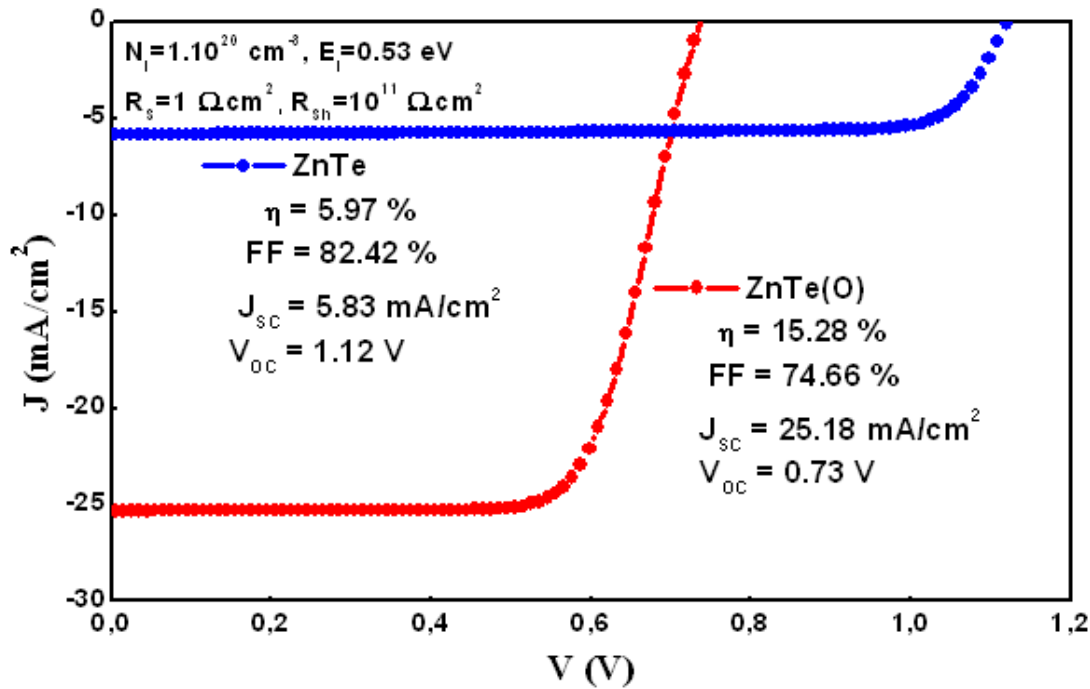


**Figure IV.17 :** Caractéristique courant-tension pour différentes épaisseur de la couche absorbante ZnTe(O).

### IV.3.2.9 Caractéristique $J(V)$ pour une structure hétérojonction ZnTe sans et avec oxygène

Après simulation et modélisation de la caractéristique  $J(V)$ , sous éclaircissement standard AM 1.5 et  $R_s = 1 \Omega \cdot \text{cm}^2$ . On peut voir clairement que la densité du courant ( $J_{SC}$ ) d'une cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O) est beaucoup plus élevé par rapport à une cellule solaire sans bande intermédiaire ZnTe, comme il est représenté sur la figure IV.18.





**Figure IV.18** : Caractéristique  $J(V)$  d'une hétérojonction  $p^+-ZnTe/p-ZnTe(O)/n^+-GaAs$  (sans et avec dopage par l'oxygène) sous l'éclairement AM 1.5.

Pour voir l'apport que peut porter la couche intermédiaire sur les propriétés électriques des cellules solaire, nous avons regroupé les paramètres de sortie dans le tableau IV.6. Le tableau IV.6 rassemble les résultats qu'on a trouvé par la simulation d'une cellule hétérojonction  $p^+-ZnTe/p-ZnTe(O)/n^+-GaAs$  et les résultats expérimentaux trouvés par W. Wang et al [15].

		$J_{sc}$ ( $mA/cm^2$ )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	$\eta$ (%)
<b>Simulation</b> (notre travail)	<b>ZnTe</b>	<b>5.83</b>	<b>1.12</b>	<b>82.42</b>	<b>5.97</b>
	<b>ZnTe:O</b>	<b>25.18</b>	<b>0.73</b>	<b>74.66</b>	<b>15.28</b>
<b>Expérimental</b> [15]	<b>ZnTe</b>	<b>1.8</b>	<b>0.45</b>	<b>45</b>	<b>0.36</b>
	<b>ZnTe:O</b>	<b>3.6</b>	<b>0.38</b>	<b>31</b>	<b>0.43</b>

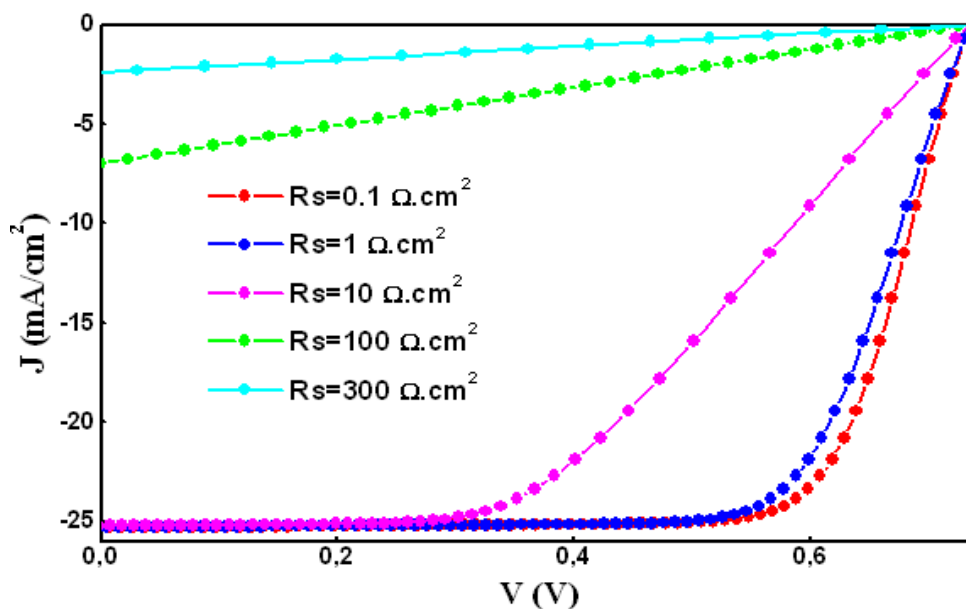
**Tableau IV.6** : Les résultats de simulation des paramètres d'une cellule solaire hétérojonction  $p^+-ZnTe/p-ZnTe(O)/n^+-GaAs$  en comparaison avec les résultats expérimentaux [15].

Le tracé de la variation de la densité de courant en fonction de la tension d'une cellule PV sous illumination (figure IV.18) permet d'accéder à bon nombre de paramètres physiques caractéristiques du composant.

#### IV.3.2.10 L'effet de la résistance série $R_s$ sur la densité du courant de court circuit $J_{SC}$

Dans notre travail on a étudié l'influence de la résistance série sur la performance de la cellule. Les résultats de simulation montrent que les effets parasites tels que la résistance série a un effet significatif sur la caractéristique  $J(V)$  de la cellule (figure IV.19).

Nous pouvons facilement constater que la résistance série a un effet significatif. Elle se dégrade principalement la densité du courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ), elle doit être très faible afin d'obtenir une forte augmentation de la densité du courant de court-circuit ( $J_{SC}$ ). Cependant, la résistance shunt dégrade principalement la tension de circuit ouvert ( $V_{OC}$ ), elle doit être très grande, afin d'éviter les courants de fuite. Par conséquent, les effets de la résistance série et de la résistance shunt dans les cellules solaires peuvent dégrader le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion ( $\eta$ ) significativement. La figure indique également que la perte du rendement de conversion est négligeable quand  $R_s$  est plus moins de  $1\Omega \cdot \text{cm}^2$  et  $R_{Sh}$  est plus que  $1\text{k}\Omega \cdot \text{cm}^2$  [11].



**Figure IV.19 :** Caractéristique courant-tension pour différentes Résistance séries  $R_s$  avec  $R_{Sh}=10^{11} \Omega \cdot \text{cm}^2$ .

Les facteurs de pertes y compris la résistance série et la résistance shunt vont consommer une partie du courant photogénéré et donc affecter le facteur de forme. La

résistance série est due à la résistivité du matériau, à la résistance de contact entre le matériau et les connexions métalliques et à la résistance des lignes de connexions. La résistance parallèle quant à elle représente les courants de fuite dans la cellule, les fuites par les bords de la cellule photovoltaïque, les fuites locales au niveau de la jonction (présence de fissures et dislocations) [30]. Plus l'intensité lumineuse envoyée vers la cellule est élevée, plus ces pertes résistives augmentent. À des intensités lumineuses trop fortes, elles deviennent même tellement importantes qu'elles entraînent la diminution du rendement de conversion de la cellule.

#### IV.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les performances des cellules solaires à bande intermédiaires (IBSC)  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) et  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.

Dans cette partie nous avons simulé la caractéristique  $J(V)$  sous les conditions AM1.5G d'éclairement solaire et on a déduit les paramètres de sortie tels que : la densité du courant de court circuit  $J_{SC}$ , le rendement de conversion  $\eta$ , la tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  et le facteur de forme FF.

L'analyse de l'ensemble de nos résultats montre que la bande intermédiaire joue un rôle très important sur les performances de la cellule solaire à base ZnTe(O). Nous avons constaté que la densité du courant de court circuit augmente de 100%, une amélioration dans le rendement de conversion de 30% approximativement, et une dégradation dans la tension de circuit ouvert et le facteur de forme en comparaison à une cellule solaire sans bande intermédiaire. Ces performances sont acquises lorsqu'on a choisi une densité d'oxygène plus que  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , et une valeur optimale de la position énergétique de la bande intermédiaire (IB) dans la bande interdite de plus que 0.45 eV au dessous de la bande conduction  $E_c$ . Les résultats de notre simulation concordent avec ceux trouvés dans la littérature.

---

**Bibliographie**

- [1] A. M. ferouani, M. R. Merad boudia, K. Rahmoun, *Rev. sci. fond. app*, 1, 56-65, (2011).
- [2] A. Filsan, Thèse de doctorat de l'Université de Paul Verlainemetz (2011).
- [3] A. Benyoucef, Thèse de doctorat de Technologie de Belfort-Monbeliard et de l'Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, Algérie (2008).
- [4] D. Diouf, Thèse de doctorat de l'Université Pari-Sud 11 (2010).
- [5] A. S. Lin, W. Wang, et J. D. Phillips, *J. Appl. Phys.* 105, 064512 (2009).
- [6] A. Luque, A. Martí, N. López, E. Antolín, E. Cánovas, C. Stanley, C. Farmer, L. J. Caballero, L. Cuadra, and J. L. Balenzategui, *J Appl. Phys. Lett.* 87, 083505 (2005).
- [7] A. Luque, A. Martí, *J Phys Rev Lett*, S0031-9007 , 03454-6 (1997).
- [8] W. Wang, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA (2010).
- [9] A. Marti, E. Antolin, C. R. Stanley, C. D. Farmer, N. Lopez, P. Diaz, E. Canovas, P. G. Linares, et A. Luque, *J Phys Rev Lett*, 97, 247701 (2006).
- [10] A. Luque, A. Mellor, I. Ramiro, E. Antolín, I. Tobías, A. Martí, *J Sol Ener Mat & Sol Cel* 115, 138-144 (2013).
- [11] A. Luque, A. Marti, E. Antolin, P. Garcia-Linares, *J Sol Enr Mat & Sol Cel* 94, 2032-2035, (2010).
- [12] T. Tanaka, K. M. Yu, A. X. Levander, O. D. Dubon, L. A. Reichertz, N. Lopez, M. Nishio, et W. Walukiewicz, *Jpn. J. Appl. Phys.* 50, 082304 (2011).
- [13] A. Marti, E. Antolin, P. G. Linares, and A. Luque, *J. Mater. Chem.* 22, 22832, (2012).
- [14] A. Marti, N. Lopez, E. Antolin, E. Canovas, C. Stanley, C. Farmer, L. Cuadra, and A. Luque, *J Thin Sol Fil* 511–512, 638, (2006).
- [15] W. Wang, A S. Lin, et J. D. Phillips, *J. Appl. Phys. Lett.* 95, 011103, (2009).
- [16] A. Martí, E. Antolín, E. Cánovas, N. López, P. G. Linares, A. Luque, C. R. Stanley, and C. D. Farmer. *J Thin Solid Films* 516, 6716, (2008).
- [17] C. Tablero, *J Comput Mat. Sci.* 49, 368 (2010).
- [18] C. Ling, L. Q. Zhou, D. Banerjee, and H. Jia, *J. Alloys Compd.* 584, 289 (2014).
- [19] T. Tanaka, Y. Nagao, T. Mochinaga, K. Saito, Q. Guo, M. Nishioa, K. M. Yu, and W. Walukiewicz, *J. Crystal. Growth* 378, 259, (2013).
- [20] Y. Shoji, K. Akimoto, and Y. Okada, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 46, 024002, (2013).
- [21] H. Mathieu and H. Fanet, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6e ed., Dunod, (2009).

- 
- [22] A. S. Lin, Thèse de doctorat de l'Université de Michigan, USA (2010).
- [23] N. Amina, K. Sopian, M. Konagai, *Sol Enr Mat & Sol Cel* 91, 1202–1208, (2007).
- [24] S. Boukli Hacène, Thèse de doctorat de l'Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, Algérie (2014).
- [25] A. Luque and A. Marti, *Adv. Mater.* 22, 160, (2010).
- [26] T. Tanaka, M. Miyabara, Y. Nagao, K. Saito, Q. Guo, et al., *Appl. Phys. Lett.* 102, 052111, (2013).
- [27] T. Tanaka, S. Kusaba, T. Mochinaga, K. Saito, Q. Guo, et al., *Appl. Phys. Lett.* 100, 011905, (2012).
- [28] C. Chen, J. Zheng, K. Nguy, F. Naab, and J. D. Phillips, *J. Elect. Mat.* s11664-013-2950-z, (2014).
- [29] S. W. Pak et al, *Current Applied Physics* 14, S49, (2014).
- [30] S. Ghennou, Mémoire de Magister de l'Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen, Algérie.

## *Conclusion Générale*

Au cours de la préparation de cette thèse, des recherches ont été réalisées sur deux types de cellules solaires à bande intermédiaire. Afin de définir et comprendre les différents phénomènes physiques régissant le fonctionnement de ce type de cellules. Nous avons réalisé une simulation numérique par le biais du logiciel SCAPS qui est basé sur la résolution des équations de base des semiconducteurs (l'équation de Poisson et les deux équations de continuité) d'une cellule solaire homojonction à bande intermédiaire à base de  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O) et d'une cellule solaire hétérojonction à bande intermédiaire à base de  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs.

Notre étude sur l'effet de la bande intermédiaire (ZnTe(O)) dans les cellules solaires de ZnTe, a conduit aux conclusions principales suivantes:

- Concernant l'influence du niveau d'énergie de la bande intermédiaire ( $E_i$ ) dans la bande interdite de la couche absorbante p-ZnTe sur les caractéristiques de la cellule solaire homojonction  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O), nous avons constaté que la valeur optimale de la position énergétique de la bande intermédiaire est nécessaire pour obtenir une efficacité maximale de la cellule solaire. Cette valeur est de l'ordre de 0,51 eV au-dessous du minimum de la bande de conduction.
- Les résultats de la simulation montrent que la concentration de dopage en oxygène ( $N_i$ ) doit être supérieure à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  pour avoir une amélioration du rendement de conversion, et une augmentation de la densité du courant de court-circuit de plus de 100 % par rapport à une cellule solaire homojonction sans bande intermédiaire à base de  $n^+$ -ZnTe/p-ZnTe avec les mêmes paramètres physiques et technologiques.
- A partir des résultats de la simulation, on a montré qu'en réduisant l'épaisseur d'environ 0,34  $\mu\text{m}$  et 0,08  $\mu\text{m}$  de la couche absorbante p-ZnTe(O) et de la couche émettrice  $p^+$ -ZnTe respectivement dans la structure de la cellule solaire hétérojonction  $p^+$ -ZnTe/p-ZnTe(O)/ $n^+$ -GaAs optimisée, on a une amélioration de la densité du courant de court-circuit ( $J_{sc}$ ) et du rendement de conversion par rapport à la cellule solaire classique à homojonction à base de ZnTe(O), dont l'épaisseur de la couche absorbante et émettrice étaient de l'ordre de 1  $\mu\text{m}$  et 0,3  $\mu\text{m}$ , respectivement. La réduction de l'épaisseur de la couche absorbante et la couche émettrice constituant la voie privilégiée pour diminuer le coût des cellules solaires à bande intermédiaire.

- Les cellules solaire à base de ZnTe(O) présentent une large réponse spectrale par rapport à une cellule solaire sans bande intermédiaire ZnTe en raison de trois transitions optiques (de la bande de valence à la bande de conduction, de la bande de valence à la bande intermédiaire, et de la bande intermédiaire à la bande de conduction) et d'une photo-excitation en dessous de l'énergie de bande interdite, résultant approximativement un double en courant de court-circuit, tout en subissant une diminution de presque de 15% de la tension en circuit ouvert.

En conclusion, la cellule solaire à bande intermédiaire ZnTe(O) pourrait être considérée comme le meilleur candidat pour le développement de dispositifs photovoltaïques à haut rendement et à faible coût.

Au regard des résultats obtenus dans cette thèse, et comme perspectives, nous suggérons d'incorporer d'autres niveaux d'énergies et voir leur influence sur les performances de la cellule solaire. Il est aussi important d'élargir cette recherche sur les cellules solaires à bandes intermédiaires (IBSC) vers d'autres composés, comme par exemple, les ternaires basés sur les III-V tel que l'arséniure de gallium (GaAs).

## Résumé

La possibilité d'améliorer le rendement de conversion d'une cellule solaire monocristallin par l'absorption séquentielle de photons a une longue histoire. La cellule la plus efficace est la cellule solaire à bande intermédiaire (IBSC), où ce type de cellules est caractérisé par l'absorption d'une grande quantité de photons (rayons lumineux) par trois bandes d'énergies: la bande de conduction (CB), la bande de valence (VB), et la bande intermédiaire (IB). Contrairement aux cellules solaires conventionnelles (CB, VB). Les cellules solaires à bande intermédiaire peuvent absorber trois photons simultanément qui permet la transition des électrons de la bande de valence (VB) à la bande de conduction (CB), de la bande de valence (VB) à la bande intermédiaire (IB), et de la bande intermédiaire (IB) à la bande de conduction (CB). Les cellules solaire à bande intermédiaire (IBSC) caractérisées par leur efficacité en absorbant des photons de basse énergies a cause de la présence d'une couche intermédiaire (IB) à l'intérieure de la bande interdite ( $E_g$ ), contrairement aux cellules solaires traditionnelles (VB, CB).

Le but de cette étude est de montrer que les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC), telle que ( $ZnTe(O)$ ) ont une efficacité considérable (rendement de conversion, courant de court circuit) lorsque la concentration en oxygène de la bande intermédiaire (IB) est supérieure à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , et le niveau d'énergie de la bande intermédiaire être dans l'intervalle (0,4-0,8 eV) au bas du minimum de la bande conduction (CB). Les résultats ont montré que lorsqu'on réduit l'épaisseur des couches ( $P^+-ZnTe$ ,  $P-ZnTe(O)$ ), les caractéristiques des cellules solaires à bande intermédiaires sont améliorées en comparaison avec des résultats expérimentaux.

**Mots clé :** Simulation des cellules solaires à bande intermédiaire (IBSC),  $ZnTeO$ , SCAPS.

### المخلص :

إمكانية زيادة فعالية الخلية الشمسية أحادية الوصلة عن طريق الإمتصاص المتتابع للفوتونات لها تاريخ طويل. الخلية الأكثر فعالية و هي الخلية الشمسية ذات الطبقة الوسيطة (IBSC), حيث أن هذا النوع من الخلايا يتميز بإمتصاصه لأكبر كمية من الفوتونات (الأشعة الضوئية) و هذا عن طريق ثلاث مستويات: حزمة التوصيل (CB), حزمة التكافؤ (VB), و الطبقة الوسيطة (IB). عكس الخلايا الشمسية التقليدية ذات الحزمتين (CB, VB). الخلايا الشمسية ذات الطبقة الوسيطة بإمكانها إمتصاص ثلاث فوتونات في آن واحد و هذا عبر تنقل الإلكترونات التي إكتسبت طاقة من الفوتونات الممتصة من مستوى لآخر ( من حزمة التكافؤ VB إلى حزمة التوصيل CB, من حزمة التكافؤ VB إلى الطبقة الوسيطة IB, و من الطبقة الوسيطة IB إلى حزمة التوصيل). الخلية الشمسية ذات الطبقة الوسيطة (IBSC) تمتاز بفعاليتها عن الخلية الشمسية أحادية الفجوة (CB, VB) بإمتصاصها للفوتونات ضعيفة الطاقة، و خاصيتها هي أنها تتميز عن الخلايا الشمسية بوجود الطبقة الوسيطة (IB) في وسط فجوة الحزمة ( $E_g$ ), بين حزمة التوصيل (CB) و حزمة التكافؤ (VB).

الهدف من هذه الدراسة هو إظهار أن الخلايا الشمسية ذات الطبقة الوسيطة (IBSC) المكونة من الخليط الثلاثي ( $ZnTe(O)$ ) لها فعالية كبيرة (مردودية) عندما تكون الطبقة الوسيطة (IB) المكونة من الأكسجين بتركيز يفوق  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , وبمستوى طاقي للطبقة الوسيطة في المجال (0,4-0,8 eV) أسفل القيمة الدنيا لحزمة التوصيل ( $E_c$ ), و أظهرت النتائج أن خصائص الخلية الشمسية تحسنت عندما قلنا من سمك الطبقتين ( $P^+-ZnTe$ ,  $P-ZnTe(O)$ ) و هذا مقارنة بالخلايا الشمسية ذات الطبقة الوسيطة التجريبية.

**الكلمات المفتاحية :** محاكاة الخلية الشمسية ذات الطبقة الوسيطة (IBSC), ( $ZnTeO$ ), SCAPS.