

REPUBLIQUE DU CAMEROUN

Paix-Travail-Patrie

UNIVERSITE DE YAOUNDE I

CENTRE DE RECHERCHE ET DE FORMATION
DOCTORALE EN SCIENCES TECHNOLOGIE ET
GEOSCIENCES

UNITE DE RECHERCHE ET DE FORMATION
DOCTORALE PHYSIQUE ET
APPLICATIONS

B.P. 812 Yaoundé
Email: crfd_stg@uy1.uninet.cm



REPUBLIC OF CAMEROON

Peace-Work-Fatherland

THE UNIVERSITY OF YAOUNDE I

POSTGRADUATE SCHOOL OF
SCIENCE, TECHNOLOGY AND
GEOSCIENCES

RESEARCH AND POSTGRADUATE
TRAINING UNIT FOR PHYSICS AND
APPLICATIONS

P.O. Box : 812 Yaoundé
Email: crfd_stg@uy1.uninet.cm

LABORATOIRE DE MECANIQUE, MATERIAUX ET STRUCTURES

Mechanical, Materials and Structures Laboratory

Optimisation numérique, par SCAPS-1D, des
paramètres électriques d'une cellule solaire à
base du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)

RESUME ETENDU

Thèse soumise en vue de l'obtention du Doctorat/ PhD de Physique

Option : Sciences des Matériaux

Par :

**ABOMO ABEGA François Xavier
Matricule : 14P2076**

Master en Physique

Dirigée par :

NDJAKA Jean-Marie Bienvenu

Professeur, Université de Yaoundé I

Année 2022





DÉPARTEMENT DE PHYSIQUE
DEPARTMENT OF PHYSICS

ATTESTATION DE CORRECTION DE LA THÈSE DE
DOCTORAT/PhD

Nous soussignés, Professeur ZEKENG Serge Sylvain et Professeur BIYA MOTTO Frédéric, respectivement Président et Examineur du jury de la Thèse de Doctorat/PhD de Monsieur ABOMO ABEGA François Xavier, Matricule 14P2076, préparée sous la supervision des Professeurs NDJAKA Jean-Marie Bienvenu intitulée : « Optimisation numérique, par SCAPS -1D, des paramètres électriques d'une cellule solaire a base du silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) », soutenue le lundi, 05 Décembre, 2022, en vue de l'obtention du grade de Docteur/PhD en Physique, Spécialité Mécanique, Matériaux et Structures, Option Sciences des Matériaux, attestons que toutes les corrections demandées par le jury de soutenance ont été effectuées.

En foi de quoi, la présente attestation lui est délivrée pour servir et valoir ce que de droit.

Fait à Yaoundé le 13 JAN 2023

Examineur

Pr BIYA MOTTO Frédéric

Président du jury

Pr ZEKENG Serge Sylvain



Visa du Chef de Département de Physique

Pr NDJAKA Jean-Marie Bienvenu

Dédicace

À ma famille

Remerciements

La rédaction de ma thèse de doctorat PhD m'a permis d'acquérir davantage une expérience formatrice sur la persévérance dans le travail de recherche. Cette recherche n'aurait pu être réalisée sans l'encadrement et l'accompagnement des personnes ci-après :

- Le Professeur **SOSSO Aurélien Maurice Recteur de l'Université de Yaoundé 1** pour son accord qui a permis une chance à ce travail d'être réalisé et défendu.
- Le Professeur **TCHOUANKEU Jean Claude Doyen de la Faculté des Sciences**, dont le soutien et les conseils dès la première étape de la recherche m'ont permis de développer une compréhension du sujet.
- Le Professeur **PEGNYEMB Dieudonné Coordonnateur du Centre de Recherche et de Formation Doctorale** en Sciences, Technologie et Géosciences (CRFD/ STG), pour la diligence des procédures administratives liées aux thèses.
- Le Professeur **NDJAKA Jean Marie Bienvenu Chef de Département de Physique et Directeur de cette thèse** pour son expertise et sa rigueur scientifique.
- Le Docteur **TEYOU NGOUPO Ariel** pour sa disponibilité, ses conseils qui m'ont permis d'améliorer mes connaissances dans la recherche et me développer sur le plan académique et personnel.
- Les membres du jury pour le grand honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de juger ce travail.
- Les enseignants du Département de Physique de l'Université de Yaoundé I pour la qualité des enseignements y reçus.

Table des matières

Dédicace.....	i
Remerciements	ii
Table des matières	iii
Liste des figures	vii
Liste des tableaux	x
Liste des notations et glossaire des acronymes	xi
RÉSUMÉ.....	xv
ABSTRACT	xvi
INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE 1 : ETAT DE L'ART DE LA CELLULE SOLAIRE À BASE DE a-Si:H... 4	
Introduction	4
1.1. Le rayonnement solaire.....	4
1.2. L'effet photovoltaïque.....	6
1.2.1. Historique	6
1.2.2. Principe de l'effet photovoltaïque	7
1.3. Les filières photovoltaïques à couches minces	9
1.3.1. La filière au silicium amorphe (a-Si)	10
1.3.2. La filière au tellure de cadmium (CdTe).....	10
1.3.3. La filière chalcopyrite (CIGS).....	11
1.4. La photopile à base de a-Si : H	11
1.4.1. La structure.....	11
1.4.2. Principe de fonctionnement.....	13
1.5. Rôle des composants de la cellule.....	14
1.5.1. Oxydes Transparents conducteurs.....	14
1.5.2. La couche p (p-a-Si:H).....	16
1.5.3. La couche a-Si:H(n)	17
1.5.4. Le contact arrière.....	17
1.6. Caractéristique et Propriétés du a-Si.....	18
1.6.1. Description générale du matériau.....	18

1.6.2. Défauts intrinsèques	19
1.6.2.1. Défauts de coordination	19
1.6.2.2. Concepts d'énergie de corrélation	20
1.6.2.3. Densité d'états	22
1.6.2.4. Rôle de l'hydrogène.....	23
1.6.3. Propriétés électroniques	25
1.6.4. Propriétés optiques	26
1.7. Pertes dans la cellule solaire à base de a-Si:H	26
1.8. Méthodes de dépôt du a-Si:H.....	27
1.9. Dégradation induite dans les cellules à base du silicium amorphe	30
1.9.1. Dégradation induite par la lumière	30
1.9.2. Dégradation induite par courant	31
1.10. Gestion de la lumière	31
CONCLUSION	32
CHAPITRE 2 : NOTIONS DE BASE DES SEMICONDUCTEURS ET	
MÉTHODOLOGIE NUMÉRIQUE	33
2.1. Les semiconducteurs	33
2.1.1. Généralités sur les semiconducteurs	33
2.1.1.1. Quelques propriétés fondamentales des semiconducteurs.....	34
2.1.1.2. Les semiconducteurs composés	36
2.1.2. Densité d'états, probabilité de présence et concentration des porteurs dans les semiconducteurs non dégénérés	37
2.1.2.1. Densité d'états	37
2.1.2.2. Probabilité de présence	38
2.1.2.3. Concentration des porteurs	39
2.1.3. Semiconducteurs intrinsèques	41
2.1.3.1. Densité intrinsèque des porteurs de charge	41
2.1.3.2. Position du niveau de <i>Fermi</i> intrinsèque	41
2.1.4. Semiconducteurs extrinsèques	42
2.1.5. Semiconducteur hors d'équilibre	44
2.2. Génération-recombinaison et durée de vie des porteurs	44

2.2.1. Etats volumiques	44
2.2.1.1. Recombinaison directe électron-trou	45
2.2.1.2. Recombinaison assistée par des centres de recombinaison	47
2.2.2. Etats de surface et d'interface	49
2.2.2.1. Etats de surface	49
2.2.2.2. Etats d'interface	50
2.3.2 Equation de continuité.....	53
2.4. Logiciel SCAPS-1D.....	54
2.4.1. Présentation	54
2.4.2. Environnement de SCAPS-1D	55
2.5. Caractérisation d'une cellule solaire	57
2.5.1. Caractéristique courant-tension (J-V)	57
2.5.1.1. Densité de courant dans une cellule solaire.....	57
2.5.1.2. Paramètres de performance d'une cellule solaire	59
2.6. Construction du modèle opérationnel de notre cellule solaire à base de a-Si:H.....	62
2.6.1. Choix des paramètres d'entrée	62
2.6.1.1. Paramètres des contacts	62
2.6.1.2. Paramètres des couches	63
2.6.1.3. Validation du modèle.....	66
CHAPITRE 3 : RÉSULTATS ET DISCUSSION	69
Introduction	69
3.1 Optimisation d'une cellule solaire ultrafine à base de silicium amorphe hydrogéné .	69
3.1.2 Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque	70
3.1.2 Influence de la variation de la densité des défauts dans la couche intrinsèque....	74
3.1.3 Effet de la densité des défauts d'interface entre la couche tampon /absorbeur....	77
3.1.4 Proposition d'une cellule solaire ultramince optimisée	80
3.2 Etude de l'impact des autres couches sur les performances de la cellule solaire optimisée.	81
3.2.1 Choix d'un réflecteur arrière (BRL).....	82
3.2.2 Effet de l'épaisseur de la couche fenêtre.....	86

3.2.3 Effet de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge	91
3.2.3.1 Influence de l'épaisseur de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge	91
3.2.3.2 Impact de la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge	93
3.2.4 Effet de la couche n-(a-Si:H) et durée de vie des porteurs de charge	95
3.2.4.1 Impact de l'épaisseur de la couche n et de la durée de vie des porteurs de charge.....	96
3.2.4.2 Influence de la densité de donneurs de la couche n et de la durée de vie des porteurs de charge.....	97
3.2.5 Influence du ZnO BRL.....	99
3.2.6 Effet de la couche tampon de type n	100
3.2.7 Effet du travail d'extraction du contact métallique arrière	104
3.2.8 Influence de la température sur la cellule solaire optimisée	106
Conclusion	108
CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES.....	109
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES.....	112
PUBLICATION.....	123

Liste des figures

Figure 1.1 Schéma indiquant les Air Mass en fonction de la zone spatiale	5
Figure 1.2 : Spectre solaire à la surface de l’atmosphère Terrestre (AM0) et à la surface du sol (AM1.5G et AM1.5D)	5
Figure 1.3 : Schéma descriptif du principe photovoltaïque	8
Figure 1.4 : Structures typiques des cellules solaires à base de a-Si :H	12
Figure 1.5 :Schéma explicatif du fonctionnement d’une cellule photovoltaïque.....	14
Figure 1.6 : Transmission optique de différents contacts avant et couches tampons.....	15
Figure 1.7 : Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d’hydrogène en blanc	19
Figure 1.8 : Illustration de la notion de défaut dans c-Si (a) et dans a-Si (b).....	20
Figure 1.9 : Représentation des niveaux énergétiques E_{d1} et E_{d2} dans les cas d’énergie de corrélation positive et négative. Il est également indiqué l’état de charge lorsque le niveau de Fermi se trouve dans une des 3 zones énergétiques délimitées par E_{d1} et E_{d2}	21
Figure 1.10 : Représentation schématique de l’orbitale moléculaire du silicium et de la densité d’états résultante pour a-Si:H (traits pleins) en comparaison avec la densité d’états du c-Si (traits pointillés).....	22
Figure 1.11 : Équilibre de passivation des liaisons pendantes des atomes de silicium par l’hydrogène dans le a-Si:H.....	23
Figure 1.12 : Équilibre de rupture des liaisons faibles $Si-Si$ par l’hydrogène dans le a-Si:H...	24
Figure 1.13 Variation expérimentale de la conductivité à température ambiante, d’échantillons de a-Si:H dopés n ou p en fonction des ratios débits gaz dopants / débit de silane. Les matériaux obtenus pour les faibles débits de B_2H_6 sont de type compensé, terme inspiré par la continuité des courbes entre les domaines PH_3 et B_2H_6	25
Figure 1.14 Types de pertes dans une cellule solaire	26
Figure 1.15 : Méthodes générales de dépôt de silicium en couches minces.	28
Figure 1.16 : Système de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma.....	29
Figure 2.1 : Mécanisme de conduction des trous	35
Figure 2.2 : Schéma de la structure de bandes	36
Figure 2.3 : Processus de recombinaison bande à bande : processus radiatif et Auger.	46
Figure 2.4 : Centres de recombinaison.....	48

Figure 2.5 : Principe de l'équation de continuité.	53
Figure 2.6 : Interface graphique principale de SCAPS-1D, version 3.3.04.	56
Figure 2.7 : Panneau de définition de la cellule solaire.....	57
Figure 2.8 : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire à jonction p-n.	58
Figure 2.9 : Représentation schématique des deux régimes du V_{CO}	61
Figure 2.10 : Structure de la cellule solaire	66
Figure 2.11: Comparaison des courbes courant-tension (J-V) pour la cellule solaire simulée (bleue) et la cellule solaire expérimentale (rouge).	67
Figure 3.1: Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque i-(a-Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{CO} , c) FF, d) η	73
Figure 3.2 : Influence de la variation de la densité de défauts de la couche intrinsèque i-(a-Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{CO} , c) FF, d) η	76
Figure 3.3 : Effet de la variation des états de l'interface couche tampon/i-(a-Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{CO} , c) FF, d) η	80
Figure 3.4: Caractéristiques J-V expérimentale, simulée et optimisée de la cellule solaire a-Si:H.	81
Figure 3.5: Diagramme schématique des cellules solaires à base de a-Si:H : (a) Cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminesces [3] ; (b) Cellule solaire à base de a-Si:H proposée pour un rendement élevé.....	82
Figure 3.6 : Effet de différents BRL sur la caractéristique J-V des cellules solaires à base de a-Si:H.	83
Figure 3.7 : Diagramme de bande interdite aux interfaces n-(a-Si:H)/BRL et BRL/Al pour la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminesces avec différents BRL.	85
Figure 3.8 : Variation des paramètres électriques en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre	89
Figure 3.9 : Courbes d'efficacités quantique en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre 90	
Figure 3.10 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charge de l'absorbeur et de l'épaisseur de la couche tampon de type p.	93
Figure 3.11 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p.	95

Figure 3.12 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de l'épaisseur de la couche n-(a-Si:H).	97
Figure 3.13 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de la densité des donneurs de la couche n-(a-Si:H)	99
Figure 3.14 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la concentration des donneurs et de l'épaisseur du réflecteur arrière ZnO.	100
Figure 3.15 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la concentration des donneurs et de l'épaisseur de la couche tampon de type n. .	102
Figure 3.16: Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire à couche ultramince à base de a-Si:H : a) sans couche tampon n ; b) avec couche tampon n.	103
Figure 3.17: Paramètres électriques normalisés de la cellule solaire à couche mince à base de a-Si:H en fonction de la fonction du travail d extraction des contacts métalliques arrières	105
Figure 3.18: Dépendance de la température de fonctionnement des paramètres électriques normalisés de la cellule solaire à base de a-Si:H.	107

Liste des tableaux

Tableau 1 : Résumé des conditions de dépôt pour toutes les couches OTC.	16
Tableau 2.1 : Composés binaires de formule $AXB_8 - X$	37
Tableau 2.2 : Paramètres d'entrée de SCAPS-1D pour différentes structures de cellules solaires à base de a-Si :H.....	64
Tableau 2.4 : Propriétés de l'interface couche tampon/absorbeur	67
Tableau 3.1 : Comparaison des paramètres électriques des structures de cellules solaires expérimentale et optimisée.	81
Tableau 3.2 : Comparaison des paramètres électriques de la cellule solaire avec différents BRL.	83
Tableau 3.3 : Les valeurs de ΔE_C , ΔE_V , et Φ_b pour différentes structures de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces.....	85
Tableau 3.4 : Comparaison des paramètres électriques des deux configurations de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces.	104
Tableau 3.5 : Performance de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces avec différents contacts métalliques arrière.....	105

Liste des notations et glossaire des acronymes

a-Si : silicium amorphe

AM : air mass

As₂Te₃ : tellurure d'arsenic

BRL : back reflector layer

CBD : chemical bain deposition (dépôt chimique en solution)

CdCl₂ : chlorure de cadmium

CdS : sulfure de cadmium

CdTe : tellurure de cadmium

CdS:O : sulfure de cadmium oxygéné

CH₄ : méthane

CIS : cuivre-indium-sélénium

CIGS : cuivre-indium-galium-sélénium

CO₂ : dioxyde de carbone

CSS : close-space sublimation (sublimation sous vide)

CSVT : close spaced vapor transport technique (technique de transport de vapeur sous vide)

Cu₂Te : tellurure de cuivre

E : niveau d'énergie

E_C : niveau d'énergie minimale de la bande de conduction

E_F : niveau de Fermi

$E_{F,i}$: niveau de Fermi intrinsèque

$E_{F,n}$: niveau de Fermi des électrons

$E_{F,p}$: niveau de Fermi des trous

E_t : niveau d'énergie des pièges

E_V : niveau d'énergie maximale de la bande de valence

GES : gaz à effet de serre

HVE : high vacuum evaporation (évaporation sous vide poussé)

IEA : international energy agency (Agence Internationale de l'énergie)

IR : infra rouge

k : constant de Boltzmann

L_n : longueur de diffusion d'un électron

MOCVD : metal organic chemical vapor deposition (dépôt en phase vapeur de produit chimique métalloorganique)

n : concentration des électrons

n_i : concentration intrinsèque des porteurs

N_a : concentration en atomes accepteurs

N_c : densité d'états équivalents dans la bande de conduction

N_d : concentration en atomes donneurs

N_t : densité d'états d'interface

N_V : densité d'états équivalents dans la bande de valence

N_2O : oxyde nitreux

NREL : National renewable energy laboratory (Laboratoire national sur les énergies renouvelables)

OECD : Organization for Economic Co-operation and Development (Organisation de coopération et de développement économiques)

ONU : organisation des nations unies

OTC : oxyde transparent conducteur

p : concentration des trous

p⁺-CdTe : tellurure de cadmium sur-dopé

PV : photovoltaïque

PVD : physical vapor deposition (dépôt en phase vapeur)

R&D : recherche et développement

RF : radio fréquence

Sb₂Te₃ : tellurure d'antimoine

SCAPS-1D : solar cell capacitance simulator in 1 dimension

SnO₂ : oxyde d'étain

SRH : Shockley-Read-Hall

STC: Standard Condition

VTD : vapor transport deposition (dépôt par transport de vapeur)

ZCE : zone de charge d'espace

ZnTe : tellurure de zinc

ZTO : stannate de zinc (Zn₂SnO₄) ou zinc-étain-oxyde

µm : micromètre

g : gramme

GW : gigawatt

kWh : kilowatt heure

Mtep : méga tonne équivalent de pétrole

nm : nanomètre

ppm : partie par million

T : température

TWh : térawatt heure

Wc : watt crête

V_{CO} : tension en circuit ouvert

J_{CC} : densité de courant de court-circuit

FF : facteur de forme

x : composition atomique

λ : longueur d'onde

m_0 : masse de l'électron

η : rendement de conversion ou efficacité de conversion

ΔV_{CO} : variation de la tension en circuit ouvert

ΔT : variation de la température de fonctionnement

ΔE_C : Discontinuité de la bande de conduction

ΔE_V : Discontinuité de la bande de valence

τ_e : durée de vie de l'électron

τ_h : durée de vie du trou

R_e : taux de recombinaison

R_{ec} : coefficient de recombinaison

U : taux de transition net

G_{th} : taux de génération thermique

RÉSUMÉ

La modélisation numérique est utilisée pour confirmer les travaux expérimentaux et théoriques. Le but de ce travail est de simuler une cellule solaire à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) à couches ultraminces avec un BRL dans sa structure et de réduire les fuites de courant aux interfaces ; les résultats sont obtenus en utilisant le logiciel SCAPS-1D. Premièrement, la comparaison entre les caractéristiques J-V de la simulation et de l'expérience de la cellule solaire de structure Verre/p-(a-SiO_x:H)/couche tampon-type p/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/ITO/Al montre que ces courbes sont en accord, preuve de la validité de notre modèle de cellule solaire. D'autre part, pour explorer l'impact de certains paramètres sur les performances (J_{CC}, V_{CO}, FF et efficacité) de la cellule solaire, les investigations montrent que l'augmentation de l'épaisseur de la couche intrinsèque améliore les performances, tandis que la densité de défauts volumique de cette couche et la densité de défauts surfacique à l'interface couche tampon-type p/i-(a-Si:H), respectivement dans les plages [10^9 cm^{-3} , 10^{15} cm^{-3}] et [10^{10} cm^{-2} , $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$], n'affectent pas les performances de la cellule solaire ultrafine à base de a-Si:H. L'analyse montre également qu'avec une couche intrinsèque de 1 μm d'épaisseur, un rendement de 12,71 % (J_{CC} = 18,95 mA.cm⁻², V_{CO} = 0,973 V, FF = 68,95 %) est obtenu. Deuxièmement, les caractéristiques J-V de la cellule solaire avec différents réflecteur arrière (ITO, IGZO, ZnO, PCBM, TiO₂ et CdS:O) ont été conçues, simulées et comparées afin de proposer le meilleur réflecteur arrière pour les cellules solaires à base de a-Si:H à couches ultraminces. Ainsi, la cellule solaire avec ZnO est la plus efficace par rapport aux autres réflecteurs arrière, avec un rendement de 17,65 % sous STC. L'épaisseur étant un paramètre qui limite les performances d'une cellule solaire, l'optimisation de l'épaisseur de la couche fenêtre p-(a-SiO_x:H) montre qu'avec 5 nm, le rendement de la cellule solaire est de 18,00 % (J_{CC} = 18,93 mA/cm², V_{CO} = 1,077 V, FF = 88,32 %). De plus, en faisant varier la durée de vie des porteurs de charge de l'absorbeur, nous avons optimisé l'épaisseur et la concentration en porteurs de chaque couche du dispositif sans et avec couche tampon de type n (introduite à l'interface i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H) afin de réduire les fuites de courant à cette interface). Ces processus nous ont permis d'obtenir une efficacité maximale de 21,49% et un coefficient de température de -0,184 %/°C pour la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces de structure Verre/p-(a-SiO_x:H)/couche tampon-type p/i-(a-Si:H)/couche tampon-type n/n-(a-Si:H)/ZnO/Al. Ce travail présente une contribution à l'amélioration des performances des cellules solaires à base de a-Si:H.

Mots-clés : Silicium amorphe hydrogéné ; Couche ultramine ; Réflecteur arrière ; Couche tampon ; Simulation numérique ; SCAPS-1D.

ABSTRACT

Numerical modelling is used to confirm experimental and theoretical work. The aim of this work is to present how to simulate an ultrathin hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) based solar cells with a BRL in their architectures and to reduce current leakage at the interfaces. These results are obtained by using SCAPS-1D software. First, the comparison between the J-V characteristics of the simulation and the experiment of the ultrathin solar cell a-Si:H-based shows that these curves are in agreement; proof of the validity of our solar cell model. On the other hand, to explore the impact of certain properties on the solar cell electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF and η), investigations show that the increase of the intrinsic layer thickness improves performance, while the bulk defects density of this layer and the surface defects density of the p-buffer layer/i-(a-Si:H) interface, respectively in the ranges [10^9 cm^{-3} , 10^{15} cm^{-3}] and [10^{10} cm^{-2} , $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$], do not affect the performance of the ultrathin a-Si:H-based solar cell. Analysis also shows that with approximately 1 μm thickness of the intrinsic layer, an efficiency of 12.71% is obtained ($J_{SC} = 18.95 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.973 \text{ V}$, $FF = 68.95 \%$). Secondly, J-V characteristics of solar cell with different BRLs (ITO, IGZO, ZnO, PCBM, TiO_2 , and CdS:O) were designed, simulated, and compared to numerically investigate the best back reflector layer (BRL) for a-Si:H-based ultrathin-film solar cells. Thus, the solar cell with ZnO BRL gives the best efficiency of 17.65% under STC, compared to other BRLs. The thickness being a parameter which limits the performance of a solar cell and the optimisation of the p-(a-SiO_x:H) window layer thickness shows that with 5 nm, the a-Si:H-based solar cell efficiency is 18,00% ($J_{SC} = 18.93 \text{ mA}/\text{cm}^2$, $V_{OC} = 1.077 \text{ V}$, $FF = 88.32\%$). In addition, by varying the charge carrier lifetime of the absorber layer, we have optimized the thickness and carrier concentration of each layer of the device without and with n-type buffer layer introduced at the i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H) interface to reduce current leakage at this interface. This improvement allowed us to obtain a maximum efficiency of 21.49% and a temperature coefficient of -0.184%/°C for the a-Si:H-based ultrathin-film solar cell with n-type buffer layer and aluminium (Al) as a back metal contact. This work presents a contribution to improving the performance of a-Si:H-based solar cells.

Keywords: Hydrogenated amorphous silicon; Ultrathin-film; Back Reflector Layer; Buffer layer; Numerical simulation; SCAPS-1D.

INTRODUCTION GENERALE

L'humanité est confrontée entre autres à un triple défi, le besoin de faire face à la croissance de la population qui est plus rapide que jamais, le besoin de permettre un développement économique pour tous, en n'oubliant pas qu'il y a sur terre deux milliards d'habitants qui n'ont pas accès à des formes modernes d'énergie, et enfin les enjeux du changement climatique, notamment la nécessité de réduire l'émission des gaz à effet de serre. Pour répondre à ces préoccupations majeures, les Etats prennent peu à peu conscience de leurs responsabilités afin de donner un nouvel élan plus respectueux vis-à-vis de nos ressources et de l'environnement. La 26^e Conférence des Nations Unies sur les Changements Climatiques (COP26), qui s'est tenue du 1^{er} au 12 novembre 2021 à Glasgow en Ecosse, est l'exemple d'un processus diplomatique et économique visant à long terme à minimiser l'impact écologique sur nos sociétés. Cette conférence avait pour cahier de charge la limitation des hausses de température du globe à 1,5°C d'ici 2050, en passant obligatoirement par la neutralité carbone. Afin de diminuer l'impact de la demande croissante en énergie sur l'augmentation des émissions de carbone, les énergies renouvelables suscitent un intérêt croissant, notamment pour la production d'électricité. Elles comprennent principalement l'hydroélectricité, l'énergie éolienne, l'énergie solaire, la géothermique et la biomasse.

L'énergie photovoltaïque est l'un des acteurs majeurs de la transition écologique, aux côtés d'autres sources de production d'électricité décarbonnée pour différentes raisons, c'est une énergie renouvelable qui n'émet pas de CO₂, elle est disponible et accessible pour tous ; aujourd'hui, elle est une énergie compétitive, raison pour laquelle le prix du watt heure crête photovoltaïque ne cesse de diminuer. En Afrique, dans les pays sahéliens, tout comme au Cameroun, nous avons un important gisement solaire qui rend le secteur photovoltaïque attrayant. Dans un contexte de crise énergétique récurrente, entraînant des délestages et de faible taux d'électrification, l'énergie photovoltaïque apparaît comme la solution énergétique fiable pour le développement des pays sahéliens. C'est dans cette optique que l'Etat du Cameroun, à travers son Ministère de l'eau et de l'énergie, a initié une campagne d'électrification rurale de 1000 localités par l'énergie photovoltaïque.

La cellule solaire étant l'élément principal dans le processus de conversion photovoltaïque, celle à base du silicium, dite de première génération, domine le marché de l'énergie solaire photovoltaïque avec 94 % de parts de marché, cette technologie demeure encore coûteuse. Par conséquent, la recherche approfondie de matériaux alternatifs, pour la

conversion photovoltaïque, est devenue une nécessité [1] au cours des dernières années. Les fabricants ont toujours besoin de cellules solaires à haut rendement et à faible coût de production [2], et celles de la seconde génération (telle que le silicium amorphe) constitue une solution idoine. Les cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné [3,4,5,6,7] et de silicium cristallin [2,8,9,10,11] ont été largement étudiées ces dernières années par plusieurs groupes de chercheurs, tant sur le plan expérimental que théorique. L'étude du silicium amorphe (a-Si) présente un intérêt particulier en raison du faible coût des techniques de dépôt utilisées pour cette technologie de cellules solaires. Aujourd'hui, l'efficacité certifiée d'une cellule solaire, basée sur le silicium amorphe, est de 10,2 % avec une tension en circuit ouvert (V_{CO}) de 0,896 V, une densité de courant de court-circuit (J_{CC}) de 16,36 mA/cm² et un facteur de forme (FF) de 69,80 % [12]. Cependant, cette efficacité certifiée est encore loin de la limite d'efficacité (~31 %) pour une cellule solaire simple jonction, à couche mince à bande interdite unique, prédite par Shockley et Queisser. Les atomes d'hydrogènes ajoutés dans la structure standard du a-Si sont généralement utilisés pour minimiser le nombre de liaisons pendantes présentes dans cette structure : le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) obtenu dans ce cas est la forme améliorée du silicium amorphe. Le semiconducteur a-Si:H est un bon matériau pour les cellules solaires avec un coefficient d'absorption optique élevé ($>10^5\text{cm}^{-1}$), une bande interdite ajustable, un faible coût, une non-toxicité, une abondance, une capacité de dépôt à basse température et une technologie de traitement mature [6,7] ; c'est également un candidat favori pour la mise en œuvre de cellules solaires avancées à couches minces [13]. Les techniques de dépôt sont essentielles pour améliorer l'efficacité des cellules solaires, et il existe plusieurs méthodes de dépôt telles que le PECVD (RF, VHF) [11], le CVD à fil chaud, le photo CVD, la pulvérisation, le ECR CVD et le PBD en aval [7]. Parmi ces méthodes, le PECVD est la méthode la plus aboutie pour la fabrication de cellules solaires à base de a-Si:H à simple jonction [7].

Dans les cellules solaires à couches minces, la productivité du photocourant reste faible et les fuites de courant limitent les performances de celles-ci ; cependant, il existe différentes stratégies pour améliorer l'efficacité d'une cellule solaire, et l'une d'elle consiste à utiliser un réflecteur arrière approprié [13] pour la gestion de la lumière au niveau du contact arrière. Cette nouvelle couche, entre la couche n-a-Si:H et le contact arrière, est généralement utilisée pour réduire le taux de recombinaison des porteurs de charge au niveau de ce contact ; et cette deuxième action améliore principalement le V_{CO} . Banerjee et al. utilisent l'ITO comme réflecteur arrière dans leurs travaux expérimentaux[4]. Cependant, l'ITO utilisé contient de

l'indium qui est un matériau aux ressources limitées et à faible toxicité. De plus, il peut y avoir un problème d'approvisionnement en indium et le coût peut augmenter soudainement [14] dans la production en masse. Dans ce travail, une étude comparative de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches minces est réalisée avec différents réflecteurs arrières (BRL) en utilisant le logiciel SCAPS-1D. La simulation numérique des cellules solaires est une stratégie importante dans le domaine de la recherche pour tester et prédire l'impact de plusieurs paramètres sur les performances de la cellule solaire. À fin de réduire les fuites de courant dans notre modèle de cellule solaire à base de a-Si:H, une couches tampon de type n est introduite à l'interface i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H). Dans ce travail de recherche, nous essayons également de comprendre l'impact de la couche fenêtre et des couches tampons sur les performances de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches minces. L'objectif principal de ce travail étant de proposer une nouvelle structure de cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces sans matériaux toxiques et avec une efficacité élevée et stable. Pour ce faire, nous avons structuré nos travaux de thèse en trois (03) chapitres et une conclusion générale, comme suit :

Le Chapitre 1, intitulé **État-de-l'art de la cellule solaire à base de a-Si:H**, donnera un aperçu des recherches déjà effectuées dans ce domaine et présente les techniques de croissance utilisées pour la fabrication des cellules solaires à base de a-Si.

Le Chapitre 2 porte sur les **Notions de base des semiconducteurs et la méthodologie numérique**. Nous décrivons d'abord les équations de base d'un semiconducteur, qui sont essentielles pour la modélisation numérique ; et par la suite, nous présenterons le code SCAPS-1D utilisé pour effectuer notre étude.

Le Chapitre 3 rapporte les **Résultats et discussion** des calculs que nous avons effectués et interprétés, afin d'optimiser les performances d'une cellule solaire à base de a-Si:H.

CHAPITRE 1 : ETAT DE L'ART DE LA CELLULE SOLAIRE À BASE DE a-Si:H

Introduction

En raison de ses propriétés optiques, électroniques et chimiques, le a-Si:H peut devenir le matériau de base pour les cellules solaires à couches minces de haut rendement de conversion et à faible coût, en utilisant des techniques de fabrication robustes. Les couches a-Si:H adaptées pour la conversion d'énergie photovoltaïque ont été produites par des processus différents. Ce chapitre passe en revue, l'état des cellules solaires à base de a-Si:H, en mettant l'accent sur les propriétés qui font du semiconducteur a-Si:H, un matériau favorable à la conversion de l'énergie solaire photovoltaïque terrestre, à leur évolution historique, et à leurs méthodes de fabrication. Les problèmes de stabilité, de santé et d'environnement ne limitent pas le potentiel commercial des modules PV à base de a-Si:H.

1.1. Le rayonnement solaire

Bien que notre planète soit continuellement traversée par divers rayonnements photoniques émis par des réactions de fusion nucléaire qui ont lieu au sein des étoiles du système solaire, le soleil demeure la principale source de photons utilisables pour des applications photovoltaïques terrestres et spatiales. Du fait de sa proximité, il émet des photons de longueurs d'onde différentes, constituant le spectre solaire qui au cours de leur parcours en direction de la terre, subissent différentes interactions à l'instar des phénomènes de réflexion, de réfraction, de diffusion et d'absorption (modérée pour la partie visible du spectre solaire). Ces phénomènes sont non seulement dus aux divers gaz de l'atmosphère (ozone, vapeur d'eau et CO₂) et aux aérosols à un degré variable en fonction de la fréquence, mais également aux conditions climatiques.

Pour tenir compte des fluctuations du spectre solaire, on définit le coefficient de masse d'air (ou coefficient d'Air Mass), souvent désigné par « AM » et suivie d'un nombre, qui est le quotient de la division de la longueur (L) du trajet optique direct à travers l'atmosphère terrestre, par la longueur (L_0) du trajet verticalement vers le haut, c'est-à-dire au zénith :

$$AM = \frac{L}{L_0} \approx \frac{1}{\cos\theta} \quad (1.1)$$

θ est l'angle d'incidence du rayonnement par rapport à la normale à la surface de la terre. Les figures 1.1 et 1.2, suivantes, illustrent les différents Air Mass et les spectres correspondants.

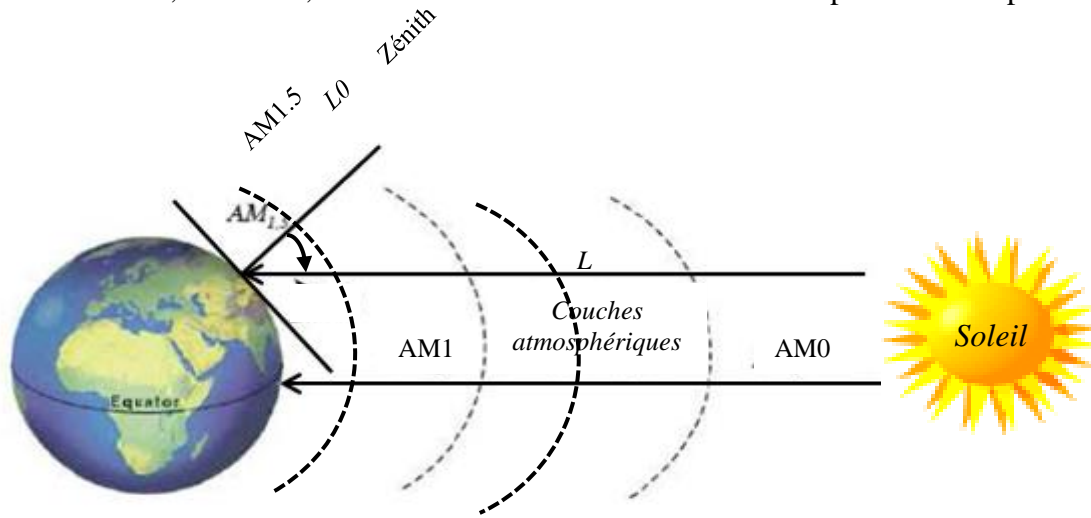


Figure 1.1 Schéma indiquant les Air Mass en fonction de la zone spatiale [15].

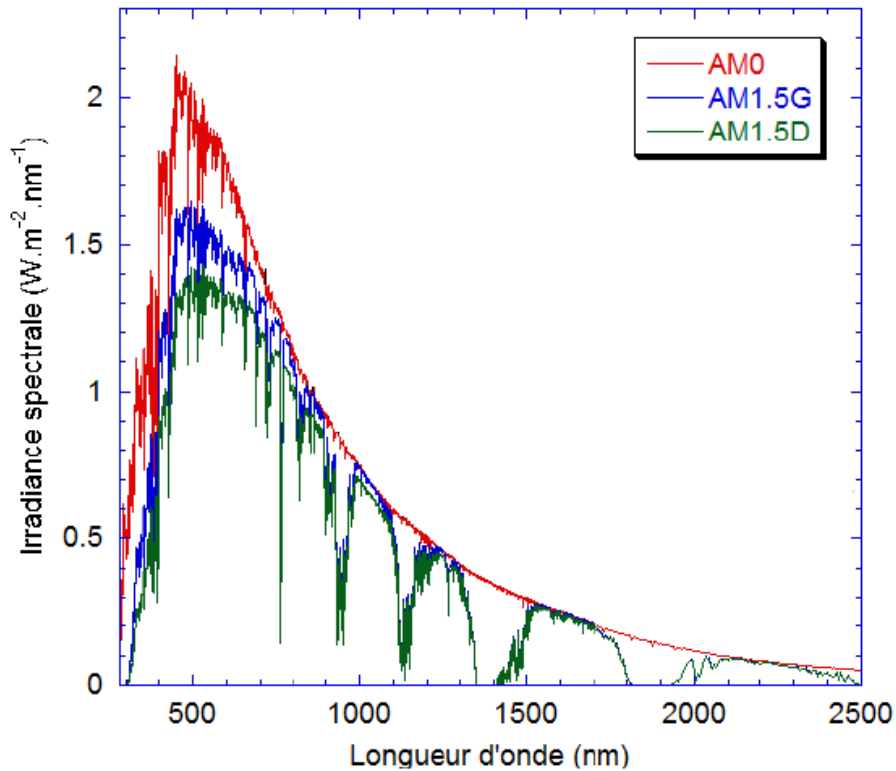


Figure 1.2 : Spectre solaire à la surface de l'atmosphère Terrestre (AM0) et à la surface du sol (AM1.5G et AM1.5D).

Le coefficient d'Air Mass est couramment utilisé pour caractériser les performances des cellules solaires dans des conditions normalisées. Par exemple ;

- Le spectre à la surface de l'atmosphère, c'est-à-dire au-delà de l'atmosphère terrestre, est approximé par celui du Corps Noir à 5800K. Il est appelé « AM0 », qui signifie « zéro atmosphère ». Il permet de caractériser les cellules solaires pour les applications spatiales et en l'occurrence les satellites de communication et les engins spatiaux.
- Le spectre à la surface de la mer, estimé directement à partir du soleil au zénith, est nommé « AM1 », qui signifie « une atmosphère ». Ce rayonnement arrivant normalement à la surface de la terre, sous une incidence de 0° , permet d'estimer la performance des cellules solaires dans les régions équatoriales et tropicales.
- Le spectre « AM1.5 », d'intensité $1000W.m^{-2}$, recueilli à la surface de la terre est presque une norme universelle permettant de tester et d'évaluer les cellules ou les modules solaires terrestres, y compris ceux utilisés dans les systèmes de concentration. Il correspond à une incidence de 45° . On définit également le spectre « AM1.5G » qui tient compte des radiations directes et diffuses, ainsi que le spectre « AM1.5D » qui se limite à la radiation directe provenant du soleil.

1.2. L'effet photovoltaïque

1.2.1. Historique

L'effet photovoltaïque est découvert pour la première fois en 1838 par le physicien français Alexandre Edmond Becquerel [16]. Il observe lors d'une expérience, que le courant produit par une batterie électrolytique, avec des électrodes de platine, augmentait lorsque celle-ci était exposée au soleil. En 1873, l'ingénieur électricien Anglais Willoughby Smith découvre l'effet photovoltaïque dans les solides et quelques années plus tard, en 1877, le professeur de philosophie naturelle William Grylls Adams et son élève Richard Evans Day produisent de l'électricité en exposant le sélénium aux rayons solaires. C'était la première cellule photovoltaïque. Cependant, l'explication scientifique de l'effet photovoltaïque, pour les physiciens de cette époque, fut énigmatique, car ils n'arrivaient pas à comprendre comment un rayonnement pouvait interagir avec une particule. Il a fallu attendre un siècle après sa découverte, que le célèbre physicien Albert Einstein apporte une explication plausible à la photoconductivité.

En 1953, Calvin Fuller, Gerald Pearson et Daryl Chapin découvrent la cellule solaire au silicium. Cette cellule produit suffisamment d'électricité et pouvait faire fonctionner de petits appareils électriques. Dès lors, ce matériau devrait avoir une grande importance dans l'avenir de l'énergie solaire. Les premières cellules solaires, aux coûts très onéreux, ne sont apparues sur le marché qu'à partir de 1956. Il faut signaler que, l'essor réel du photovoltaïque commence dans les années 1960, avec les programmes de recherche d'autonomisation des engins spatiaux, qui ont engendré une augmentation très rapide des rendements de conversion des cellules solaires et la réduction du prix de ces cellules d'environ 80% au début des années 1970. On note par exemple l'utilisation des cellules solaires dans les satellites de communication américains et soviétiques dès le début des années 1960. En outre, la crise pétrolière de 1973, l'accident nucléaire de Tchernobyl de 1986, la guerre du Golfe de 1990 et le récent accident nucléaire de Fukushima de 2011, ont contribué à un engouement sans précédent, au niveau de la recherche fondamentale et appliquée, à l'amélioration nette des performances des dispositifs solaires, de la découverte et la synthétisation de nouveaux matériaux à propriétés photovoltaïques.

1.2.2. Principe de l'effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque peut se définir comme la génération d'une différence de potentiel à la jonction de deux matériaux semiconducteurs, dopés respectivement de « type p » et de « type n », en réponse au visible ou à une autre radiation et donnant lieu à trois processus sous-jacents, à savoir :

- La génération des porteurs de charge, les « paires électron-trou », due à l'absorption des photons dans les matériaux qui forment la jonction ;
- La séparation des porteurs photogénérés à la jonction ;
- La collection des porteurs de charge photogénérés aux extrémités de la jonction.

L'effet photovoltaïque permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité, par le biais de la production et du transport dans un matériau semiconducteur, de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière. Son principe repose sur les propriétés semi-conductrices du matériau et son dopage, afin d'améliorer la conductivité.

Dans la pratique, on juxtapose deux parties d'un même matériau (homojonction) ou de deux matériaux semiconducteurs (hétérojonction) différemment dopées, l'une possédant un

excès d'électrons (type n) et l'autre un déficit d'électrons (type p). Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau n diffusent dans le matériau p . Ainsi, aux voisinages de la jonction, la zone initialement dopée n se charge positivement, tandis que la zone initialement dopée p se charge négativement et il se crée un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone n et les trous vers la zone p . La jonction dite p - n est ainsi créée (Figure 1.3). En ajoutant des contacts métalliques aux bornes des zones n et p , on obtient une diode. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite du matériau (cas d'une homojonction) ou des deux matériaux (cas d'une hétérojonction) communiquent leur énergie aux atomes pour les ioniser et faire passer un électron de la bande de valence dans la bande de conduction.

L'électron extrait laisse derrière lui un trou capable de se mouvoir. Ce processus engendre une paire électron-trou, dont la séparation engendre une différence de potentiel aux bornes de la cellule. Si une charge est connectée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n rejoignent les trous de la zone p via la connexion extérieure, donnant naissance à un courant électrique dans la charge, tel qu'illustré sur la *figure 1.3*. Ce principe est le même dans toutes les filières de cellules solaires (silicium, couches minces et organiques). Cette thèse est principalement axée sur la filière à couches minces.

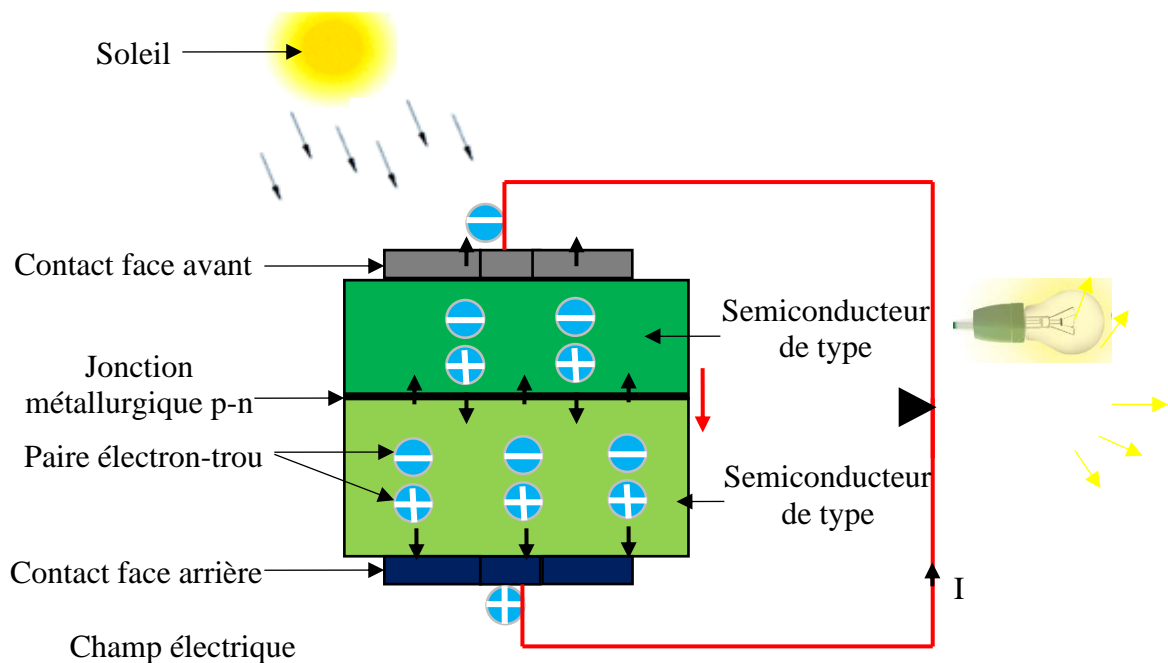


Figure 1.3 : Schéma descriptif du principe photovoltaïque

1.3. Les filières photovoltaïques à couches minces

En dépit de l'abondance de la matière première et du bon rendement des cellules solaires de première génération, faites de silicium monocristallin, le défi majeur reste l'enjeu économique. Les procédés d'obtention et de purification du silicium cristallin de meilleure qualité sont très énergétivores. Cette situation est un problème réel pour une production en masse et bon marché. Pour y faire face, les industriels et les scientifiques se sont lancés, à la fin des années 1970, à la recherche des solutions mieux adaptées, répondant aux exigences du marché. C'est pour cette raison que les cellules solaires à couches minces ont vu le jour et font de nos jours, l'objet d'une intense activité de recherche pour plusieurs raisons :

- les matériaux utilisés dans la technologie à couches minces sont des semiconducteurs à gap direct et absorbent dix fois plus la lumière visible que le silicium cristallin ;
- pour une meilleure conversion spectrale, il est plus facile d'empiler dans une cellule photovoltaïque à couches minces deux ou trois matériaux différents. La diode frontale qui convertit la partie bleue du spectre délivrant la plus haute tension en circuit ouvert ($V_{oc} \gg 1,00V$ pour $E_g \gg 1,70eV$) et la diode arrière convertissant la partie rouge avec une plus basse tension en circuit ouvert ($V_{oc} \gg 0,60V$ pour $E_g \gg 1,10eV$). L'optimisation du photocourant commun peut s'obtenir par un traitement approprié des matériaux pendant la phase de dépôt ;
- soit que les matériaux soient directement déposés à partir d'une phase gazeuse ou d'une phase liquide, entraînant de grandes réductions de la consommation énergétique et des économies dans la méthode de fabrication. Grâce à cette technologie, les plaques industrielles actuelles sont déjà 50 fois plus grandes que la plus grande cellule solaire en silicium cristallin ;
- soit la possibilité de produire des modules intégrés contenant un grand nombre de cellules photovoltaïques qui soient plutôt déposées sur des plaques de verre qui leur procurent une bonne protection et qui limitent le processus d'encapsulation à une protection arrière ;
- l'industrie du verre étant déjà adaptée, à la production de masse des surfaces en verre, la technologie de pointe permet effectivement le revêtement en oxyde transparent conducteur (OTC) par un procédé chimique de dépôt en phase vapeur et de films métalliques minces par pulvérisation cathodique sous vide.

1.3.1. La filière au silicium amorphe (a-Si)

Les cellules solaires à couches minces à base de silicium sont constituées du silicium amorphe classé selon la taille des grains, allant du nanocristallin (n-Si) au microcristallin (μ -Si) [17]. Ces cellules sont bon marché et présentent des rendements de conversion théoriques avoisinant 30%. Cependant, les cellules solaires à couches minces de silicium présentent quelques problèmes qui handicapent leur fonctionnement :

- La faible absorption de la partie rouge du spectre solaire due à sa grande bande interdite. Néanmoins, la naissance de nouvelles filières basées sur le silicium amorphe, notamment celles des multi-jonctions au silicium amorphe dopé au germanium (a-Si:Ge) et au silicium microcristallin, de bande interdite plus petite, permet de surmonter cette faiblesse ;
- La faible mobilité des trous, due à une forte concentration intrinsèque des liaisons pendantes, affecte fortement le rendement de ces cellules. L'une des solutions techniques, généralement employées, est la passivation de ces liaisons par incorporation en phase vapeur de l'hydrogène : ce qui permet d'obtenir le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Malheureusement, le a-Si:H ne résiste pas à *l'effet Staebler-Wronski*, qui est la dégradation irréversible des propriétés électroniques d'un matériau lorsque ce dernier est exposé à une lumière intense. Il se traduit par une diminution de l'efficacité et de la stabilité de la cellule solaire au fil du temps [18,19].

1.3.2. La filière au tellure de cadmium (CdTe)

Le tellure de cadmium est un matériau semiconducteur de type *p* ayant une bande interdite de $1,45\text{eV}$, appropriée pour la technologie photovoltaïque à couches minces. Sa concentration de porteurs est de l'ordre de 10^{15}cm^{-3} . La structure générale des cellules solaires à base de CdTe à couches minces est une hétérojonction *n*-CdS/*p*-CdTe. Cette hétérojonction présente l'avantage que le CdS et le CdTe peuvent être déposés avec les mêmes techniques ; ce qui contribue à la réduction du coût de production.

Les techniques classiques de dépôt généralement utilisées sont : la sublimation/condensation, le dépôt chimique en phase vapeur, la pulvérisation et l'électrodéposition. Le rendement record de ces cellules solaires est de 21% réalisé par NREL, en déposant le CdTe par sublimation et le CdS par bain chimique [20]. Les travaux réalisés par Ngoupo et al.[21], par simulation numérique à l'aide du logiciel SCAPS-1D, ont permis d'obtenir un rendement de 21,75% qui demeure inférieur à la limite de l'efficacité théorique ($\approx 31\%$) d'une simple jonction, prédite par Shockley et Queisser.

Malgré ce rendement expérimental satisfaisant et des progrès dans la compréhension de ce type de cellules, quelques problèmes émaillent cette filière entre autres :

- La difficulté de réaliser un contact ohmique stable et efficace au contact arrière [22]. L'exigence de matériaux de très grand travail de sortie demeure un talon d'Achille pour les chercheurs [23] ;
- Le caractère très toxique et polluant du cadmium, connu pour être un composé cancérigène [24], fait l'objet de beaucoup de controverses entre la communauté scientifique et les environnementalistes ;
- La grande difficulté de dopage, en raison de la forte tendance à l'auto compensation ;
- Les réserves mondiales limitées de tellure sont un handicap pour la production en masse des cellules solaires à base de CdTe.

1.3.3. La filière chalcopyrite (CIGS)

Les cellules solaires chalcopyrites sont basées sur le composé $CuInSe_2$, encore appelé CIS. Les chalcopyrites sont obtenues par substitution de l'indium par le gallium et le sélénium par le soufre, $(Cu(In,Ga)Se_2$ et $Cu(In,Ga)(Se,S)_2$). Elles ont des propriétés optiques et électriques très intéressantes pour les applications photovoltaïques et offrent la possibilité de modification de leurs propriétés intrinsèques et en l'occurrence de leur bande interdite. Cette propriété rend ces matériaux aussi bien pour des cellules à jonction simple que pour des cellules tandem. La structure générale des cellules solaires à couches minces de CIGS est une hétérojonction n -CdS/ p -CIGS.

Les techniques de dépôt couramment utilisées pour les cellules CIGS sont : la co-évaporation, la pulvérisation cathodique, l'électrodéposition, les nanoparticules, le spray-pyrolyse et l'impression. En 2020 Mbopda et al ont obtenu un rendement 22,86% par simulation numérique en introduisant une couche SnSe comme BSF [25]. Cependant, de nos jours le rendement de conversion record des cellules CIGS est de 23,35%.

1.4. La photopile à base de a-Si : H

1.4.1. La structure

Les cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogénée sont constituées d'un empilement de plusieurs couches minces. La séquence de dépôt et le dopage de celles-ci lui confèrent deux configurations différentes, appelées « substrat » n - i - p et « superstrat » p - i - n comme le présente la figure 1.4. Dans les deux configurations, la lumière entre dans la cellule à travers les couches OTC et la couche fenêtre p . Cependant, dans la configuration superstrat, les couches OTC, p , i et n sont déposées séquentiellement sur un substrat transparent (verre ou

polymère texturée ou non) qui sert également de support mécanique à la cellule, et la lumière doit traverser ce substrat avant d'atteindre la diode p-i-n [26]. Dans la configuration substrat, la couche n est d'abord déposée sur un substrat approprié (transparent ou opaque), suivi d'un dépôt séquentiel des couches i, p et OTC [27]. Dans ces configurations, les OTC et des couches métalliques spécifiques sont utilisés respectivement pour les contacts électriques avant et arrière.

Néanmoins le processus de synthèse de la structure substrat s'avère difficile. Face à ce manquement, le développement des cellules solaires a-Si : H s'est beaucoup plus penché sur la technologie superstrat, car le contact arrière est généralement déposé à la fin de la cellule, pour avoir un meilleur contrôle ; et de plus, cette configuration fournit un meilleur rendement. La configuration superstrat facilite l'encapsulation à faible coût des modules solaires [26,28] Cette configuration est également importante pour le développement de cellules solaires tandem à haute efficacité, utilisant efficacement le spectre solaire complet pour la conversion de l'énergie photovoltaïque [29].

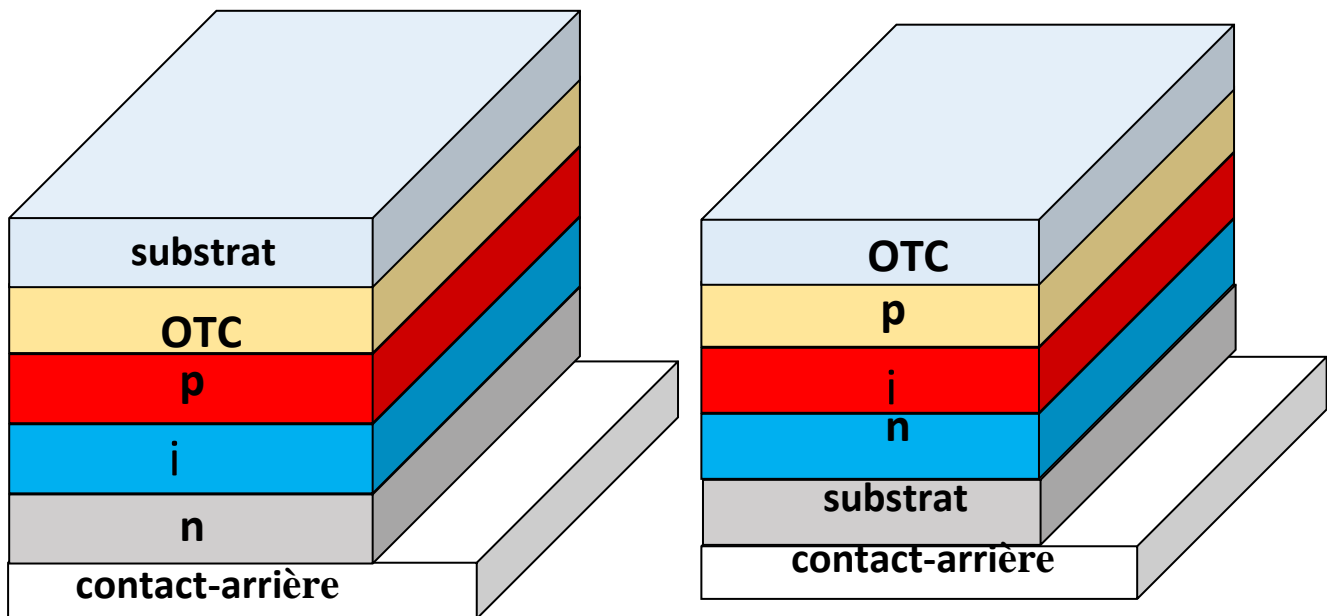


Figure 1.4 : Structures typiques des cellules solaires à base de a-Si :H : (a) configuration superstrat, (b) configuration substrat.

1.4.2. Principe de fonctionnement

La cellule est l'élément de base d'un panneau photovoltaïque. C'est elle qui convertit l'énergie lumineuse des photons en énergie électrique par effet photoélectrique.

Le principe général du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque est décrit par le schéma de la figure 1.3. Les dispositifs classiques sont généralement constitués d'un matériau semiconducteur, comme le silicium, qui absorbe les photons de la lumière incidente (*absorbeur* ou *base*). Un semiconducteur est constitué d'une bande de valence et d'une bande de conduction, dans lesquelles circulent les porteurs de charges, respectivement positives (les trous) et négatives (les électrons). On définit alors la bande interdite E_G (ou *gap*) par la différence d'énergie entre le haut de la bande de valence E_V et le bas de la bande de conduction E_C . Lorsque l'énergie des photons incidents $h\nu$ est supérieure à la bande interdite E_G du semiconducteur, un électron de la bande de valence est excité dans la bande de conduction, ce qui crée un trou : on dit qu'il y a photogénération de paires électron-trou. En conséquence, la concentration de porteurs dans les bandes d'énergie augmente. L'énergie absorbée en excès par rapport à E_G est perdue sous forme de chaleur par désexcitation des porteurs : c'est le processus de thermalisation. Ces porteurs photogénérés doivent ensuite se déplacer vers les contacts et être collectés, afin de générer un courant dans le circuit électrique connecté ; vu de l'extérieur de la cellule, les électrons proviennent du pôle négatif (n) et les trous du pôle positif (p). Pour réaliser cette séparation des porteurs, il est nécessaire que la structure du matériau soit dissymétrique. Il faut faire en sorte que les électrons (respectivement les trous) souhaitant circuler vers le côté p (respectivement le côté n) rencontrent une barrière. Concrètement, on crée un champ électrique en i [30]. Ce champ, orienté de la zone n vers la zone p au sein du semi-conducteur ou des interfaces, permet d'orienter le mouvement des porteurs.

Lorsque les couches p , i et n sont mises en contact, les porteurs libres dus aux donneurs de la région n et aux accepteurs de la région p diffusent vers la zone intrinsèque sous l'effet du gradient de concentration. Suite à cette diffusion, il apparaît une charge d'espace fixe négative dans la couche p et positive dans la couche n . Il s'établit alors un champ électrique interne qui permet d'atteindre une situation d'équilibre où les flux de porteurs (électrons et trous) s'annulent.

Dans le cas des cellules a-Si:H, ce champ électrique permet la séparation des porteurs photo-générés dans la région intrinsèque et leur collection. Idéalement, ce champ interne est uniforme. En réalité, le a-Si:H intrinsèque présente des défauts, notamment les liaisons pendantes qui influencent la collection des charges puisque d'une part, elles se comportent comme des centres de recombinaison et d'autre part, elles peuvent induire une déformation du champ interne qui n'est alors plus uniforme.

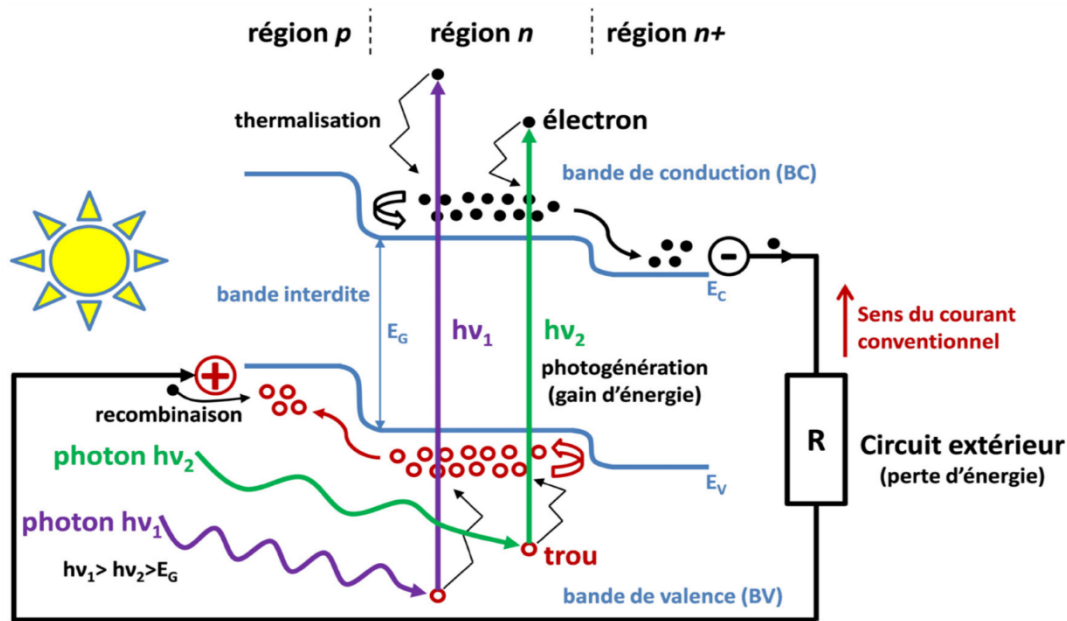


Figure 1.5 : Schéma explicatif du fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [31]

1.5. Rôle des composants de la cellule

1.5.1. Oxydes Transparents conducteurs

Les oxydes transparents conducteurs (OTC) revêtent une importance particulière pour les Cellules solaires. Ils doivent remplir deux exigences principales pour être utilisés dans l'architecture des cellules solaires a-Si H : une transparence suffisante de l'ordre de 80% dans les longueurs d'onde d'intérêt (300-1100nm) pour laisser passer assez de lumière aux couches sous-jacentes, principalement la couche intrinsèque i (a-Si:H), et une conductivité importante pour pouvoir transporter le photo-courant vers un circuit extérieure [31]. En plus de cela, il est nécessaire de présenter de faibles résistivités (inferieur a $10^{-4}\Omega.cm$) pour former un bon contact et un bon alignement de bandes avec la couche p, afin d'éviter trop de pertes électriques [32]. Une bonne stabilité thermique est requise pour les OTC dans le but de réduire l'interdiffusion des atomes de la couche déposée sur l'OTC [33,34]. Des contacts métalliques sont

généralement déposés sur l'OTC, afin de réduire la résistance série. La qualité de l'OTC est donc fonction de sa résistance, son absorption, sa réflexion, ainsi que sa transmission. Plusieurs types de couches OTC ont été testés et utilisés dans les cellules solaires à couches minces, dont principalement : SnO_2 , In_2O_3 , ITO, Cd_2SnO_4 (CTO), etc. Les CTO excellent en conductivité et en bande interdite, permettant un courant et un facteur de forme plus élevés dans les cellules solaires [35]. La transmission spectrale des différentes couches OTC est représentée dans la figure 1.6.

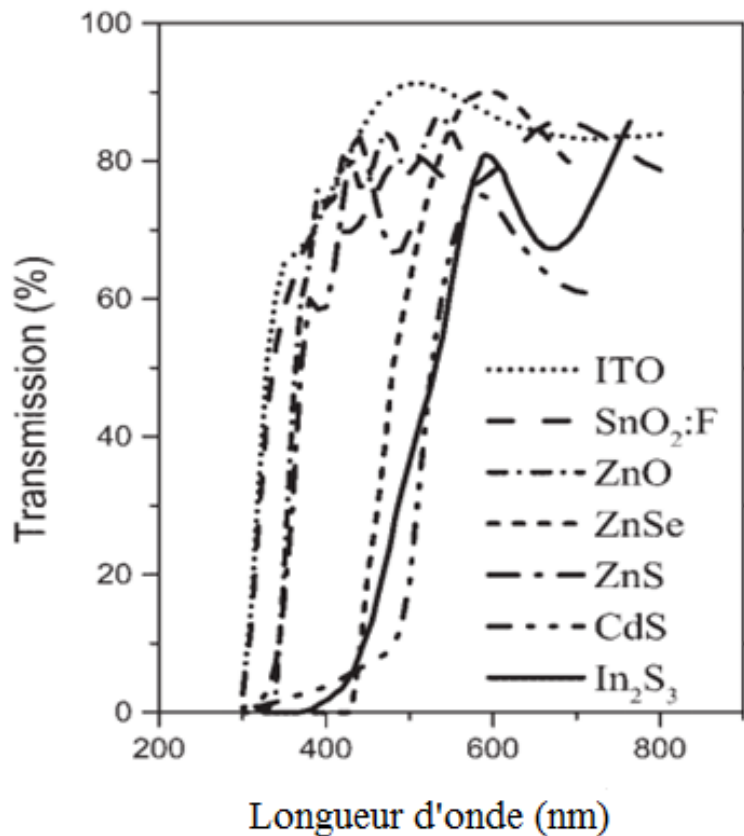


Figure 1.6 : Transmission optique de différents contacts avant et couches tampons [29] .

Les procédés primaires de dépôt pour les couches OTC, de résistivité faible et élevée, sont présentés dans le tableau 1. Ces composés sont utilisés pour la fabrication des couches du contact avant dans les cellules solaires à couches minces à base de a-Si:H.

Tableau 1 : Résumé des conditions de dépôt pour toutes les couches OTC [36].

Résistivité	OTC	Méthode de dépôt-commentaires
Faible	ITO	Pulvérisation par magnétron à radiofréquence de 90% In ₂ O ₃ /10% SnO ₂ (99.99%) dans Ar ; Déposé à RT et traité thermiquement dans une atmosphère inerte
	SnO ₂ :F	MOCVD ; TMT ; O ₂ ; CBrF ₃ ; gaz porteur He ; déposé à 480°C
	Cd ₂ SnO ₄	Co-pulvérisation par radiofréquence de CdO et SnO ₂ (99,99%) dans Ar ; Déposé à température ambiante et traité thermiquement dans une atmosphère inerte
	CdIn ₂ O ₄	Radiofréquence réactive conjointement de pulvérisation de Cd et In (99,99 %) à Ar/O ₂ (25%) ; déposés à la température ambiante et traité thermiquement dans une atmosphère inerte
Elevé	SnO ₂	Pulvérisation réactive de Sn (99,99 %) dans Ar/O ₂ (25 %) ; déposé à 300°C
	In ₂ O ₃	Pulvérisation réactive de In (99,99 %) dans Ar/O ₂ (25 %) ; déposé à 300°C
	Zn ₂ SnO ₄	Pulvérisation par radiofréquence de SnO ₂ et ZnO (99,99%) dans Ar ; Déposé à 25-425°C et traité thermiquement dans une atmosphère inerte

1.5.2. La couche p (p-a-Si:H)

Positionnée entre la couche fenêtre et l'absorbeur, la couche p ou couche tampon joue un rôle fondamental dans le fonctionnement de la photopile. Théoriquement, la couche tampon sert à former une jonction p-i avec l'absorbeur ; mais de nombreux chercheurs ont permis de mettre en lumière plusieurs autres avantages de la couche p dans les cellules solaires au a-Si :H. Elle affecte à la fois les propriétés électriques de la jonction et la protège contre les réactions chimiques et les dommages mécaniques. D'un point de vue électrique, la couche tampon optimise l'alignement des bandes à l'interface p/absorbeur et crée une zone de déplétion suffisamment large qui minimise les effets tunnels et établit un potentiel de contact atténué, qui permet d'obtenir les paramètres de performances relativement élevés [5]. La présence de cette couche permet une bonne passivation de cette interface [37]. La couche p joue également un rôle très important comme couche mécanique, car elle protège la jonction électrique et

mécanique contre les dommages qui pourraient être causés par le dépôt des OTC. La couche tampon permet l'auto-limitation des pertes électriques en empêchant les zones défectueuses de l'absorbeur de dominer la tension en circuit ouvert sur l'ensemble de la cellule solaire [38].

Pour la seconde option, le choix d'un matériau, comme couche p de cellules solaires, est motivé par certains critères qu'il faut tenir compte :

- La bande interdite doit être relativement large, moins que celle de la couche fenêtre, afin de permettre aux rayonnements visibles et infra-rouge d'atteindre l'absorbeur ;
- La résistivité doit être assez grande pour réduire les pertes de courant à l'interface p/absorbeur ;
- L'affinité électronique doit être assez proche de celle de l'absorbeur afin de réduire les discontinuités des bandes au niveau de l'interface tampon/absorbeur et d'assurer un bon alignement de bandes ;
- La technique de dépôt doit être favorable au processus de fabrication de la cellule solaire.

Elle a aussi pour objectif de transmettre le maximum de lumière incidente à la couche absorbante.

1.5.3. La couche a-Si:H(n)

La couche a-Si:H(n) est située entre la couche i (a-Si:H) et le métal. C'est une couche arrière qui permet l'établissement et la protection de la jonction i/n. Elle permet la création d'un champ électrique avec la couche p, au travers de la couche absorbante, et favorisant ainsi la séparation des porteurs de charge. D'une part, elle contribue à la passivation et à la diminution du décalage de bande entre la couche i et la couche n et d'autre part, elle protège la couche active contre l'interdiffusion des particules de métaux provenant du contact arrière. Lors de son dépôt à l'aide du gradient de CO₂, elle vise à une transition douce ou souple entre la couche et le métal [39].

1.5.4. Le contact arrière

Le contact arrière est une partie essentielle dans le fonctionnement de la photopile, aussi bien pour la collecte des porteurs de charge (**trous ou électrons selon la structure**) que pour la transmission de ces porteurs vers le circuit de charge. Pour assumer convenablement cette fonction, le contact arrière doit être un bon réflecteur optique pour des porteurs indésirables

afin de minimiser les recombinaisons d'interfaces au niveau de ce contact. Le choix d'un tel matériau exige des critères précis, à l'instar d'un travail de sortie approprié afin d'établir un contact ohmique avec la couche absorbante d'une part, mais aussi d'être capable de résister aux différentes températures de dépôts, d'encapsulation et des divers traitements qui entrent dans le processus de fabrication de la photopile d'une part. Dans la littérature, plusieurs matériaux ont fait l'objet d'études et quelques-uns semblent remplir ces exigences. Parmi ces métaux, on peut citer le platine (Pt), le chrome (Cr), le manganèse (Mn), le molybdène (Mo), le titane (Ta), le tungstène (W), l'or (Au), le cuivre (Cu), l'argent (Ag) et l'aluminium (Al). De ces métaux, l'aluminium semble être un candidat de choix, comme contact arrière dans la fabrication des photopiles à couche mince au silicium amorphe, en raison de sa relative stabilité à la température des processus de dépôt, de sa faible résistance de contact avec l'absorbeur, de sa conductivité assez élevée, de son travail de sortie convenable et de son utilisation comme un masque métallique à moindre coût dans la dernière étape du processus de fabrication de la cellule solaire afin [27].

1.6. Caractéristique et Propriétés du a-Si

Les études sur les matériaux semi-conducteurs amorphes se sont développées grâce à la recherche sur l'électrophotographie avec le sélénium dans un premier temps, puis sur le silicium [40]. Les premières couches de silicium amorphe étaient déposées par pulvérisation ou évaporation et n'étaient pas hydrogénées [41]. A la fin des années 1960, de nouvelles techniques de dépôts utilisant la décomposition chimique du silicane SiH_4 par décharge luminescence apparaissent et permettent l'utilisation de l'hydrogène qui modifie radicalement les propriétés du matériau [42]. Les premières cellules à base de silicium amorphe hydrogéné apparaissent en 1976 et seront utilisées quelques années plus tard dans les calculatrices [43]. D'autres applications de ces matériaux apparaissent ensuite : transistors en couches minces, scanners optiques, écrans à cristaux liquides.

1.6.1. Description générale du matériau

Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) est composé d'atomes de silicium et d'hydrogène en configuration désordonnée comme le montre la figure 1.7. À cause de sa configuration désordonnée et de la présence d'hydrogène, les propriétés du silicium amorphe sont très différentes de celles du silicium cristallin : on trouve des défauts dans la matrice cristalline, de nombreux atomes de silicium non tétraonaux ainsi que des déformations des angles et longueurs des liaisons entre les atomes.



Figure 1.7 : Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc [44].

Le théorème de Bloch utilisé pour la structure des bandes nécessite une structure périodique ; Or, il n'existe pas de périodicité à grande échelle dans le silicium amorphe comme c'est le cas dans le réseau du silicium cristallin. Il existe cependant un ordre à courte distance, ce qui signifie qu'un atome de silicium et ses plus proches voisins sont dans une configuration proche de celle qu'ils auraient eue au sein d'un réseau cristallin. Au-delà des quatre premiers voisins, les positions relatives des atomes sur le réseau sont totalement aléatoires et il n'est plus possible de parler de matrice cristalline ; il n'existe pas d'ordre à grande distance. Cet ordre à courte distance permet de retrouver une structure de bande, cependant la configuration désordonnée du a-Si:H modifie fortement la structure électronique par rapport à celle du silicium cristallin.

1.6.2. Défauts intrinsèques

1.6.2.1. Défauts de coordination

La notion de défaut est différente dans un matériau amorphe et dans un cristal (voir figure 1.8). Un défaut cristallin se définit par toute rupture de la périodicité du réseau. C'est le cas lorsqu'un atome est vacant ou en position interstitielle. Par contre, dans le a-Si:H, on parle plus généralement de défaut de coordination. Il s'agit d'un atome de silicium ayant un excès ou un défaut de liaisons covalentes. Ces défauts sont inhérents au caractère désordonné du matériau et ont des signatures particulières dans la bande interdite. Ils sont classés par indice de coordination (i), correspondant à l'écart en nombre de liaisons par rapport à la coordination du silicium tétravalent ($Si_{(4)}$) :

- $i = -2$ ($Si_{(2)}$) : Lacune double (*Divacancy*)
- $i = -1$ ($Si_{(3)}$) : Liaison pendante (*Dangling Bond*)

- $i = 0$ ($Si_{(4)}$) : Liaison faible (*Weak Bond*)
- $i = 1$ ($Si_{(5)}$) : Liaison flottante (*Floating Bond*)

Malgré des avis variés dans la littérature, les défauts de coordination prépondérants dans les couches a-Si:H intrinsèques, mesurées par la technique de résonance paramagnétique électronique (RPE), semblent être les liaisons pendantes [45,46,47] .

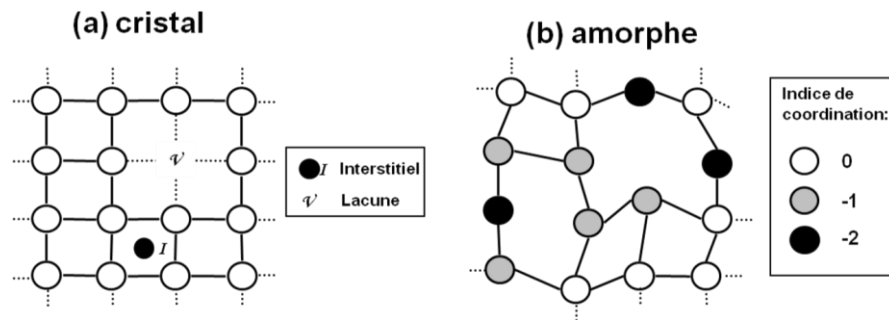


Figure 1.8 : Illustration de la notion de défaut dans c-Si (a) et dans a-Si (b) [31].

1.6.2.2. Concepts d'énergie de corrélation

D'après le principe d'exclusion de Pauli, un état électronique peut contenir jusqu'à deux électrons au maximum, ce qui signifie qu'un état localisé dans la bande interdite, correspondant à un défaut D , a trois états de charge possibles en fonction de la position du niveau de Fermi, équivalent au potentiel électrochimique des électrons. Par exemple, dans le cas de la liaison pendante, l'état neutre D^0 est occupé par un électron célibataire, l'état vide d'électron correspond à un défaut chargé positivement D^+ et l'état doublement occupé sera chargé négativement D^- . Cependant, du fait de l'interaction électron-électron, les niveaux énergétiques correspondant aux états D^0 et D^- sont séparés d'une certaine quantité d'énergie U appelée énergie de corrélation définie par la relation :

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r} - W_r \quad (1.2)$$

Le premier terme correspond à l'énergie d'interaction coulombienne : e est la charge de l'électron, ϵ la permittivité diélectrique relative, ϵ_0 la permittivité diélectrique dans le vide et r est le rayon effectif séparant les deux électrons. Le deuxième terme, W_r , est l'énergie de relaxation, traduisant la possibilité qu'un changement de configuration des liaisons se produit lors de l'ajout d'un électron supplémentaire.

Si $|U| \ll kT$, l'occupation des états peut être simplement décrite par la statistique de Fermi. Dans ce cas, les états sont doublement occupés en-dessous de E_F et vides au-dessus. On peut trouver des états simplement occupés dans une gamme d'énergie environ égale à $E_F \pm kT$. Cependant, $|U|$ est très supérieure à kT dans le cas de a-Si:H : l'occupation des états ne peut plus être aussi simplement décrite. Une autre particularité des défauts vient du signe de U qui peut théoriquement être négatif ou positif. Cela a des conséquences non négligeables sur l'équilibre des défauts représenté par l'équation 1.3.

$$2D^0 = D^+ + D^- \quad (1.3)$$

On définit le premier niveau énergétique E_{d1} correspondant aux états D^+ ou D^0 et le deuxième niveau $E_{d2} = E_{d1} + U$ correspondant à l'état D^- . Si U est positive, E_{d1} se situe plus bas en énergie que E_{d2} et inversement. L'état de charge des défauts dépend de la position du niveau de Fermi et est également représenté sur la figure 1.9. Dans le cas $U > 0$, E_F peut se situer dans les trois régions énergétiques délimitées par E_{d1} et E_{d2} : les trois états de charges sont possibles. Cependant, si $U < 0$ alors E_F se retrouve par construction bloqué entre les niveaux E_{d1} et E_{d2} ; les états D^+ et D^- cohabitent [41,48]. On verra par la suite que ce dernier cas représente bien le comportement de E_F dans un échantillon dopé, où les dopants et les liaisons pendantes jouent un rôle qui peut s'apparenter à celui de défauts à énergie de corrélation négative [41,49].

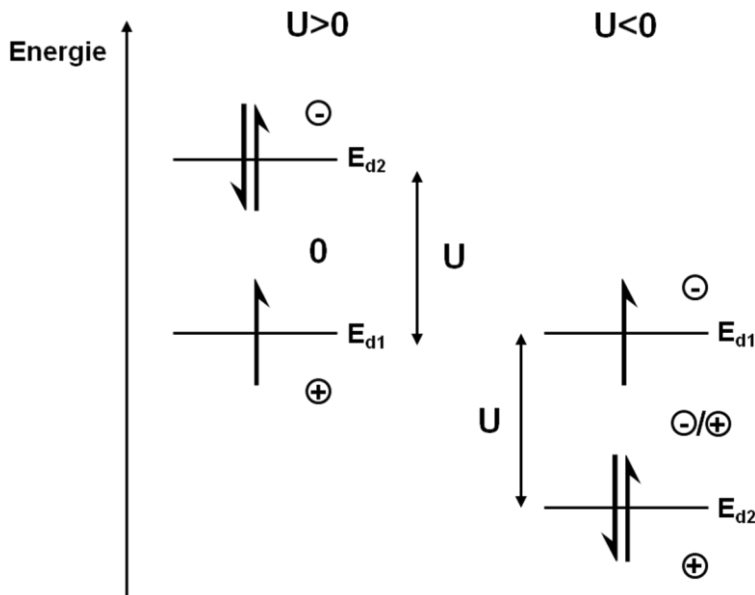


Figure 1.9 : Représentation des niveaux énergétiques E_{d1} et E_{d2} dans les cas d'énergie de corrélation positive et négative. Il est également indiqué l'état de charge lorsque le niveau de Fermi se trouve dans une des 3 zones énergétiques délimitées par E_{d1} et E_{d2} [50].

Le calcul théorique de U est délicat, notamment du fait de l'évaluation difficile de r ainsi que de ε à cause de la forte localisation des fonctions d'onde [39,41]. Quant à la valeur expérimentale de U dans le cas des liaisons pendantes d'a-Si:H, elle est estimée à $U \sim 0.3 \pm 0.1\text{eV}$ et serait donc positive [51]. L'existence d'une énergie de corrélation négative est cependant parfois défendue par certains auteurs [52,53,54].

1.6.2.3. Densité d'états

Dans un cristal, la présence d'une bande de conduction et d'une bande de valence, nettement séparées par une bande interdite, est conditionnée par la périodicité du réseau et résulte du couplage des orbitales atomiques s et p des atomes de silicium formant des liaisons covalentes [55]. Dans le cas du silicium amorphe, on considère que sa structure est suffisamment ordonnée localement, sur quelques nanomètres, et proche de celle du silicium cristallin pour lui attribuer une bande de valence (BV) et une bande de conduction (BC) [41]. Cependant, les bandes d'énergie ne peuvent plus être décrites par des relations de dispersion $E(\mathbf{k})$. Le désordre à longue distance qui caractérise sa structure est responsable de la localisation des fonctions d'ondes dans l'espace. D'après la théorie de la localisation, dont les fondements résident dans un article publié par Anderson en 1958, lorsque le désordre dépasse un certain seuil, les fonctions d'onde des électrons perdent leur cohérence de phase d'un atome à l'autre, si bien que la conduction via ces états est nulle à 0 K [56]. Ces états, répartis dans la bande interdite du matériau, sont dits localisés en opposition aux états étendus des bandes de conduction ou de valence. Les états étendus sont séparés des états localisés par le bord de mobilité. La figure 1.10 résume les principales différences distinguant la densité d'états du silicium cristallin et celle du silicium amorphe hydrogéné.

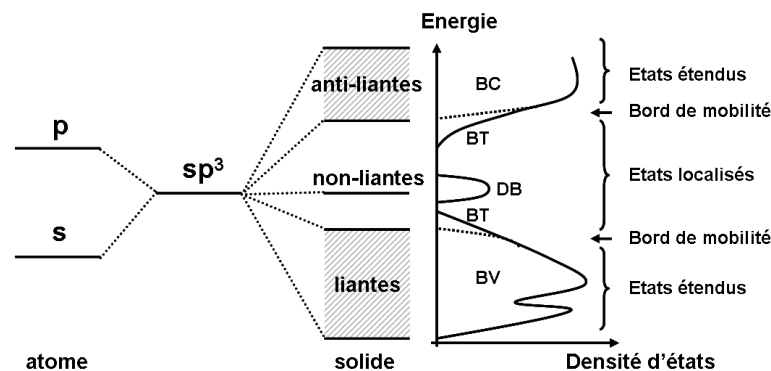


Figure 1.10 : Représentation schématique de l'orbitale moléculaire du silicium et de la densité d'états résultante pour a-Si:H (traits pleins) en comparaison avec la densité d'états du c-Si (traits pointillés) [31].

Parmi les états localisés dans le gap, on distingue :

- **Les queues de bandes ou *band tails* (BT)** : États faiblement localisés correspondant aux liaisons faibles Si-Si. Ces défauts sont liés aux fluctuations des longueurs et des angles des liaisons covalentes Si-Si par rapport à la configuration cristalline. Ces états sont présents à l'intérieur du gap dans le prolongement des bandes de conduction et de valence. On les appelle des *queues de bandes exponentielles* à cause de leur forme typique [41].
- **Les liaisons pendantes ou *dangling bonds* (DB)** : États fortement localisés et situés au centre du gap liés à la rupture des liaisons faibles. Comme expliqué précédemment, ces dernières sont les défauts de coordination prépondérants dans le a-Si:H, d'indice -1 et d'énergie de corrélation positive [45,46]. Ces défauts sont amphotères, c'est-à-dire qu'ils peuvent avoir trois états de charge. Ils sont généralement représentés par des gaussiennes dans la bande interdite.

1.6.2.4. Rôle de l'hydrogène

Le silicium amorphe non hydrogéné a une densité de défauts profonds dus aux liaisons pendantes de l'ordre de 10^{19} cm^{-3} . L'hydrogène incorporé passive la majorité des liaisons pendantes à travers l'équilibre représenté à la figure 1.11. Hydrogéné, le silicium amorphe est donc beaucoup moins défectueux puisque la densité de défauts profonds est de l'ordre de 10^{16} cm^{-3} [51]. Il devient donc bien meilleur photoconducteur.

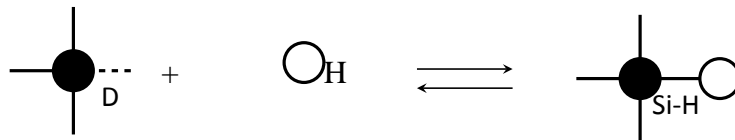


Figure 1.11 : Équilibre de passivation des liaisons pendantes des atomes de silicium par l'hydrogène dans le a-Si:H.

La réduction des défauts augmente l'efficacité des atomes dopants. L'introduction d'hydrogène facilite donc la variation du niveau de Fermi avec le dopage des couches [57].

L'hydrogène a également la capacité d'élargir le gap du silicium amorphe. La largeur de bande interdite de a-Si vaut environ 1,2eV et peut atteindre 2,10eV pour les matériaux a-Si:H comportant une forte concentration d'hydrogène [58].

Néanmoins, l'hydrogène n'a pas que des bienfaits dans le silicium amorphe puisqu'il peut également être à l'origine de la rupture de liaisons faibles $S_i - S_i$ selon l'équilibre donné à la figure 1.12

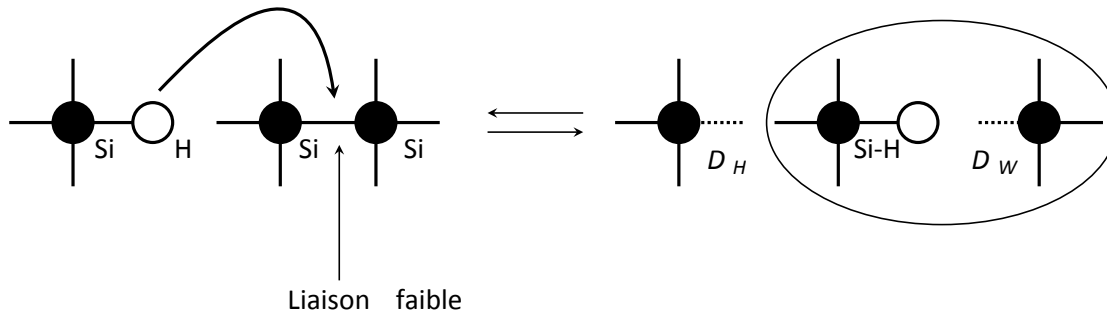


Figure 1.12: Équilibre de rupture des liaisons faibles $S_i - S_i$ par l'hydrogène dans le a-Si:H

Dans cet équilibre, $S_i - H \cdots D$ doit être considérée comme une seule espèce dans laquelle une liaison $S_i - S_i$ a été hydrogénée. On caractérise les réactions de formation des liaisons pendantes à l'aide d'un indice i correspondant au nombre de liaisons $S_i - H$ intervenant dans la réaction. Dans le cas de l'équilibre, l'indice vaut $i = 1$.

Une liaison faible $S_i - S_i$ peut également être dissociée pour former deux liaisons pendantes D selon l'équilibre suivant :



Dans lequel l'espèce $S_i - H \cdots H - S_i$ est formée. Dans cet équilibre, l'indice est $i = 2$. L'hydrogène n'est pas le seul responsable de la formation des liaisons pendantes, puisqu'il existe également un équilibre entre les atomes de silicium liés par une liaison simple $S_i - S_i$ et ces mêmes atomes avec chacun une liaison pendante :



Puisqu'il n'y a pas d'intervention de liaisons $S_i - H$, l'indice i vaut $i = 0$ dans cet équilibre.

La densité de liaisons pendantes dans le a-Si:H est donc le résultat d'un équilibre thermochimique entre la formation et la stabilisation des liaisons pendantes par ces différentes transitions. Cependant, la réaction associée à l'indice $i = 2$ serait la réaction prépondérante dans la formation des liaisons pendantes [59].

La proportion d'hydrogène au sein de a-Si:H est comprise entre 6% et 40 %, mais la concentration d'atomes actifs d'hydrogène est beaucoup plus faible dans le a-Si:H puisque la

majorité des atomes d'hydrogène n'intervient pas dans des liaisons, $Si-H$ mais s'assemblent pour former des agrégats. Le rapport des atomes d'hydrogène actifs sur le total des atomes d'hydrogène est généralement pris égal à 1/10 [41].

1.6.3. Propriétés électroniques

Les applications technologiques des semi-conducteurs dépendent de leurs propriétés électriques. Le silicium amorphe présente une bande interdite ajustable variante de 1,6 à 1,9eV. Son gap optique est environ 1,7 eV, correspondant parfaitement au spectre solaire d'un absorbeur photovoltaïque [60]. Il peut présenter trois types de conductivités i, p et n avec des niveaux de dopage différents. Spear et Le Combe ont montré expérimentalement qu'il était possible de moduler la conductivité du silicium amorphe hydrogéné sur plusieurs ordres de grandeurs, en introduisant des gaz dopants pendant le dépôt [57]. Ainsi, lorsque le PH_3 est utilisé on obtient une conductivité de type n et lorsque le B_2H_6 est utilisé on obtient une conductivité de type p comme le présente la figure 1.13. Il est important de noter que même si le dopage est possible dans a-Si:H, il est trop peu efficace car une très faible proportion est active. L'efficacité du dopage n'excède pas 1% et diminue d'autant plus que l'on essaie de doper le matériau. Les 99% restants sont non actifs, augmentent le désordre et réduisent davantage la mobilité des porteurs [61]. En règle générale, les forts dopages n ou p provoquent l'augmentation des défauts à l'intérieur de la bande interdite de a-Si:H [51, 62,63,64]. On parle alors de défauts induits par dopage mais il est important de remarquer que les micro dopages provoquent une diminution de la densité des défauts profonds [64].

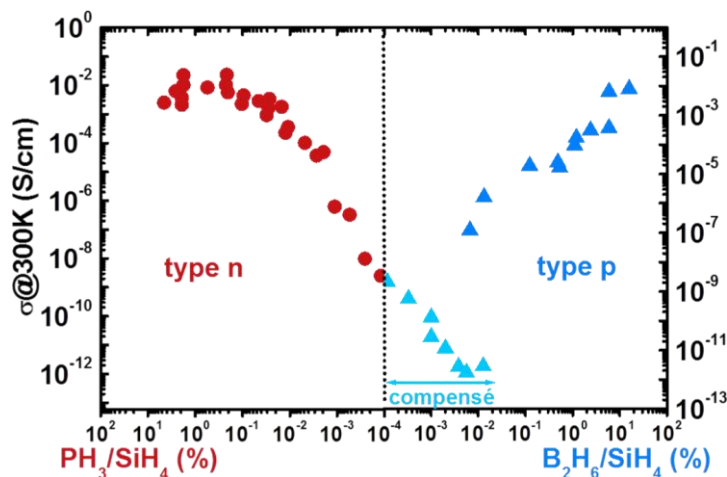


Figure 1.13 Variation expérimentale de la conductivité à température ambiante, d'échantillons de a-Si:H dopés n ou p en fonction des ratios débits gaz dopants / débit de silane. Les matériaux obtenus pour les faibles débits de B_2H_6 sont de type compensé, terme inspiré par la continuité des courbes entre les domaines PH_3 et B_2H_6 [65].

1.6.4. Propriétés optiques

Grace à son gap variable, à sa photoconductivité large et à son coefficient d'absorption optique élevé ($>10^5$ /cm) dans le spectre du visible, le a-Si:H présente des rendements théoriques élevés [7]. Par conséquent, son efficacité quantique présente relativement une bonne réponse spectrale pour des longueurs d'onde comprises entre 400nm et 650nm. Ce qui prouve que l'absorbeur a-Si:H est un candidat potentiel pour les technologies solaires à couches minces [66].

1.7. Pertes dans la cellule solaire à base de a-Si:H

Les principales pertes présentes dans les cellules solaires sont d'origine optique et électrique comme le montre la figure 1.14 ; ce ne sont pas toutes les paires électron-trou produites qui contribuent au photocourant. Les pertes limitent le rendement de conversion qui est inférieur à la limite théorique du rendement maximum réalisable par la cellule solaire.

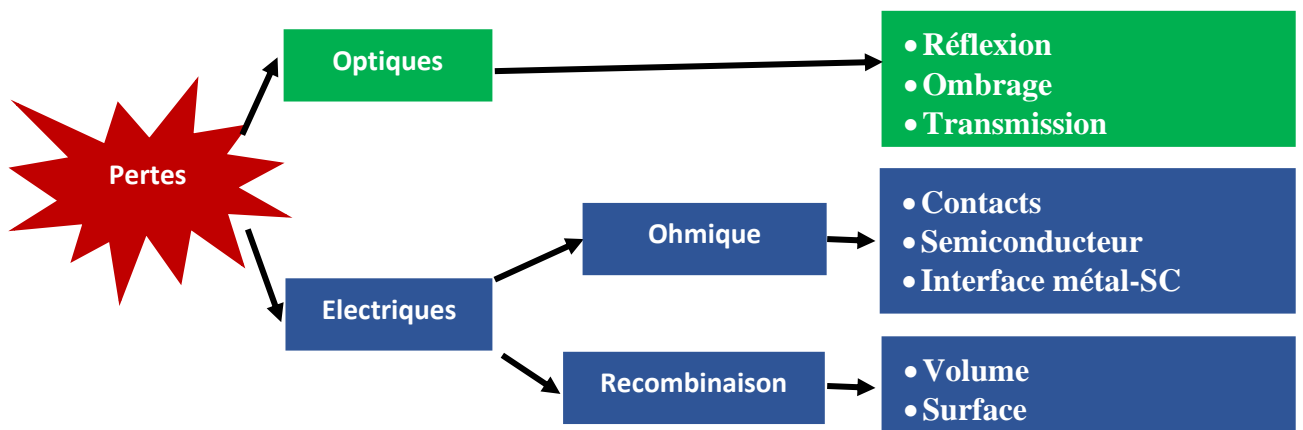


Figure 1.14 Types de pertes dans une cellule solaire [67].

Dans une cellule solaire à base de a-Si:H, les pertes optiques peuvent être de deux sortes : celles absorbées ou dispersées avant d'atteindre l'absorbeur a-Si:H ; et celles qui sont dues à une absorption incomplète des photons pénétrant l'absorbeur [68]. Le rendement quantique (QE) d'une cellule solaire, en particulier lorsqu'il est combiné avec des mesures indépendantes de réflexion et d'absorption de la cellule et des différentes couches fenêtres, est un outil puissant pour analyser ces pertes.

La perte par réflexion au niveau de la surface avant de la structure de la cellule, les pertes par absorption (dans le verre, la couche OTC et dans la couche fenêtre), et les pertes par

pénétration profonde, agissent principalement sur la densité de courant de court-circuit. Les pertes par réflexion ont lieu sur la surface avant du verre de la configuration superstrat. Dans la sous configuration p/OTC/verre de la cellule, les pertes ne sont directement attribuables à la polycristallinité, mais il semble qu'une morphologie plus brutale nécessite généralement des couches OTC et p plus épaisses [69].

On quantifie le rendement d'une cellule par le rapport entre la puissance débitée et la puissance lumineuse incidente. Un certain nombre de pertes, d'origines optiques ou électriques, peuvent limiter la tension délivrée ou le courant débité par la cellule [70,71]. Les rendements sont alors d'autant plus élevés que :

- les processus de photogénération sont nombreux et les pertes par thermalisation sont faibles,
- la séparation et la collecte des porteurs est facilitée.

Le travail des technologues, ingénieurs et chercheurs qui conçoivent et fabriquent les cellules consiste alors à optimiser chacun de ces points. Donnons quelques exemples :

Pour maximiser la photogénération, il est nécessaire de réduire les pertes optiques dues à l'ombrage en optimisant la largeur des contacts métalliques ; il faut également limiter les pertes dues à la réflexion des photons en adaptant les épaisseurs et les indices optiques des matériaux. Pour augmenter les rendements, on peut aussi combiner des matériaux de gaps différents afin d'utiliser au mieux l'ensemble du spectre solaire et ainsi limiter les pertes par thermalisation. Pour maximiser la collecte des porteurs, il est important de générer un champ électrique suffisant, en optimisant la structure de bandes et le dopage des matériaux ; mais il est également essentiel de réduire les pertes électriques dues aux recombinaisons des électrons avec les trous pendant leur transport. Pour cela, il faut maximiser la durée de vie des porteurs, en optimisant la qualité des matériaux et des interfaces, et ajuster les épaisseurs en conséquence.

1.8. Méthodes de dépôt du a-Si:H

Plusieurs procédés de fabrication de silicium en couches minces ont été développés durant les trente dernières années. Ces méthodes font appel à des principes physiques différents, mettant en jeu des processus qui déterminent les caractéristiques structurales des matériaux déposés. Ainsi, suivant la qualité du matériau obtenu et l'adaptation à un environnement industriel, certaines méthodes se sont plus développées que d'autres. L'organigramme de la Figure 1.15 illustre les différentes techniques de dépôt du silicium en couches minces.

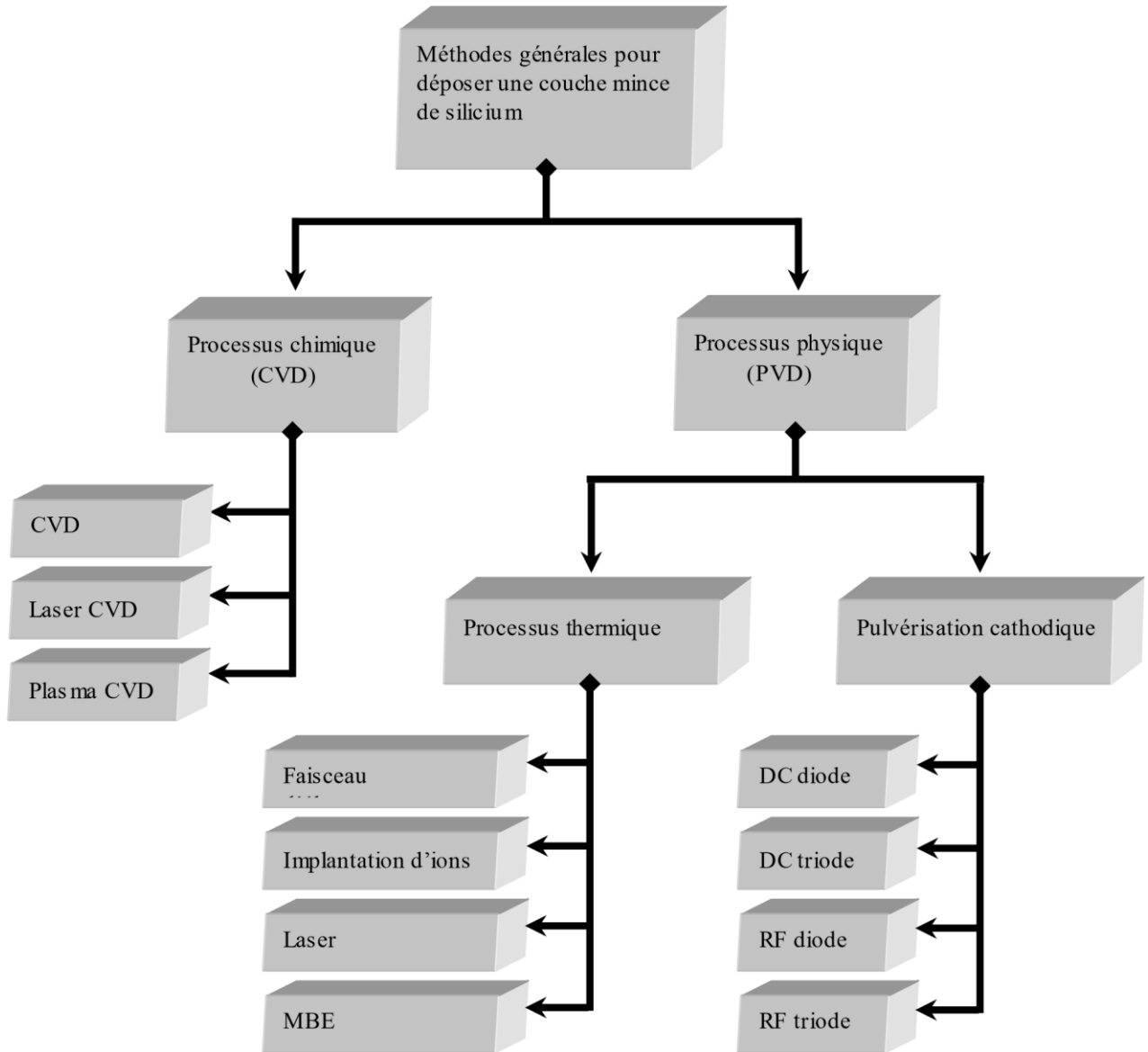


Figure 1.15 : Méthodes générales de dépôt de silicium en couches minces [72].

Ces méthodes sont fréquemment utilisées. Une des plus anciennes est l'évaporation thermique qui donne un matériau de mauvaise qualité, à haute densité de défauts et non utilisable. En réalité, cette technique ne permet pas de faire du a-Si:H, mais uniquement du a-Si.

Il existe également des équipements de dépôt par pulvérisation (sputtering), où une cible de c-Si est bombardée. Pour obtenir du a-Si:H une atmosphère d'H₂ est nécessaire. Mais c'est une technique avec laquelle il est difficile d'obtenir un matériau avec de bonnes caractéristiques optoélectroniques.

Une autre technique, appelée « Hot Wire CVD » (dépôt chimique en phase vapeur par filament chaud) donne de meilleurs résultats mais son application à un niveau industriel n'a pas encore été démontrée.

La technique actuellement la plus répandue est le dépôt chimique en phase vapeur assistée par plasma (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition : PECVD). L'échantillon sur lequel la couche va être déposée est introduit dans une chambre sous vide et chauffé entre 150°C et 350°C suivant les applications ; après avoir effectué et atteint un vide poussé ($< 10^{-6}$ mbar), un gaz ou un mélange de gaz contenant du silane (SiH_4) est introduit dans la chambre. Le flux du gaz et la pression dans l'enceinte peuvent être ajustés et contrôlés. Suite à l'application d'un champ électrique suffisant qui permet l'ionisation du gaz, un plasma est amorcé. Ce plasma permet la dissociation des molécules de gaz précurseur en radicaux qui vont réagir à la surface du substrat et ainsi former une couche (Figure 1.16). Le champ électrique peut être de type continu ou alternatif.

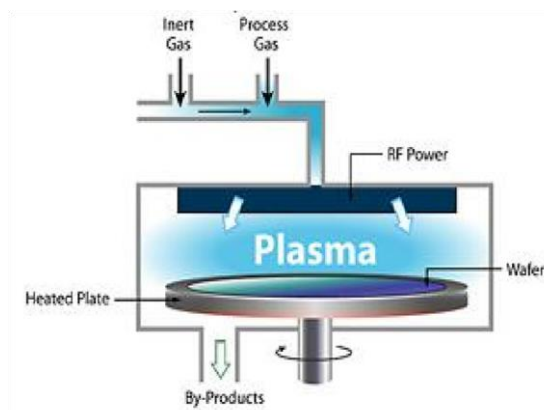


Figure 1.16 : Système de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma [73].

La fréquence standard utilisée dans l'industrie et dans d'autres instituts est en général de 13.56 MHz. Parmi les différentes techniques de dépôt par plasma, dans le but d'augmenter la vitesse de dépôt ou de diminuer la densité des défauts : **RF** (Radio fréquence) et **VHF-PECVD** (VHF pour Very High Frequency) ; cette dernière est utilisée pour caractériser les techniques utilisant des fréquences plus élevées que celle standard.

Les couches intrinsèques utilisent principalement du silane dilué avec de l'hydrogène. Pour les couches dopées, des gaz dits **dopants** sont ajoutés avec du diborane comme accepteur par exemple, et de la phosphine comme donneur. Un point intéressant du dépôt PECVD est sa température relativement basse. En effet, cela permet l'utilisation d'une multitude de substrats

différents, quartz, wafer (c-Si, InP, GaAs), verre nu ou avec des couches conductrices métalliques et/ou des oxydes transparents conducteurs, des substrats métalliques tel que l'aluminium ou l'acier ; mais aussi des plastiques, comme le PET (flexible) ou le polyimide. Les températures de dépôt sont également compatibles avec les circuits intégrés et le procédé n'endommage donc pas l'électronique [72].

Il y a aussi d'autres techniques de dépôt CVD à haute température, parmi elles la méthode LPCVD (Low Pressure Chemical Vapour Deposition) permet la réalisation de cellules photovoltaïques en silicium cristallin à basse pression et la RTCVD (Rapid Thermal CVD) permet, en revanche de faire croître des couches de silicium à pression atmosphérique [74].

1.9. Dégradation induite dans les cellules à base du silicium amorphe

1.9.1. Dégradation induite par la lumière

L'aspect le plus ennuyeux dans le développement des cellules solaires basées sur a-Si:H est l'effet de Staebler-Wronski (SWE), qui impose une limitation du rendement de conversion maximum procurable d'une cellule [75]. Cet effet se manifeste dans les matériaux de a-Si:H une fois exposé à la lumière du soleil pendant un temps prolongé, et provoque un décalage du niveau de Fermi vers le milieu du gap, accompagné d'une réduction de la conductivité en obscurité et de la photoconductivité du a-Si:H. Les défauts excessifs produits par la lumière absorbée sont approximativement un ordre de grandeur plus élevé de concentration des liaisons pendantes qui sont initialement présents dans le film déposé. Ces valeurs peuvent, cependant, être retournées à leurs valeurs originales par recuit du film au-dessus de 150°C pendant 1-3 heures ; c'est -à -dire, les changements sont réversibles ou métastables. Depuis 1980, toutes les données expérimentales ont montré que l'exposition à la lumière du a-Si:H augmente la densité des liaisons pendantes neutres de silicium. Pendant les vingt dernières années, le grand nombre d'expériences effectuées par divers laboratoires suggèrent que la recombinaison des porteurs produite par absorption de la lumière ou par l'injection dans l'obscurité soit la cause de la création des liaisons pendantes métastables.

Les principales leçons tirées des études fondamentales sur le vieillissement du silicium amorphe pour la conception des cellules à base de ce matériau sont : i) de limiter les recombinaisons au sein du matériau intrinsèque en utilisant une couche intrinsèque aussi mince que possible qui est à l'origine des cellules tandem a-Si:H/a-Si:H ou a-Si:H/a-SiGe:H ou a-Si:H/ μ c-Si:H... et ii) modifier la microstructure du matériau afin de produire une couche intrinsèque plus stable face à l'effet Staebler-Wronski.

1.9.2. Dégradation induite par courant

C'est Staebler et al qui ont observé pour la première fois que l'application d'un courant de polarisation en aval sur une cellule p-i-n dans l'obscurité peut également produire des changements de performances de la cellule, qui étaient semblables aux changements produits par illumination prolongée. Nakamura et al ont étudié la similitude entre les deux méthodes de dégradation, c'est-à-dire celle par exposition à la lumière, et l'autre en injectant le courant dans la cellule [76]. En 1991, R. A. Street a rapporté de ses études que la cinétique de création des défauts qui a été induite par un courant dans les dispositifs p-i-n, sans illumination, a une forme semblable aux défauts induits par lumière [59]. Yamagisawa a également rapporté qu'une bonne corrélation existe entre les caractéristiques de la dégradation provoquée par la lumière et le courant [77].

1.10. Gestion de la lumière

Les cellules solaires à couches minces en silicium amorphe offrent la possibilité d'obtenir des rendements élevés à faible coût. Cependant, leur épaisseur limitée et imposée par les propriétés intrinsèques des matériaux, empêche l'absorption complète de la lumière. Pour pallier ce manquement une gestion intelligente des photons est nécessaire. Il faut donc recourir à des astuces avancées pour une exploitation optimale de la lumière incidente dans la couche active de la cellule. Ce problème peut être résolu en utilisant des techniques de piégeage de la lumière à l'effet d'améliorer la longueur du chemin optique (OPL) des photons à l'intérieur de la cellule solaire. Récemment, plusieurs structures de piégeage de la lumière, telles que les couches texturées, la plasmonique, les structures diffractives et les milieux stratifiés, ont été utilisées dans les cellules solaires a-Si : H. En réglant convenablement les propriétés électriques et optiques de plusieurs nanostructures, il est également possible de les appliquer comme couche de diffusion de la lumière pour les applications solaires. De différentes manières, l'absorption optique et la collecte des porteurs peuvent être augmentées en améliorant les caractéristiques de réflexion de la couche arrière. L'une des stratégies consiste à encapsuler les nanoparticules de sulfure d'argent entre deux couches d'oxyde d'indium pour former un miroir nano structuré sur la face arrière (BRL), qui est composé d'un réseau nanoscopique qui permet de diriger la lumière à l'intérieur de la cellule. Cet assemblage bien ordonné conduit à piéger la lumière le plus longtemps possible dans la cellule ceci grâce au phénomène de diffraction. La lumière incidente va couvrir une fois l'épaisseur de l'absorbeur puis elle va réfléchir dans les angles particuliers. Autrement dit, les photons lumineux seront obligés de faire des va et vient à l'intérieur de la cellule de sorte qu'ils n'arrivent plus à ressortir et seront

en fin de compte absorbés. Cela permet à la lumière incidente de rebondir plusieurs fois à travers les couches actives, ce qui contribue à une meilleure exploitation de la lumière en minimisant les pertes d'absorptions qui se produisent au niveau du contact arrière sur une large plage de longueur d'onde.

CONCLUSION

Ce chapitre nous a permis de présenter les différents concepts qui entrent dans la compréhension de la photopile en général, et en particulier de la cellule solaire a-Si:H. Un aperçu sur le rayonnement solaire et l'effet photovoltaïque y a été abordé. Le rôle des différentes couches structurales de la cellule solaire à couches minces a-Si:H, ainsi que les propriétés et les techniques de dépôt de la couche absorbante a-Si:H, ont été, dans une mesure plus ou moins exhaustive, parcourus. Quelques particularités de l'absorbant a-Si:H, telles que les défauts de coordination, l'énergie de corrélation et la densité d'états, y ont aussi été présentées. La création des queues de bande et des liaisons pendantes, souvent citées dans la littérature, sont des causes éventuelles de la limitation des performances de la cellule solaire. Enfin, le phénomène de dégradation de la cellule induite par la lumière a été exploré.

Tous ces aspects montrent la complexité des structures photovoltaïques à couches minces et la difficulté de contrôler expérimentalement un grand nombre de paramètres, du fait que beaucoup sont très fluctuants et dépendent des techniques de dépôt des couches. En outre, l'influence de ces paramètres, sur le fonctionnement des dispositifs photovoltaïques à couches minces, est mal maîtrisée à l'heure actuelle. De ce fait, une investigation et une compréhension des mécanismes de pertes dans la photopile à couches minces de a-Si:H nous semble utiles. La simulation numérique se prête ainsi comme l'outil le plus efficace et indispensable à l'exploration et à la compréhension du comportement des dispositifs photovoltaïques à couches minces. A ce titre, le chapitre suivant sera consacré à l'exposé des concepts de base de la simulation numérique et à l'approche méthodologique utilisée dans la réalisation des objectifs de nos travaux.

CHAPITRE 2 : NOTIONS DE BASE DES SEMICONDUCTEURS ET MÉTHODOLOGIE NUMÉRIQUE

Introduction

La modélisation numérique est un outil incontournable dans la recherche fondamentale et appliquée. De plus, les avantages que présente la modélisation numérique dans la compréhension scientifique des systèmes complexes, à l'instar de la prévision du comportement des structures, lorsque certains paramètres sont modifiés font d'elle un outil nécessaire pour l'investigation des systèmes physiques, en l'occurrence des cellules solaires. A ce titre, la modélisation numérique permet de valider les explications proposées à la suite des analyses des résultats expérimentaux, de prédire les performances des cellules solaires, lorsque les propriétés des matériaux sont variables, mais aussi d'ajuster les résultats numériques à ceux expérimentaux.

Ce chapitre présente la méthodologie utilisée dans nos travaux, exclusivement basés sur la simulation numérique de la cellule solaire à base de a-Si:H, à l'aide du code SCAPS-1D, (*Solar cell Capacitance Simulator in 1-Dimension*). Ce code étant conçu sur la base des équations de la physique des semiconducteurs, un bref aperçu sur les semiconducteurs semble utile à la compréhension du code et à l'interprétation des résultats. En outre, des éléments de base de la cellule solaire et sur le concept de base de la simulation numérique d'une cellule solaire à couches minces seront abordés. Ensuite, nous décrirons le code de simulation SCAPS-1D et les techniques de caractérisation de la cellule solaire. Enfin, les détails liés à la construction du modèle opérationnel de notre cellule solaire et à sa validation seront présentés.

2.1. Les semiconducteurs

2.1.1. Généralités sur les semiconducteurs

Les semiconducteurs sont des matériaux intermédiaires entre les isolants et les conducteurs.

2.1.1.1. Quelques propriétés fondamentales des semiconducteurs

Trois propriétés fondamentales permettent de mettre en évidence la particularité d'un semiconducteur :

a) La résistivité

Variant entre 10^{-5} et $10^5 \Omega.m$, la simple valeur de la résistivité ne suffit pas pour identifier un semiconducteur car, aux très basses températures ou à l'état pur, la résistivité des semiconducteurs est comparable à celle des isolants et plusieurs semiconducteurs impurs sont aussi conducteurs que certains alliages métalliques. Il faut néanmoins remarquer que, contrairement aux métaux, la résistivité des semiconducteurs diminue avec l'augmentation de la température.

b) La conductivité

Dans un semiconducteur, la densité des électrons libres est faible par rapport à celle d'un métal. Elle est quasi-nulle au zéro absolu et augmente avec la température. En effet, la conductivité dans les semiconducteurs est assurée par deux types de porteurs de charge :

- Les électrons libres dont le mécanisme de conduction est identique à celui des métaux ;
- Les lacunes, communément appelées « trous », laissées par les électrons libérés par suite d'une augmentation de température ou par absorption d'un rayonnement. Un trou peut capturer un électron libre passant à proximité, on parle de *recombinaison* ; ou un électron d'une liaison voisine par suite d'une agitation thermique. Ce dernier phénomène permet à l'électron lié de changer de position et par suite, le trou. Puisqu'il se répète, tout se passe comme si une charge positive se déplace dans le matériau.

En l'absence de tension appliquée, le trou se déplace de façon aléatoire et son mouvement est comparable à l'agitation thermique des électrons libres. Un champ électrique \vec{E} appliqué, favorise la capture d'un électron appartenant à une liaison située sur une ligne de champ. Le déplacement de l'électron lié prend alors l'apparence de celui d'une charge positive dans la direction et le sens du champ, le trou auquel on associe toutes les propriétés d'une particule. La *figure 2.1* illustre ces phénomènes.

Ainsi, dans un semiconducteur, à la conductivité électronique, s'ajoute celle des trous. Cette conductivité dépend du nombre de porteurs de charge (électrons libres et trous). Si n est la densité d'électrons libres et p celle des trous, dans les semiconducteurs purs (semiconducteurs intrinsèques), ces deux densités sont égales à l'équilibre thermodynamique.

Lorsque la température s'élève, les porteurs libres deviennent de plus en plus nombreux par rapport aux électrons liés de valence et la conductivité du semiconducteur croît alors suivant la loi :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = A \exp\left(-\frac{B}{T}\right) \quad (2.1)$$

où ρ est la résistivité, A et B sont les paramètres qui dépendent des propriétés du semiconducteur.

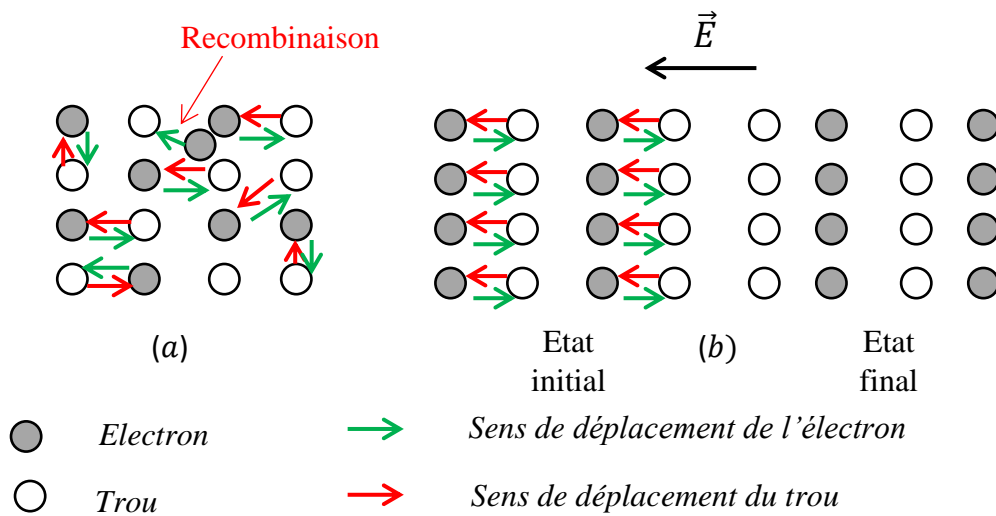


Figure 2.1 : Mécanisme de conduction des trous : a) en absence de champ ; b) en présence de champ (\vec{E} : Champ électrique).

c) Structure de bandes d'énergie

Dans un atome isolé, les électrons occupent les niveaux d'énergie discrets. Par contre, dans un cristal, les niveaux internes (moins élevés) sont occupés par des électrons fortement liés au noyau, tandis que les niveaux les plus élevés, dits de valence, sont occupés par des électrons moins liés au noyau et qui sont plus sensibles à l'environnement atomique et assurent les liaisons de covalence avec les atomes voisins. Ainsi, l'interaction entre les atomes voisins dans le cristal élargit chaque niveau d'énergie discret de l'atome isolé en de bandes d'énergie permises constituées par les niveaux d'énergie discrets très rapprochés de ces atomes voisins. Les différentes bandes permises sont séparées par une bande interdite, dont la largeur est appelée le « gap ». La première bande permise est appelée la bande de valence, occupée par les électrons de valence. Elle est généralement saturée mais, ses électrons peuvent être libérés plus ou moins facilement selon la nature du corps. La seconde est la bande de conduction qui peut

être vide ou incomplète. La structure de ces bandes est un critère qui permet de différencier les trois classes de matériaux, à savoir : les isolants, les semiconducteurs et les métaux. Dans le cas particulier des semiconducteurs, la bande interdite est assez petite (gap $\sim 1\text{eV}$) pour que, sous l'effet de l'agitation thermique ou de l'influence d'un rayonnement par exemple, un électron de la bande de valence puisse franchir le gap pour la bande de conduction. La *figure 2.2* représente la structure schématique de bandes des trois classes de matériaux.

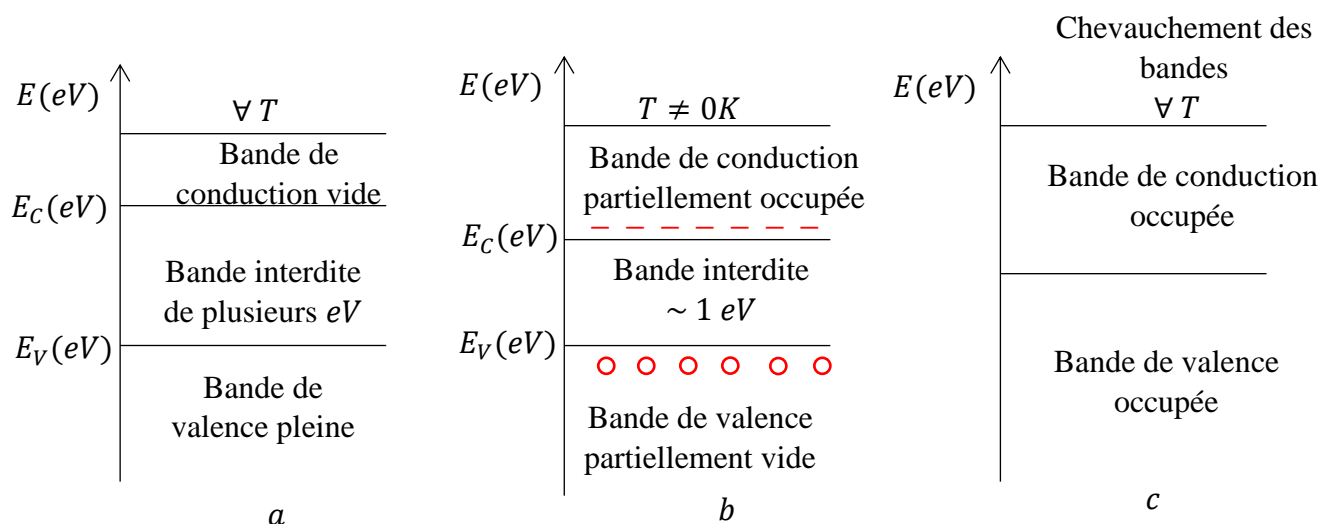


Figure 2.2 : Schéma de la structure de bandes : a) isolant ; b) semiconducteur ; c) métal.

2.1.1.2. Les semiconducteurs composés

On dénombre parmi les corps purs simples, 12 (douze) semiconducteurs, à savoir : le bore B, le carbone C, le silicium Si, le phosphore P, le soufre S, le germanium Ge, l'arsenic As, le sélénium Se, l'étain Sn, l'antimoine Sb, le tellure Te et l'iode I. En outre, un grand nombre de composés binaires, répondant à la formule $A^X B^{8-X}$, possède des propriétés de semiconducteur, où A est un élément du groupe X et B celui du groupe $8 - X$ (Tableau 2.1, présente quelques exemples). A côté des composés $A^X B^{8-X}$, il existe également des semiconducteurs binaires répondant aux formules $A^{IV} B^{VI}$ (PbS, PbSe et PbTe) et $A^I B^{VI}$ (CuS, CuO et Cu_2O), des composés ternaires de formules $A_1^X A_2^X B^{8-X}$ et $A^X B_1^{8-X} B_2^{8-X}$ et des composés quaternaires de formules $A_1^X A_2^X B_1^{8-X} B_2^{8-X}$. En dehors des composés inorganiques, on connaît également des composés organiques qui manifestent les propriétés semiconductrices, à l'instar de l'anthracène, le bleu de méthylène, etc.

Tableau 2.1 : Composés binaires de formule $A^X B^{8-X}$.

Formule du composé	Exemples
$A^I B^{VII}$	AgCl, CuBr, KBr, etc...
$A^{II} B^{VI}$	CdS, ZnO, ZnS, CdTe, etc...
$A^{III} B^V$	GaAs, GaP, etc ...
$A^{IV} B^{IV}$	SiC et SiGe

De nos jours, les règles de prédiction de la semiconductibilité étant maîtrisées, il est possible de synthétiser les composés aux propriétés les mieux adaptées aux besoins pratiques, des plus simples aux plus complexes.

2.1.2. Densité d'états, probabilité de présence et concentration des porteurs dans les semiconducteurs non dégénérés

Un semiconducteur est dit non dégénéré lorsque le niveau de *Fermi* se trouve dans la bande interdite, à plus de $3kT$ des limites de cette bande. C'est le cas de la grande majorité des semiconducteurs utilisés pour la fabrication des composants électroniques, notamment les photopiles.

2.1.2.1. Densité d'états

La densité d'états d'énergie comprise entre E et $E + dE$ est le nombre d'états par unité de volume V du cristal. Elle est donnée par la relationM :

$$N(E) = 2\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - V_0)^{\frac{1}{2}} \quad (2.2)$$

Les états électroniques ne pouvant contenir au maximum que deux électrons de spins opposés, la relation (2.2) devra être multipliée par 2 (deux) pour tenir compte du *principe d'exclusion de Pauli* ; soit alors :

$$N(E) = 4\pi \left(\frac{2m^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E - V_0)^{\frac{1}{2}} \quad (2.3)$$

m^* est la masse effective du porteur de charge, h la constante de *Planck*, E l'énergie de l'état considéré et V_0 l'énergie potentielle.

2.1.2.2. Probabilité de présence

a) Cas de l'électron

Les électrons étant des particules de spin $\frac{1}{2}$. Ils obéissent à la statistique de *Fermi-Dirac*, dont la probabilité d'occupation d'un état électronique bien défini, d'énergie E , est donnée par la fonction :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (2.4)$$

où E_F est l'énergie du niveau de *Fermi*, k la constante de *Boltzmann* et T la température absolue. La fonction $f_n(E)$ est égale à l'unité pour des énergies très inférieures à E_F et quasi-nulle pour des énergies largement supérieures à E_F .

Puisque 90% de la variation de la fonction $f_n(E)$ se produit dans un domaine de $\pm 3kT$ autour de la valeur centrale E_F , si $E > E_F + 3kT$, l'exponentielle figurant au dénominateur est supérieure à 20 et l'on peut négliger le nombre 1 avec une erreur maximale de 5%. La probabilité de présence obéit alors à la statistique de *Boltzmann*, soit :

$$f_n(E) \approx \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) \quad (2.5)$$

b) Cas du trou

La probabilité d'occupation d'un état par un trou est égale à la probabilité pour que cet état ne soit pas occupé par un électron. Soit alors :

$$f_p(E) = 1 - f_n(E) \quad (2.6)$$

Quelles que soient les positions du niveau d'énergie E et du niveau de *Fermi*, la fonction de *Fermi-Dirac* pour les trous est donnée par :

$$f_p(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right)} \quad (2.7)$$

Si $E < E_F - 3kT$, la probabilité de présence d'un trou peut être approchée par la formule de *Boltzmann* d'expression :

$$f_p(E) \approx \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) \quad (2.8)$$

2.1.2.3. Concentration des porteurs

Dans le cas d'un semiconducteur peu dopé, c'est-à-dire que la concentration des dopants est inférieure à 10^{18} cm^{-3} , le nombre d'électrons ou de trous dans les bandes permises est très inférieur au nombre de places disponibles. On peut appliquer la statistique de *Boltzmann* à tous les niveaux des bandes permises.

a) Cas des électrons libres

La densité d'états des électrons dans la bande de conduction s'écrit, en tenant compte de l'expression (2.3), sous la forme :

$$N_C(E) = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E - E_C)^{\frac{1}{2}} \quad (2.9)$$

où m_n^* est la masse effective des électrons et E_C est le minimum d'énergie de la bande de conduction. La concentration n d'électrons libres est égale au produit du nombre d'états d'énergie compris entre E et $E + dE$ par la probabilité pour qu'un électron s'y trouve, étendu à la bande de conduction ; soit :

$$n = \int_{E_C}^{E_{\max}} N_C(E) f_n(E) dE \quad (2.10)$$

L'intégrale (2.10) portant sur toute la bande de conduction et tenant compte de la décroissance exponentielle de $f_n(E)$ pour les grandes valeurs de E , on peut remplacer la limite supérieure de l'intégrale (2.10) par $+\infty$. L'expression (2.10) se réécrit alors de la manière suivante :

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{E_C}^{+\infty} (E - E_C)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{E_F - E}{kT}\right) dE \quad (2.11)$$

et qui, après une intégration, permet d'exprimer la concentration des électrons libres dans la bande de conduction sous la forme :

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_F - E_C}{kT}\right) \quad (2.12)$$

où

$$N_C = \left(\frac{8\pi m_n^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.13)$$

est la densité d'états effectifs dans cette bande.

b) Cas des trous

La densité d'états des trous dans la bande de valence s'écrit aussi, en se référant à l'expression (2.3), sous la forme :

$$N_V(E) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} (E_V - E)^{\frac{1}{2}} \quad (2.14)$$

où m_p^* est la masse effective des trous et E_V est l'énergie supérieure de la bande de valence. La concentration p des trous est aussi égale au produit du nombre d'états d'énergie compris entre E et $E + dE$ par la probabilité de présence d'un trou, étendu à la bande de valence; soit :

$$p = \int_{E_{\min}}^{E_V} N_V(E) f_p(E) dE \quad (2.15)$$

L'intégrale (2.15) portant également sur toute la bande de valence et tenant compte de la décroissance exponentielle de $f_p(E)$ pour les faibles valeurs de E , on peut également, sans gêne, remplacer la limite inférieure de l'intégrale (2.15) par $-\infty$. L'expression (2.15) se réécrit aussi sous la forme :

$$p = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \int_{-\infty}^{E_V} (E_V - E)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right) dE \quad (2.16)$$

et qui, après une intégration permet d'exprimer la concentration des trous dans la bande de valence, sous la forme :

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_F}{kT}\right) \quad (2.17)$$

où

$$N_v = \left(\frac{8\pi m_p^* kT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.18)$$

est la densité d'états effectifs dans la bande de valence.

2.1.3. Semiconducteurs intrinsèques

Les semiconducteurs intrinsèques sont des matériaux semiconducteurs purs. Leur réseau cristallin ne contient pas d'impuretés susceptibles de modifier la densité des porteurs.

2.1.3.1. Densité intrinsèque des porteurs de charge

Dans un semiconducteur intrinsèque, à une température T donnée, à chaque électron excité thermiquement dans la bande de conduction, correspond un trou dans la bande de valence. Ainsi, à l'équilibre thermodynamique, si n_i est la densité intrinsèque des porteurs de charge, alors on peut écrire :

$$n_i = n = p \quad (2.19)$$

De cette relation, on peut déduire que :

$$n_i = \sqrt{np} = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad (2.20)$$

Où $E_g = E_c - E_v$ est la largeur de la bande interdite.

2.1.3.2. Position du niveau de *Fermi* intrinsèque

La relation (2.19) permet de déterminer la position du niveau de *Fermi*. En effet, en partant de cette égalité on trouve aisément que :

$$E_{F_i} = \frac{E_c + E_v}{2} + \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_v}{N_c}\right) \quad (2.21)$$

Au zéro absolu (0 K), le niveau de *Fermi* intrinsèque coïncide avec le milieu de la bande interdite. Cette position reste sensiblement la même à une température T quelconque.

2.1.4. Semiconducteurs extrinsèques

Les semiconducteurs extrinsèques proviennent de la présence des imperfections dans le réseau cristallin d'un semiconducteur intrinsèque. Ces imperfections entraînent des variations importantes de la conductivité et la durée de vie des porteurs. Elles sont de divers types dont les plus importantes sont :

- L'incorporation d'atomes étrangers, de valence différente, dans le réseau cristallin d'un semiconducteur intrinsèque par dopage ;
- Les défauts physiques dus aux atomes qui ne se sont pas logés à leur place dans le réseau cristallin et ont laissé des sites vacants (défauts de *Schottky*) ou sont allés se loger en positions interstitielles (défauts de *Frankel*) ;
- Les imperfections chimiques dues à la composition du matériau qui ne correspond pas tout à fait à la formule théorique dite de composition stoéchiométrique. Les atomes du constituant en excès viennent se loger en positions interstitielles, comme dans le cas des oxydes, des sulfures, des séléniures, etc.

Ces imperfections perturbent localement la périodicité du potentiel cristallin en introduisant des niveaux d'énergie, dits extrinsèques, qui peuvent être occupés par un électron lié à l'impureté. L'interaction entre les différentes imperfections de même type, provoque l'élargissement de ces niveaux extrinsèques en bandes qui peuvent se trouver soit dans les bandes d'énergie permise, soit dans la bande interdite du cristal parfait. Dans la première situation, les niveaux extrinsèques seront dilués à cause de la grande densité des niveaux intrinsèques. Par contre, dans la bande interdite, ils confèrent au matériau des propriétés extrêmement importantes. On distingue :

- Les niveaux voisins des limites des bandes permises (niveaux peu profonds « *shallow levels* »). Ils sont distants des limites des bandes de moins de 0,1 eV environ. Ces niveaux interagissent facilement avec la bande permise adjacente. Par exemple, ils conditionnent la conductivité extrinsèque du matériau semiconducteur en fournissant des électrons ou des trous aux bandes de conduction ou de valence.
- Les niveaux profonds « *deep levels* », plus éloignés des limites de bandes, ont une action à la fois sur la conductivité et sur la durée de vie des porteurs majoritaires.

En fonction de la position des niveaux voisins, on va distinguer :

- Les semiconducteurs de type n dans lesquels le niveau voisin est situé dans la bande interdite, en dessous de la bande de conduction, et est occupé par des *donneurs d'électron* non ionisés à basse température. Un faible apport d'énergie entraîne l'ionisation des donneurs et les électrons libérés passent dans la bande de conduction. Ainsi, la conductivité du semiconducteur est assurée par les porteurs majoritaires qui sont les électrons.
- Les semiconducteurs de type p dans lesquels le niveau voisin est situé dans la bande interdite, immédiatement au-dessus de la bande de valence. il est normalement vide à basse température (*accepteurs d'électron*). Par apport d'énergie, un électron de la bande de valence peut être élevé jusqu'au niveau voisin et l'accepteur s'ionise négativement. La bande de valence étant alors incomplètement remplie, la conductivité du semiconducteur est assurée par les porteurs majoritaires qui sont, dans ce cas, les trous.

La présence des donneurs ou des accepteurs ionisés modifie les populations n et p qui sont toujours données par les expressions (2.12) et (2.17). Puisque les densités d'états $N_C(E)$ et $N_V(E)$ ne sont pas affectées par la présence des impuretés, le niveau de *Fermi* extrinsèque a alors une valeur différente de celle trouvée dans les semiconducteurs intrinsèques. En supposant qu'à l'équilibre thermodynamique, tous les donneurs et les accepteurs sont ionisés, l'équation d'électroneutralité s'écrit :

$$n + N_A = p + N_D \quad (2.22)$$

où N_A et N_D sont respectivement les concentrations des accepteurs et des donneurs ionisés.

Si l'on suppose que le semiconducteur extrinsèque est de type n , la concentration n des électrons est sensiblement égale à celle des donneurs ionisés, à des températures supérieures à 200 K (*approximation de déplétion complète*). Soit :

$$n \approx N_D \quad (2.23)$$

En tenant compte de cette approximation, l'expression (2.12) permet de calculer le niveau de *Fermi* extrinsèque, à partir de l'expression :

$$E_{Fn} = E_C - kT \ln \frac{N_C}{N_D} \quad (2.24)$$

De ce fait, l'augmentation de la concentration des donneurs déplace le niveau de *Fermi* vers la bande de conduction.

Si l'on suppose maintenant que le semiconducteur extrinsèque est de type *p*, la concentration *p* des trous est sensiblement égale à celle des accepteurs ionisés, à des températures supérieures à 200 K (*approximation de de déplétion complète*). Soit :

$$p \approx N_A \quad (2.25)$$

En tenant compte de cette approximation, l'expression (2.17) permet également de calculer le niveau de *Fermi* extrinsèque, à partir de l'expression :

$$E_{Fp} = E_V + kT \ln \frac{N_V}{N_A} \quad (2.26)$$

Ainsi, l'augmentation de la concentration des accepteurs déplace le niveau de *Fermi* vers la bande de valence.

2.1.5. Semiconducteur hors d'équilibre

Sous des conditions de polarisation ou d'illumination, l'égalité $n.p = n_i^2$ n'est plus possible. Le niveau de *Fermi* n'est plus le même pour les trous et les électrons. On introduit alors le concept des *quasi-niveaux de Fermi* E_{Fn} et E_{Fp} pour les électrons et les trous respectivement. Les concentrations des électrons et des trous sont réajustées et se réécrivent sous la forme :

$$n = N_C \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_C}{kT}\right) \quad (a) \quad (2.27)$$

$$p = N_V \exp\left(\frac{E_V - E_{Fp}}{kT}\right) \quad (b)$$

2.2. Génération-recombinaison et durée de vie des porteurs

2.2.1. Etats volumiques

La création des porteurs dans les semiconducteurs peut se réaliser suivant deux processus :

- La génération spontanée des porteurs due à l'agitation thermique. Elle se caractérise par un paramètre g_{th} , appelé *taux de génération thermique* des porteurs, qui mesure le nombre de porteurs générés par agitation thermique, par unité de volume et par unité temps. Ce paramètre est intrinsèque au matériau.
- La génération causée par une source extérieure au semiconducteur, telle une excitation optique, un photon d'énergie supérieure au gap du semiconducteur, une irradiation des particules d'énergie élevée, un champ électrique intense, de l'ordre de 10^5 à 10^6 V/m, une injection ou une extraction de porteurs, une électrode métallique en contact avec le cristal ou d'une jonction réalisée dans le cristal. Ce type de génération est caractérisé par un paramètre de génération g , appelé *taux de génération* des porteurs, qui est spécifique au processus mis en jeu.

A côté du processus de création des porteurs, il se produit également, dans le semiconducteur, un phénomène d'annihilation des porteurs excédentaires, appelé recombinaison et caractérisé par le paramètre r' propre au matériau.

Ainsi, la variation du nombre de porteurs par unité de volume et par unité de temps, due au processus génération-recombinaison, s'écrit :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g + g_{th} - r' \quad (2.28)$$

Le *taux de recombinaison* des porteurs, r , étant la balance entre les recombinaisons et le taux de génération thermique, $r = r' - g_{th}$, l'équation (2.28) se réécrit sous la forme :

$$\left(\frac{dn}{dt}\right)_{gr} = g - r \quad (2.29)$$

La recombinaison d'un électron et d'un trou dans un semiconducteur peut se produire directement, par rencontre des deux particules, ou indirectement, par l'intermédiaire d'une impureté qui joue le rôle d'un agent de liaison.

2.2.1.1. Recombinaison directe électron-trou

Elle est encore appelée recombinaison bande à bande pour les électrons et les trous. L'énergie de transition d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction se conserve soit par émission d'un photon, processus radiatif ; soit par transfert d'énergie à un autre électron ou à un autre trou, processus Auger. La *figure 2.3* illustre ces phénomènes.

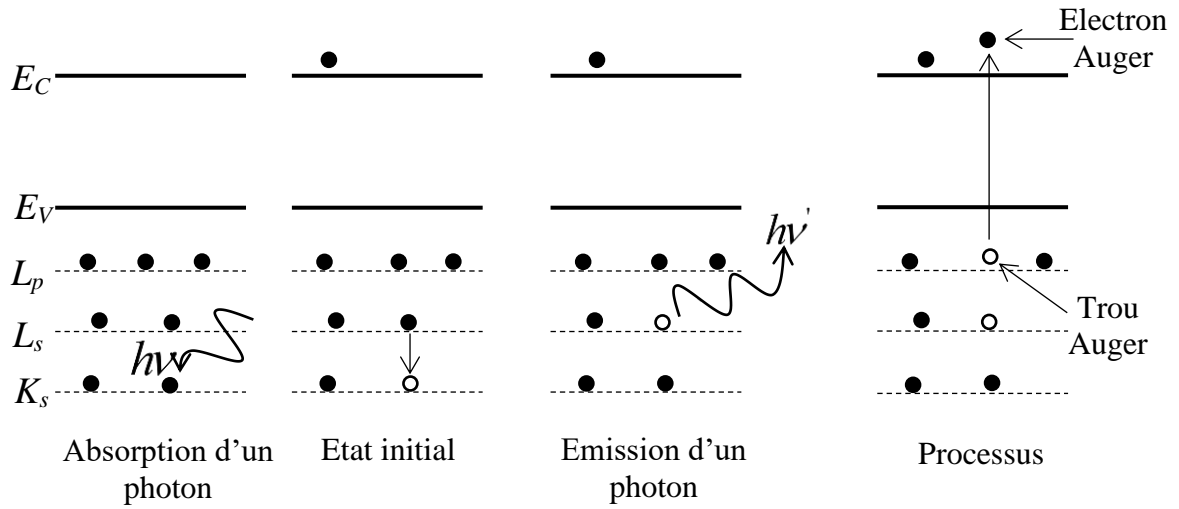


Figure 2.3 : *Processus de recombinaison bande à bande : processus radiatif et Auger.*

Le nombre de recombinaisons directes électron-trou est proportionnel au nombre d'électrons, d'une part, et au nombre de trous, d'autre part. Il est donné par la relation :

$$r' = Rpn \quad (2.30)$$

La constante de proportionnalité R est appelée coefficient de recombinaison et est liée au taux de génération thermique g_{th} par la relation :

$$R = \frac{g_{th}}{n_i^2} \quad (2.31)$$

Ce coefficient dépend de la température et de la structure de bandes du semiconducteur. Dans les semiconducteurs à gap direct, la transition bande à bande a un coefficient de recombinaison de l'ordre de $10^{-10} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$, et cent mille fois plus grand que celui des semiconducteurs à gap indirect [78].

Ainsi, le taux de recombinaisons directes électron-trou s'écrit sous la forme :

$$r = R(np - n_i^2) \quad (2.32)$$

Dans l'état hors équilibre, $n = n_0 + \Delta n$ et $p = p_0 + \Delta p$. La condition d'électroneutralité impose que $\Delta n = \Delta p$. En réécrivant (2.32), on montre que r peut se mettre sous les formes :

$$r = \frac{\Delta n}{\tau(\Delta n)} = \frac{\Delta p}{\tau(\Delta p)} \quad (2.33)$$

où τ est la durée de vie des porteurs minoritaires.

En régime de *faible injection*, c'est-à-dire que la concentration des porteurs minoritaires en excès est faible par rapport à la densité des porteurs majoritaires à l'équilibre thermodynamique ($\Delta n = \Delta p \ll n_0$ ou p_0), le taux de recombinaison directe peut être approximé par les expressions suivantes :

- Pour un semiconducteur de type n ,

$$r \approx RN_D \Delta p = \frac{\Delta p}{\tau_h} \quad (2.34)$$

et la durée de vie des trous τ_h est donnée par :

$$\tau_h = \frac{1}{RN_D} \quad (2.35)$$

- Pour semiconducteur de type p ,

$$r \approx RN_A \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau_e} \quad (2.36)$$

et la durée de vie des électrons τ_e est donnée par :

$$\tau_e = \frac{1}{RN_A} \quad (2.37)$$

De ce fait, en régime de *faible injection*, la durée de vie des transitions directes est inversement proportionnelle au dopage.

2.2.1.2. Recombinaison assistée par des centres de recombinaison

Dans les semiconducteurs peu dopés, les densités des porteurs libres sont faibles. Par conséquent, la probabilité qu'un électron et un trou se recombinent est fortement réduite. Cependant, la présence des impuretés incontrôlées joue un rôle important dans le processus de recombinaison. Une impureté peut piéger un électron (trou) qui attire par attraction coulombienne un trou (électron), provoquant la recombinaison de ces deux particules. En effet, *les centres de recombinaison* sont des défauts profonds qui ont une grande probabilité de capture des électrons. Ainsi, l'électron, au lieu d'être réémis vers la bande de conduction, comme dans le cas d'un *piège à électron*, va capturer un trou et entraîner la recombinaison de

la paire électron-trou. La *figure 2.4* met en évidence le mécanisme des centres de recombinaison.

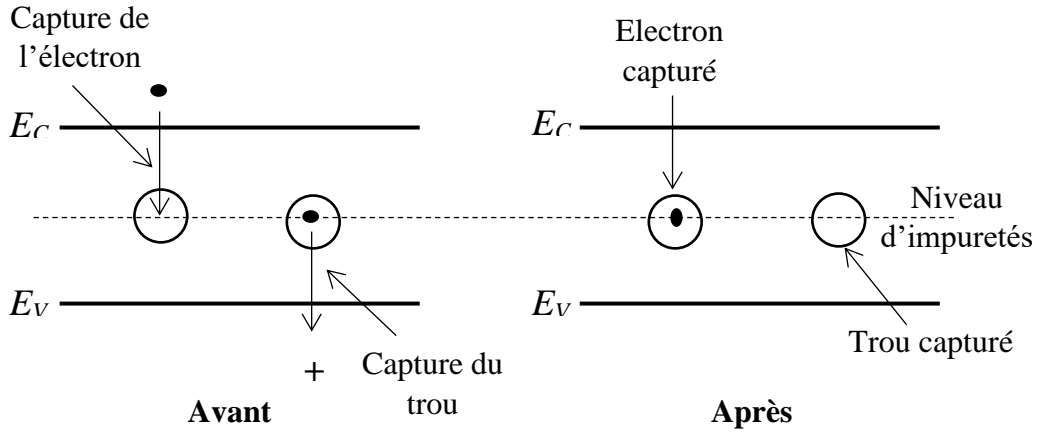


Figure 2.4 : Centres de recombinaison.

Le calcul du taux de recombinaison, associé à ces centres, fait l'objet de *la théorie de Shockley-Read-Hall*. Ce taux est donné par l'expression :

$$r = \frac{\sigma_e \sigma_h v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_e \left[n + n_i \exp\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right) \right] + \sigma_h \left[p + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_t}{kT}\right) \right]} \quad (2.38)$$

σ_e et σ_h sont respectivement les sections efficaces des électrons et des trous ; v_{th} est la vitesse thermique des porteurs minoritaires ; N_t est la densité des défauts profonds ; E_t est l'énergie de transition ; E_i est l'énergie de l'état électronique.

r est maximal lorsque $E_t = E_i$. Cela signifie que *les centres de défauts proches du milieu de la bande interdite sont des centres clés de recombinaison*. Si l'on se limite à de tels niveaux, l'expression (2.38) peut se réécrire sous la forme :

$$r = \frac{\sigma_e \sigma_h v_{th} N_t (pn - n_i^2)}{\sigma_e [n + n_i] + \sigma_h [p + n_i]} \quad (2.39)$$

En régime de faible injection, le taux de recombinaison indirecte peut être approximé par les expressions suivantes :

- Pour un semiconducteur de type n ,

$$r \approx \sigma_h v_{th} N_t \Delta p = \frac{\Delta p}{\tau_h} \quad (2.40)$$

et la durée de vie des trous τ_h est donnée par :

$$\tau_h = \frac{1}{\sigma_h v_{th} N_t} \quad (2.41)$$

- Pour un semiconducteur de type p ,

$$r \approx \sigma_e v_{th} N_t \Delta n = \frac{\Delta n}{\tau_e} \quad (2.42)$$

et la durée de vie des électrons τ_e est donnée par :

$$\tau_e = \frac{1}{\sigma_e v_{th} N_t} \quad (2.43)$$

De façon similaire aux expressions (2.35) et (2.37), la durée de vie des transitions indirectes est inversement proportionnelle à la densité des défauts profonds.

2.2.2. Etats de surface et d'interface

2.2.2.1. Etats de surface

A la surface d'un semiconducteur, les états électroniques sont modifiés contrairement aux états électroniques contenus en volume, regroupant les bandes de valence et de conduction, les états discrets associés aux donneurs et aux accepteurs ou aux centres profonds. Ces modifications surfaciques sont de deux ordres :

- Les états surfaciques intrinsèques causés par la rupture de la périodicité du réseau cristallin, qui se justifient par le fait que, les atomes de surfaces n'établissent les liaisons que dans un demi-plan et laissent apparaître des liaisons pendantes du côté du vide ;
- Les états surfaciques extrinsèques provoqués par l'absorption à la surface d'atomes étrangers, à l'instar des atomes d'oxygène qui entraînent l'oxydation de la surface du semiconducteur. La présence de ces impuretés crée une distorsion du réseau cristallin due à la différence de maille entre le semiconducteur et son oxyde.

2.2.2.2. Etats d'interface

Dans les hétérostructures, à l'interface des deux matériaux, le réseau cristallin passe sur une distance de quelques angströms de la périodicité d'un matériau à celle d'un autre. Ce brusque changement crée, à l'interface, des états électroniques différents de ceux des matériaux : ce sont les états d'interface.

Les états de surface et d'interface entraînent des recombinaisons à la surface du matériau ou à l'interface de deux matériaux. Ces recombinaisons sont également caractérisées par le taux de recombinaison surfacique qui, dans les hétérostructures, permet d'estimer les recombinaisons aux contacts avant ou arrière et à l'interface des matériaux. Par analogie au taux de recombinaison volumique, le taux de recombinaison surfacique est donné par :

$$s = \frac{\sigma_e \sigma_h v_{th} N_{st} (p_s n_s - n_i^2)}{\sigma_e \left[n_s + n_i \exp\left(\frac{E_{st} - E_i}{kT}\right) \right] + \sigma_h \left[p_s + n_i \exp\left(\frac{E_i - E_{st}}{kT}\right) \right]} \quad (2.44)$$

n_s et p_s sont respectivement les concentrations surfaciques des électrons et des trous ; N_{st} est la densité des états de surface ou d'interface ; E_{st} est l'énergie des états de surface ou d'interface.

Dans ce cas également, *les centres les plus efficaces se trouvent au milieu de la bande interdite*. Ces centres de recombinaison agissant de façon presque identique sur un trou ou sur un électron ($\sigma_e = \sigma_h = \sigma$), l'expression (2.44) se réécrit plus simplement, sous la forme :

$$s = \frac{\sigma v_{th} N_{st} (p_s n_s - n_i^2)}{\left[n_s + p_s + 2n_i \cosh\left(\frac{E_{st} - E_i}{kT}\right) \right]} \quad (2.45)$$

En pratique, pour réduire les recombinaisons à la surface ou à l'interface, on peut procéder par passivation de ces états ou par introduction d'une couche fenêtre qui empêche les porteurs minoritaires d'atteindre la surface.

Pour une exploitation des charges libres présentes dans le semiconducteur, nous allons présenter, à la suite des mécanismes précédents, les phénomènes de transport de ces charges à travers les équations fondamentales d'un semiconducteur, et le code de simulation numérique qui permet d'approcher les solutions de ces équations.

2.3. Simulation numérique d'une cellule solaire

Le concept de la simulation numérique d'une cellule solaire est basé sur la résolution des équations différentielles de *Poisson* et de *Continuité*. Ces équations ne sont pas couplées linéairement, aussi bien pour les électrons que pour les trous, mais elles sont fonction de la position. Au vue de la taille des cellules, de l'ordre de quelques micromètres, pour les plus grandes, une résolution numérique à une dimension de ces équations est assez réaliste pour produire des résultats probants. C'est la raison pour laquelle, nous avons adopté une description unidimensionnelle de la cellule solaire a-Si:H, en utilisant le code de simulation SCAPS-1D, dont la pertinence des résultats a fortement contribué à l'essor des cellules solaires.

2.3.1. Equation de Poisson

La présence des charges libres et liées, dans les matériaux semiconducteurs de la cellule solaire, crée dans son environnement une distribution de charge, de densité $\rho(x)$, qui engendre un champ électrique dérivant d'un potentiel électrique $\psi(x)$.

La densité de charge, est la somme des densités de trous et d'électrons libres, de concentrations respectives $p(x)$ et $n(x)$, des densités des donneurs et des accepteurs ionisés, de concentrations respectives $N_D^+(x)$ et $N_A^-(x)$, et de la densité ρ_{def} des porteurs piégés par des centres de défauts actifs. Ainsi, la densité de charge au sein de la cellule s'écrit :

$$\rho(x) = e \left[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + \frac{\rho_{def}}{e} \right] \quad (2.46)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[-\varepsilon(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] = e \left[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + \frac{\rho_{def}}{e} \right] \quad (2.47)$$

A l'équilibre thermodynamique, les concentrations des trous et des électrons libres s'expriment en fonction du niveau de *Fermi*, suivant les équations (2.12) et (2.17). Cependant, lorsque la cellule est soumise à une tension de polarisation et/ou à une excitation lumineuse, ces concentrations s'expriment en fonction des quasi-niveaux de *Fermi*, suivant les équations (2.27).

Les concentrations des donneurs et des accepteurs ionisés résultent des niveaux superficiels de dopage, voisins des bandes permises. Si E_D et E_A sont respectivement les énergies des niveaux donneurs et accepteurs, les concentrations des donneurs et des accepteurs ionisés, à l'équilibre thermodynamique, ont pour expressions :

$$N_D^+(x) = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_F - E_D}{kT}\right)} \quad (2.48)$$

et

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1 + 4 \exp\left(\frac{E_A - E_F}{kT}\right)} \quad (2.49)$$

Le facteur pré-exponentiel 2, dans l'équation (2.48), représente la dégénérescence et provient du choix possible des deux états de spin différents dans l'échange d'énergie avec la bande de conduction, des donneurs monovalents ; et le facteur pré-exponentiel 4, dans l'équation (2.49), traduit également la dégénérescence des deux états de spin possibles dans l'échange d'énergie, des accepteurs monovalents avec la bande de valence, constituée des bandes des trous lourds et des trous légers.

Dans l'état hors équilibre, ces concentrations s'expriment en fonction des quasi-niveaux de *Fermi*, et sont réécrites sous les formes :

$$N_D^+(x) = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(\frac{E_{Fn} - E_D}{kT}\right)} \quad (2.50)$$

et

$$N_A^-(x) = \frac{N_A}{1 + 4 \exp\left(\frac{E_A - E_{Fp}}{kT}\right)} \quad (2.51)$$

On note que, lorsque les états de pièges à électrons et/ou à trous sont des centres actifs, ils portent respectivement une charge négative (électron piégé) et une charge positive (trou piégé). Par conséquent, la densité des centres de défauts actifs est proportionnelle à la somme des concentrations des électrons et des trous piégés, $p_p(x)$ et $n_p(x)$. Ces concentrations

s'expriment également, en tenant compte de l'état d'équilibre thermodynamique ou non, en fonction du niveau de *Fermi* ou des quasi-niveaux de *Fermi*.

2.3.2 Equation de continuité

Considérons, par exemple, un élément de volume, d'épaisseur dx , d'une cellule solaire où on assiste simultanément aux phénomènes de diffusion, de dérive, de génération et de recombinaison des porteurs de charge, tel que le montre la *figure 2.5*.

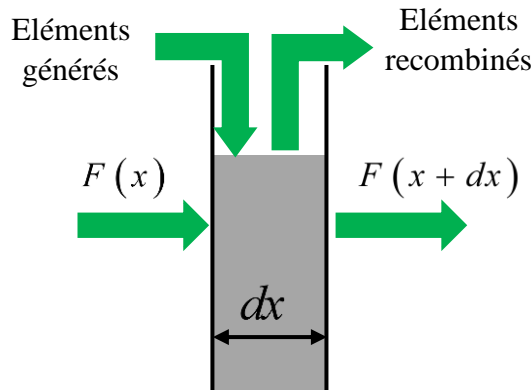


Figure 2.5 : Principe de l'équation de continuité.

Si le flux des porteurs entrants $F(x)$ est supérieur à celui des porteurs sortants $F(x+dx)$, alors la concentration des porteurs augmente. De plus, l'absorption des photons génère des paires de porteurs électron-trou, de taux de génération G_L , et qui peuvent se recombiner avec un taux R_i , dépendant du type de porteurs de charge. Ainsi, la variation de la concentration C des porteurs se traduit par l'équation de continuité :

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{dF}{dx}\right) + G_L - R_i \quad (2.52)$$

Sachant que les densités des électrons et des trous sont respectivement liées aux flux des électrons et des trous par les expressions suivantes :

$$J_n = -eF_n \quad (2.53)$$

et

$$J_p = eF_p \quad (2.54)$$

les équations de continuité des électrons et des trous s'écrivent alors sous les formes :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \left(\frac{dJ_n}{dx} \right) + G_L - R_n \quad (2.55)$$

et

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e} \left(\frac{dJ_p}{dx} \right) + G_L - R_p \quad (2.56)$$

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

$$J_n = \mu_n n \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x} \quad (2.57)$$

et

$$J_p = \mu_p p \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x} \quad (2.58)$$

De même, à l'équilibre thermodynamique, les expressions des densités de courant des électrons et des trous, (2.57) et (2.58) respectivement, s'expriment plutôt en fonction du niveau de *Fermi*.

Les équations principales étant présentées (equations), qui sont des équations différentielles non linéaires couplées, la section suivante sera réservée à un bref aperçu sur le code SCAPS-1D utilisé pour approcher numériquement leurs solutions, dont les interprétations permettront d'investiguer les mécanismes de pertes dans les cellules solaires à base de a-Si:H.

2.4. Logiciel SCAPS-1D

2.4.1. Présentation

SCAPS-1D est un programme de simulation développé par le Département d'Electronique et des Systèmes Informatiques de l'Université de Gent en Belgique. Ce programme est le fruit d'un collège de Chercheurs, *Alex Niemegeers, Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen* et *Stefaan Degrave*.

Le code SCAPS-1D a été développé pour simuler les caractéristiques électriques des cellules solaires à hétérojonctions de couches minces, en résolvant les équations de *Poisson* et

de *continuités*, couplées aux équations (2.57) et (2.58), et associées à des conditions aux interfaces et aux contacts appropriés, dont les solutions sont des triplets de la forme (ψ, n, p) ou (ψ, E_{Fn}, E_{Fp}) .

Les premiers tests ont été effectués sur les cellules solaires à base de CdTe et de Cu(In,Ga)Se₂ par *Marc Burgelman et al.* [79]. Les résultats de simulations obtenus sont en très bon accord avec ceux de l'expérience.

L'avantage qu'offre ce code est la possibilité de simuler des structures constituées de sept couches au maximum, en plus des contacts avant et arrière, avec des profils de dopage différents et des distributions énergétiques des niveaux donneurs et accepteurs quelconques, aussi bien en volume qu'aux interfaces, et éclairées par un spectre de lumière arbitraire. En outre, SCAPS-1D permet également de graduer l'épaisseur, les propriétés optiques et électriques d'une couche en fonction de la concentration atomique des éléments chimiques qui la constituent.

2.4.2. Environnement de SCAPS-1D

L'environnement du code SCAPS-1D est fait d'un ensemble d'interfaces graphiques qui donne accès aux différentes fonctionnalités et aux actions exécutables par le programme. La *figure 2.6*, présente le panneau de définition du code SCAPS-1D, version 3.3.04, utilisé pour nos travaux de recherche. Ce panneau permet de définir le problème et les conditions de simulation, d'une part, et d'exécuter des tâches particulières, d'autre part. Ce panneau présente six parties essentielles, telles que numérotées de 1 à 6, visibles sur la *figure 2.6* :

- *La partie 1* permet de définir les conditions de l'environnement des simulations telles que la température, la tension de polarisation, la fréquence, les résistances parasites, le spectre lumineux et le maillage ;
- *La partie 2* offre la possibilité de choisir les différentes caractéristiques de la cellule solaire à simuler, en spécifiant leur domaine et le nombre d'itérations. En l'occurrence, les caractéristiques courant-tension (J-V), capacité-tension (C-V), capacité-fréquence (C-f) et rendement quantique (Q-E), permettant d'investiguer et d'évaluer la performance d'une cellule solaire ;

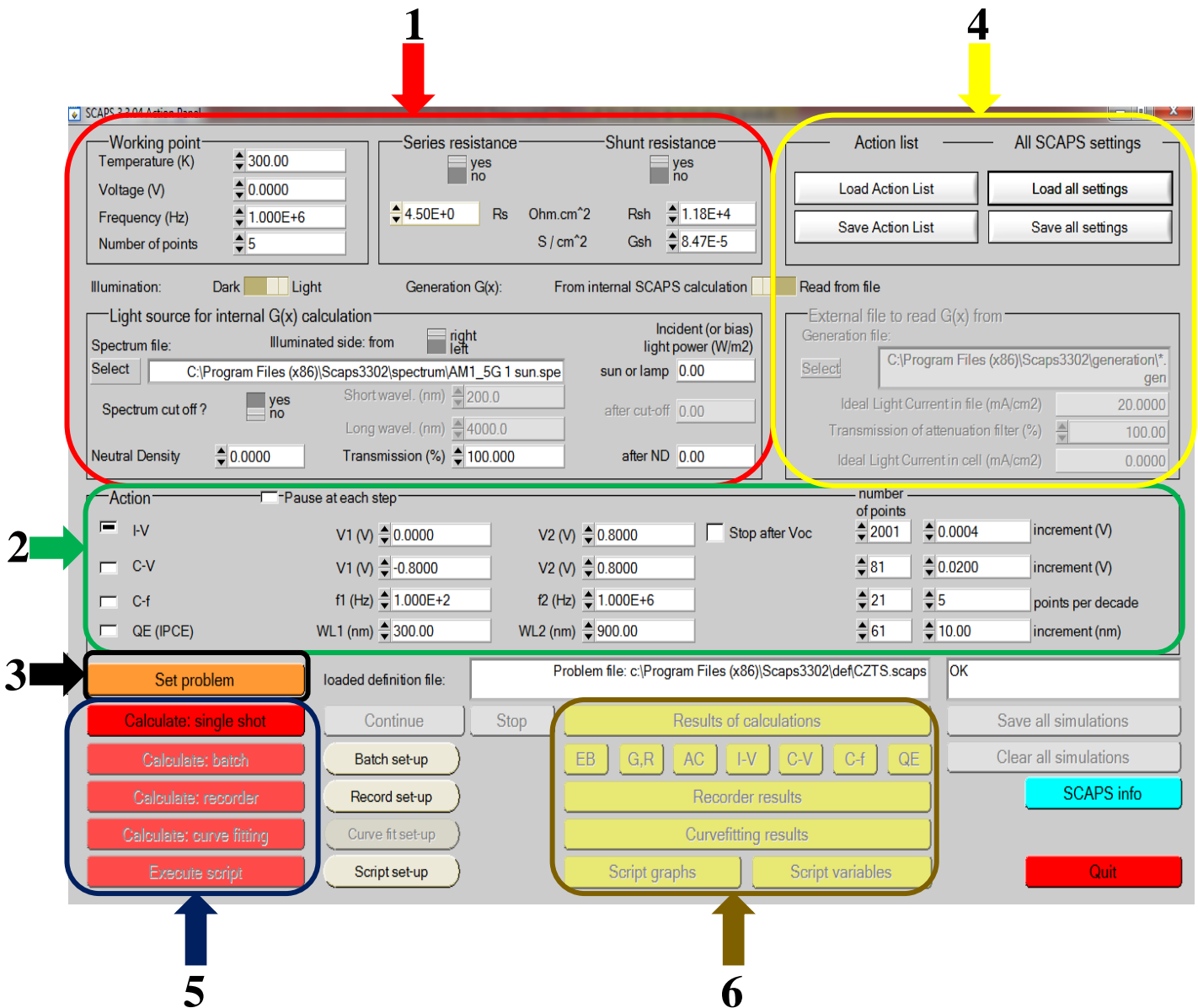


Figure 2.6 : Interface graphique principale de SCAPS-1D, version 3.3.04.

- La partie 3 donne accès au panneau de définition de la cellule solaire (figure 2.7). C'est ici que l'on modélise la structure de la photopile à simuler, en définissant les différentes couches et leurs propriétés, les propriétés des interfaces et des contacts.
- La partie 4 intervient pour l'enregistrement des fichiers sources, contenant tous les paramètres de simulations ;
- La partie 5 est réservée aux lancements des simulations et aux calculs ;
- La partie 6, enfin, permet d'afficher les résultats de simulations.

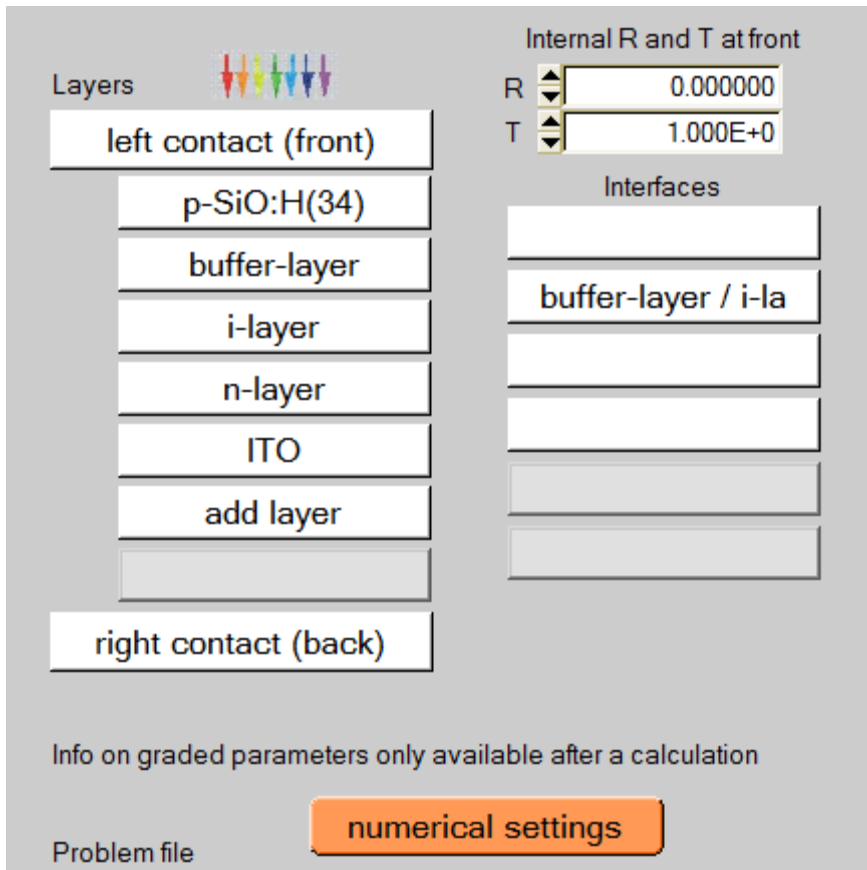


Figure 2.7 : *Panneau de définition de la cellule solaire*

L'analyse des cellules solaires est basée sur la technique de caractérisation qui permet de déterminer les sources de perte et de suggérer les méthodes pour les minimiser. SCAPS-1D donne la possibilité, une fois que la cellule solaire a été modélisée, de la caractériser. Fort de cette importance, la section suivante est réservée aux méthodes de caractérisation employées dans nos travaux.

2.5. Caractérisation d'une cellule solaire

Dans cette thèse, seule la caractérisation par courant-tension est utilisée pour l'aboutissement de nos travaux.

2.5.1. Caractéristique courant-tension (J-V)

2.5.1.1. Densité de courant dans une cellule solaire

La caractéristique courant-tension est une méthode standard d'évaluation de la performance électrique d'une cellule solaire. Une cellule solaire idéale peut être modélisée par un circuit électrique comportant une source de courant photogénérée et une diode modélisant

la jonction $p-n$ (figure 2.8). Dans le cas de la cellule réelle, il faut intégrer les résistances parasites R_s , dites résistances série qui représentent les pertes résistives au sein de la photopile, et R_{sh} , dites résistances shunt qui correspondent aux fuites de courant qui court-circuitent la jonction. La figure 2.8, représente le schéma équivalent de la photopile.

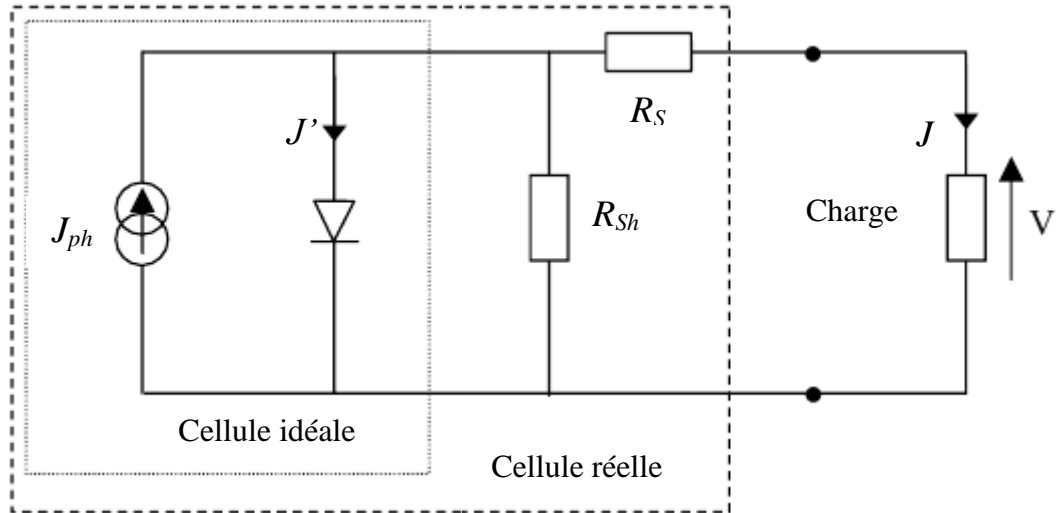


Figure 2.8 : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire à jonction $p-n$.

A l'équilibre thermodynamique, le courant de recombinaison, J_{rec} , dû à la diffusion des porteurs minoritaires dans la zone quasi-neutre, est compensé par le courant de génération thermique, J_{gen} , causé par la dérive des porteurs minoritaires à travers la jonction, soit :

$$J^i = J_{rec}(V=0) - J_{gen}(V=0) = 0. \quad (2.59)$$

Si l'on suppose que la jonction est soumise à une tension de polarisation V en sens directe, le courant de recombinaison croît suivant une loi exponentielle avec un facteur de Boltzmann $\exp\left(\frac{eV}{kT}\right)$; Ainsi :

$$J_{rec} = J_{rec}(V=0) \exp\left(\frac{eV}{kT}\right) \quad (2.60)$$

Par contre, le courant de génération thermique étant indépendant de la tension appliquée, $J_{gen}(V=0) = J_{rec}(V=0) = J_0$, il ressort que, la densité de courant net fournie est donnée par l'équation :

$$J^i = J_0 \left[\exp\left(\frac{eV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.61)$$

Cette équation est connue comme *équation de Shockley* qui décrit le comportement de la caractéristique courant-tension d'une diode *p-n* idéale (R_{sh} tend vers l'infini et R_s est égale à zéro). Le terme J_0 dans l'équation (2.61) représente la densité de courant de saturation ou de fuite circulant à travers la jonction, quel que soit le type de polarisation. Elle est due au phénomène de diffusion des porteurs minoritaires vers les régions neutres (les trous vers la région de type *p* et les électrons vers la région de type *n*), à la densité intrinsèque des porteurs, au dopage et à la structure de la cellule. Elle est limitée par les recombinaisons de sources diverses, à l'instar des recombinaisons dans le volume de l'absorbeur, les recombinaisons dans la zone de charge d'espace et des recombinaisons au niveau de l'interface.

Lorsque la cellule est éclairée, un courant photogénéré, J_{ph} , naît et se superpose au courant de génération thermique. Sous une tension de polarisation appliquée en sens direct, la densité de courant net produite par la cellule solaire idéale a pour expression :

$$J^i = J_0 \left[\exp\left(\frac{eV}{kT}\right) - 1 \right] - J_{ph} \quad (2.62)$$

Dans le cas d'une cellule solaire réelle, les résistances parasites, série et shunt, influencent la densité de courant et son expression est réécrite sous la forme plus générale :

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{e(V - R_s J)}{A k T}\right) - 1 \right] + \frac{V - R_s J}{R_{sh}} - J_{ph} \quad (2.63)$$

où A est le facteur d'idéalité ou de qualité, qui est égale à l'*unité* pour une diode idéale. Ce paramètre rend compte de la nature des courants circulant à travers la jonction. Il prend la valeur 1, s'il s'agit d'un mécanisme de diffusion ; la valeur 2, pour un mécanisme de génération-recombinaison. Lorsque les courants sont comparables, A a une valeur comprise entre 1 et 2. S'il prend d'autres valeurs, cela signifie que d'autres mécanismes interviennent dans le transport du courant, à l'instar de l'effet tunnel, les électrons *Auger*, etc.

2.5.1.2. Paramètres de performance d'une cellule solaire

Quatre paramètres clés permettent de caractériser la performance d'une cellule solaire. Ils sont estimés à partir de la caractéristique courant-tension, il s'agit de :

- La densité de courant de court-circuit, J_{CC} ;
- La tension en circuit ouvert, V_{CO} ;
- Le facteur de remplissage ou de forme, FF ;
- L'efficacité, η .

a) Densité de courant de court-circuit

La densité de courant court-circuit, J_{CC} , est la densité de courant qui circule à travers la jonction sous illumination et en absence d'une tension appliquée. Au point J_{CC} , la puissance de la cellule solaire est nulle. J_{CC} croît avec l'intensité lumineuse et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement incident et de la mobilité des porteurs.

b) Tension en circuit ouvert

La tension en circuit ouvert, V_{CO} , est la tension mesurée aux bornes de la cellule solaire lorsqu'aucun courant n'y circule. Elle dépend de la nature de la jonction $p-n$, de la nature de la couche active, de la nature des contacts de la couche active-électrode, de l'éclairement de la cellule et de la température environnante.

En considérant l'expression (2.63), en supposant que la résistance shunt est de valeur très grande et que la résistance série est nulle, la tension en circuit ouvert a pour expression :

$$V_{CO} = \frac{AkT}{e} \ln \left(\frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (2.64)$$

Suivant le degré d'éclairement, deux régimes peuvent être observés :

- Le régime des faibles flux lumineux, correspondant à $J_{ph} \ll J_0$. Dans ce cas, en procédant à un développement limité au premier ordre, il s'en suit que :

$$V_{CO} = \frac{AkT}{eJ_0} J_{ph} \quad (2.65)$$

Ce régime traduit la zone de comportement *linéaire* de la cellule. On définit alors la résistance interne de la diode par unité de surface, sous faible flux lumineux et en absence de polarisation, par la quantité :

$$R_0 = \frac{AkT}{eJ_0} \quad (2.66)$$

- Le régime de flux lumineux intense, correspondant à $\frac{J_{ph}}{J_0} \gg 1$. Dans cette approximation, la tension en circuit ouvert se met sous la forme :

$$V_{CO} = \frac{AkT}{e} \ln\left(\frac{J_{ph}}{J_0}\right) \quad (2.68)$$

Il s'agit de la zone de comportement *logarithmique*.

La figure 2.9, illustre les deux régimes du comportement du flux lumineux .

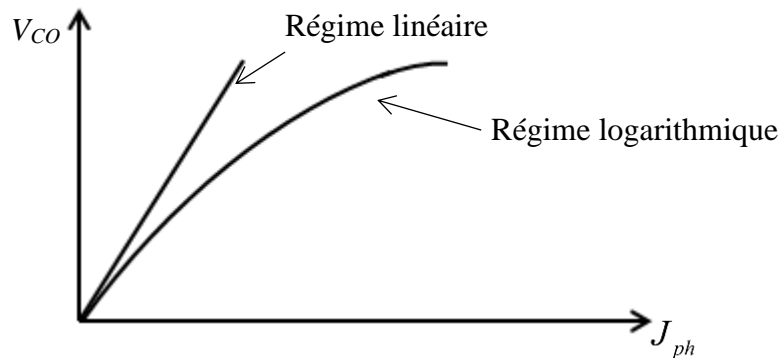


Figure 2.9 : Représentation schématique des deux régimes du V_{CO} .

c) Facteur de forme ou de remplissage

La puissance fournie par une cellule solaire, sous éclairage, dépend de la valeur de la résistance de charge (résistance du circuit extérieur). En faisant varier cette résistance, l'aire du rectangle délimité par l'axe des tensions, l'axe des densités de courant et les droites d'équations $V = V_{pm}$ et $J = J_{pm}$ passe par son maximum au point de fonctionnement, P_m , de puissance maximale. On définit alors le facteur de forme comme étant le rapport de l'aire, P_{max} , du rectangle sus-indiqué, à l'aire du rectangle de côtés mesurés par V_{CO} et J_{CC} . Soit :

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{CO}J_{CC}} = \frac{V_{pm}J_{pm}}{V_{CO}J_{CC}} \quad (2.69)$$

La densité de courant étant régie par le facteur de *Boltzmann*, la caractéristique courant-tension ne pourra jamais avoir une forme rectangulaire, même dans le cas idéal. Par conséquent, sa valeur ne peut excéder 0,89. De ce fait, les points de fonctionnement, de tensions supérieures à V_{pm} , correspondent à une zone de forte recombinaison, alors que ceux de densités de courant

au-delà de J_{pm} , représentent la région dissipative (effet *Joule*). Toutefois, le facteur de forme est limité par les résistances aux contacts, la faible mobilité des porteurs de charge et les courants de fuite à la jonction

d) Rendement de conversion d'une cellule solaire

Les paramètres d'intérêt, ci-dessus, permettent de déterminer le rendement de conversion photovoltaïque d'une cellule solaire, noté η . C'est le rapport de la puissance maximale, délivrée par la cellule solaire, à la puissance rayonnante de la lumière incidente. Ainsi, le rendement de conversion d'une cellule solaire est donné par l'expression :

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{in}} = \frac{J_{CC} V_{CO} FF}{P_{in}} \quad (2.70)$$

P_{in} est le flux lumineux incident, arrivant sur la face avant de la cellule solaire. P_{in} est choisi égal à 1000 W/m^2 , valeur recommandée pour tester les cellules solaires pour les applications terrestre (AM1.5).

2.6. Construction du modèle opérationnel de notre cellule solaire à base de a-Si:H

La modélisation d'un système, à l'instar d'une cellule solaire, est une tâche dont l'enjeu repose non seulement sur un choix judicieux de paramètres d'entrée, mais aussi sur des critères de fiabilité du modèle numérique. A ce titre, un accent sera porté sur ces deux aspects.

2.6.1. Choix des paramètres d'entrée

La sélection des paramètres d'entrée s'appuie sur les données expérimentales, les calculs théoriques et les estimations raisonnables afin de permettre la convergence de notre modèle. La figure 2.10 (a) présente notre modèle opérationnel dans SCAPS ; elle est connue sur la base structure expérimentale de Barnerje et al.

2.6.1.1. Paramètres des contacts

En général, les contacts ohmiques sont nécessaires pour obtenir de meilleure performance pour une cellule solaire. Dans le cas de nos travaux, nous supposons c'est d'ailleurs ce que nous avons fait cette étude. La réflexion sur la face avant a été supposée négligeable pour redire les absorptions parasites. Cela signifie que la plupart des photons incidents sont absorbés dans les masses des matériaux. Par contre, il faut tenir compte de la réflexion arrière lorsque l'épaisseur est fortement réduite, puisque certains photons pouvant

atteindre le contact arrière sans être absorbés. C'est le cas par exemple des absorbeurs dont les épaisseurs sont inférieures à 100nm. Dans toute cette thèse, nous avons fixé le coefficient de réflexion de la face arrière à 93% pour tenir compte de la réflexion totale des couches qui constituent la cellule solaire, puisque les épaisseurs de l'absorbeur dans notre étude sont inférieures à 100nm.

La vitesse de recombinaison des trous et des électrons au niveau des contacts arrière et avant est la même que leur vitesse thermique. De cette manière, tout porteur minoritaire qui atteint les contacts se recombine efficacement.

2.6.1.2. Paramètres des couches

Pour obtenir la structure simulée (figure 2.10(a)), nous avons utilisé comme base de données entrée de SCAPS-1D, les éléments du tableau 2.3

Tableau 2.2: Paramètres d'entrée de SCAPS-1D pour différentes structures de cellules solaires à base de a-Si :H.

	Couches										
	Fenêtre	Tampon- type p	Absorbeur	Tampon- type n	Emetteur	BRL					
<i>Paramètres de la couche</i>	p-(a-SiO _x :H)	p-(a-Si:H)	i-(a-Si:H)	n-(a-Si:H)	n-(a-Si:H)	ITO	IGZO	ZnO	PCBM	TiO ₂	CdS:O
<i>Epaisseur : w (nm)</i>	14,40	4,0	1000	Variable	25	60	60	60	60	60	60
<i>Gap : E_g (eV)</i>	1,95	1,80	1,70	1,70	1,70	3,65	3,05	3,30	2,0	3,3	2,52
<i>Affinité électronique : χ (eV)</i>	4,0	3,90	3,90	3,90	3,90	4,80	4,16	4,10	3,90	3,9	4,3
<i>Constante diélectrique relative : ε_r</i>	9,0	11,9	11,9	11,9	11,9	8,9	10,0	9,0	3,9	9,0	10,0
<i>Densité d'états dans la bande de conduction: N_C (cm⁻³)</i>	2,2×10 ¹⁸	10 ²⁰	10 ²⁰	10 ²⁰	10 ²⁰	5,2×10 ¹⁸	5×10 ¹⁸	4×10 ¹⁸	2,5×10 ²¹	10 ¹⁹	2,2×10 ¹⁸
<i>Densité d'états dans la bande de valence: N_V (cm⁻³)</i>	1,8×10 ¹⁹	10 ²⁰	10 ²⁰	10 ²⁰	10 ²⁰	10 ¹⁸	5×10 ¹⁸	10 ¹⁹	2,5×10 ²¹	10 ¹⁹	1,8×10 ¹⁹
<i>Mobilité des électrons: μ_e (cm²/V.s)</i>	5	50	20	30	30	50	15	100	0,2	20	100
<i>Mobilité des trous: μ_h (cm²/V.s)</i>	1	10	5	5	5	25	0,2	25	0,2	10	25
<i>Concentration des donneurs: N_D (cm⁻³)</i>	0,0	0,0	10 ⁶	Variable	10 ¹⁸	10 ²⁰	10 ¹⁷	10 ¹⁸	2,93×10 ¹⁷	10 ¹⁶	1,1×10 ¹⁸
<i>Concentration des accepteurs: N_A (cm⁻³)</i>	10 ¹⁶	10 ¹⁵	10 ⁶	0,0	0,0	0,0	0,0	10 ⁵	0,0	0,0	0,0
Propriétés des défauts volumiques											

<i>Densité et type des défauts: N_t (cm^{-3})</i>	10^{15} (N)	10^{14} (D)	10^{15} (A)	10^{16} (A)	10^{16} (A)	10^{19} (D)	10^{15} (A)	2×10^{17} (D)	10^{15} (D)	10^{15} (D)	10^{14} (D)
<i>Section de capture des électrons : σ_e (cm^2)</i>	$3,5 \times 10^{-12}$	10^{-14}	$8,5 \times 10^{-10}$	$1,5 \times 10^{-13}$	$1,5 \times 10^{-13}$	10^{-16}	2×10^{-14}	10^{-15}	10^{-15}	2×10^{-14}	2×10^{-14}
<i>Section de capture des trous : σ_h (cm^2)</i>	10^{-12}	10^{-14}	$1,35 \times 10^{-10}$	$1,5 \times 10^{-12}$	$1,5 \times 10^{-12}$	10^{-15}	2×10^{-14}	10^{-15}	10^{-15}	2×10^{-14}	2×10^{-14}
Propriétés de l'interface p-(a-Si:H)/ i-(a-Si:H)											
<i>Densité et type des défauts : D_{it} (cm^{-2})</i>	10^{10} (a)										
<i>Section de capture des électrons : σ_e (cm^2)</i>	10^{-15}										
<i>Section de capture des trous : σ_h (cm^2)</i>	10^{-15}										

"(A)", "(D)" et "(N)" représentent respectivement les défauts profonds de type accepteur, donneur et neutre, tandis que "(a)" est un défaut d'interface de type accepteur.

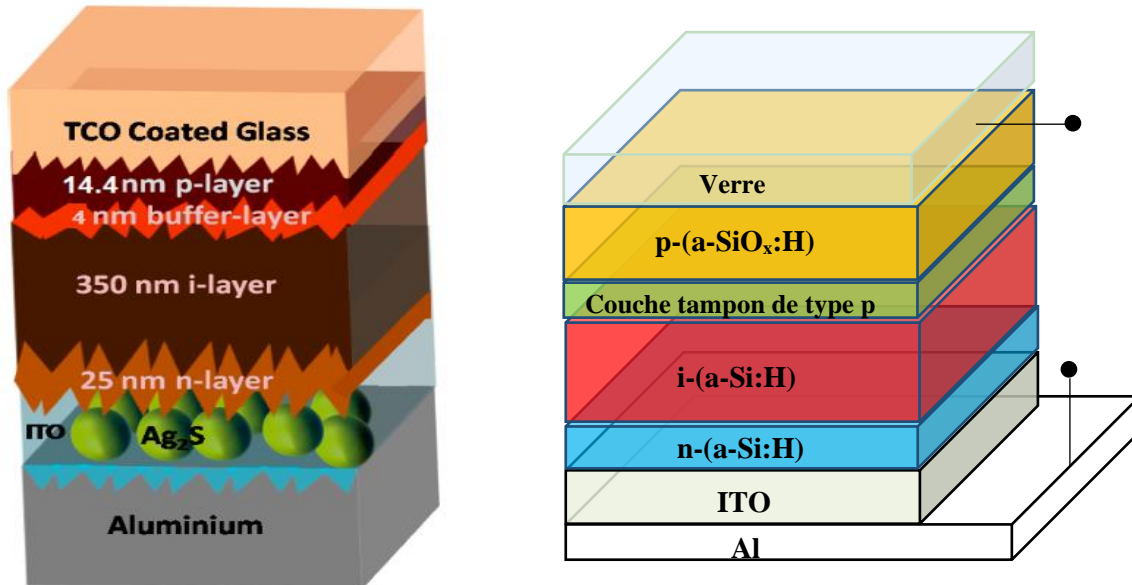


Figure 2.10 : Structure de la cellule solaire : expérimentale (a), simulée(b)[4]

Tous les paramètres des matériaux utilisés dans ce travail et énumérés dans le tableau 2.2 ont été pris dans la littérature ; et certains sont des estimations raisonnables parce que le nombre de paramètres qui peuvent être modifiés dans chaque couche de la structure. L'estimation de certaines variables n'est pas chose facile, puisqu'elles sont généralement dépendantes des méthodes de dépôt et peuvent varier d'une structure à l'autre. Les paramètres variables de chaque matériau de la figure 2.10, dans le cas de la simulation numérique, peuvent être l'épaisseur de la couche, la concentration de dopage, la composition atomique du mélange p(a-SiO_x), la bande interdite, etc. Dans cette analyse numérique, l'illumination incidente utilisée, lors du calcul des caractéristiques courant-tension pour l'état éclairé et le rendement quantique de la cellule solaire, est le spectre AM1.5. Ce spectre indique que, le parcours de la lumière dans l'atmosphère est 1.5 fois supérieur au parcours le plus court du soleil, c'est-à-dire lorsqu'il est au zénith ; et l'énergie solaire moyenne tombant à la surface de la terre, pour ce spectre, est environ égale à 1000 W/m².

2.6.1.3. Validation du modèle

En simulation numérique, la validation d'un modèle constitue une étape indispensable. Elle permet d'évaluer les performances du modèle utilisé par rapport à une référence (données expérimentales, simulations). Cette phase d'analyse nous renseigne sur le comportement du modèle par rapport à la référence. Dans le cadre de ce travail, le modèle utilisé a été validé par

rapport aux expériences antérieures sur la base de quelques paramètres. Les résultats de la caractéristique J - V de la cellule solaire expérimentale (figure 2.10a) et de la cellule solaire simulée (figure 2.10b) sont présentés sur la figure 34. Les paramètres de performance résultants de cette comparaison de la tension en circuit ouvert, V_{Co} , de la densité de courant de court-circuit, J_{CC} , du facteur de forme, FF , et du rendement de conversion, sont déterminés et présentés dans le tableau 9.

Tableau 2.4: Propriétés de l'interface couche tampon/absorbeur

Paramètres	Expérimentales [4]	Simulations
J_{CC} (mA.cm ⁻²)	17,2	16,55
V_{Co} (V)	0,87	0,905
FF(%)	70,0	70,62
η (%)	10,58	10,58

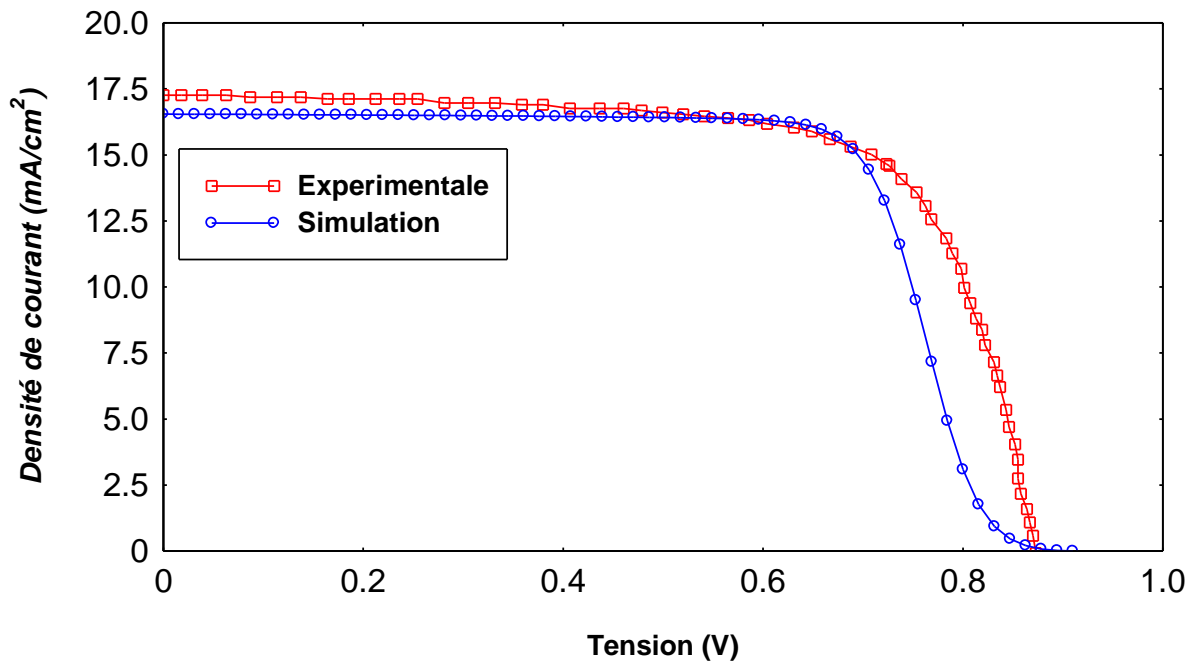


Figure 2.11: Comparaison des courbes courant-tension (J - V) pour la cellule solaire simulée (bleue) et la cellule solaire expérimentale (rouge).

D'emblée, on peut remarquer que les courbes expérimentale et simulée présentent pratiquement la même allure, malgré quelques légers débordements au niveau de la densité de courant de court-circuit (J_{CC}), la tension en circuit ouvert (V_{CO}) et du facteur de forme (FF). Ces écarts sont d'ailleurs négligeables, au regard des précisions de 4%, de 3,5% et de 0,1% respectivement de ces paramètres d'intérêt par rapport à ceux expérimentaux. La concordance des rendements de conversion photovoltaïque de la cellule simulée et celle expérimentale prouve une fois de plus, que ces disparités observées sont assez faibles et ne sauraient remettre en doute cette simulation numérique de la cellule solaire au silicium amorphe.

Fort de ce qui précède, nous pouvons conclure que les résultats expérimentaux et ceux obtenus à partir de nos simulations sont concordants, ce qui valide du même coup l'ensemble de nos paramètres de base pour nos travaux futurs.

Conclusion

Les propriétés fondamentales nécessaires à la compréhension de l'élément de base d'une cellule solaire qui est un semiconducteur, dont les équations fondamentales (Poisson et de continuité) caractérisant les phénomènes de transport de charges libres à l'intérieur de celui-ci, ont été présentées. La résolution analytique de ces équations n'étant pas aisée, le code SCAPS-1D est utilisé pour approcher numériquement les solutions de celles-ci, ainsi que la modélisation et l'analyse des performances des cellules solaires qui sont faites à base de semiconducteurs. Nous avons effectué une étude comparative entre la cellule solaire expérimentale ($V_{CO} = 0,87$ V, $J_{CC} = 17,2$ mA/cm² et $FF = 70,0$ %) et celle simulée ($V_{CO} = 0,905$ V, $J_{CC} = 16,55$ mA/cm² et $FF = 70,62$ %) à l'aide de SCAPS-1D, ce qui nous a permis de valider notre modèle de cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces. Ces résultats montrent que nos paramètres de base et les hypothèses fixées pour nos travaux de recherche sont plausibles, au vue de la nette concordance du rendement de conversion de la cellule solaire (10,58%).

CHAPITRE 3 : RÉSULTATS ET DISCUSSION

Introduction

Dans les chapitres précédents, nous avons décrit les techniques de croissance, de fabrication et la méthode numérique d'optimisation des cellules solaires à base de a-Si:H. Afin d'optimiser numériquement les paramètres électriques de la cellule solaire, nous proposons les résultats obtenus dans les cas d'applications suivantes en utilisant le code SCAPS-1D, présenté au chapitre précédent :

- Amélioration des paramètres électriques par l'optimisation des propriétés des couche absorbante, tampon et de l'émetteur (n-(a-Si:H)) ;
- Amélioration du contact arrière de la cellule solaire par ajout d'un réflecteur arrière (BRL) à l'interface couche absorbante/contact arrière ;
- Analyse de l'effet de la température de fonctionnement sur les performances de la cellule solaire.

L'objectif est d'améliorer les paramètres électriques de la cellule solaire à base de a-Si:H, en partant d'une structure expérimentale que nous avons validée par simulation numérique, en comparant les caractéristiques J-V de l'expérience et de la simulation, dans le chapitre 2.

3.1 Optimisation d'une cellule solaire ultrafine à base de silicium amorphe hydrogéné

Les simulations numériques effectuées avec le code SCAPS-1D permettent de déterminer et de proposer les structures solaires performantes et stables. Cela passe notamment par l'étude d'un certain nombre de paramètres liés aux propriétés optiques et électroniques des matériaux qui constituent la cellule solaire. Dans cette partie, nous proposons d'améliorer les performances de la cellule solaire a-Si:H décrite par les travaux de Bernaj et al[4], en investiguant de manière succincte les variations de l'épaisseur, de la densité de défauts de la

couche intrinsèque et de la densité des états de défauts d'interface entre l'absorbeur et la couche tampon.

3.1.2 Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque

Le principal inconvénient des cellules solaires a-Si:H est sa forte prépondérance à l'effet *Staebler-Wronski*, qui est la dégradation de la cellule solaire induite par l'exposition à la lumière. Fort heureusement, cet effet peut être minimisé en contrôlant l'épaisseur de la couche intrinsèque (i) [4]. Par conséquent, il est judicieux de pouvoir apprécier l'importance de l'étude de la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque sur les paramètres de performance de la cellule solaire à base de a-Si:H, car c'est dans cette couche que se produit le phénomène de conversion photovoltaïque, aboutissant à la production d'énergie électrique. Pour cela, nous considérons que l'épaisseur de la couche intrinsèque varie de $0,1\mu m$ à $1\mu m$ pour rester en conformité avec les travaux expérimentaux (l'épaisseur de la couche intrinsèque doit être inférieure à $1\mu m$). Les propriétés des autres couches de la cellule solaire restant constantes (Figure 2.10b), nous avons également négligé les propriétés d'interfaces entre les différentes couches. Dans cette plage d'épaisseurs de la couche intrinsèque, nous observons une évolution croissante de la densité de courant de court-circuit de $13,28\text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ à $18,75\text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ lorsque l'épaisseur de cette couche augmente (figure 3.1a). Ce résultat s'explique par une absorption considérable des photons incidents dans la couche intrinsèque, entraînant une augmentation du nombre de porteurs photogénérés[7], telle que le montre l'équation (3.1), mettant en exergue la corrélation entre le taux de génération des porteurs et la densité de courant. Ces observations sont également en accord avec les travaux de Chelvanathan et al.[80], sur les cellules solaires à base de CIGS, qui montrent que la densité de courant augmente également avec l'épaisseur.

$$J_{ph} = q \cdot G \cdot (L_n + W + L_p) \quad (3.1)$$

où L_n et L_p sont les longueurs de diffusion des électrons et des trous, respectivement, W est la largeur de la région de charge d'espace, q la charge élémentaire et G le taux de génération des porteurs.

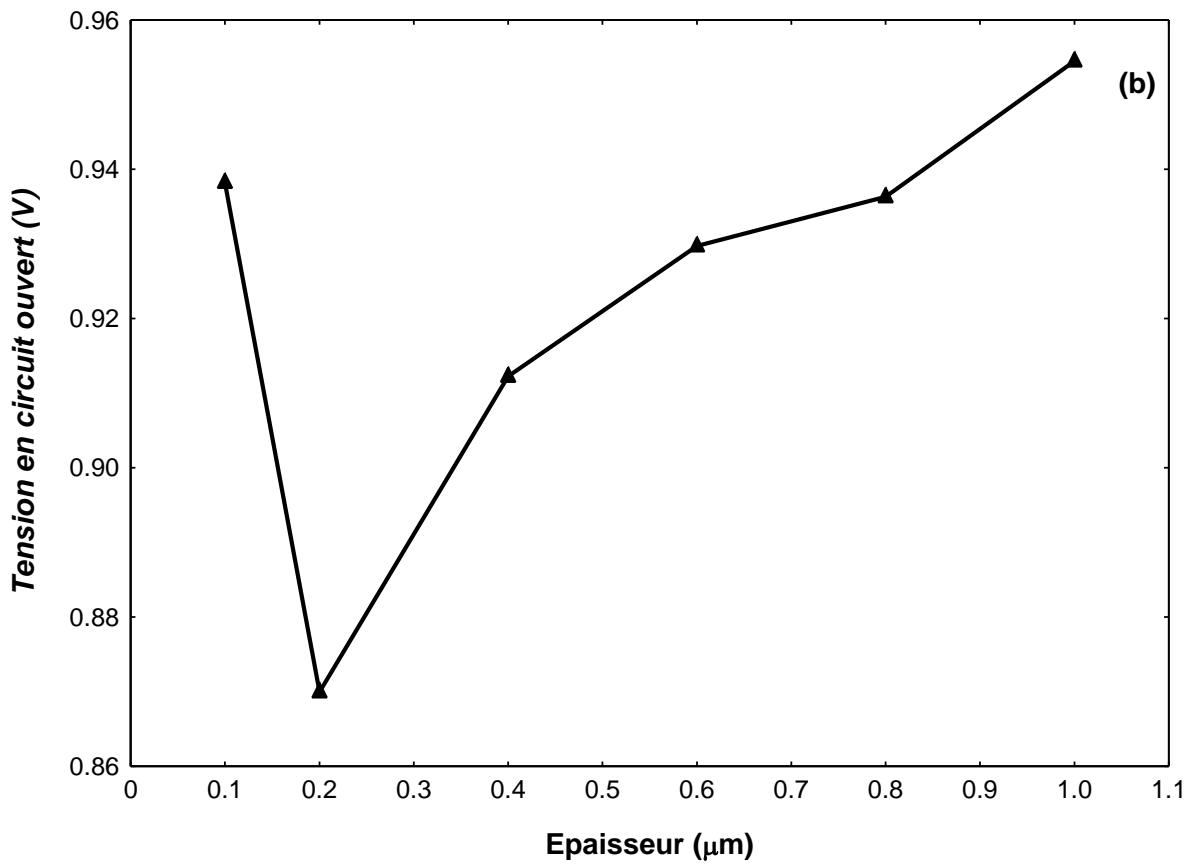
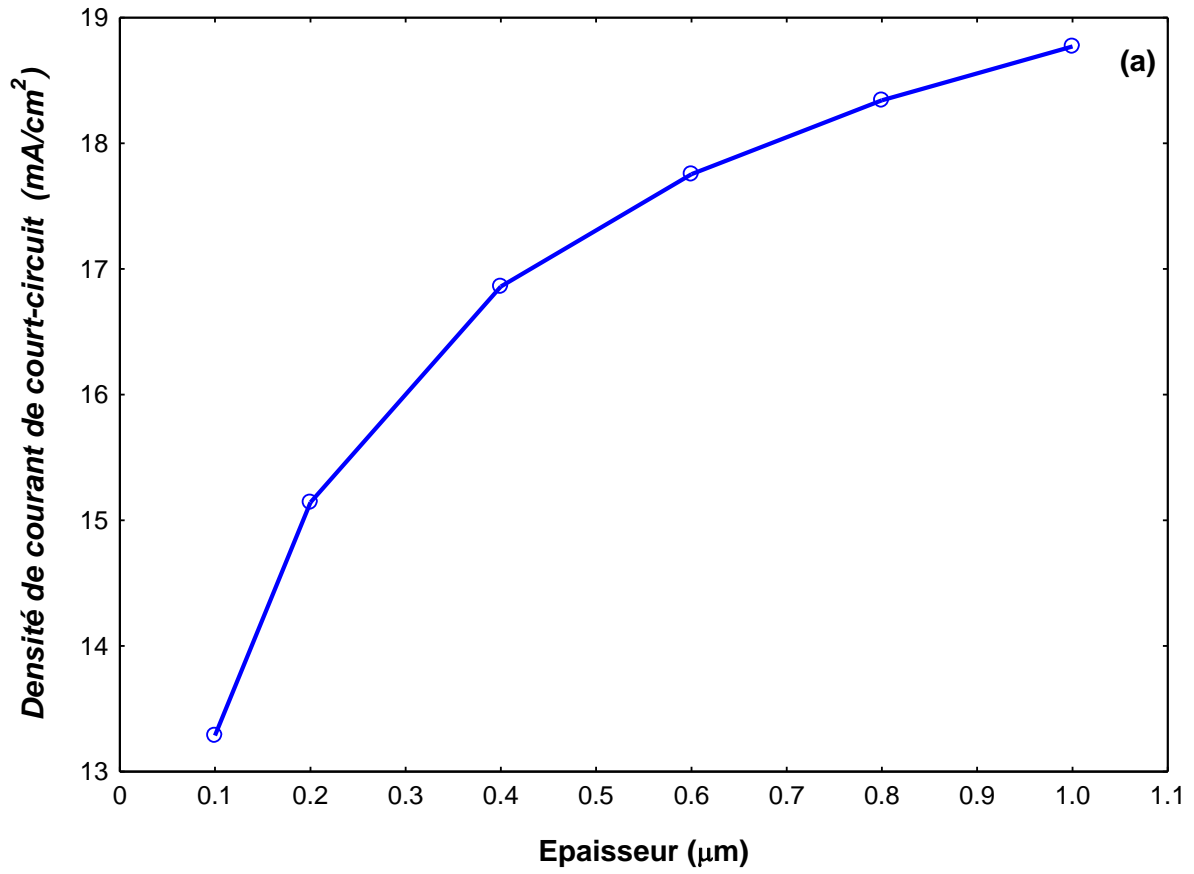
En outre, la tension en circuit ouvert (figure 3.1b) augmente avec l'épaisseur de la couche intrinsèque, précisément dans l'intervalle $[0,2\mu m, 1\mu m]$; ceci peut être attribué à une diminution du phénomène de recombinaison au niveau du contact arrière, et à une meilleure passivation des états d'interface i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H) comme suggéré par Lachaume [31] et

De Wolf et al. [28] dans leurs travaux. En revanche, la diminution de la tension en circuit ouvert, aux très faibles épaisseurs, c'est-à-dire dans l'intervalle $[0,1 \mu m, 0,2 \mu m]$, reflète l'instabilité de la jonction i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H), conduisant à sa dégradation d'une part, mais aussi à une prédominance du phénomène de recombinaison à cette l'interface dans ces conditions d'autre part.

Par ailleurs, le facteur de forme FF (Figure 3.1c) présente également deux tendances : une première comprise dans l'intervalle $[0,1\mu m, 0,2\mu m]$ et une deuxième contenue dans l'intervalle $[0,2\mu m, 1 \mu m]$. L'augmentation du FF, dans la première zone, peut être attribuée à la réduction de l'effet de double diode observée dans la couche i-(a-Si:H) [81] . Cependant, la diminution du FF dans la seconde zone est due à la présence des défauts de coordination dans la couche absorbante d'une part, et la forte résistance de la couche intrinsèque, occasionnée par l'augmentation de son épaisseur et contribuant ainsi à la résistance série de la cellule solaire, qui affecte drastiquement le FF d'autre part.

Au vu de ce qui précède, l'augmentation de l'épaisseur de la couche i-(a-Si:H) influence positivement la plupart des paramètres d'intérêt de la cellule solaire à base a-Si:H, malgré une décroissance du facteur de forme, pour des épaisseurs relativement épaisses, après l'atteinte du pic à une épaisseur de $0,2\mu m$. Par conséquent, l'action combinée de ces trois paramètres (J_{SC} , V_{OC} , FF) concourt à l'augmentation du rendement de conversion (équation 3.2) de la cellule solaire à base de a-Si:H, telle que illustrée par la figure 3.1d , montrant l'évolution du rendement de conversion, de 8,26 % à 11,63 %, en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque.

$$\eta = \frac{J_{SC} \cdot V_{OC} \cdot FF}{P} \quad (3.2)$$



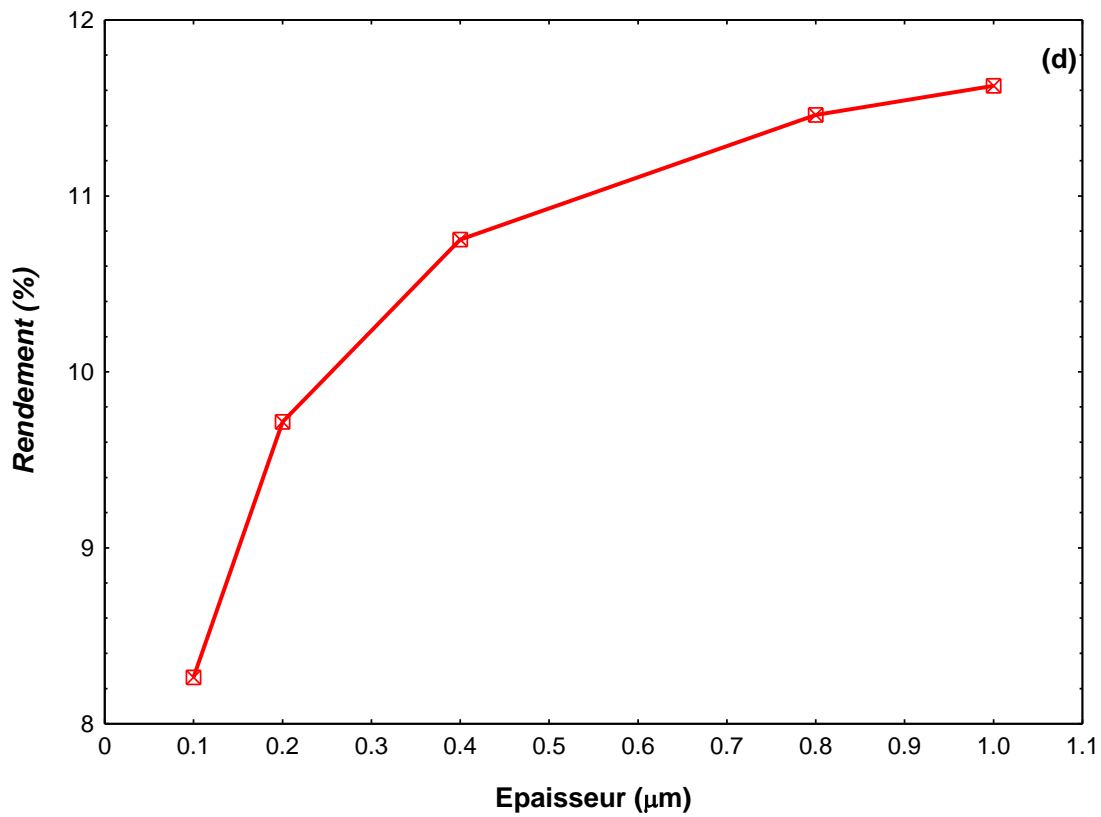
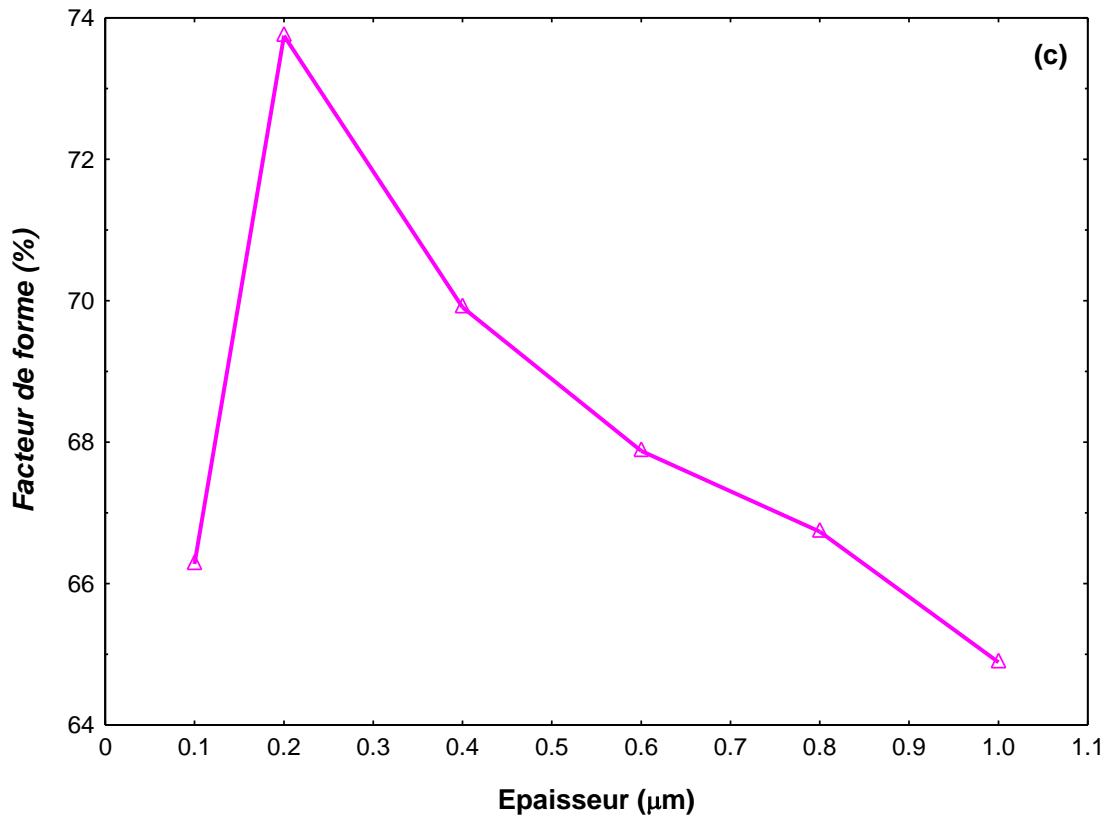
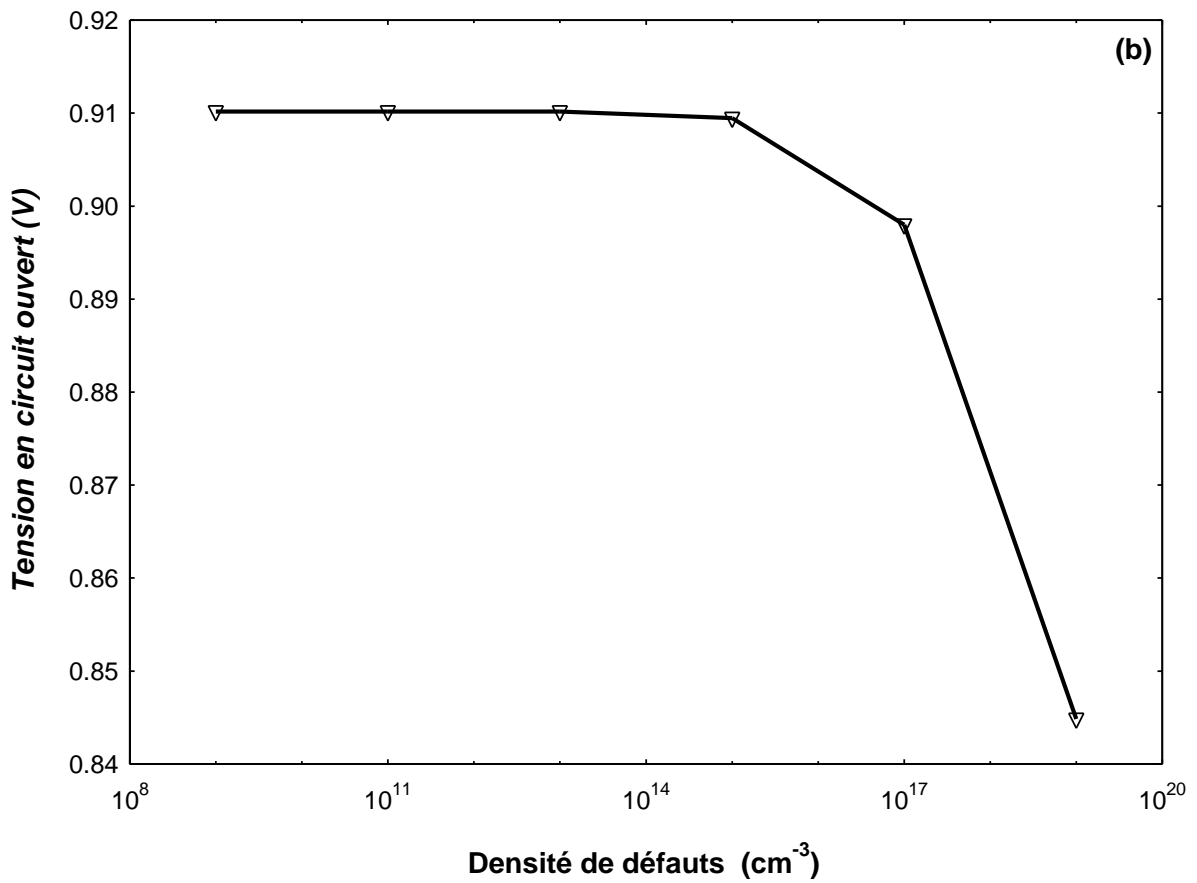
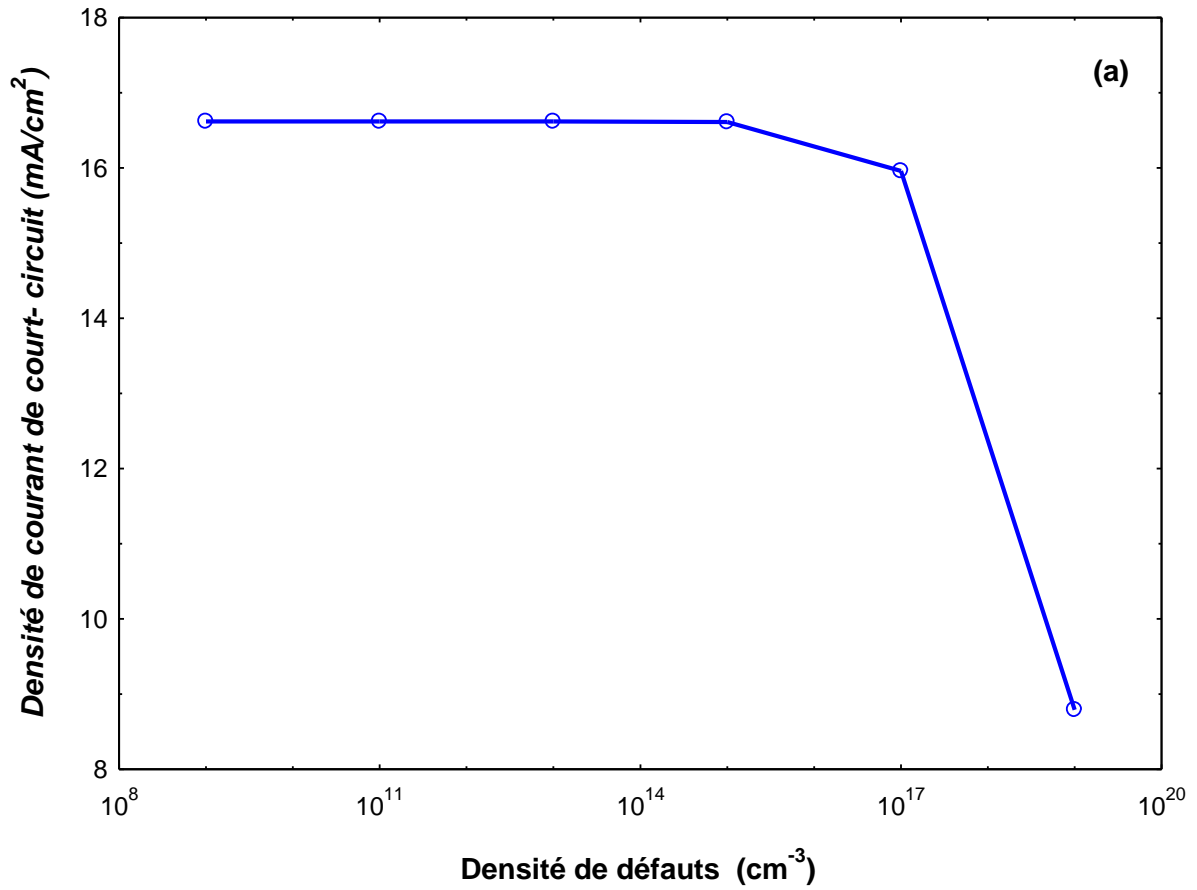


Figure 3.1: Influence de la variation de l'épaisseur de la couche intrinsèque i -(a -Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{CO} , c) FF , d) η

3.1.2 Influence de la variation de la densité des défauts dans la couche intrinsèque

La figure 3.2 montre l'effet de la variation de la densité de défauts volumiques profonds (N_t), de types accepteurs de la couche intrinsèque, sur les paramètres de performance de la cellule solaire à base de a-Si:H. Les simulations ont été effectuées en considérant les données du Tableau 1 et pour des densités de défauts allant de 10^9 cm^{-3} à 10^{19} cm^{-3} . Ces défauts se forment suite à la rupture de l'équilibre chimique des liaisons Si-Si faibles lors du dépôt de silicium amorphe [81]. Leur répartition énergétique dans la bande interdite varie en fonction de l'incorporation des proportions d'hydrogène dans la couche intrinsèque. Ces défauts sont localisés dans la partie supérieure de la bande interdite. Les résultats obtenus montrent que, pour N_t pris dans l'intervalle [10^9 cm^{-3} , 10^{15} cm^{-3}], les paramètres électriques (J_{CC} , V_{CO} , FF et η) sont indifférents (Figure 3.2), dues au fait que, dans cette région, la densité des donneurs (10^6 cm^{-3}) est égale à celle des accepteurs. Compte tenu du caractère intrinsèque de la couche absorbante, elle peut être considérée comme fortement dopée ; par conséquent, les effets combinés des accepteurs et des donneurs compensent ceux des défauts volumiques. Autrement dit, le taux de recombinaison est négligeable dans la couche intrinsèque.

Par contre, pour des densités (N_t) comprises dans l'intervalle [10^{15} cm^{-3} , 10^{19} cm^{-3}], tous les paramètres électriques (J_{CC} , V_{CO} , FF et η) sont fortement affectés par l'augmentation de la densité de défauts. On note une décroissance notable de tous ces paramètres (Figure 3.2), qui pourrait se justifier par le fait que l'accroissement de ces défauts crée, dans la bande interdite, des états localisés [83,84]. Ces états localisés influencent le niveau de Fermi intrinsèque en créant des états de queue et en induisant des charges supplémentaires, qui sont prises en compte dans la densité de défaut ρ_{def} de l'équation (2.47). Ainsi, les phénomènes de recombinaison des porteurs photogénérés dans cette couche prédominent sur les phénomènes de génération. La densité de courant diminue de $16,61 \text{ mA/cm}^2$ à $8,79 \text{ mA/cm}^2$, la tension en circuit ouvert de $0,910 \text{ V}$ à $0,845 \text{ V}$, le facteur de forme FF de $73,0\%$ à $41,33\%$ et le rendement de $11,04\%$ à $3,07\%$. La présence de ces défauts est à l'origine d'une perte optique due à un taux de recombinaison Shockley-Read-Hall élevé, entraînant une forte baisse de tous les paramètres électriques. Ces résultats sont en accord avec les travaux de Ghahremani et Fathy [85].



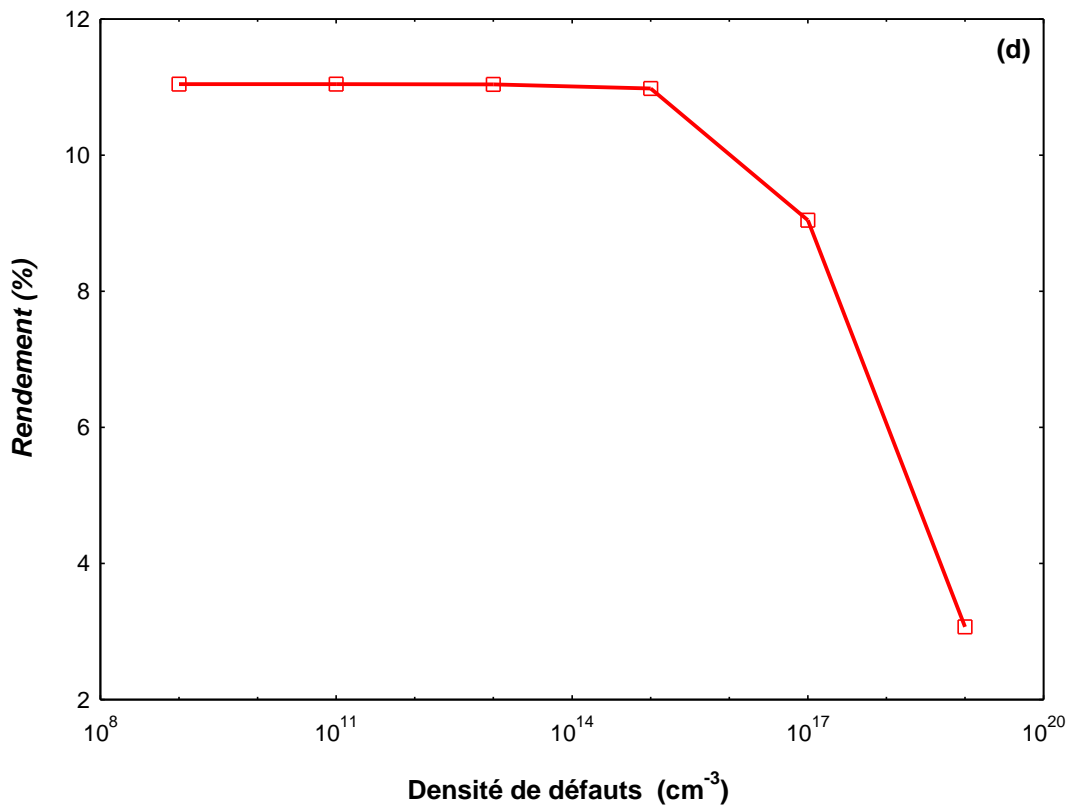
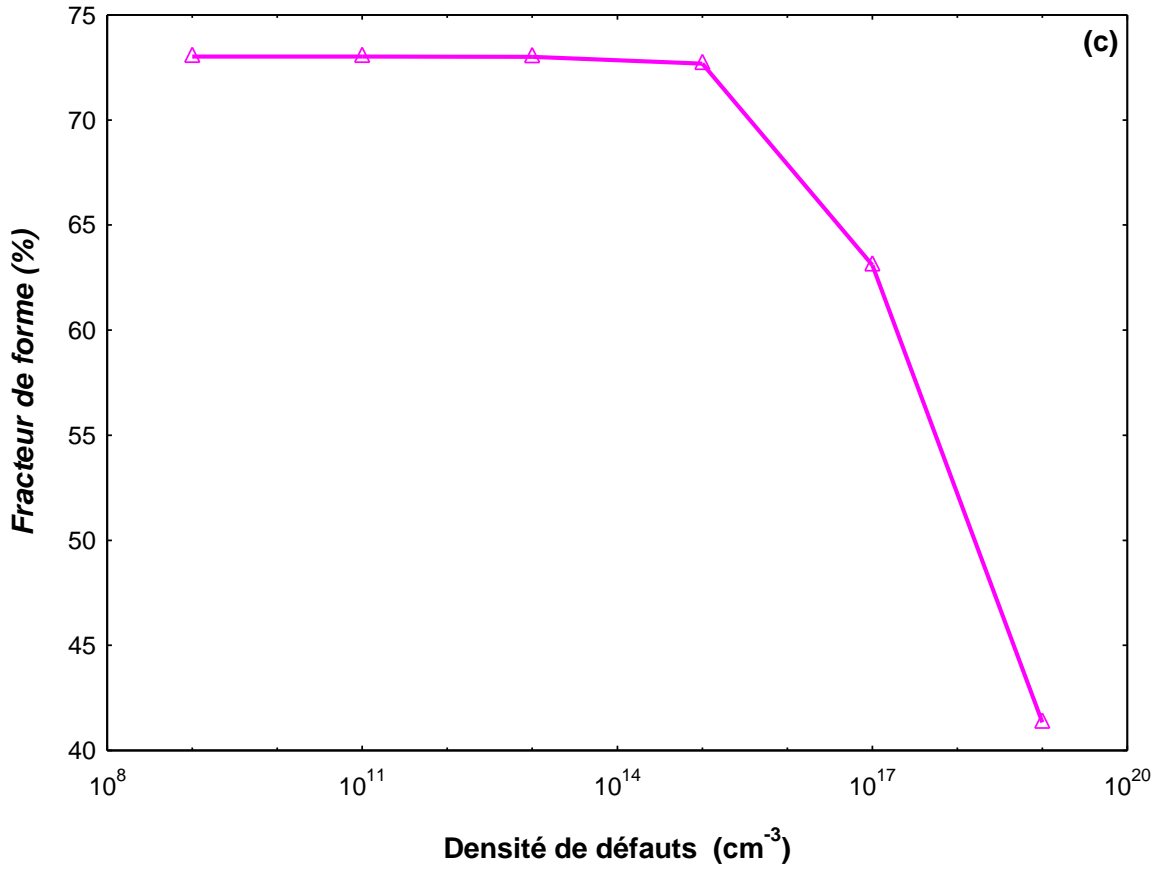


Figure 3.2 : Influence de la variation de la densité de défauts de la couche intrinsèque *i*-(*a*-Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{CO} , c) FF , d) η .

3.1.3 Effet de la densité des défauts d'interface entre la couche tampon /absorbeur

Les défauts à l'interface de deux couches peuvent provoquer une forte recombinaison d'interface dans les cellules solaires. Un état d'interface situé au bas de la bande interdite à mi-hauteur peut être obtenu par l'insertion de silicium amorphe hydrogéné intrinsèque dans la cellule solaire à contact passivé a-Si/c-Si (a-PC) [86]. La modélisation et l'optimisation d'une cellule solaire nécessitent de contrôler les états d'interface entre les différentes couches qui la constituent, afin d'assurer le passage des porteurs de charge à travers la jonction. Les résultats précédents sont obtenus en négligeant les propriétés d'interface entre les différentes couches.

Conscient du rôle crucial joué par l'interface couche tampon/absorbeur dans le mécanisme de transport de charge dans les cellules solaires a-Si:H [87], dans cette sous-section, nous explorons l'influence de la densité des défauts de surface (Tableau 2.3), à l'interface couche tampon/i-(a-Si:H), sur les paramètres électriques (J_{SC} , V_{OC} , FF et η) de la cellule solaire à base de a-Si:H. Nous avons, pour cela, utilisé les données du Tableau 2.3 et la densité des défauts profonds, de la couche intrinsèque, prise à $N_t = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. De plus, la densité de défauts de surface (D_{it}) varie de 10^{10} cm^{-2} à $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$. Les résultats sont présentés sur la figure 3.3.

Pour des densités de défauts surfaciques allant de 10^{10} cm^{-2} à 10^{13} cm^{-2} , les paramètres électriques sont quasiment insensibles. De plus, lorsque la densité des défauts de surface augmente de 10^{13} cm^{-2} à $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, la densité de courant de court-circuit diminue considérablement de $16,43 \text{ mA/cm}^2$ à $11,47 \text{ mA/cm}^2$ (figure 3.3a). Cette diminution est due à l'augmentation des centres de recombinaison à l'interface couche tampon /i-(a-Si:H), favorisant la prolifération des pièges à électrons mais, aussi la perte par absorption optique de la lumière incidente [88].

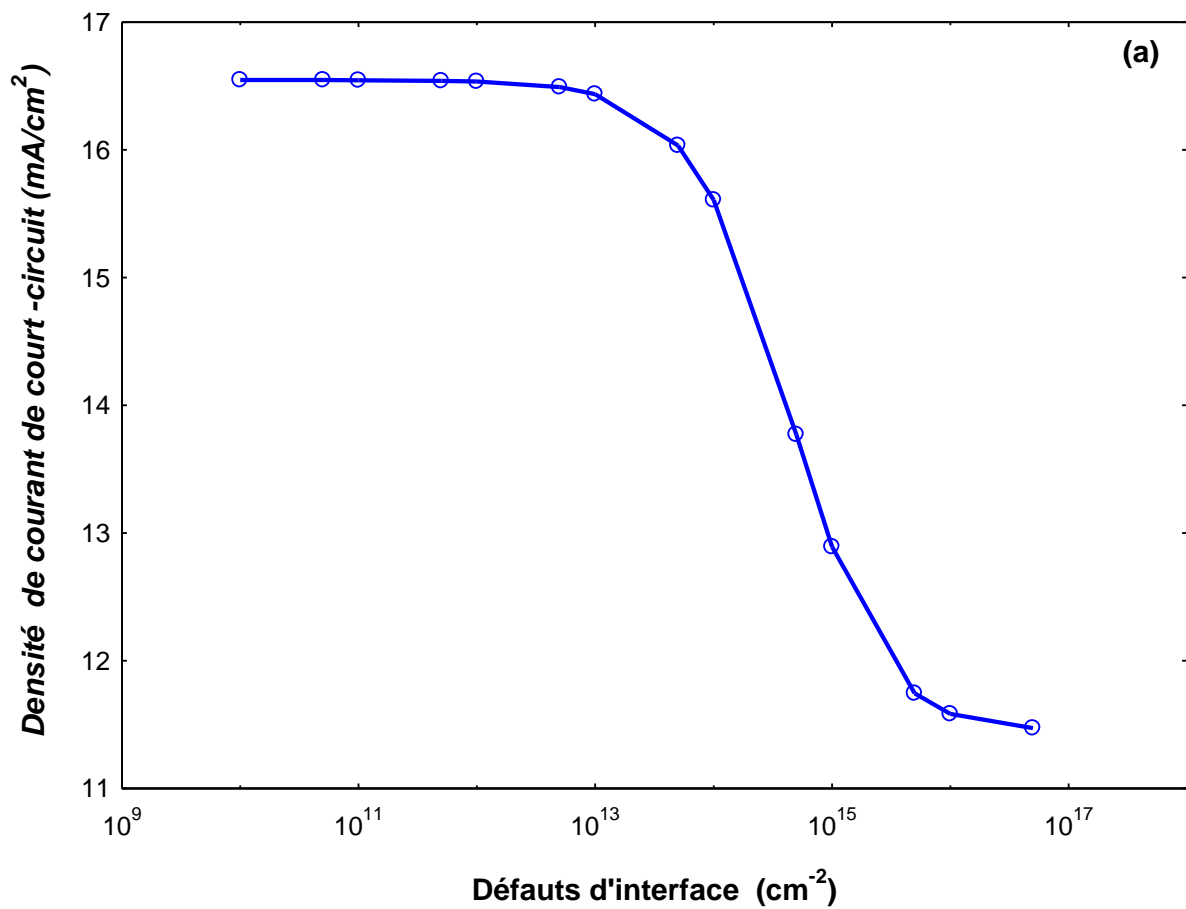
La figure 3.3b montre que, pour D_{it} pris dans l'intervalle [10^{14} cm^{-2} , $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$], la tension en circuit ouvert diminue de 0,908 V à 0,896 V. Cette diminution est la conséquence des liaisons pendantes dans la couche absorbante, qui provoquent des phénomènes de recombinaison et d'interdiffusion atomique à l'interface couche tampon /i-(a-Si:H).

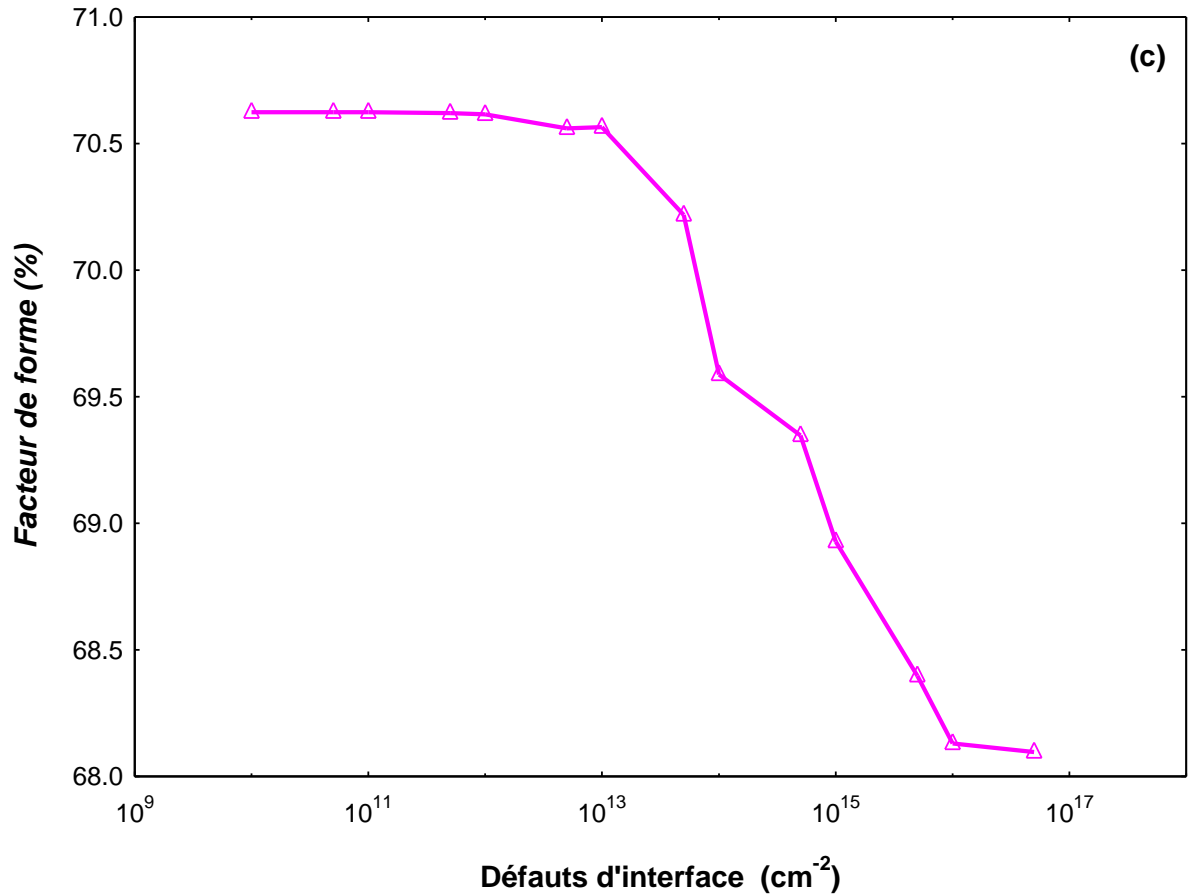
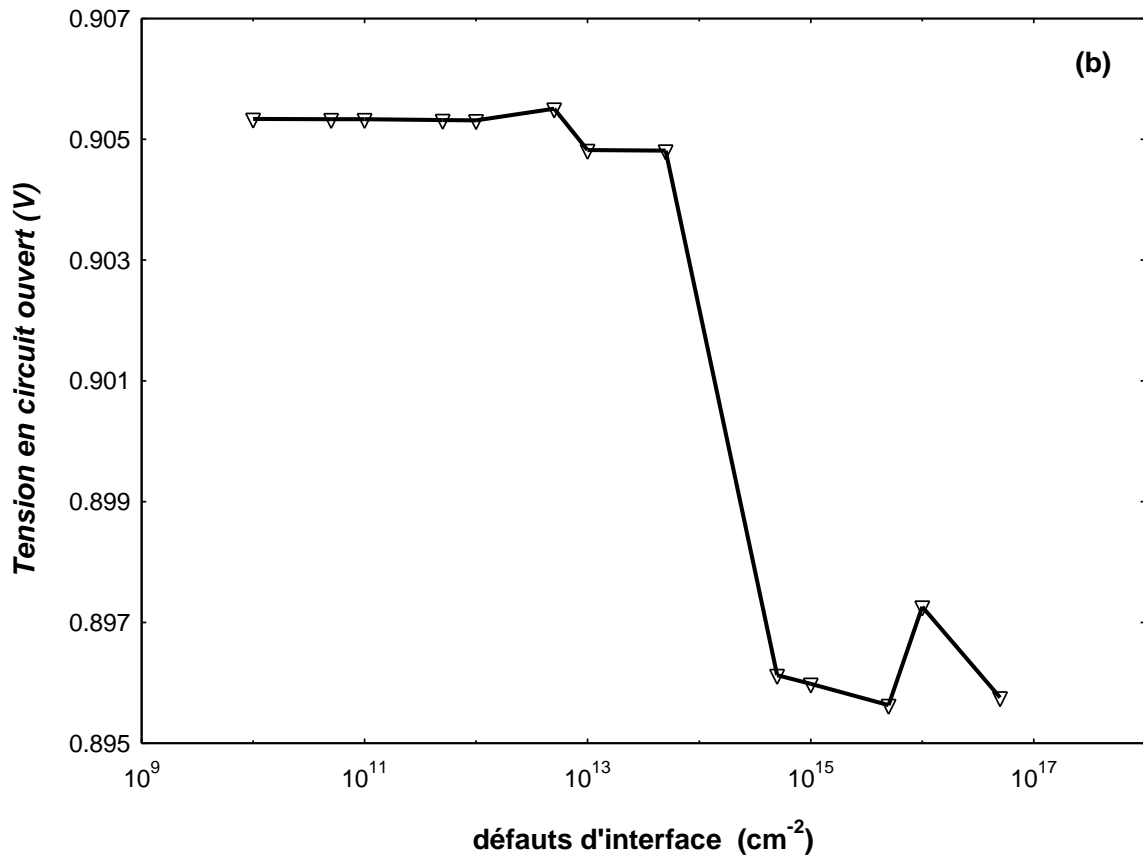
La figure 3.3c montre la variation du facteur de forme en fonction de la densité des défauts de surface. Pour des densités de défauts de surface supérieures à 10^{13} cm^{-2} , le facteur de forme diminue de 70,56 % à 68,09 %. Ceci est due aux recombinaisons de surface à l'interface couche tampon /i-(a-Si:H). On peut également expliquer cet affaiblissement par une

expression empirique de FF traduite par l'équation (3.3) [25,89] : la diminution de V_{OC} induit celle de FF.

$$FF = \frac{v_{oc} - \ln(v_{oc} + 0.72)}{1 + v_{oc}} \quad \text{ou} \quad v_{oc} = \frac{qV_{OC}}{AkT} \quad (3.3)$$

Ces trois paramètres électriques (J_{CC} , V_{CO} et FF) contribuent à la diminution de l'efficacité de conversion (figure 3.3d) donnée par l'équation (3.2). Ces résultats sont en accord avec les travaux de Rached et Rahal [90] . Ces résultats sont également similaires à ceux observés dans les travaux de Zhou et al. [91].





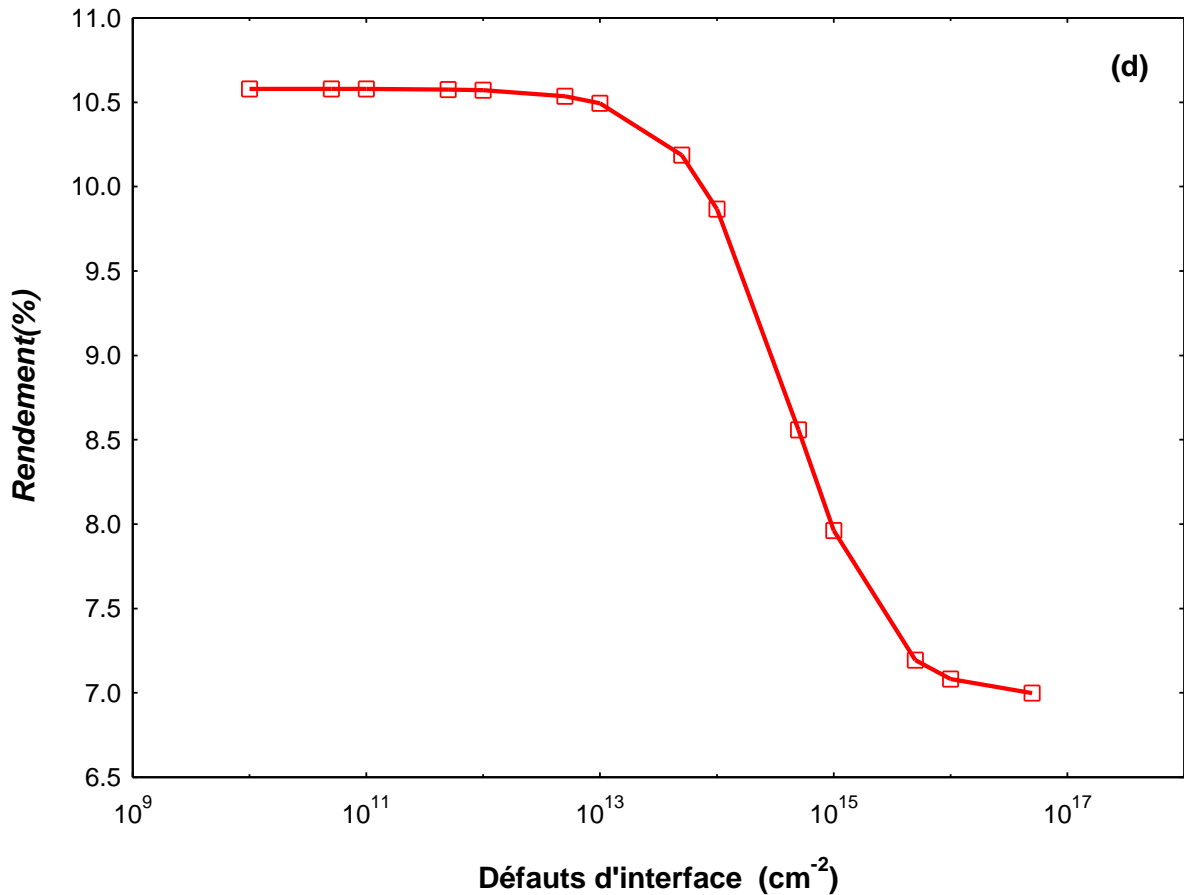


Figure 3.3 : Effet de la variation des états de l'interface couche tampon/*i*-(*a*-Si:H) sur les paramètres électriques : a) J_{CC} , b) V_{Co} , c) FF , d) η .

3.1.4 Proposition d'une cellule solaire ultramince optimisée

Optimiser une cellule solaire consiste à trouver les valeurs des paramètres qui la rendent plus efficace. Dans cette section, il s'agit d'utiliser les paramètres électriques optimaux de notre modèle de cellule solaire au silicium amorphe hydrogéné à couche ultramince. Notre approche dans cette section consiste à utiliser les valeurs optimales des paramètres étudiés dans les sous-sections précédentes, afin de simuler les paramètres électriques de la cellule solaire optimisée. Les paramètres optimaux, précédemment déterminés, sont $1 \mu\text{m}$, 10^9 cm^{-3} et 10^{10} cm^{-2} , respectivement, de l'épaisseur et de la densité de défauts de la couche intrinsèque et de la densité des défauts de surface à l'interface couche tampon/*i*-(*a*-Si:H). La cellule optimisée conduit ainsi à un rendement de conversion de 12,71%. La figure 3.4 présente une étude comparative des caractéristiques courant-tension des trois structures utilisées dans cette première partie de notre travail, et le Tableau 3.1 résume les paramètres électriques des cellules solaires expérimentale, simulée et optimisée. On peut se rendre à l'évidence d'une nette

amélioration de la densité de courant de court-circuit de la cellule optimisée par rapport aux deux autres, traduisant ainsi une assez bonne génération et collecte des porteurs de charge dans ladite cellule. Ainsi, nous prédisons que le choix de l'épaisseur de la couche intrinsèque, pour les cellules solaires à base de a-Si:H, à couches ultraminces, est crucial et devrait être à un micromètre. De plus les techniques de dépôt et le traitement des interfaces doivent être une préoccupation majeure pour la réalisation de telles cellules solaires à haut rendement.

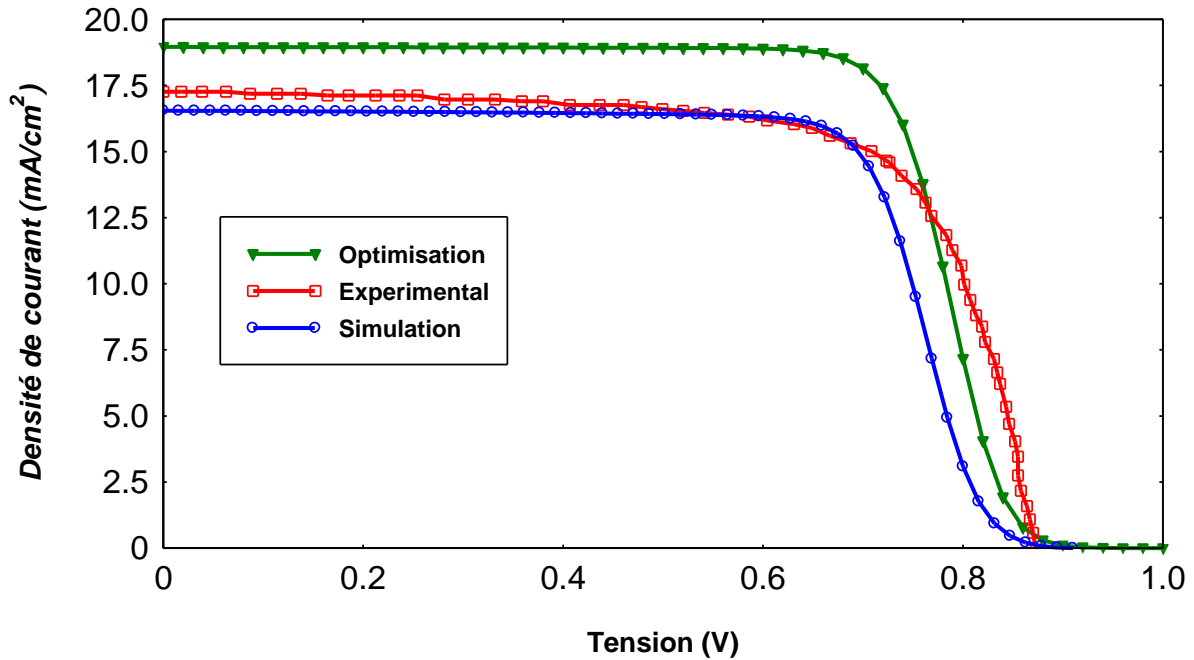


Figure 3.4: Caractéristiques J-V expérimentale, simulée et optimisée de la cellule solaire a-Si:H.

Tableau 3.1 : Comparaison des paramètres électriques des structures de cellules solaires expérimentale et optimisée.

Paramètres	Expérimentale	Simulation
J_{CC} (mA.cm ⁻²)	17,2	18,95
V_{CO} (V)	0,87	0,973
FF (%)	70,0	68,86
η (%)	10,58	12,71

3.2 Etude de l'impact des autres couches sur les performances de la cellule solaire optimisée.

Dans nos premières études [3] basées sur une cellule solaire a-Si:H ultrafine, avec l'épaisseur de l'absorbeur égale à 1 μ m, le rendement de 12,71 % est obtenu en utilisant l'ITO comme réflecteur arrière (BRL) dans le structure de la cellule solaire (Figure 3.5a). Cependant,

l'efficacité obtenue reste inférieure à l'efficacité théorique. Afin de pouvoir optimiser à nouveau notre structure de cellule solaire, nous étudions dans la suite de cette thèse, l'effet de différentes couches BRL et d'autres couches (fenêtre, tampon, couche n-(a-Si:H)) de la structure (Figure 3.5b) sur les performances de la cellule solaire à base de a-Si:H, dans le but de proposer une nouvelle architecture de cellule solaire a-Si:H pouvant produire de meilleurs rendements.

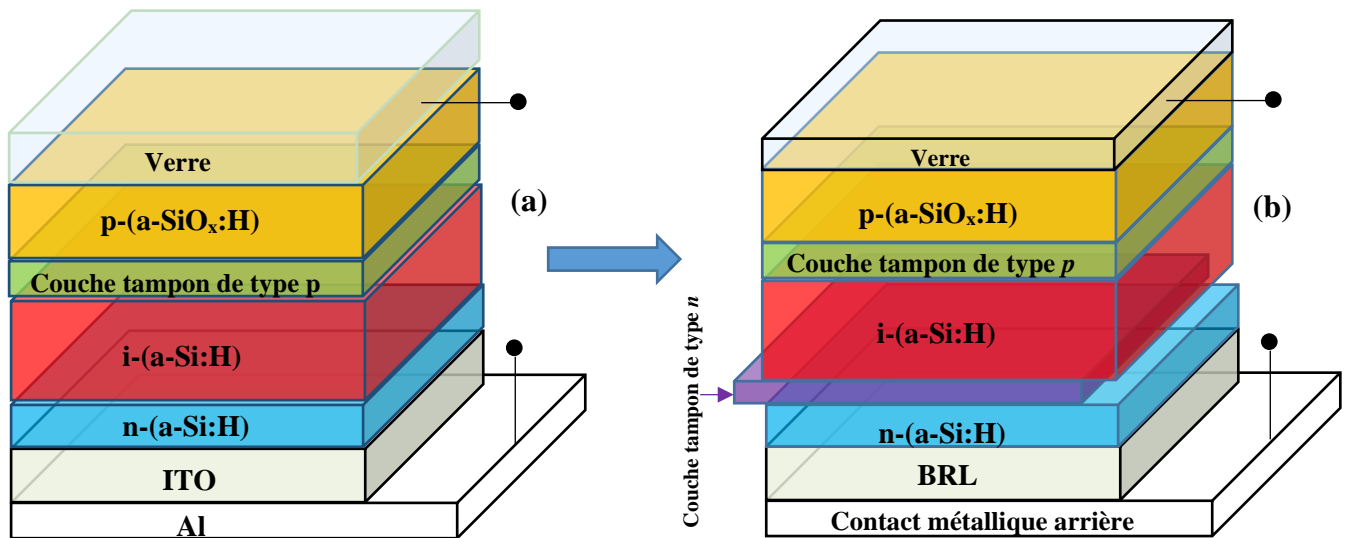


Figure 3.5: Diagramme schématique des cellules solaires à base de a-Si:H : (a) Cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces [3] ; (b) Cellule solaire à base de a-Si:H proposée pour un rendement élevé.

3.2.1 Choix d'un réflecteur arrière (BRL)

L'optimisation des capacités de piégeage de la lumière dans les cellules solaires par les réflecteurs arrière (BRL) est un pan important pour la conception et la réalisation des cellules photovoltaïques à haut rendement. Ces couches sont généralement situées entre le contact métallique arrière et la couche de type-n, dans la cellule solaire a-Si:H. Ces couches ont l'avantage de favoriser la réflexion de la lumière incidente par le phénomène rétrodiffusion de celle-ci dans les couches actives de la cellule photovoltaïque (Figure 3.5). La figure 3.6 illustre les caractéristiques courant- tension associées aux différentes structures solaires incorporant diverses couches BRL (IGZO, ZnO, PCBM, TiO₂ et CdS:O,) susceptible de remplacer l'ITO utilisé dans l'expérience par Banerjee et al [4].

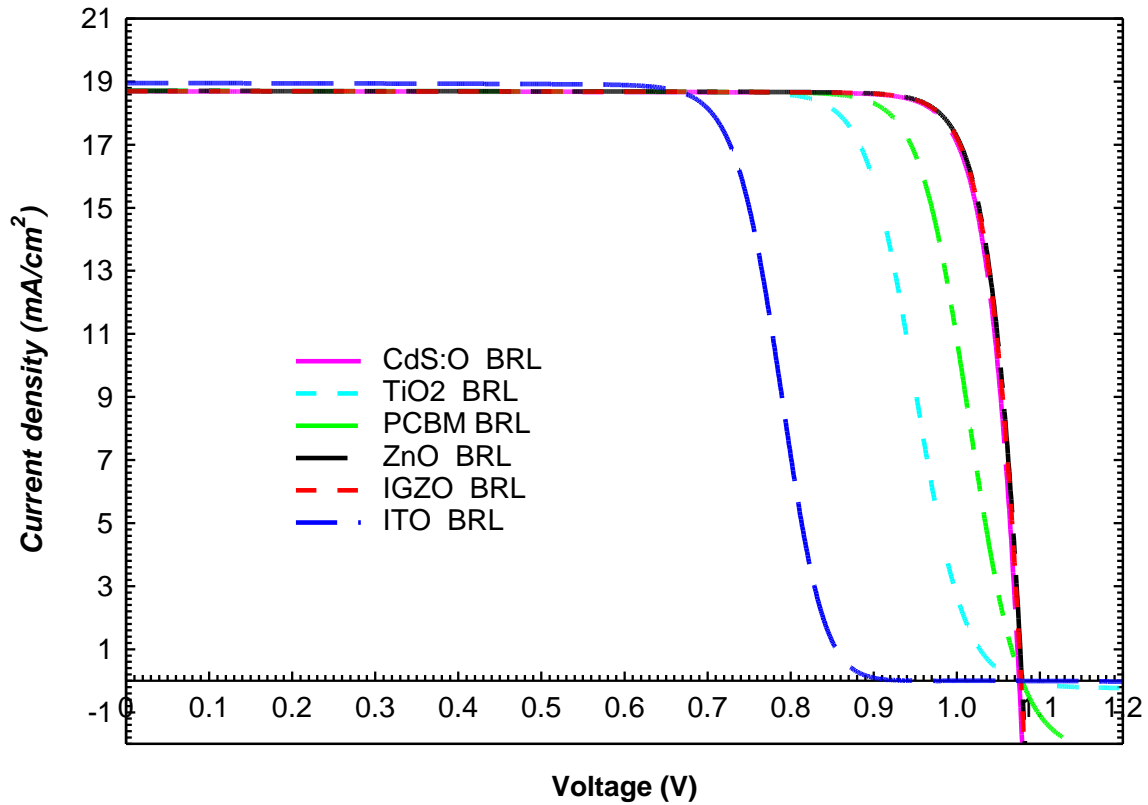


Figure 3.6 : Effet de différents BRL sur la caractéristique J-V des cellules solaires à base de *a-Si:H*.

Le Tableau 3.2 récapitule les paramètres de performance correspondant à chacune de ces cellules solaires. On constate que, l'insertion d'autres couches de BRL (figure 3.5b) conduit à l'amélioration de la tension en circuit ouvert, V_{CO} et du facteur de forme, FF . Cette observation traduit la corrélation qui existe entre ces deux paramètres électriques (voir équation 3.3). Ceci est principalement dû à la réduction du taux de recombinaison au niveau du contact arrière de la cellule solaire.

Tableau 3.2 : Comparaison des paramètres électriques de la cellule solaire avec différents BRL.

Paramètre électrique	Avec ITO	Avec IGZO	Avec ZnO	Avec PCBM	Avec TiO ₂	Avec CdS:O
J_{CC} (mA/cm ²)	18,95	18,70	18,71	18,70	18,71	18,70
V_{CO} (V)	0,941	1,077	1,078	1,079	1,079	1,075
FF (%)	71,28	87,50	87,50	81,96	76,43	87,46
Efficacité (%)	12,71	17,63	17,65	16,54	15,43	17,58

Les alignements de bandes entre la couche n-(a-Si:H) et les diverses couches BRL sont schématisés sur la figure 3.7. On peut y remarquer que toutes les couches BRL, à l'exception de l'ITO, présentent une discontinuité de bande de conduction relativement meilleure, comparativement à la forte falaise énergétique observée dans le cas de l'ITO, dont la conséquence est l'affaiblissement du V_{co} et du FF (voir Tableau 3.2). Les valeurs presque constantes de la densité de courant de court-circuit J_{CC} (Tableau 3.2), indiquent l'insensibilité de ce paramètre à la couche BRL, comme prévu par Ahmed et al. [92]. Les facteurs qui s'opposent généralement au transport des porteurs de charges dans les cellules solaires sont les discontinuités de bandes de valence (ΔE_V) et de conduction (ΔE_C), mais aussi la barrière électronique à l'interface BRL/Al, au niveau du contact arrière. Pour tenir compte de cela, SCAPS-1D utilise le modèle d'Anderson [87], dont les équations 3.4 et 3.5, ci-dessous, nous ont permis de calculer ces paramètres.

$$\Delta E_C = \Delta\chi \quad (a) \quad ; \quad \Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C \quad (b) \quad (3.4)$$

$$\Phi_b = MWF - \chi_{BRL} \quad (3.5)$$

MWF et χ_{BRL} représentent respectivement le travail de sortie du contact arrière et l'affinité électronique du BRL.

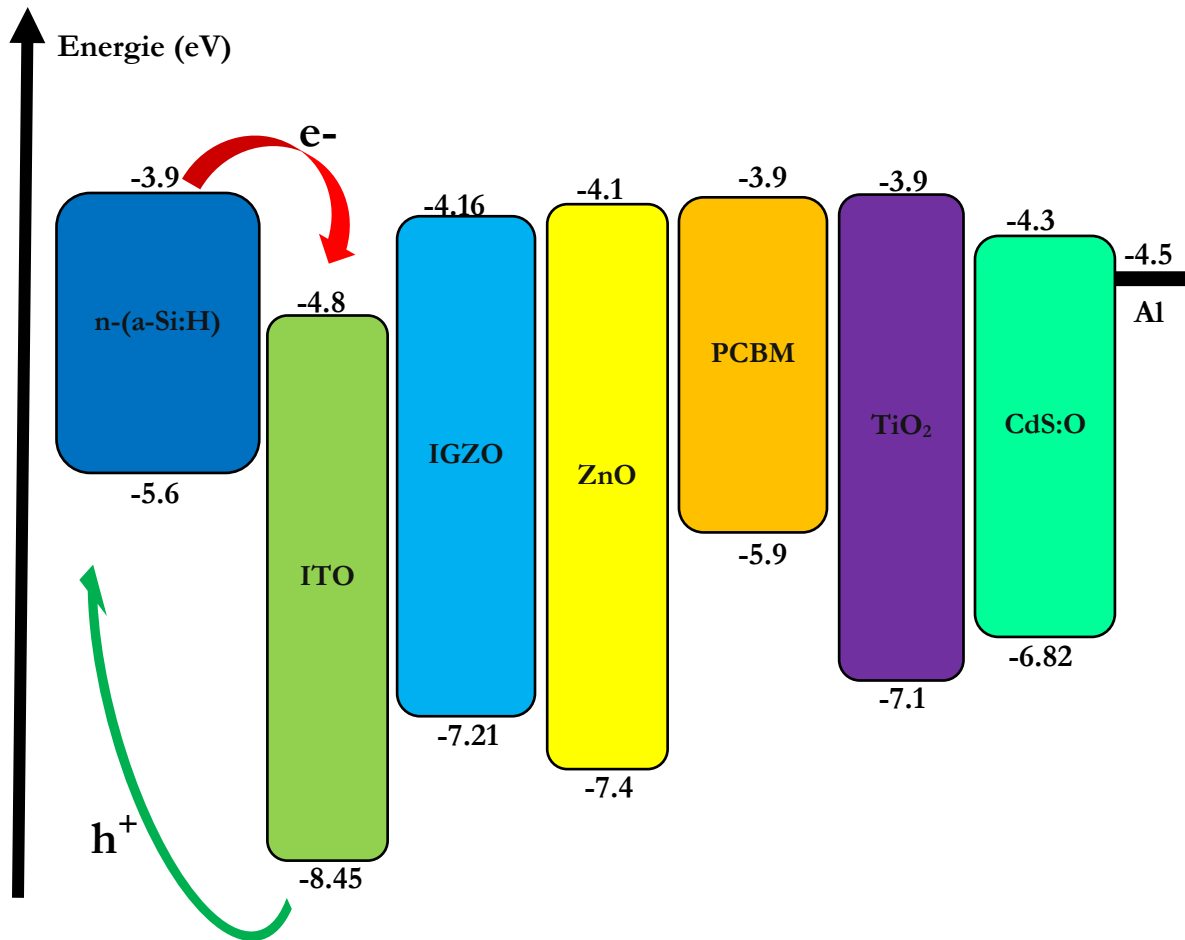


Figure 3.7 : Diagramme de bande interdite aux interfaces $n\text{-(a-Si:H)/BRL}$ et BRL/Al pour la cellule solaire à base de $a\text{-Si:H}$ à couches ultraminces avec différents BRL.

En se référant à la figure 3.7, la bande de conduction de toutes les couches BRL utilisées est inférieure ou égale à celle de la couche $a\text{-Si:H}$ de type n . On peut donc admettre l'existence d'une falaise énergétique à l'interface couche $n\text{-(a-Si:H)/BRL}$ [93].

Tableau 3.3 : Les valeurs de ΔE_C , ΔE_V , et Φ_b pour différentes structures de la cellule solaire à base de $a\text{-Si:H}$ à couches ultraminces.

Paramètre	Avec ITO	Avec IGZO	Avec ZnO	Avec PCBM	Avec TiO ₂	Avec CdS:O
ΔE_C	0,90	0,26	0,20	0,0	0,0	0,40
ΔE_V	2,85	1,61	1,80	0,30	1,60	1,22
Φ_b	0,30	-0,34	-0,40	-0,60	-0,60	-0,20

Le faible rendement de 12,71% dans le cas de la cellule solaire avec l'ITO comme BRL est certainement dû à la forte falaise énergétique à l'interface couche n/ITO estimée 0,90eV et

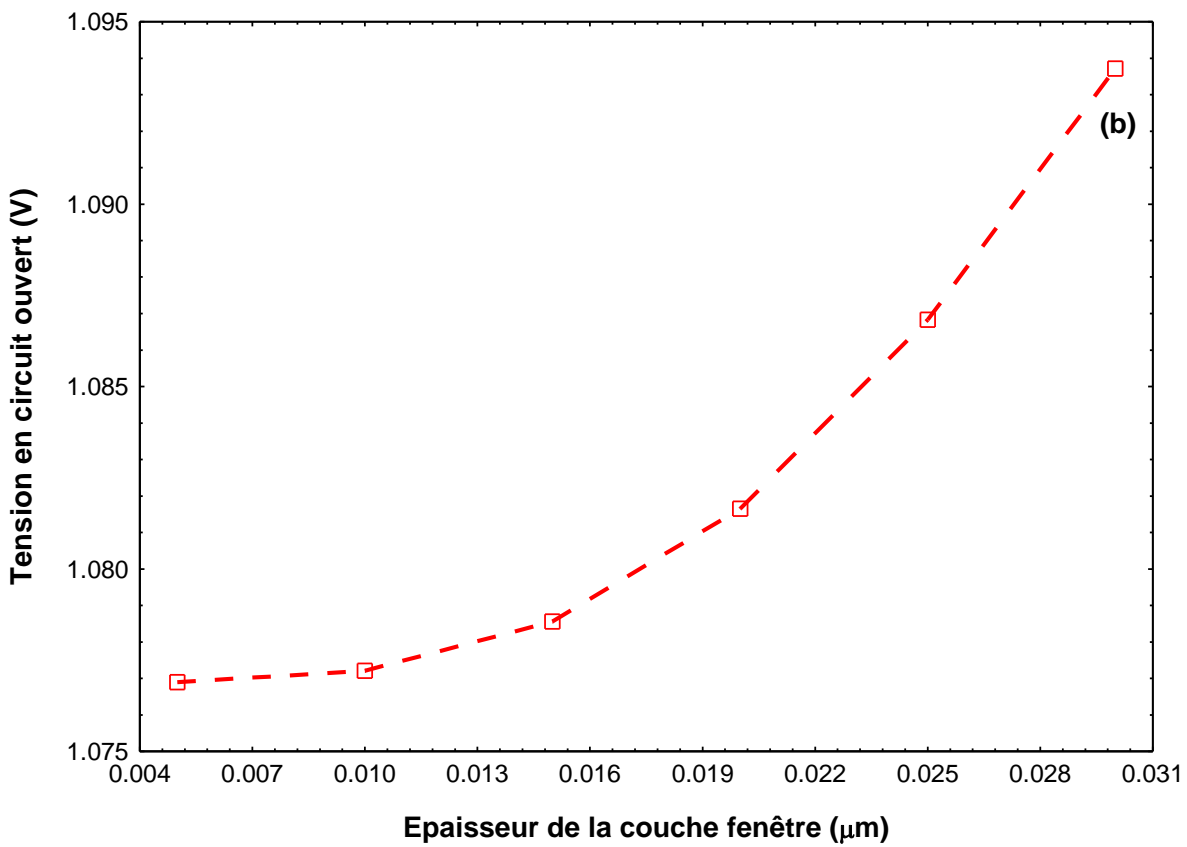
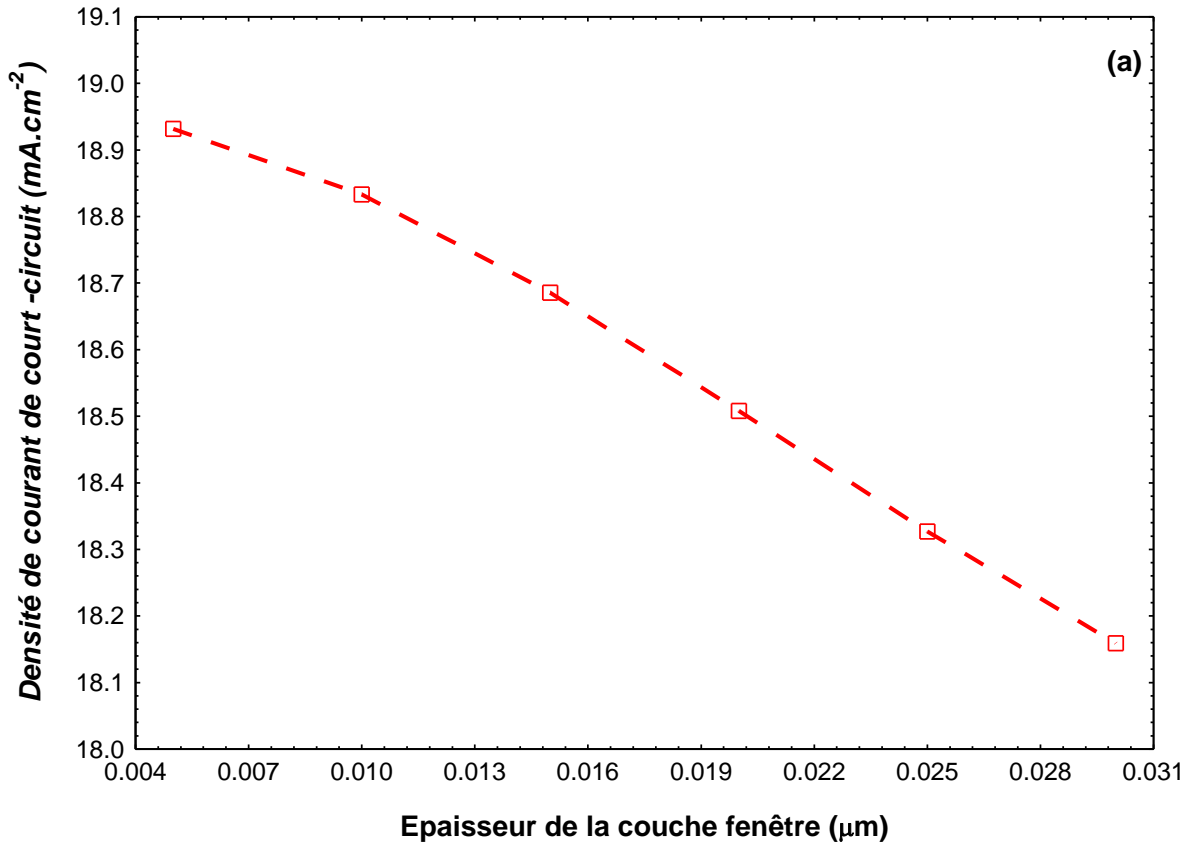
au pic énergétique 0,30eV, de la barrière électronique au niveau du contact arrière de, donc l'effet serait une accumulation des électrons conduisant à un fort courant de recombinaison (figure 3.7). Tous ces faits contribuent à augmenter le taux de recombinaison des porteurs de charge photogénérés dans la cellule solaire. Le meilleur rendement de conversion de 17,65 % (Tableau 3.2) est obtenu pour la cellule solaire à couches ultraminces à base de a-Si:H avec le ZnO comme couche BRL. Cela peut s'expliquer par la mobilité élevée des porteurs de charge dans le ZnO, et la grande valeur de sa constante diélectrique [94] ; mais également de faible la discontinuité de la bande de conduction, assez favorable au transport des électrons. Fort de ces raisons et du fait que l'oxyde de zinc est non-toxique, possède un indice de réfraction ajustable [94] , et qu'il soit largement utilisé dans les industries concernées[95], nous avons choisi d'utiliser la couche de ZnO comme BRL dans la suite de ces travaux afin de réaliser nos simulations.

3.2.2 Effet de l'épaisseur de la couche fenêtre

L'estimation de l'épaisseur de la couche fenêtre est un processus fondamental et crucial pour la conception d'une cellule solaire à haut rendement [1]. Une couche fenêtre très épaisse rend difficile le filtrage de la lumière avant qu'elle ne soit absorbée par la couche intrinsèque sous-jacente, ce qui augmente les absorptions parasites de la cellule solaire. L'épaisseur optimale doit pouvoir contribuer à un équilibre entre la transmittance et la photogénération des porteurs de charges. Comme mentionné ci-dessus, la transmittance de la couche p-(a-SiOx:H) est relativement grande. Pour déterminer l'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre sur les performances de la cellule, tout en maintenant les autres paramètres du matériau constants, nous avons fait varier l'épaisseur de la couche fenêtre p-(a-SiOx:H) entre 0,005 à 0,030 μm . L'influence de l'épaisseur de la couche p-(a-SiOx:H) sur les paramètres électriques d'intérêt (J_{CC} , V_{CO} , FF, et Efficacité) est montrée sur la Figure 3.8. Ces courbes sont en bon accord avec celles obtenues par Kouider et al. [96] et Mehmood et al. [97] dans le cas des cellules solaires a-SiOx:H et a-Si:H, respectivement. Nous pouvons observer que J_{CC} (Figure 3.8a) et FF (Figure 3.8c) diminuent légèrement tandis que le V_{CO} (Figure 3.8b) croît légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche p-(a-SiOx:H). La diminution de J_{CC} est la conséquence de l'augmentation du piégeage de la lumière (causée par l'absorption parasite) pour de grandes épaisseurs de la couche fenêtre, ce qui concourt à la diminution du taux de générations des paires électron-trou dans la cellule solaire. Cette absorption parasite ne contribue pas à la génération du photocourant dans la couche active. De plus, la décroissance du FF est due à l'augmentation de la résistance série de la cellule solaire qui croît avec

l'épaisseur de la couche fenêtre. La légère augmentation du V_{CO} avec l'épaisseur de la couche fenêtre est due à la diminution du taux de recombinaison au niveau du contact avant.

L'efficacité décroît de 18,00% ($J_{CC} = 18,93 \text{ mA/cm}^2$; $V_{CO} = 1,077 \text{ V}$; $FF = 88,32\%$) à 15,87% ($J_{CC} = 18,16 \text{ mA/cm}^2$; $V_{CO} = 1,093 \text{ V}$; $FF = 79,95\%$) lorsque la valeur de l'épaisseur de la couche fenêtre varie de 5 nm à 30 nm. Cette perte peut être attribuée à la réponse négative de l'augmentation de l'épaisseur de la couche p-(a-SiOx:H) sur J_{CC} et FF : elle est due à l'effet combiné de la décroissance de J_{CC} et FF . En outre, la figure 3.9 nous montre la variation de la réponse spectrale pour différentes épaisseurs de la couche fenêtre p-(a-SiOx:H). Nous remarquons une diminution de la réponse spectrale avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche fenêtre. Cette baisse est causée par l'absorption parasite de la lumière pour les couches fenêtrés plus épaisses. Afin d'optimiser notre structure, nous avons fixé l'épaisseur de la couche fenêtre p-(a-SiOx:H) à 5 nm, pour la suite de nos travaux.



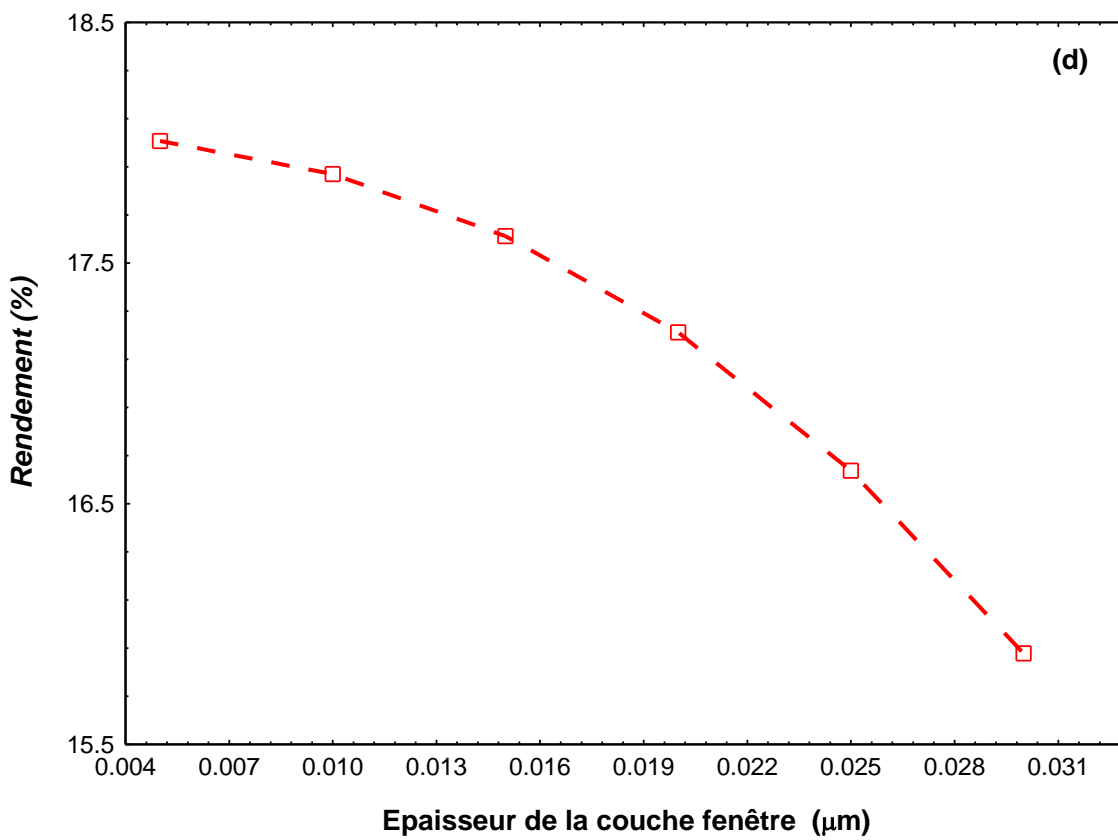
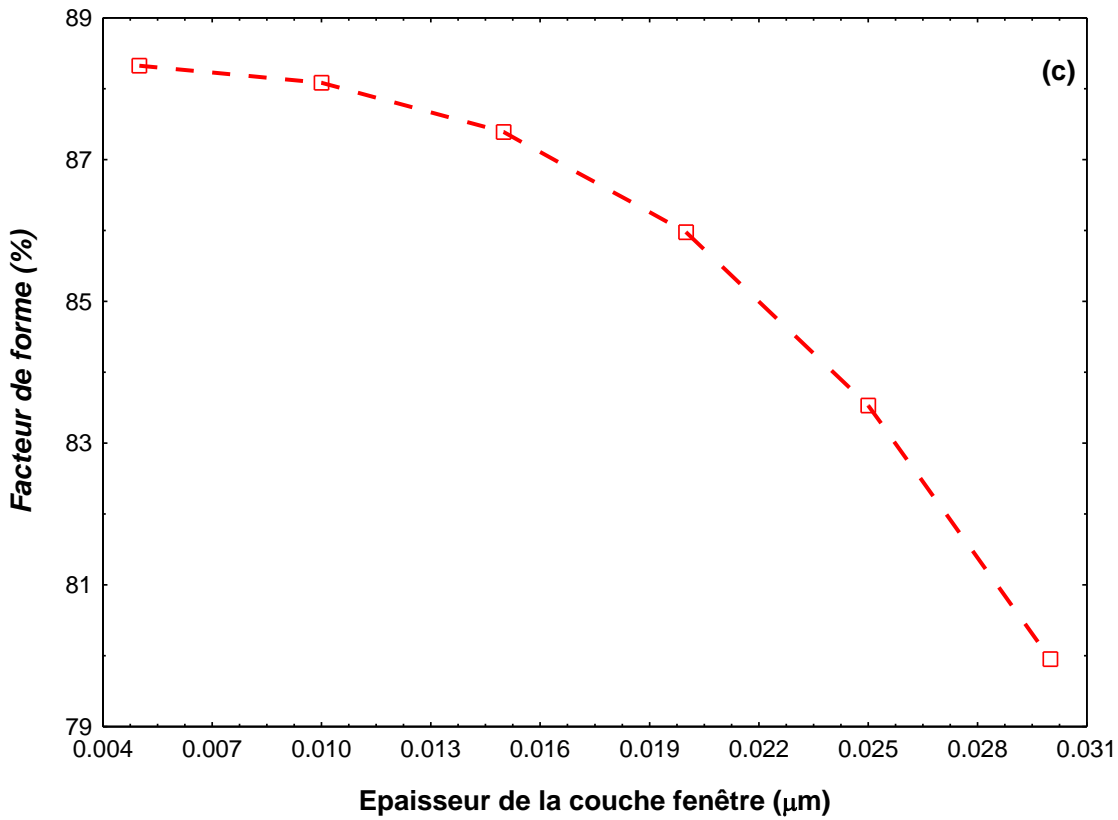


Figure 3.8 : Variation des paramètres électriques en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre : a) J_{CC} , b) V_{Co} , c) FF , d) Efficacité.

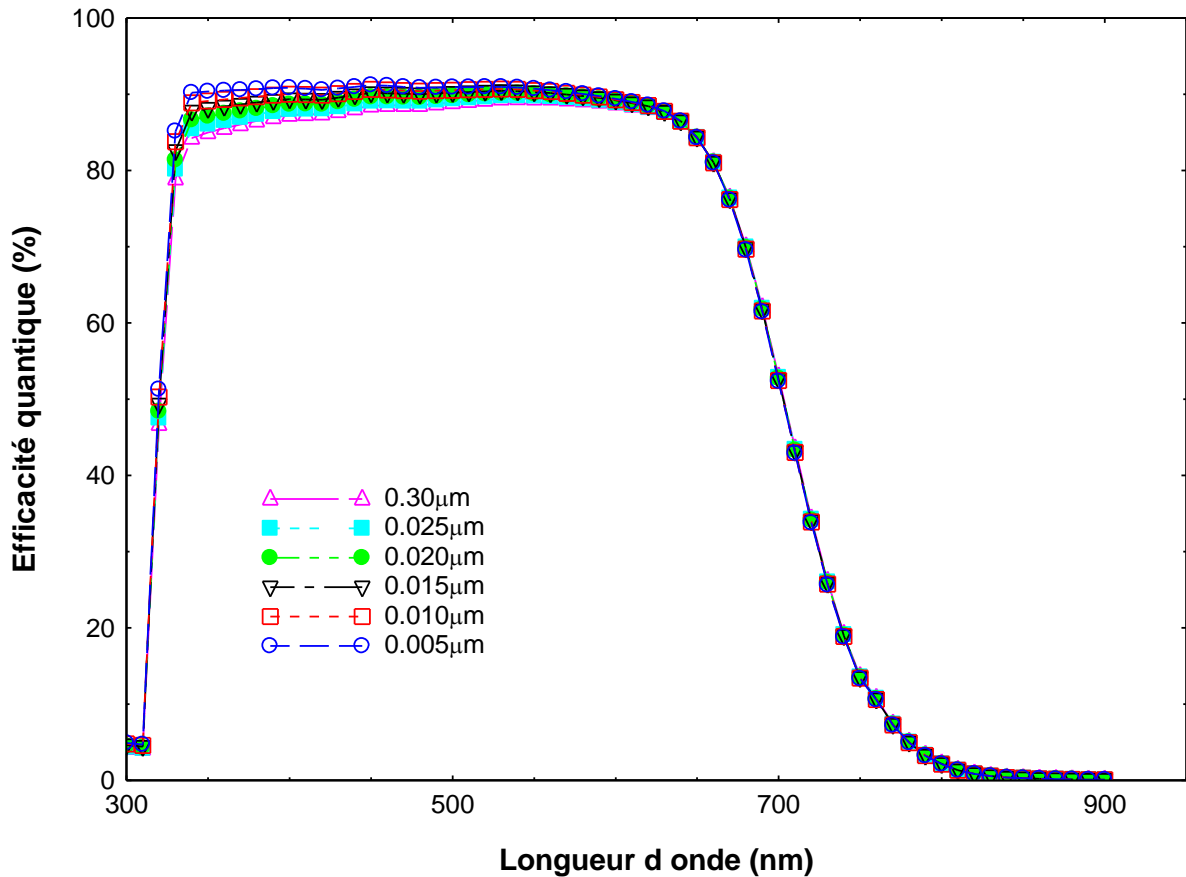


Figure 3.9 : Courbes d'efficacité quantique en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre

En raison du grand nombre de variables de traitement, il est coûteux d'examiner expérimentalement l'effet de chaque paramètre physique sur les performances de la cellule solaire [98] ; cependant, la simulation numérique peut permettre d'économiser du temps, des matériaux et des coûts dans ce processus. Dans les parties suivantes de notre travail, nous nous sommes concentrés principalement sur l'étude de l'effet de variation de la durée de vie des porteurs de charge, de l'épaisseur et de la concentration de dopage des différentes couches sur les performances de la cellule solaire à couche mince à base de a-Si:H.

3.2.3 Effet de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge

Le courant de fuite est l'une des causes principales qui affecte la tension en circuit ouvert des cellules solaires, car il dépend des technologies de fabrication des cellules solaires, des types de cellules et de la microstructure des dispositifs [99]. L'insertion d'une couche tampon de type p est généralement utilisée pour améliorer la tension en circuit ouvert, réduire le phénomène de recombinaison à l'interface [100] et empêcher la formation de « pinhole » et les courants de fuites en dérivation à cette interface, contribuant à la résistance shunt. Dans cette sous-section, nous essayons de comprendre l'impact de certains paramètres de cette couche tampon de type p sur les performances de la cellule solaire.

3.2.3.1 Influence de l'épaisseur de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge

L'épaisseur de la couche tampon de type p doit être réduite à quelques nanomètres. Cependant, si cette couche est trop fine, des « pinhole » ou des discontinuités se produiront inévitablement de sorte que l'absorbeur entre directement en contact avec l'électrode avant, ce qui entraîne des micro-shunts électriques [99]. En outre, la collecte des porteurs est cruciale pour les dispositifs photovoltaïques à couches minces [101]. La figure 3.10 montre les lignes de niveau des paramètres électriques en fonction de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i et de l'épaisseur de la couche tampon de type p. L'objectif est d'étudier l'effet combiné de ces paramètres sur les performances de la cellule solaire. La durée de vie des porteurs de charge photogénérés et l'épaisseur de la couche tampon de type p sont respectivement prises dans les plages de 0,01 ns à 5 ns et de 4 nm à 50 nm. On peut y observer une très faible influence de ces deux paramètres sur les performances de la cellule solaire. Pour une durée de vie des porteurs de charge fixe, J_{CC} augmente légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon car l'épaisseur de la ZCE augmente légèrement (équation 3.1). Nous rappelons que l'épaisseur de la couche de fenêtre est très faible (5 nm) ; et pour une faible épaisseur de la couche tampon, le taux de recombinaison sera très élevé et entraînera la diminution de la J_{CC} . À l'inverse, pour une épaisseur de couche tampon de type p fixe, J_{CC} n'est pas affecté par l'augmentation de la durée de vie des porteurs de charge photogénérés ; cependant, le V_{OC} augmente légèrement en raison de la réduction des phénomènes de recombinaison volumique et au niveau de l'interface couche tampon p/couche i. On observe également que pour une durée de vie des porteurs de charge photogénérés supérieure ou égale à 2 ns, l'augmentation de la durée de vie n'affecte non plus le FF. Par contre, pour une durée de vie des porteurs de charge inférieure à 2 ns, le FF croît légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon

de type p. Cette croissance pourrait s'expliquer par le fait qu'il y a moins de recombinaison à l'interface couche tampon p/couche i et à l'augmentation de la résistance série. La fuite de courant est donc minimisée en utilisant une couche tampon de type p légèrement plus épaisse. Pour une durée de vie fixe des porteurs de charge (supérieure à 1 ns), l'efficacité de la cellule solaire augmente légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon, ceci est dû à l'augmentation simultanée de J_{CC} et FF. Pour une épaisseur de couche tampon de type p de 50 nm et une durée de vie des porteurs de charge photogénérés supérieure à 1 ns, l'efficacité maximale obtenue pour la cellule dans ces conditions est d'environ 18,53 %. Ainsi, nous prendrons cette valeur de 50 nm comme l'épaisseur optimale de la couche tampon de type p.

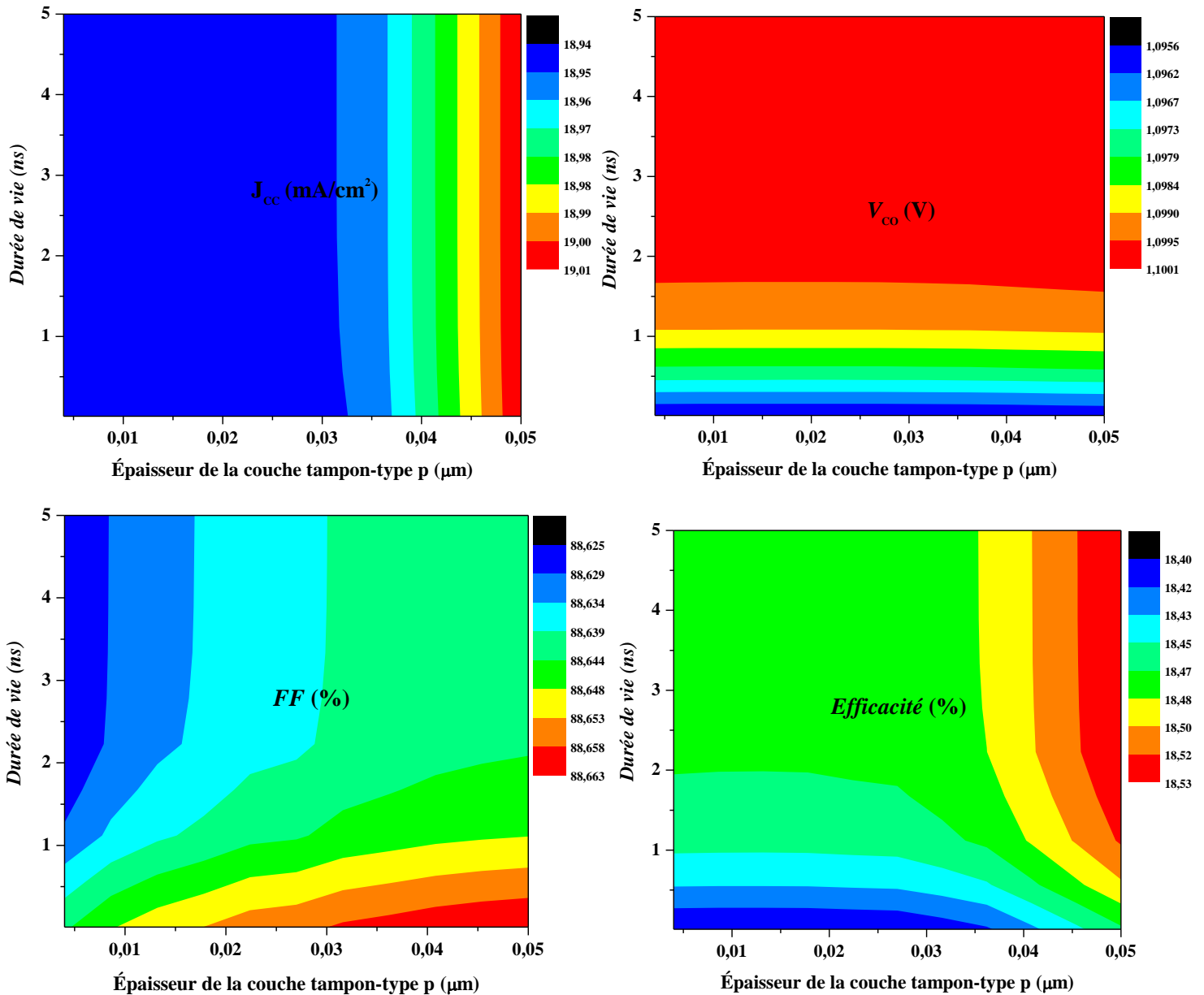


Figure 3.10 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charge de l'absorbeur et de l'épaisseur de la couche tampon de type p.

3.2.3.2 Impact de la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p et de la durée de vie des porteurs de charge

Dans cette étude, la photogénération est un élément important de la cellule solaire. Une courte durée de vie des porteurs de charge entraîne une baisse du V_{co} dans les cellules solaires [102]. La figure 3.11 illustre les lignes de niveaux des paramètres électriques en fonction de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i et de la densité d'accepteurs dans la couche tampon de type p. Pour effectuer nos simulations, la durée de vie des porteurs de charge

photogénérés et la densité d'accepteurs varient de 0,01 ns à 5 ns et de 10^{12} cm^{-3} à 10^{16} cm^{-3} , respectivement. La figure 3.11 montre que, quelque soit la durée de vie des porteurs de charge tous les paramètres électriques ne sont pas affectés par l'augmentation de la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p. À l'inverse, pour une densité d'accepteurs de couche tampon de type p fixe, tous les paramètres électriques de la cellule sont affectés positivement car l'augmentation de la durée de vie des porteurs de charge photogénérés ; ces observations sont principalement dues à la réduction du phénomène de recombinaison volumique. Pour les simulations suivantes, la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p est fixée à 10^{14} cm^{-3} .

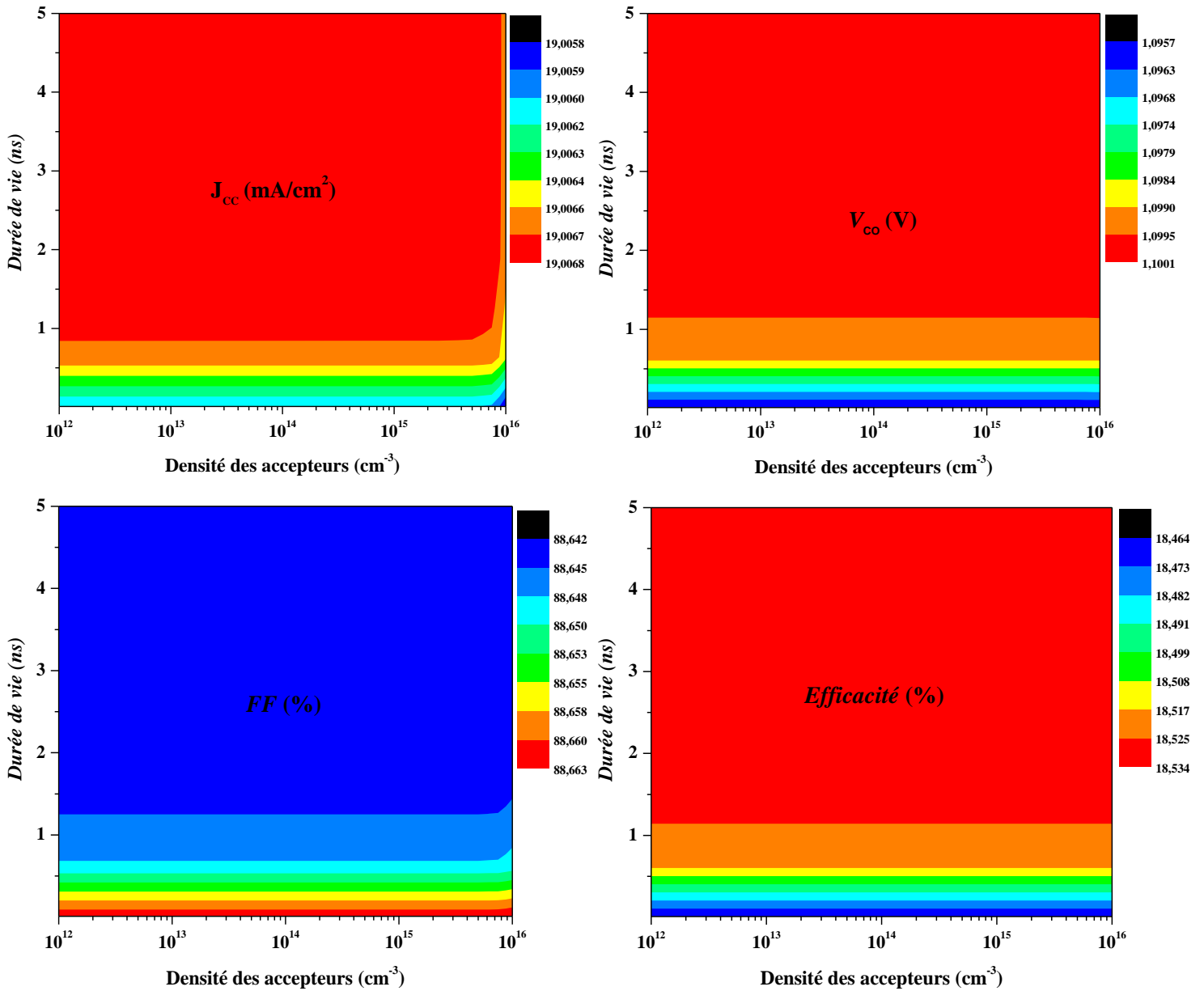


Figure 3.11 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de la densité d'accepteurs de la couche tampon de type p.

3.2.4 Effet de la couche n-(a-Si:H) et durée de vie des porteurs de charge

Dans cette partie du travail, l'impact de l'épaisseur de la couche n et de la variation de sa densité de donneurs sur les performances de la cellule solaire sont analysés. L'objectif de cette étude est de déterminer les paramètres optimaux de la couche n-(a-Si:H) afin d'optimiser les performances de la cellule.

3.2.4.1 Impact de l'épaisseur de la couche n et de la durée de vie des porteurs de charge

La figure 3.12 présente les lignes de niveaux des paramètres électriques en fonction de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i et de l'épaisseur de la couche n. La durée de vie des porteurs de charge photogénérés et l'épaisseur de la couche n varient de 0,01 ns à 5 ns et de 10 nm à 100 nm, respectivement. Ces variations ont une très faible influence sur les paramètres électriques de la cellule solaire. Nous observons que le V_{CO} , le FF et le rendement montrent les mêmes tendances. Pour une épaisseur de couche n inférieure à 75 nm le V_{OC} , le FF et l'efficacité augmente légèrement avec l'épaisseur de la couche n pour une durée de vie fixe des porteurs de charges photogénérés. L'augmentation de l'efficacité est due à l'effet combinée de l'augmentation de V_{CO} et FF. Inversement, Pour une épaisseur de couche n supérieure à 75 nm, l'efficacité diminue, cette décroissance est due à la diminution du J_{CC} cette observation est due à l'absorption parasite pour de grandes épaisseurs de cette couche. Légèrement avec la durée de vie des porteurs de charge photogénérés. Ces observations sont principalement dues à la réduction de la recombinaison à l'interface des cellules solaires [103]. En outre, il est clair que la variation de la durée de vie des porteurs de charge photogénérés et de l'épaisseur de la couche n n'affectent pas vraiment la J_{CC} . De plus, pour une épaisseur de couche n de 25 nm et une durée de vie des porteurs de charge photogénérés supérieure à 0,5 ns, un rendement maximal d'environ 18,55 % ($J_{CC}=19,01 \text{ mA/cm}^2$; $V_{CO}=1,101 \text{ V}$; $FF=88,67 \%$) est obtenu pour la cellule solaire ; et pour nous, cette épaisseur de ladite couche tient lieu de valeur optimale pour les simulations ultérieures.

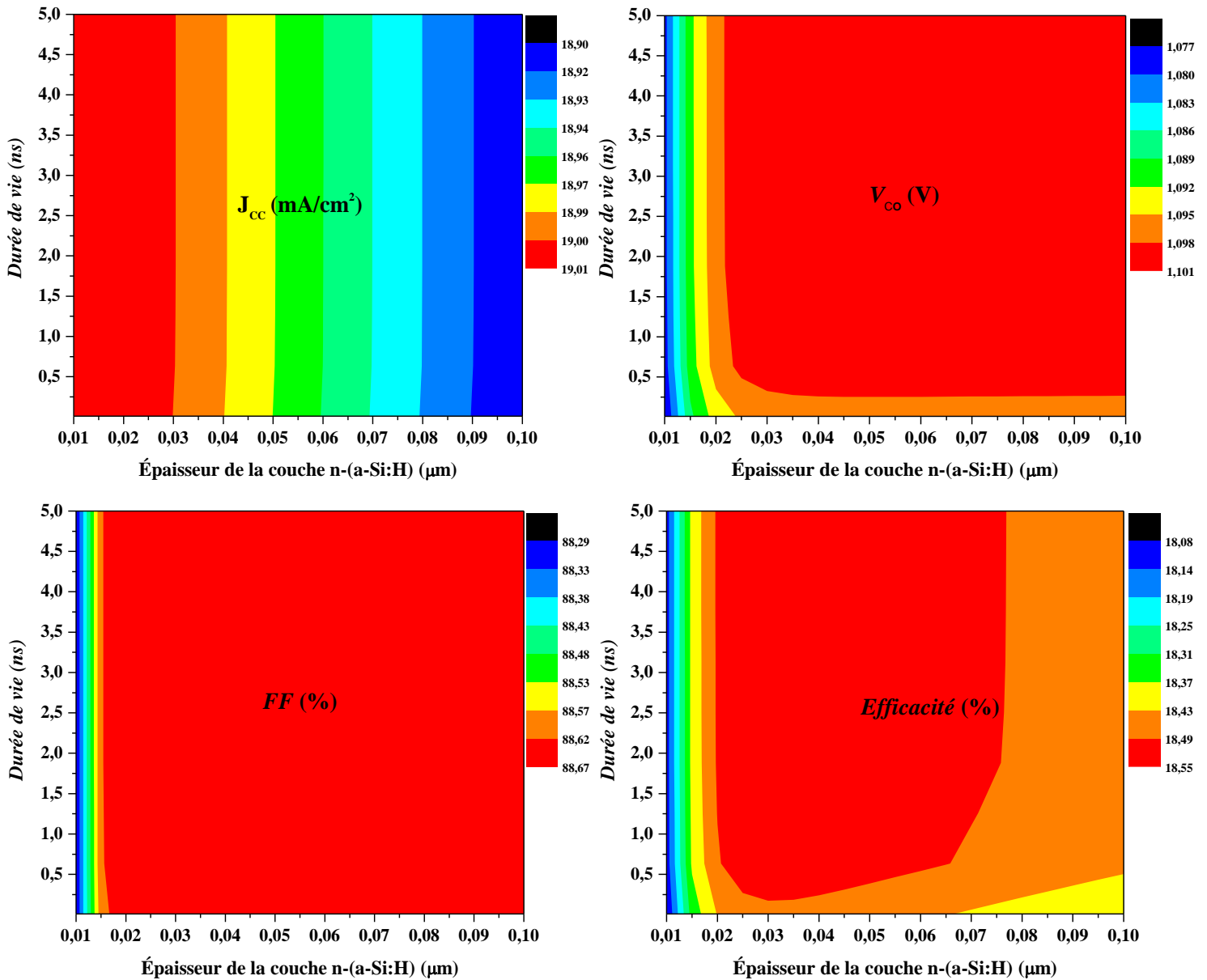


Figure 3.12 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de l'épaisseur de la couche n-(a-Si:H).

3.2.4.2 Influence de la densité de donneurs de la couche n et de la durée de vie des porteurs de charge

La figure 3.13 présente les lignes de niveaux des paramètres électriques en fonction de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i et de la densité de donneurs de la couche n. La durée de vie des porteurs de charge photogénérés et la densité de donneurs de la couche n varient de 0,01 ns à 5 ns et de 10^{19} cm⁻³ à 10^{21} cm⁻³, respectivement. Nous observons que les paramètres électriques augmentent avec la concentration de porteurs de la couche n,

indépendamment de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i. Cette augmentation de la densité de donneurs de la couche n améliore le champ électrique induit dans la cellule solaire, ce qui maximise le nombre de séparations de paires électron-trou photogénérées dans la couche absorbante ; cela se reflète dans la légère amélioration de J_{CC} de 18,967 mA/cm² à 19,032 mA/cm², mais reste presque inchangé avec la durée de vie des porteurs. L'augmentation de V_{CO} est due aux effets combinés de l'augmentation de J_{CC} (ou I_G) et de la diminution du courant de saturation (I_0) comme le montre l'équation 7 [104]. Le FF augmente également de 86,30% à 89,90% avec l'augmentation de la densité de donneurs de la couche n et indépendamment de la durée de vie des porteurs de charge dans la couche i. L'amélioration de l'efficacité peut être observée sur la Figure 3.13 lorsque la densité de donneurs de la couche n augmente, ce qui est en accord avec le résultat d'Abdelaziz et al. [104] dans le cas de ETL et HTL. Cette observation est l'effet combiné de la croissance de J_{CC} de V_{CO} , et principalement du FF

$$V_{CO} = n \cdot V_T \cdot \ln \left(1 + \frac{I_G}{I_0} \right) \quad (3.4)$$

où I_0 est le courant de saturation dans l'obscurité, n est le facteur d'idéalité de la diode, I_G est le courant photogénéré par la lumière et V_T est la tension thermique.

Pour une densité de donneurs de 10^{21} cm⁻³ dans la couche n et une durée de vie des porteurs de charge photogénérés supérieure à 1,5 ns, le rendement maximal obtenu pour la cellule solaire est d'environ 21,40 %. Pour les simulations ultérieures, la densité de donneurs de la couche n est fixée à 10^{21} cm⁻³.

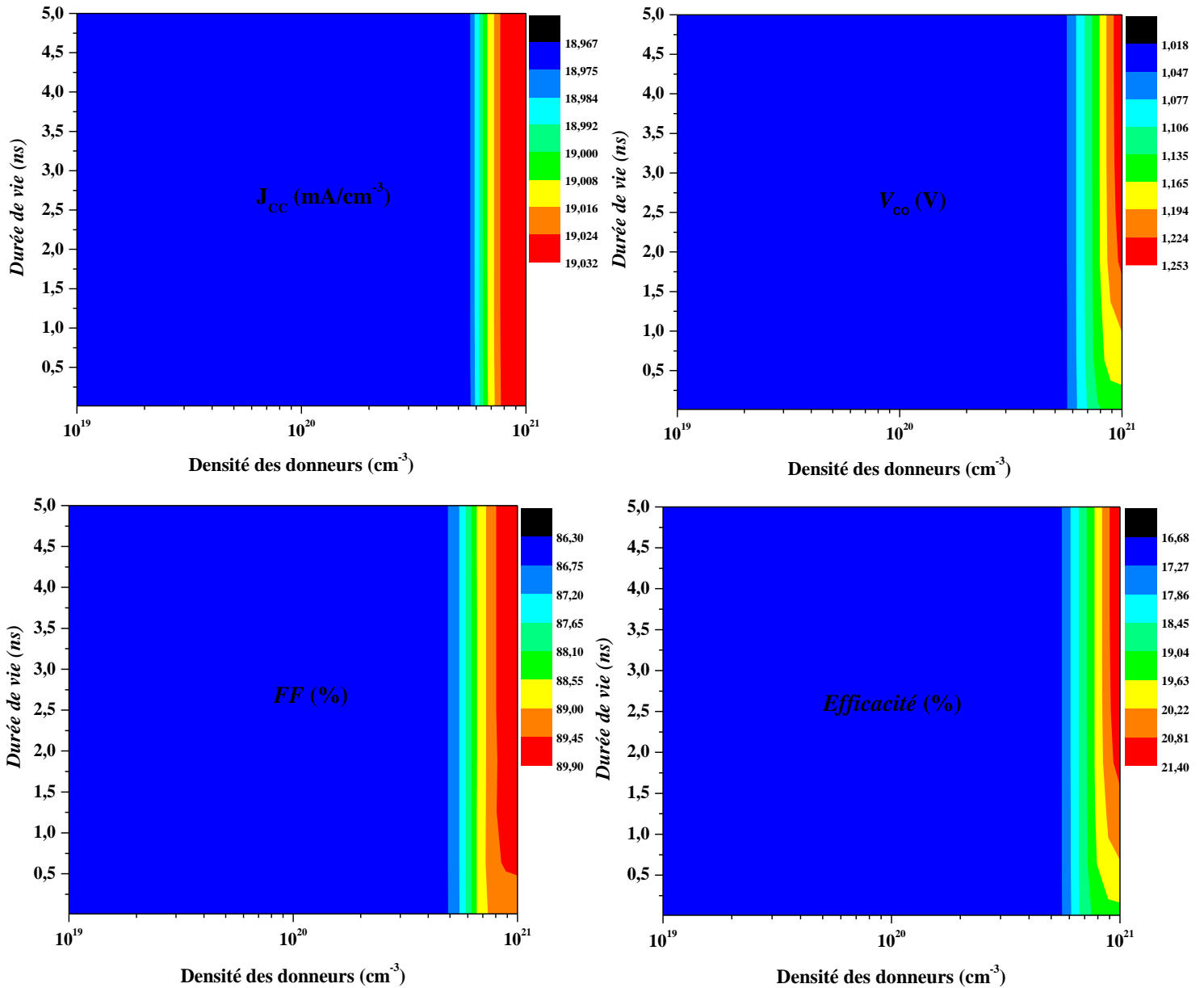


Figure 3.13 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la durée de vie des porteurs de charges de l'absorbeur et de la densité des donneurs de la couche n-(a-Si:H)

3.2.5 Influence du ZnO BRL

Les réflecteurs arrières (BRL) sont généralement utilisés pour gérer la lumière (piégeage de la lumière) dans la cellule solaire. La figure 3.14 illustre la dépendance des propriétés photovoltaïques (J_{cc} , V_{co} , FF et Efficacité) de la cellule par rapport à la concentration des donneurs et à l'épaisseur du BRL utilisée pour le piégeage de la lumière, dans le cadre de ce travail le ZnO est utilisé comme BRL. La concentration de donneurs et l'épaisseur de la couche de ZnO variaient entre 10¹⁸ cm⁻³ et 10²¹ cm⁻³ et 10 nm et 100 nm, respectivement. On voit sur

la figure 3.14 que toutes ces propriétés photovoltaïques ne changent pratiquement pas quelles que soient la concentration des porteurs et l'épaisseur de la couche ZnO. Afin de réduire l'utilisation des matériaux et de leur coût de production de manière substantielle, nous avons fixé l'épaisseur et la concentration des donneurs du ZnO BRL à 10 nm et 10^{18} cm^{-3} , respectivement.

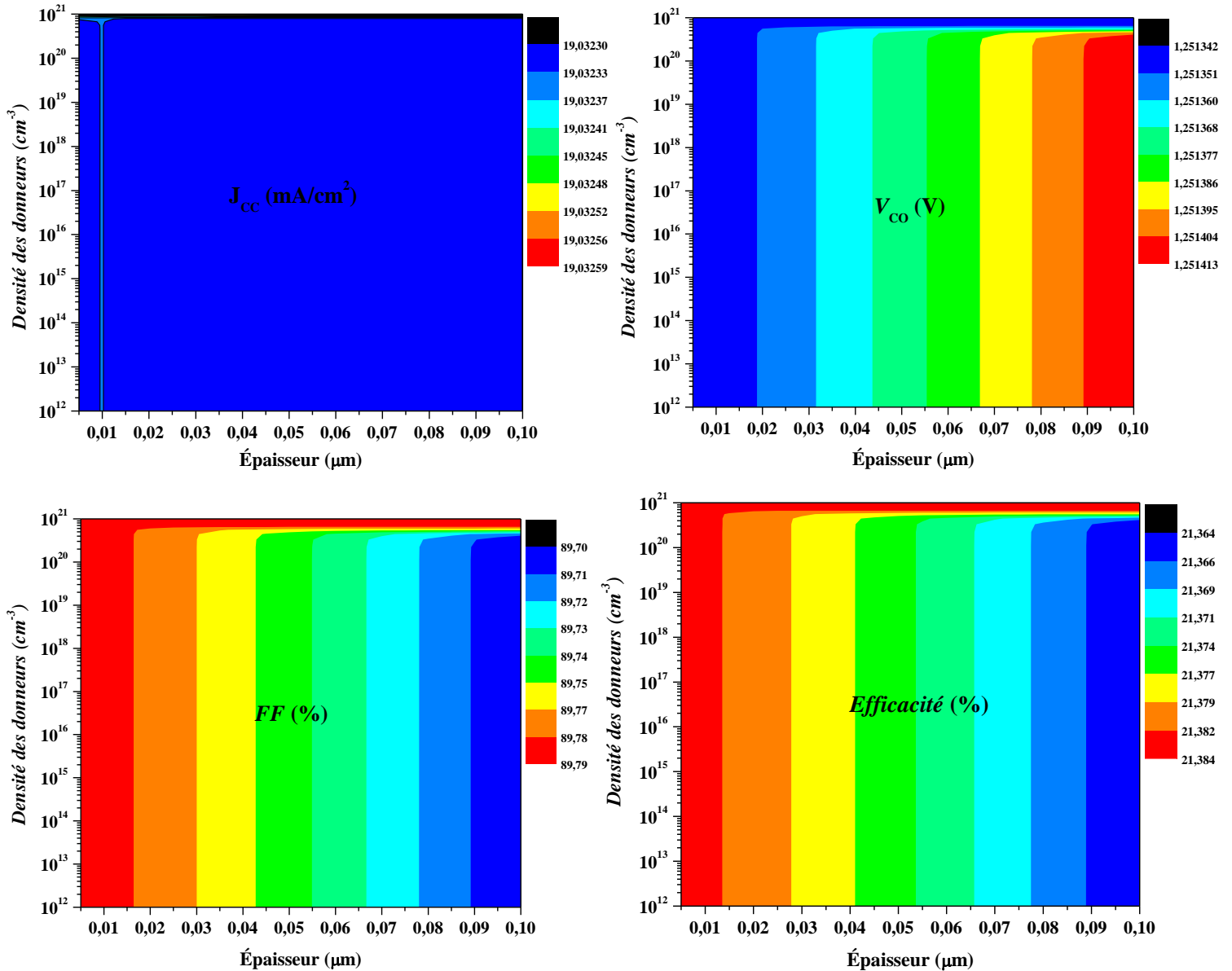


Figure 3.14 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la concentration des donneurs et de l'épaisseur du réflecteur arrière ZnO.

3.2.6 Effet de la couche tampon de type n

Les résultats ci-dessus sont obtenus sans la couche tampon de type n dans la structure de la cellule. La stratégie d'ingénierie interfaciale entre l'absorbeur et la couche de transport de

charge joue un rôle essentiel dans les cellules solaires hautement efficaces [95], et les niveaux d'énergie à l'interface de ces deux matériaux affecteront le transport des porteurs de charge [91]. La bande interdite plus large de la couche p crée des décalages de bande à l'interface p/i, ce qui entraîne des pertes par recombinaison à cette interface [105]. Ces problèmes (recombinaison des porteurs à l'interface, défauts d'interface, pinhole, etc.) peuvent également être présents à l'interface i/n. Dans ce travail, une solution adoptée pour prévenir ces problèmes est d'introduire également une couche tampon de type n à cette interface (Figure 3.5b). La figure 3.15 montre l'effet de l'épaisseur et de la concentration des donneurs de la couche tampon de type n sur les performances de la cellule solaire à couches ultraminces à base de a-Si:H. La concentration de donneurs et l'épaisseur de la couche tampon de type n sont modifiées respectivement de 10^{15} cm^{-3} à $8 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ et de 4 nm à 100 nm. La figure 3.15 révèle que la densité des donneurs et l'épaisseur de la couche tampon de type n n'améliorent légèrement les paramètres électriques de la cellule solaire. Nous pouvons observer que les performances du dispositif diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur pour une couche tampon de type n, et indépendamment pour une concentration de donneurs inférieure à 10^{21} cm^{-3} , ceci est dû au phénomène de recombinaison qui augmente légèrement dans la couche tampon de type n légèrement plus épaisse. Au-dessus de 10^{21} cm^{-3} , tous les paramètres électriques augmentent légèrement et indépendamment de l'épaisseur de la couche tampon de type n. Cette couche inhibe la recombinaison électron-trou à l'interface [95] et réduit les défauts d'interface ; elle améliore ainsi la tension en circuit ouvert et le courant de court-circuit, de sorte que le rendement initial augmente [106]. L'épaisseur et la densité des donneurs de la couche tampon de type n sont fixées à 10 nm et $5 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, respectivement.

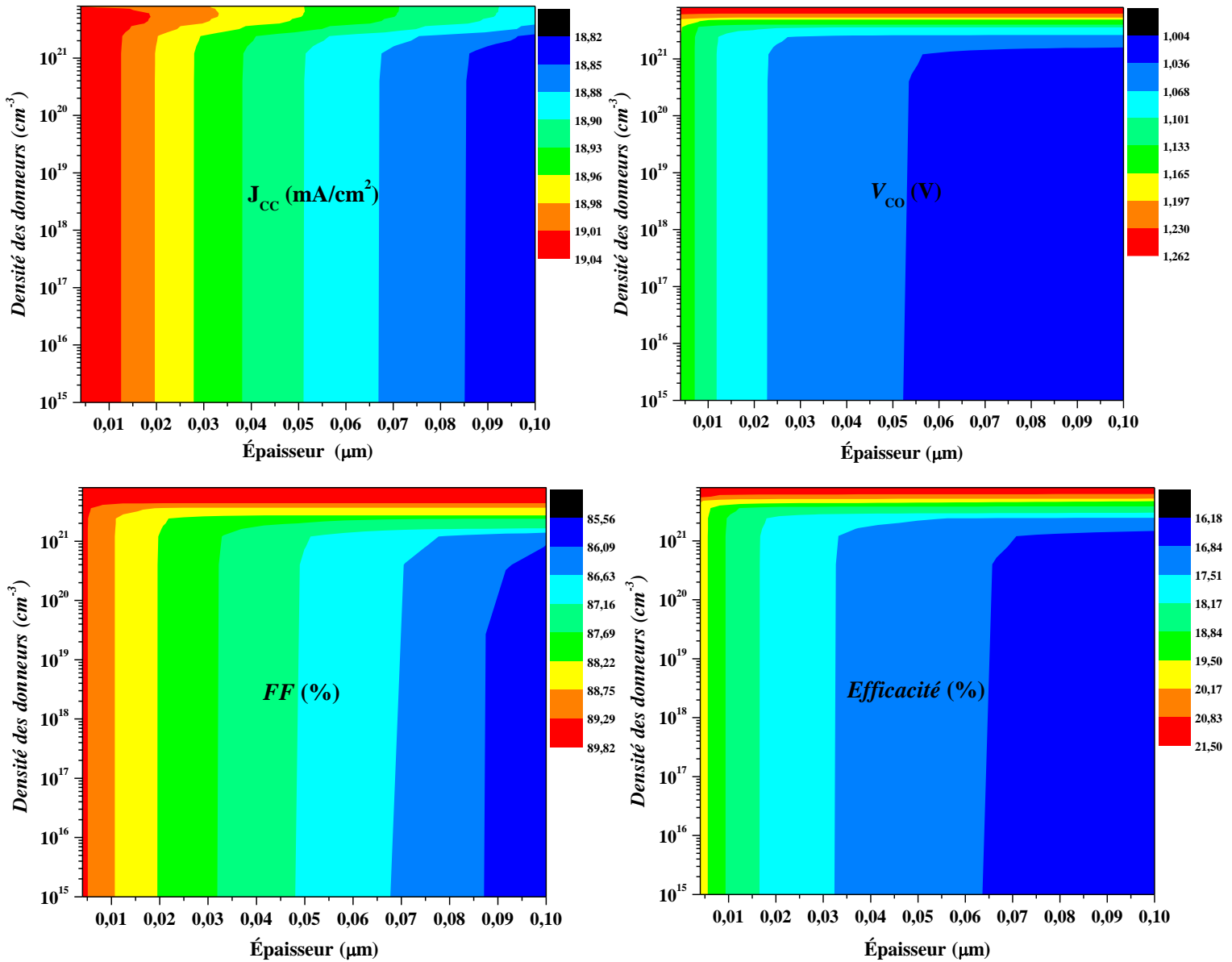


Figure 3.15 : Courbe de niveau des paramètres électriques de la cellule solaire en fonction de la concentration des donneurs et de l'épaisseur de la couche tampon de type n.

La figure 3.16 compare le diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire à couches ultraminces optimisée à base de a-Si:H avec et sans couche tampon de type n, et le tableau 3.4 résume leurs paramètres électriques. Ainsi, la cellule avec couche tampon de type n présente un rendement légèrement meilleur en raison de la réduction du taux de recombinaison à l'interface i/n

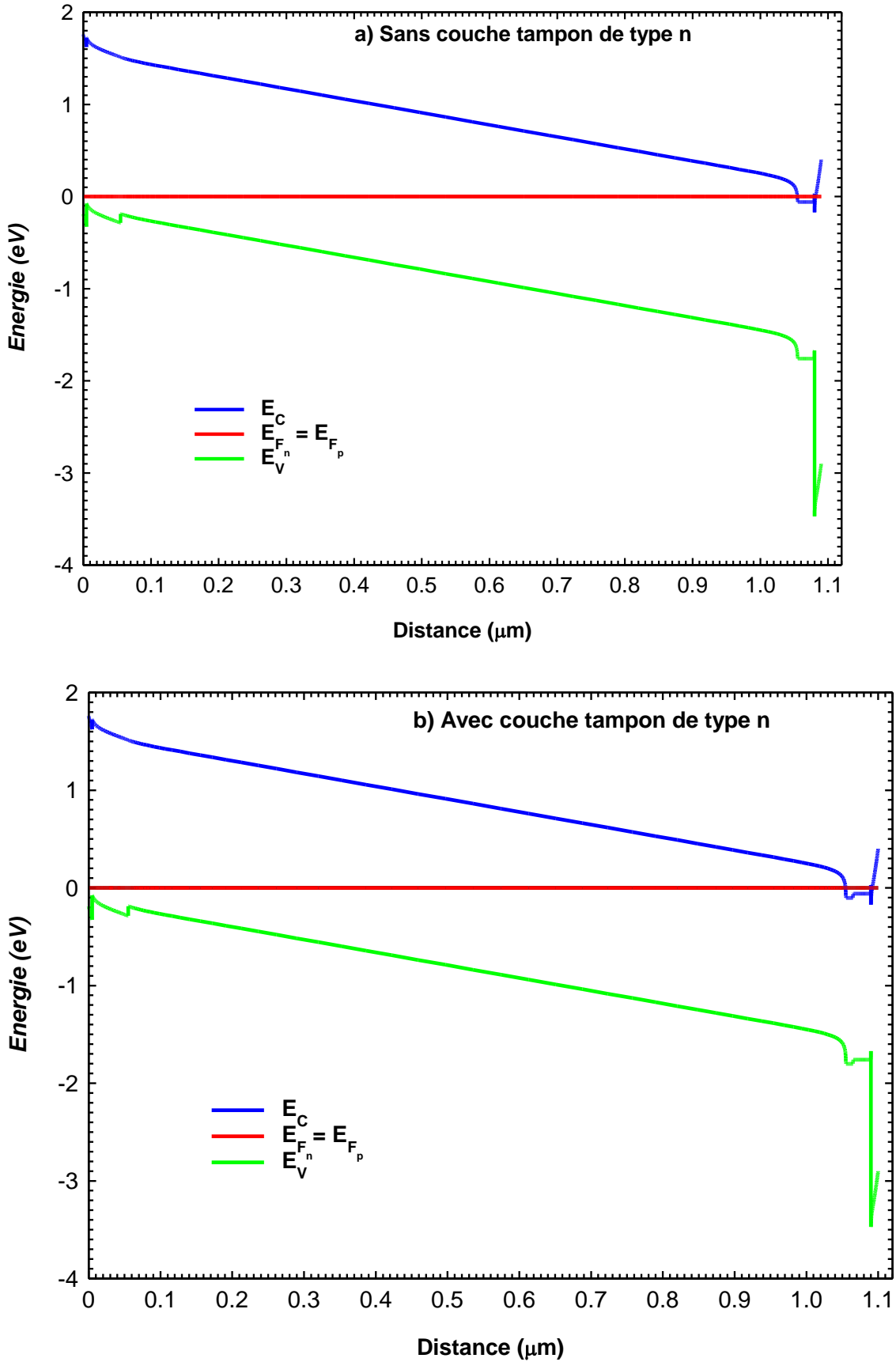


Figure 3.16: Diagramme de bande d'énergie de la cellule solaire à couche ultramince à base de a-Si:H : a) sans couche tampon n ; b) avec couche tampon n.

Tableau 3.4 : Comparaison des paramètres électriques des deux configurations de la cellule solaire à base de *a-Si:H* à couches ultraminces.

Paramètre électrique	Jcc (mA/cm ²)	Vco (V)	FF (%)	Rendement (%)
Sans couche tampon de type n	19,03	1,251	89,78	21,37
Avec couche tampon de type n	19,01	1,261	89,66	21,49

3.2.7 Effet du travail d'extraction du contact métallique arrière

La nature de l'élément de contact joue un rôle important dans la collecte des porteurs de charge dans la cellule solaire. En fonction de l'élément utilisé comme contact, on peut obtenir un contact ohmique ou non ohmique. L'élément de contact est donc déterminant pour obtenir un meilleur rendement de conversion. Tout comme la simulation numérique à l'aide du logiciel AFORS-Het [98], l'utilisation du logiciel SCAPS-1D montre que la nature du contact métallique a une grande influence sur les propriétés photovoltaïques des cellules solaires à hétérojonction [21]. L'effet du travail d'extraction du métal arrière de divers éléments sur les paramètres électriques de la cellule est étudié comme le montre le Tableau 3.5, la figure 3.17 représente cet effet sur le paramètre électrique normalisé. Nous pouvons voir que la densité de courant de court-circuit (Jcc) et la tension en circuit ouvert (Vco) sont constantes c'est à dire ne dépendent pas de ce paramètre dans le cas de la cellule solaire à base de *a-Si:H*; tandis que le facteur de forme (FF) et l'efficacité de la cellule diminuent avec des hauteurs de la barrière Schottky ($\Phi_{b,BC}$), donnée par l'équation 3.5 [21], supérieures à 0,37 eV résultant de l'augmentation du taux de recombinaison au niveau du contact arrière. Par conséquent, le contrôle de Φ_m est essentiel pour réduire le taux de recombinaison, ce qui conduit à un FF élevé [106]. Ainsi, le rendement de conversion de la cellule diminue de 21,49 à 20,59% lorsque la valeur du travail d'extraction du métal augmente de 3,90 eV à 4,65 eV.

$$\Phi_{b,BC} = E_g + \chi - \Phi_m \quad (3.5)$$

où E_g , χ et Φ_m sont respectivement la bande interdite, l'affinité électronique du BRL et le travail de sortie du contact métallique arrière.

Tableau 3.5 : Performance de la cellule solaire à base de *a-Si:H* à couches ultraminces avec différents contacts métalliques arrière.

Φ_m (eV) [97]	$\Phi_{b,BC}$ (eV) (par rapport à E_F)	J_{cc} (mA/cm ²)	V_{co} (V)	FF (%)	Rendement (%)
3,90	-0,20	19,01	1,261	89,70	21,49
4,20	0,10	19,01	1,261	89,70	21,49
4,30	0,20	19,01	1,261	89,70	21,49
4,33	0,23	19,01	1,261	89,70	21,49
4,40	0,30	19,01	1,261	89,70	21,49
4,47	0,37	19,01	1,261	89,69	21,49
4,50	0,40	19,01	1,261	89,66	21,48
4,51	0,41	19,01	1,261	89,65	21,48
4,55	0,45	19,01	1,261	89,47	21,44
4,59	0,49	19,01	1,261	88,81	21,28
4,65	0,55	19,01	1,261	85,92	20,59

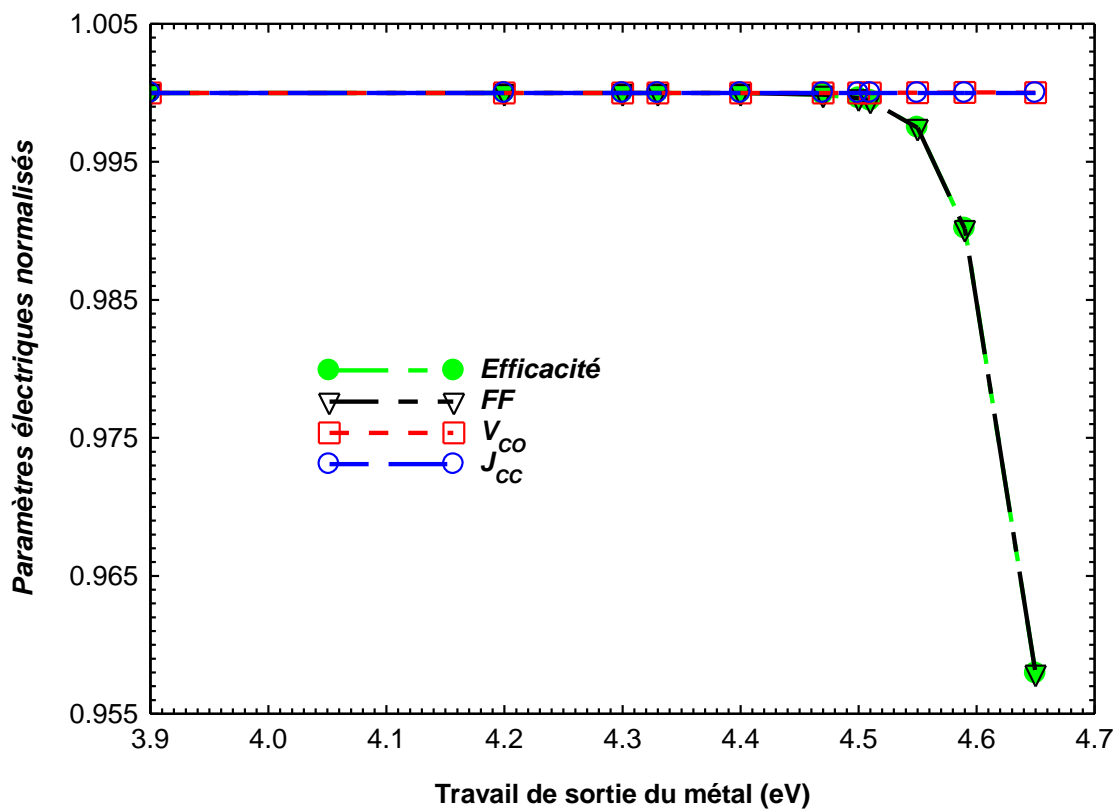


Figure 3.17 : Paramètres électriques normalisés de la cellule solaire à couche mince à base de *a-Si:H* en fonction de la fonction du travail d'extraction des contacts métalliques arrière.

3.2.8 Influence de la température sur la cellule solaire optimisée

Les cellules solaires sont généralement exposées à une plage de température allant de 288 K à 323 K, de sorte que l'étude de leur comportement en fonction de la température (T) de fonctionnement est essentielle [107]. Les performances en fonction de la température sont étudiées pour permettre aux cellules solaires de fonctionner dans des conditions optimales et de produire un rendement maximal [108]. Dans les applications terrestres, les cellules solaires sont généralement exposées à des environnements qui peuvent augmenter la température, même à 45 °C au-dessus de la température ambiante [102]. Une augmentation de la température réduit la bande interdite d'un semiconducteur [109], comme le montre l'équation 3.6 [110] ; d'autre part, l'augmentation de la température entraîne une concentration accrue de porteurs, ce qui accroît les taux de recombinaison des porteurs internes [111].

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{(T + \beta)} \quad (3.6)$$

où $E_g(0)$ est la valeur de la bande interdite à $T \approx 0$ K, α , et β sont des constantes qui caractérisent les matériaux semi-conducteurs.

Le logiciel SCAPS-1D est utilisé pour analyser l'influence de la température de fonctionnement sur le rendement de conversion de notre cellule solaire à couches ultramines optimisée à base de a-Si:H dans ce travail.

Comme le montre la figure 3.18, la température varie de 295 à 333K (22°C à 60°C) ; une augmentation de la température ambiante réduit le rendement, le Voc, le FF, et augmente légèrement le Jcc. Les résultats de simulation obtenus sont en accord avec ceux de Krajangsang et al. [2] et Sameera et al. [112]. La valeur du coefficient de température (CT) peut être exprimée par l'équation 10 [2]. La cellule solaire à couches ultramines à base de a-Si:H que nous proposons pour un rendement élevé, présente un gradient de température de 0,0003 %/°C, -0,145 %/°C, -0,041 %/°C et -0,184 %/°C pour Jcc, Vco, FF et rendement, respectivement.

$$TC (\%/^{\circ}C) = \frac{1}{Z} \times \left(\frac{\delta Z}{\delta T} \right) \Bigg|_{T_n} \quad (3.7)$$

où Z désigne les paramètres électriques de la cellule solaire (Jcc, Vco, FF, Rendement), (T_n) est la température de normalisation fixée à 25°C dans ce travail.

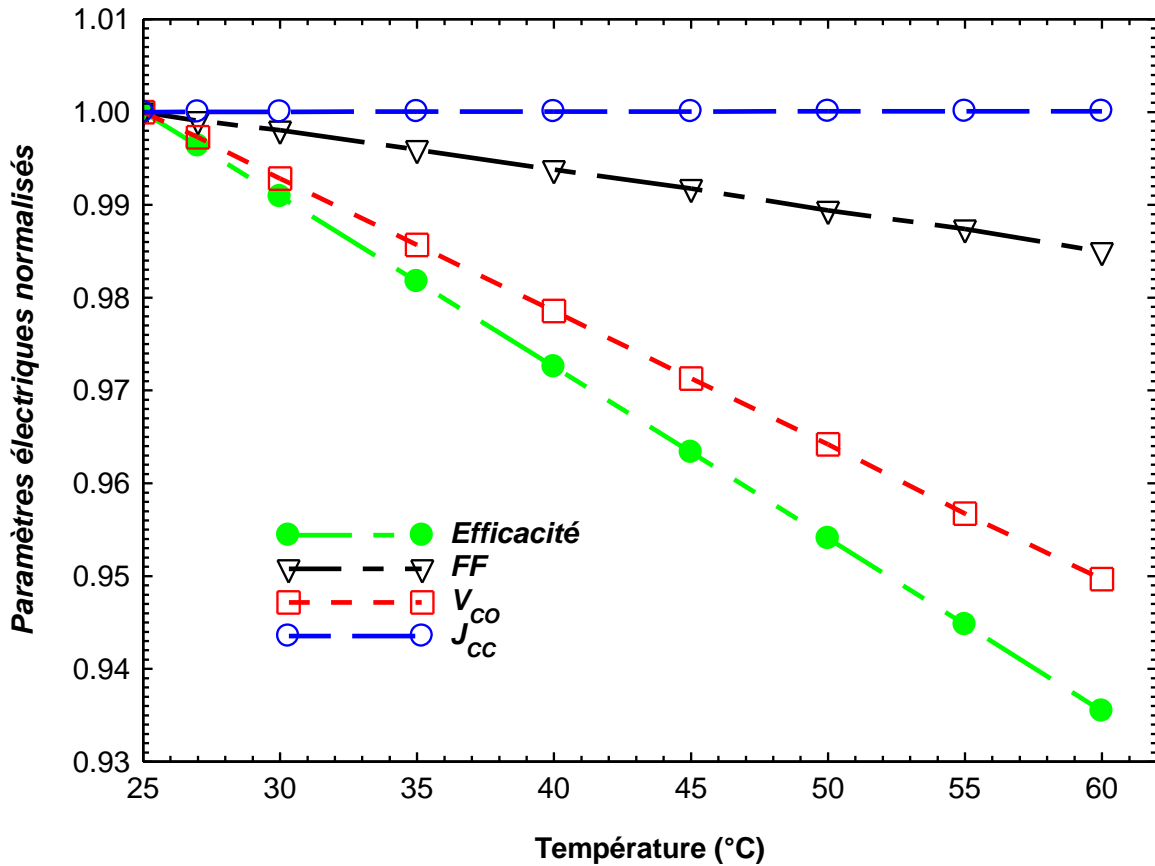


Figure 3.18: Dépendance de la température de fonctionnement des paramètres électriques normalisés de la cellule solaire à base de *a*-Si:H.

La tension en circuit ouvert diminue lorsque la température augmente car elle dépend du courant de saturation à l'obscurité [110] et en raison de l'augmentation du processus de recombinaison [112]. Le courant de court-circuit, J_{CC} , augmente légèrement avec la température car l'énergie de la bande interdite diminue (équation 3.6) et davantage de photons ont suffisamment d'énergie pour créer des paires électron-trou [112] ; de plus, la conductivité augmente avec la température via l'équation 2.1. La diminution de la FF est liée à la diminution des V_{OC} (équation 3.3). Le rendement diminue avec l'augmentation de la température de fonctionnement, en raison de l'effet combiné de la diminution du V_{CO} et de la FF ; malgré la légère augmentation de la J_{CC} .

Conclusion

En somme, il ressort de ce chapitre que l'optimisation d'une cellule photovoltaïque à base du silicium amorphe hydrogéné passe nécessairement par la maîtrise des propriétés des couches qui la constitue. De ce fait, les résultats obtenus par le code de simulation SCAPS 1-D nous ont permis d'une part de proposer une première structure de cellule photovoltaïque à base de silicium amorphe hydrogéné avec un rendement de 12,71 % pour des valeurs optimisées de l'épaisseur de l'absorbeur (couche i), de la densité des défauts de l'absorbeur et de la densité des états i/n respectivement de $1\mu\text{m}$, de 10^9 cm^{-3} et de 10^{10} cm^{-2} . Et d'autre part, dans les conditions d'études standard, l'optimisation de la couche fenêtre (épaisseur ultramince), de la couche tampon de type p et la couche n-(a-Si:H); et par ailleurs l'insertion et l'optimisation du réflecteur arrière ZnO et de la couche tampon de type n (présente à l'interface i/n-(a-Si:H), ont permis d'obtenir finalement un rendement de 21,49% et un coefficient de température de $-0,184 \text{ \%}/^\circ\text{C}$ pour la cellule à solaire de a-Si:H à couche ultramince.

CONCLUSION GÉNÉRALE ET PERSPECTIVES

L'objectif de cette thèse, intitulée "*Optimisation numérique, par SCAPS-1D, des paramètres électriques d'une cellule solaire à base du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H)*", est d'approfondir les connaissances sur les facteurs pouvant être à l'origine des pertes électriques dans la cellule solaire à base de a-Si:H et sur les techniques d'optimisation de cette cellule solaire. Outre l'introduction générale, le développement de ce travail a été présenté en trois chapitres :

Au **Chapitre 1**, la cellule solaire à base de a-Si:H a été présentée comme un candidat prometteur pour la conversion photovoltaïque dans le cadre des applications terrestres. Ce chapitre a passé en revue les propriétés et le rôle de chaque composante de la structure, nécessaire au fonctionnement de la cellule solaire. Il en ressort que, les propriétés de chacune de ces composantes dépendent fortement de la technique de dépôt utilisée pour sa croissance. L'utilisation des couches réfléchissantes arrières (BRL) permet le piégeage de la lumière et une gestion plus efficace des photons dans la couche active de la cellule solaire à base de a-Si:H.

Au **Chapitre 2**, les propriétés fondamentales nécessaires à la compréhension de l'élément de base d'une cellule solaire qui est un semiconducteur, dont les équations fondamentales (Poisson et de continuité) caractérisant les phénomènes de transport de charges libres à l'intérieur de celui-ci, ont été présentées. La résolution analytique de ces équations n'étant pas aisée, le code SCAPS-1D est utilisé pour approcher numériquement les solutions de celles-ci, ainsi que la modélisation et l'analyse des performances des cellules solaires qui sont faites à base de semiconducteurs. Nous avons effectué une étude comparative entre la cellule solaire expérimentale ($V_{CO} = 0,87$ V, $J_{CC} = 17,2$ mA/cm² et $FF = 70,0$ %) et celle simulée ($V_{CO} = 0,905$ V, $J_{CC} = 16,55$ mA/cm² et $FF = 70,62$ %) à l'aide de SCAPS-1D, ce qui nous a permis de valider notre modèle de cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminesces. Ces résultats montrent que nos paramètres de base et les hypothèses fixées pour nos travaux de recherche sont plausibles, au vue de la nette concordance du rendement de conversion de la cellule solaire (10,58%).

Au **Chapitre 3**, des analyses numériques de la cellule solaire Verre/p-(a-SiO_x:H)/couche tampon-type p/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/ITO/Al ont été effectuées dans le but de mieux comprendre l'impact de différents paramètres physiques sur les performances de cette dernière, de développer et d'optimiser différentes configurations de cette cellule sans avoir à

recourir systématiquement à des procédés expérimentaux, d'évaluer le potentiel de nouvelles structures et leur rendement théorique maximale. Pour ce faire, nous avons d'une part étudié l'effet de la variation de l'épaisseur et de la densité des défauts volumiques de la couche intrinsèque (couche active ou absorbeur), et de la variation de la densité d'états d'interface entre la couche tampon (de type p) et l'absorbeur sur les paramètres électriques de la cellule solaire. L'augmentation de l'épaisseur de la couche intrinsèque à une valeur de 1 μm (valeur limite expérimentale) permet d'augmenter le phénomène d'absorption des photons dans cette couche ; par contre, la réduction des défauts de la couche intrinsèque, associée à celle des états d'interface entre l'absorbeur et la couche tampon de type p, permet la réduction du phénomène de recombinaison dans la structure de la cellule solaire; ce qui a permis de proposer une cellule solaire à couches ultraminces avec un rendement de 12,71%, soit une augmentation de 2,13% par rapport à la cellule solaire expérimentale. Et d'autre part, nous avons étudié l'effet de différents réflecteurs arrières ou BRL (ITO, IGZO, ZnO, PCBM, TiO₂ et CdS:O) sur les performances de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces, avec une configuration Verre/p-(a-SiOx:H)/couche tampon-type p/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/BRL/Al. Les affinités électroniques de l'absorbeur i-(a-Si:H) et des couches n-(a-Si:H) et BRL doivent être suffisamment proches pour réduire les discontinuités de bandes à leurs différentes interfaces et assurer un bon alignement des bandes. Les résultats montrent que tous les BRL utilisés, à l'exception de l'ITO, ont un alignement de bandes relativement bon avec la couche n-(a-Si:H), ce qui conduit à un J_{CC} constant. Le BRL ZnO montre un meilleur rendement de 17.65% pour $J_{CC}=18.71 \text{ mA/cm}^2$, $V_{CO}=1.078 \text{ V}$, et $FF=87.50\%$. De plus, l'étude de l'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre p-(a-SiOx:H) sur les paramètres électriques de la cellule solaire nous a permis d'obtenir une épaisseur de 5 nm, en tenant compte de la technique de dépôt utilisée. L'insertion d'une couche tampon de type n à l'interface i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H) permet d'éviter d'éventuels courants de fuite. L'optimisation des autres couches et l'étude de différents contacts arrières de la cellule solaire à base de a-Si:H à couches ultraminces, de configuration Verre/p-(a-SiOx:H)/couche tampon-type p/i-(a-Si:H)/couche tampon-type n/n-(a-Si:H)/ZnO/Al, ont permis d'obtenir un rendement de conversion de 21,49 % ($J_{CC} = 19,01 \text{ mA/cm}^2$, $V_{CO} = 1,261 \text{ V}$ et $FF = 89,66 \%$) pour des épaisseurs de 50 nm, 25 nm, 10 nm et 10 nm, respectivement de la couche tampon de type p, de la couche n-(a-Si:H), de la couche tampon de type n et de la couche ZnO, et en utilisant l'aluminium (Al) comme élément de contact arrière. Enfin, l'effet de la température de fonctionnement sur la structure optimisée se traduit par un coefficient de température de -0,184%/°C.

Perspectives

Ce travail constitue une étape très importante dans la modélisation et la caractérisation des cellules solaires à base de a-Si:H. Des travaux supplémentaires doivent être menés pour mieux comprendre la structure dans son ensemble, il s'agit entre autres :

- D'étudier l'impact d'une double couche fenêtre sur les performances de la cellule photovoltaïque à base silicium amorphe hydrogéné ;
- D'étudier la cellule photovoltaïque à base silicium amorphe hydrogéné multi-jonction, afin de réduire les absorptions parasites ;
- D'effectuer une simulation 3 D afin de prendre en compte les effets liés aux recombinaisons aux joints de grain.

Références bibliographiques

- [1] I. Alam and M. A. Ashraf, « Effect of different device parameters on tin-based perovskite solar cell coupled with In₂S₃ electron transport layer and CuSCN and Spiro-OMeTAD alternative hole transport layers for high-efficiency performance », *Energy Sources Part Recovery Util. Environ. Eff.*, vol. 0, n° 0, p. 1-17, sept. 2020, doi: 10.1080/15567036.2020.1820628.
- [2] T. Krajangsang, A. Moollakorn, S. Inthisang, A. Limmanee, K. Sriprapha, N. Boriraksantikul, T. Taratiwat, N. Akarapanjavid and J. Sritharothikhum, « Study of an Amorphous Silicon Oxide Buffer Layer for p-Type Microcrystalline Silicon Oxide/n-Type Crystalline Silicon Heterojunction Solar Cells and Their Temperature Dependence », *Int. J. Photoenergy*, vol. 2014, p. e251508, août 2014, doi: 10.1155/2014/251508.
- [3] F. X. A. Abega, A. T. Ngoupo and J. M. B. Ndjaka, « Numerical Design of Ultrathin Hydrogenated Amorphous Silicon-Based Solar Cell », *Int. J. Photoenergy*, vol. 2021, p. e7506837, août 2021, doi: 10.1155/2021/7506837.
- [4] S. Banerjee, S. Mandal, S. Dhar, A. B. Roy, and N. Mukherjee, « Nanomirror-Embedded Back Reflector Layer (BRL) for Advanced Light Management in Thin Silicon Solar Cells », *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 58, n° 28, p. 12678-12686, juill. 2019, doi: 10.1021/acs.iecr.9b01719.
- [5] W. Hadj Kouider, A. Belfar, M. Belmekki and H. Aït-kaci, « The benefit of using p-a-SiO_xCy:H as double window layers in hydrogenated amorphous silicon solar cells: Correlation of simulation and experiment », *Optik*, vol. 238, p. 166749, juill. 2021, doi: 10.1016/j.ijleo.2021.166749.
- [6] M. K. Hossain, « Hydrogenated Amorphous Silicon-Based Thin Film Solar Cell: Optical, Electrical and Structural Properties », *Adv. Mater. Res.*, vol. 1116, p. 59-64, 2015, doi: 10.4028/www.scientific.net/AMR.1116.59.
- [7] M. I. Kabir, S. A. Shahahmadi, V. Lim, S. Zaidi, K. Sopian and N. Amin, « Amorphous silicon single-junction thin-film solar cell exceeding 10% efficiency by design optimization », *Int. J. Photoenergy*, vol. 2012, 2012.
- [8] S. Bhattacharya and S. John, « Beyond 30% Conversion Efficiency in Silicon Solar Cells: A Numerical Demonstration », *Sci. Rep.*, vol. 9, n° 1, Art. n° 1, août 2019, doi: 10.1038/s41598-019-48981-w.

- [9] M. Nagesh, R. Suresh, R. Jayapal and K. N. Subramanya, « Surface Passivation Studies of n-type Crystalline Silicon for HIT Solar Cells », *Trans. Electr. Electron. Mater.*, vol. 23, n° 1, p. 45-51, févr. 2022, doi: 10.1007/s42341-021-00316-1.
- [10] W. L. Rahal, D. Rached, F. Mahi and F. Azzemou, « Simulation and Optimization of Back Surface Field for Efficient HIT Solar Cells », *Silicon*, avr. 2021, doi: 10.1007/s12633-021-01083-7.
- [11] J. Wang, X. Ru, T. Ruan, Y. Hu, Y. Zhang and H. Yan, « Performance of heterojunction solar cells with different intrinsic a-Si:H thin layers deposited by RF- and VHF-PECVD », *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 32, n° 20, p. 25327-25331, oct. 2021, doi: 10.1007/s10854-021-06991-3.
- [12] M. A. Green, E. D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis and X. Hao, « Solar Cell Efficiency Tables (Version 58) », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 29, n° 7, Art. n° NREL/JA-5900-80028, juin 2021, doi: 10.1002/pip.3444.
- [13] M. I. Hossain, W. Qarony, M. K. Hossain, M. K. Debnath, M. J. Uddin and Y. H. Tsang, « Effect of back reflectors on photon absorption in thin-film amorphous silicon solar cells », *Appl. Nanosci.*, vol. 7, n° 7, p. 489-497, oct. 2017, doi: 10.1007/s13204-017-0582-y.
- [14] J. Ramanujam and U. P. Singh, « Copper indium gallium selenide based solar cells – a review », *Energy Environ. Sci.*, vol. 10, n° 6, p. 1306-1319, juin 2017, doi: 10.1039/C7EE00826K.
- [15] S. Petibon, « Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques », phd, Université de Toulouse, Université Toulouse III - Paul Sabatier, 2009. Consulté le: 28 décembre 2021. [En ligne]. Disponible sur: <http://thesesups.ups-tlse.fr/504/>
- [16] B. Lavédrine, « Edmond Becquerel et la photographie », *Support/Tracé*, n° 20, p. 43-56, 2021.
- [17] A. Jäger-Waldau, « Status of thin film solar cells in research, production and the market », *Sol. Energy*, vol. 77, n° 6, p. 667-678, déc. 2004, doi: 10.1016/j.solener.2004.08.020.
- [18] M. H. Elshorbagy, E. López-Fraguas, J. M. Sánchez-Pena, B. García-Cámara and R. Vergaz, « Boosting ultrathin aSi-H solar cells absorption through a nanoparticle cross-packed metasurface », *Sol. Energy*, vol. 202, p. 10-16, mai 2020, doi: 10.1016/j.solener.2020.03.075.

- [19] A. Idda, L. Ayat and S. Bentouba, « A Review of Different Techniques for Improving the Performance of Amorphous Silicon based Solar Cells », *Algerian J. Renew. Energy Sustain. Dev.*, vol. 1, n° 02, Art. n° 02, déc. 2019, doi: 10.46657/ajresd.2019.1.2.6.
- [20] A. D. Compaan, « Materials challenges for terrestrial thin-film photovoltaics », *JOM*, vol. 59, n° 12, p. 31-36, déc. 2007, doi: 10.1007/s11837-007-0149-6.
- [21] A. T. Ngoupo, S. Ouédraogo, F. Zougmore and J. M. B. Ndjaka, « Numerical analysis of ultrathin Sb₂Se₃-based solar cells by SCAPS-1D numerical simulator device », *Chin. J. Phys.*, vol. 70, p. 1-13, avr. 2021, doi: 10.1016/j.cjph.2020.12.010.
- [22] A. G. Aberle, « Thin-film solar cells », *Thin Solid Films*, vol. 517, n° 17, p. 4706-4710, juill. 2009, doi: 10.1016/j.tsf.2009.03.056.
- [23] T. M. Razykov, C. S. Ferekides, D. Morel, E. Stefanakos, H. S. Ullal and H. M. Upadhyaya, « Solar photovoltaic electricity: Current status and future prospects », *Sol. Energy*, vol. 85, n° 8, p. 1580-1608, août 2011, doi: 10.1016/j.solener.2010.12.002.
- [24] A. McEvoy, T. Markvart, L. Castaner, T. Markvart and L. Castaner, *Practical Handbook of Photovoltaics: Fundamentals and Applications*. Elsevier, 2003.
- [25] G. L. Mbopda Tcheum, A. Teyou Ngoupo, S. Ouédraogo, N. Guirdjebaye and J. M. B. Ndjaka, « Numerical analysis of ultrathin Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with Zn(O,S) buffer layer », *Pramana*, vol. 94, n° 1, p. 111, déc. 2020, doi: 10.1007/s12043-020-01977-y.
- [26] B. Rech and H. Wagner, « Potential of amorphous silicon for solar cells », *Appl. Phys. A*, vol. 69, n° 2, p. 155-167, août 1999, doi: 10.1007/s003390050986.
- [27] K. B. Alaoui, S. Laalioui, B. Ikken and A. Outzourhit, « Promising Shadow Masking Technique for the Deposition of High-Efficiency Amorphous Silicon Solar Cells Using Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition », *Front. Mech. Eng.*, vol. 6, p. 92, 2020, doi: 10.3389/fmech.2020.560385.
- [28] M. I. Hossain, A.K. Hosan, W. Qarony, Md. Shahiduzzaman, M.A. Islam, Y. Ishikawa, Y. Uraoka, N. Amin, D. Knipp, Md. Akhtaruzzaman and H.Y. Tsang, « Electrical and Optical Properties of Nickel-Oxide Films for Efficient Perovskite Solar Cells », *Small Methods*, vol. 4, n° 9, p. 2000454, 2020, doi: 10.1002/smt.202000454.
- [29] A. Romeo *et al.*, « Development of thin-film Cu(In,Ga)Se₂ and CdTe solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 12, n° 2-3, p. 93-111, 2004, doi: 10.1002/pip.527.
- [30] B. Peng, G. Yu, X. Liu, X. Liang, L. Bi, L. Deng, T. C. Sum and K. P. Loh, « Ultrafast charge transfer in MoS₂/WSe₂ p-n Heterojunction », *2D Mater.*, vol. 3, n° 2, p. 025020, mai 2016, doi: 10.1088/2053-1583/3/2/025020.

- [31] R. Lachaume, « Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction », phd thesis, Université de Grenoble, 2014. Consulté le: 19 décembre 2021. [En ligne]. Disponible sur: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01186474>
- [32] J. Müller, B. Rech, J. Springer and M. Vanecek, « TCO and light trapping in silicon thin film solar cells », *Sol. Energy*, vol. 77, n° 6, p. 917-930, déc. 2004, doi: 10.1016/j.solener.2004.03.015.
- [33] S. Calnan and A. N. Tiwari, « High mobility transparent conducting oxides for thin film solar cells », *Thin Solid Films*, vol. 518, n° 7, p. 1839-1849, janv. 2010, doi: 10.1016/j.tsf.2009.09.044.
- [34] G. Jeong, D.Koo, J.Seo, S.Jung, Y.Choi, J.lee, H.Park, « Suppressed Interdiffusion and Degradation in Flexible and Transparent Metal Electrode-Based Perovskite Solar Cells with a Graphene Interlayer », *Nano Lett.*, vol. 20, n° 5, p. 3718-3727, mai 2020, doi: 10.1021/acs.nanolett.0c00663.
- [35] N. Naghavi, D.Abou-Ras, N.Allsop, S.Bucheler, « Buffer layers and transparent conducting oxides for chalcopyrite Cu(In,Ga)(S,Se)₂ based thin film photovoltaics: present status and current developments », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 18, n° 6, p. 411-433, 2010, doi: 10.1002/pip.955.
- [36] A. Romeo, M.Terheggen, D.Abou-Ras, D.L.Batzner, F.J.Haug, M.Kalin, D.Rudmann and A.N.Tiwari, « Development of thin-film Cu(In,Ga)Se₂ and CdTe solar cells », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, vol. 12, n° 2-3, p. 93-111, 2004, doi: 10.1002/pip.527.
- [37] C. S. Ferekides, R. Mamazza, U. Balasubramanian and D. L. Morel, « Transparent conductors and buffer layers for CdTe solar cells », *Thin Solid Films*, vol. 480-481, p. 224-229, juin 2005, doi: 10.1016/j.tsf.2004.11.094.
- [38] X. Ru, M.Qu, J.Wang, T.Ruan, M.Yang, F.Peng, W.Long, K.Zheng, H.Yan and X.Xu, « 25.11% efficiency silicon heterojunction solar cell with low deposition rate intrinsic amorphous silicon buffer layers », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 215, p. 110643, sept. 2020, doi: 10.1016/j.solmat.2020.110643.
- [39] T. Ruan, M.Qu, X.Qu, X.Ru, J.Wang, Y.He, K.Zheng, X.Xu, Y.Zang and H.Yon, « Achieving high efficiency silicon heterojunction solar cells by applying high hydrogen content amorphous silicon as epitaxial-free buffer layers », *Thin Solid Films*, vol. 711, p. 138305, oct. 2020, doi: 10.1016/j.tsf.2020.138305.

- [40] F. T. Si, O. Isabella and M. Zeman, « Thin-film amorphous silicon germanium solar cells with p- and n-type hydrogenated silicon oxide layers », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 163, p. 9-14, avr. 2017, doi: 10.1016/j.solmat.2017.01.001.
- [41] C. Ngô and H. Ngô, *Physique des semi-conducteurs - 4e édition*. Dunod, 2012.
- [42] R. A. Street, *Hydrogenated Amorphous Silicon*. Cambridge University Press, 1991.
- [43] S. Guha, J. Yang, A. Banerjee, B. Yan, and K. Lord, « High quality amorphous silicon materials and cells grown with hydrogen dilution », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 78, n° 1, p. 329-347, juill. 2003, doi: 10.1016/S0927-0248(02)00441-5.
- [44] K. Jäger and C. Becker, « A Brief History of Light Management in Solar Cells », in *OSA Advanced Photonics Congress 2021 (2021)*, paper PvW2B.1, juill. 2021, p. PvW2B.1. doi: 10.1364/PVLED.2021.PvW2B.1.
- [45] D. Réaux, « Cellules photovoltaïques à hétérojonctions de silicium (a-Si:H/c-Si) : modélisation des défauts et de la recombinaison à l'interface », phdthesis, Université Paris Saclay (COMUE), 2017. Consulté le: 29 décembre 2021. [En ligne]. Disponible sur: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01613084>
- [46] G. Pfanner, C. Freysolat, J. Neugebauer, F. Inam, D. Drabold, K. Jaroline and M. Zeman, « Dangling-bond defect in a-Si:H: Characterization of network and strain effects by first-principles calculation of the EPR parameters », *Phys. Rev. B*, vol. 87, n° 12, p. 125308, mars 2013, doi: 10.1103/PhysRevB.87.125308.
- [47] M. Stutzmann and D. K. Biegelsen, « Microscopic nature of coordination defects in amorphous silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 40, n° 14, p. 9834-9840, nov. 1989, doi: 10.1103/PhysRevB.40.9834.
- [48] B. von Roedern, « Photovoltaic Materials, Physics of », in *Encyclopedia of Energy*, C. J. Cleveland, Éd. New York: Elsevier, 2004, p. 47-59. doi: 10.1016/B0-12-176480-X/00327-2.
- [49] D. Adler and E. J. Yoffa, « Electronic Structure of Amorphous Semiconductors », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 36, n° 20, p. 1197-1200, mai 1976, doi: 10.1103/PhysRevLett.36.1197.
- [50] J. Robertson, « Doping and gap states in amorphous silicon », *J. Phys. C Solid State Phys.*, vol. 17, n° 13, p. L349, 1984.
- [51] R. Lachaume, « Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction », PhD Thesis, Grenoble, 2014.
- [52] M. Stutzmann, D. K. Biegelsen and R. A. Street, « Detailed investigation of doping in hydrogenated amorphous silicon and germanium », *Phys. Rev. B*, vol. 35, n° 11, p. 5666-5701, avr. 1987, doi: 10.1103/PhysRevB.35.5666.

- [53] D. Adler and F. R. Shapiro, « Effective correlation energy of the dangling bond in amorphous silicon », *Phys. BC*, vol. 117-118, p. 932-934, mars 1983, doi: 10.1016/0378-4363(83)90698-8.
- [54] Y. Bar-Yam and J. D. Joannopoulos, « Dangling Bond in a-Si:ZZH », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 56, n° 20, p. 2203-2206, mai 1986, doi: 10.1103/PhysRevLett.56.2203.
- [55] C. F. Lo, D. Adler and K. H. Johnson, « Theoretical calculation of the effective correlation energy of hydrogenated amorphous silicon dangling bond by the self-consistent-field X-alpha scattered-wave method », *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 99, n° 2, p. 394-403, févr. 1988, doi: 10.1016/0022-3093(88)90445-0.
- [56] S. M. Sze and K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd Edition. Hoboken, N.J: Wiley–Blackwell, 2006.
- [57] P. W. Anderson, « Random-Phase Approximation in the Theory of Superconductivity », *Phys. Rev.*, vol. 112, n° 6, p. 1900-1916, déc. 1958, doi: 10.1103/PhysRev.112.1900.
- [58] W. E. Spear and P. G. Le Comber, « Substitutional doping of amorphous silicon », *Solid State Commun.*, vol. 17, n° 9, p. 1193-1196, nov. 1975, doi: 10.1016/0038-1098(75)90284-7.
- [59] K. Fukutani, M. Kanbe, W. Futako, B. Kaplan, T. Kamiya, C. M. Fortmann and I. Shimizu, « Band gap tuning of a-Si:H from 1.55 eV to 2.10 eV by intentionally promoting structural relaxation », *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 227-230, p. 63-67, mai 1998, doi: 10.1016/S0022-3093(98)00022-2.
- [60] R. A. Street, *Hydrogenated Amorphous Silicon*. 1991. Consulté le: 19 décembre 2021. [En ligne]. Disponible sur: <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1991has..book.....S>
- [61] M. I. Kabir, S. A. Shahahmadi, V. Lim, S. Zaidi, K. Sopian and N. Amin, « Amorphous Silicon Single-Junction Thin-Film Solar Cell Exceeding 10% Efficiency by Design Optimization », *Int. J. Photoenergy*, vol. 2012, p. e460919, déc. 2012, doi: 10.1155/2012/460919.
- [62] M. J. Powell and S. C. Deane, « Improved defect-pool model for charged defects in amorphous silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 48, n° 15, p. 10815-10827, oct. 1993, doi: 10.1103/PhysRevB.48.10815.
- [63] L. Korte and M. Schmidt, « Investigation of gap states in phosphorous-doped ultra-thin a-Si:H by near-UV photoelectron spectroscopy », *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 354, n° 19, p. 2138-2143, mai 2008, doi: 10.1016/j.jnoncrysol.2007.09.010.
- [64] R. A. Street, « Doping and the Fermi Energy in Amorphous Silicon », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 49, n° 16, p. 1187-1190, oct. 1982, doi: 10.1103/PhysRevLett.49.1187.

- [65] R. A. Street, D. K. Biegelsen and J. C. Knights, « Defect states in doped and compensated a-Si:H », *Phys. Rev. B*, vol. 24, n° 2, p. 969-984, juill. 1981, doi: 10.1103/PhysRevB.24.969.
- [66] W. E. Spear, « Doped amorphous semiconductors », *Adv. Phys.*, vol. 26, n° 6, p. 811-845, nov. 1977, doi: 10.1080/00018737700101463.
- [67] E. Purwandari, S. Mutma'inah, W. Maulina, A. Arkundato, L. Rohman and R. D. Syarifah, « Simulation of Hydrogenated Amorphous Silicon-based Solar Cell: Investigation of J-V Characteristic in Optimum Thickness », *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 1951, n° 1, p. 012028, juin 2021, doi: 10.1088/1742-6596/1951/1/012028.
- [68] K. Mertens, *Photovoltaics: fundamentals, technology, and practice*. John Wiley & Sons, 2018.
- [69] A. Luque and S. Hegedus, *Handbook of photovoltaic science and engineering*. John Wiley & Sons, 2011.
- [70] J. R. Sites, J. E. Granata and J. F. Hiltner, « Losses due to polycrystallinity in thin-film solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 55, n° 1-2, p. 43-50, 1998.
- [71] M. A. Green, « Third generation photovoltaics: solar cells for 2020 and beyond », *Phys. E Low-Dimens. Syst. Nanostructures*, vol. 14, n° 1, p. 65-70, avr. 2002, doi: 10.1016/S1386-9477(02)00361-2.
- [72] B. Subedi, Z. Song, C. Chen, C. Li and K. Ghemire, « Optical and Electronic Losses Arising from Physically Mixed Interfacial Layers in Perovskite Solar Cells », *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 13, n° 4, p. 4923-4934, févr. 2021, doi: 10.1021/acsami.0c16364.
- [73] A. BENSMAIN, « Investigation de l'ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonction a-Si: H/c-Si: Modélisation et simulation numérique », PhD Thesis, 2018.
- [74] R. E. I. Schropp, K. F. Feenstra, E. C. Molenbroek, H. Meiling and J. K. Rath, « Device-quality polycrystalline and amorphous silicon films by hot-wire chemical vapour deposition », *Philos. Mag. B*, vol. 76, n° 3, p. 309-321, sept. 1997, doi: 10.1080/01418639708241096.
- [75] M. Benmansour, « Développement, contrôle et modélisation d'un procédé de projection de poudres de silicium par plasma RF-Application aux couches minces photovoltaïques », PhD Thesis, Chimie ParisTech, 2003.
- [76] D. L. Staebler and C. R. Wronski, « Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 31, n° 4, p. 292-294, 1977.

- [77] G. Nakamura, K. Sato, T. Ishihara, M. Usui, K. Okaniwa and Y. Yukimoto, « Tandem type amorphous solar cells », *J. Non-Cryst. Solids*, vol. 59-60, p. 1111-1114, déc. 1983, doi: 10.1016/0022-3093(83)90361-7.
- [78] T. Yanagisawa, « Correlation between light and current induced degradation in a-Si solar cells », *Electron. Lett.*, vol. 30, n° 21, p. 1802-1803, 1994.
- [79] S. M. Sze and K. K. Ng, « LEDs and Lasers », *Phys. Semicond. Devices*, vol. 3, p. 601-657, 2006.
- [80] M. Burgelman, P. Nollet and S. Degrave, « Modelling polycrystalline semiconductor solar cells », *Thin Solid Films*, vol. 361, p. 527-532, 2000.
- [81] P. Chelvanathan, M. I. Hossain and N. Amin, « Performance analysis of copper–indium–gallium–diselenide (CIGS) solar cells with various buffer layers by SCAPS », *Curr. Appl. Phys.*, vol. 10, n° 3, Supplement, p. S387-S391, mai 2010, doi: 10.1016/j.cap.2010.02.018.
- [82] R. V. K. Chavali, J. Wilcox, B. Ray, J. Gray and M. Alam, « Correlated Nonideal Effects of Dark and Light I–V Characteristics in a-Si/c-Si Heterojunction Solar Cells », *Photovolt. IEEE J. Of*, vol. 4, p. 763-771, mai 2014, doi: 10.1109/JPHOTOV.2014.2307171.
- [83] J. S. Park, S. Kim, Z. Xie and A. Walsh, « Point defect engineering in thin-film solar cells », *Nat. Rev. Mater.*, vol. 3, n° 7, Art. n° 7, juill. 2018, doi: 10.1038/s41578-018-0026-7.
- [84] T. Ouslimane, L. Et-taya, L. Elmaimouni and A. Benami, « Impact of absorber layer thickness, defect density, and operating temperature on the performance of MAPbI₃ solar cells based on ZnO electron transporting material », *Heliyon*, vol. 7, n° 3, p. e06379, mars 2021, doi: 10.1016/j.heliyon.2021.e06379.
- [85] Université des Sciences de la Technologie Mohamed-Boudiaf, El Mnouar, BP 1505, Oran, Algeria, M. ` Rahmouni, S. Belarbi, et Université des Sciences de la Technologie Mohamed-Boudiaf, El Mnouar, BP 1505, Oran, Algeria, « Defect Pool Numerical Model in Amorphous Semiconductor Device Modeling Program », *J. Nano- Electron. Phys.*, vol. 11, n° 2, p. 02008-1-02008-5, 2019, doi: 10.21272/jnep.11(2).02008.
- [86] A. Ghahremani and A. E. Fathy, « High efficiency thin-film amorphous silicon solar cells », *Energy Sci. Eng.*, vol. 4, n° 5, p. 334-343, 2016, doi: 10.1002/ese3.131.
- [87] T. Pu, H. Shen and Q. Tang, « Simulation of a Charged Al₂O₃ Film as an Assisting Passivation Layer for a-Si Passivated Contact P-Type Silicon Solar Cells », *Silicon*, p. 1-10, avr. 2021, doi: 10.1007/s12633-021-01105-4.

- [88] A. Teyou Ngoupo, S. Ouédraogo and J. M. Ndjaka, « Numerical analysis of interface properties effects in CdTe/CdS:O thin film solar cell by SCAPS-1D », *Indian J. Phys.*, vol. 93, n° 7, p. 869-881, juill. 2019, doi: 10.1007/s12648-018-01360-z.
- [89] O. Astakhov, V. Smirnov, R. Carius, B. E. Pieters, Y. Petrusenko, V. Borysenko and F. Finger, « Relationship between absorber layer defect density and performance of a-Si:H and μ c-Si:H solar cells studied over a wide range of defect densities generated by 2MeV electron bombardment », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 129, p. 17-31, oct. 2014, doi: 10.1016/j.solmat.2013.12.024.
- [90] D. Rached and W. L. Rahal, « Investigation of the interface defect density at pm-Si:H/c-Si and the surface recombination speeds on silicon heterojunction solar cells », *Optik*, vol. 223, p. 165575, déc. 2020, doi: 10.1016/j.ijleo.2020.165575.
- [91] B. Zhou, X. Yin, J. Zhang, G. Zeng, B. Li and L. Feng, « Numerical simulation of an innovative high efficiency solar cell with CdTe/Si composite absorption layer », *Opt. Mater.*, vol. 110, p. 110505, déc. 2020, doi: 10.1016/j.optmat.2020.110505.
- [92] S. Ahmed, F. Jannat, Md. A. K. Khan and M. A. Alim, « Numerical development of eco-friendly Cs₂TiBr₆ based perovskite solar cell with all-inorganic charge transport materials via SCAPS-1D », *Optik*, vol. 225, p. 165765, janv. 2021, doi: 10.1016/j.ijleo.2020.165765.
- [93] T. Minemoto and M. Murata, « Theoretical analysis on effect of band offsets in perovskite solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 133, p. 8-14, févr. 2015, doi: 10.1016/j.solmat.2014.10.036.
- [94] F.-I. Lai, J.-F. Yang, Y.-C. Hsu and S.-Y. Kuo, « Improvement of Amorphous Silicon Thin-Film Photovoltaic Cells with Zinc Oxide Nanorods », *Crystals*, vol. 10, n° 12, Art. n° 12, déc. 2020, doi: 10.3390/cryst10121124.
- [95] F. Wang, Y. Zhang, M. Yang, J. Du, L. Xue, L. Yang, L. Fan, Y. Sui, J. Yang and X. Zhanf, « Exploring low-temperature processed a-WO_x/SnO₂ hybrid electron transporting layer for perovskite solar cells with efficiency %3E20.5% », *Nano Energy*, oct. 2019, Consulté le: 13 février 2022. [En ligne]. Disponible sur: <https://researcher-app.com/paper/3147961>
- [96] W. H. Kouider, A. Belfar, M. BELMEKKI and H. AIT-KACI, « Window layer thickness effect on amorphous silicon oxide solar cell performances », *J. Algerian J. Renew. Energy Sustain. Dev.*, vol. 2, n° 1, p. 67-74, 2020.

- [97] H. Mehmood and T. Tauqeer, « Modelling and performance analysis of amorphous silicon solar cell using wide band gap nc-Si: H window layer », *IET Circuits Devices Syst.*, vol. 11, n° 6, p. 666-675, 2017.
- [98] C. Aliani, M. Krichen and A. Zouari, « Effect of the front-metal work function on the performance of a-Si:H(n+)/a-Si:H(i)/c-Si(p) heterojunction solar cells », *J. Comput. Electron.*, vol. 18, n° 2, p. 576-583, juin 2019, doi: 10.1007/s10825-019-01324-4.
- [99] K. Shen, C.Ou, T.Huang, H.Zhu, J.Li, Z.Li and Y.Mai, « Mechanisms and modification of nonlinear shunt leakage in Sb₂Se₃ thin film solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 186, p. 58-65, nov. 2018, doi: 10.1016/j.solmat.2018.06.022.
- [100] V. A. Dao, J.Heo, H.Choi, Y.Kim, S.Park, S.Jung and J.Yi, « Simulation and study of the influence of the buffer intrinsic layer, back-surface field, densities of interface defects, resistivity of p-type silicon substrate and transparent conductive oxide on heterojunction with intrinsic thin-layer (HIT) solar cell », *Sol. Energy*, vol. 84, n° 5, p. 777-783, mai 2010, doi: 10.1016/j.solener.2010.01.029.
- [101] D. Wang, J.Wu, H.Guo, M.Wu and L.Wu , « Tuning the Work Function of the Metal Back Contact toward Efficient Cu₂ZnSnSe₄ Solar Cells », *Sol. RRL*, vol. 5, n° 1, p. 2000391, 2021, doi: 10.1002/solr.202000391.
- [102] K. Sobayel, M.Shahinuzzaman, N.Amin, M.R.Karim and M.A.Dar, « Efficiency enhancement of CIGS solar cell by WS₂ as window layer through numerical modelling tool », *Sol. Energy*, vol. 207, p. 479-485, sept. 2020, doi: 10.1016/j.solener.2020.07.007.
- [103] F. Baig, Y. H. Khattak, A. Shuja, K. Riaz and B. M. Soucase, « Performance investigation of Sb₂Se₃ based solar cell by device optimization, band offset engineering and Hole Transport Layer in SCAPS-1D », *Curr. Appl. Phys.*, vol. 20, n° 8, p. 973-981, août 2020, doi: 10.1016/j.cap.2020.06.005.
- [104] S. Abdelaziz, A. Zekry, A. Shaker and M. Abouelatta, « Investigating the performance of formamidinium tin-based perovskite solar cell by SCAPS device simulation », *Opt. Mater.*, vol. 101, p. 109738, mars 2020, doi: 10.1016/j.optmat.2020.109738.
- [105] V. Kanneboina, R. Madaka and P. Agarwal, « Stepwise tuning of the doping and thickness of a-Si:H(p) emitter layer to improve the performance of c-Si(n)/a-Si:H(p) heterojunction solar cells », *J. Mater. Sci. Mater. Electron.*, vol. 32, n° 4, p. 4457-4465, févr. 2021, doi: 10.1007/s10854-020-05187-5.
- [106] B. Samanta, D. Das and A. K. Barua, « Role of buffer layer at the p/i interface on the stabilized efficiency of a-Si solar cells », *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 46, n° 3, p. 233-237, juin 1997, doi: 10.1016/S0927-0248(97)80001-3.

- [107] X. Rong, H.Tian, W.Bi, H.Jin, T.Zhang, D.Wo and K.Zhao, « Impact of metal electrode work function of CH₃NH₃PbI₃/p-Si planar heterojunction perovskite solar cells », *Sol. Energy*, vol. 158, p. 424-431, déc. 2017, doi: 10.1016/j.solener.2017.08.050.
- [108] M. Al-Hattab, L. Moudou, M. Khenfouch, O. Bajjou, Y. Chrafi and K. Rahmani, « Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/GaSe solar cell system using SCAPS-1D software », *Sol. Energy*, vol. 227, p. 13-22, oct. 2021, doi: 10.1016/j.solener.2021.08.084.
- [109] Y. Zhou and A. Gray-Weale, « A numerical model for charge transport and energy conversion of perovskite solar cells », *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 18, n° 6, p. 4476-4486, févr. 2016, doi: 10.1039/C5CP05371D.
- [110] R. T. Mouchou, T. C. Jen, O. T. Laseinde and K. O. Ukoba, « Numerical simulation and optimization of p-NiO/n-TiO₂ solar cell system using SCAPS », *Mater. Today Proc.*, vol. 38, p. 835-841, janv. 2021, doi: 10.1016/j.matpr.2020.04.880.
- [111] A. M. N. Abena, A. T. Ngoupo, F. X. A. Abega and J. M. B. Ndjaka, « Numerical investigation of solar cells based on hybrid organic cation perovskite with inorganic HTL via SCAPS-1D », *Chin. J. Phys.*, vol. 76, p. 94-109, mars 2022, doi: 10.1016/j.cjph.2021.12.024.
- [112] J. N. Sameera, M.A.Islam, S.Islam, T.Hossain, M.K .Sobayel, M. Akhtaruzzaman and M. J. Rashid « Cubic Silicon Carbide (3C-SiC) as a buffer layer for high efficiency and highly stable CdTe solar cell », *Opt. Mater.*, vol. 123, p. 111911, janv. 2022, doi: 10.1016/j.optmat.2021.111911.

PUBLICATION

François Xavier ABOMO ABEGA, Ariel TEYOU NGOUPO, Jean-Marie Bienvenu NDJAKA, Numerical Design of Ultrathin Hydrogenated Amorphous Silicon-Based Solar Cell, August 2021, *International Journal of Photoenergy*, 2021 :1-13 DOI 10.1155/2021/7506837

Ariel TEYOU NGOUPO, **François Xavier ABOMO ABEGA**, Aimé Magloire NTOUGA ABENA, Jean-Marie Bienvenu NDJAKA, “ **Effect of Back Reflector Layer (BRL), Window Layer, Buffer Layers, Back Metal Contact and Temperature on the Performance of a-Si:H Ultrathin Film Solar Cells: Numerical Investigation using SCAPS-1D Software**”, (Submitted).

Research Article

Numerical Design of Ultrathin Hydrogenated Amorphous Silicon-Based Solar Cell

F. X. Abomo Abega , A. Teyou Ngoupo , and J. M. B. Ndjaka

Université de Yaoundé 1, Faculté des Sciences, Département de Physique, BP, 812 Yaoundé, Cameroon

Correspondence should be addressed to A. Teyou Ngoupo; arielteyou@yahoo.fr

Received 1 June 2021; Revised 14 July 2021; Accepted 2 August 2021; Published 14 August 2021

Academic Editor: Kok Keong Chong

Copyright © 2021 F. X. Abomo Abega et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Numerical modelling is used to confirm experimental and theoretical work. The aim of this work is to present how to simulate ultrathin hydrogenated amorphous silicon- (a-Si:H-) based solar cells with a ITO BRL in their architectures. The results obtained in this study come from SCAPS-1D software. In the first step, the comparison between the J-V characteristics of simulation and experiment of the ultrathin a-Si:H-based solar cell is in agreement. Secondly, to explore the impact of certain properties of the solar cell, investigations focus on the study of the influence of the intrinsic layer and the buffer layer/absorber interface on the electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF, and η). The increase of the intrinsic layer thickness improves performance, while the bulk defect density of the intrinsic layer and the surface defect density of the buffer layer/(a-Si:H) interface, respectively, in the ranges $[10^9 \text{ cm}^{-3}, 10^{15} \text{ cm}^{-3}]$ and $[10^{10} \text{ cm}^{-2}, 5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}]$, do not affect the performance of the ultrathin a-Si:H-based solar cell. Analysis also shows that with approximately $1 \mu\text{m}$ thickness of the intrinsic layer, the optimum conversion efficiency is 12.71% ($J_{SC} = 18.95 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.973 \text{ V}$, and FF = 68.95%). This work presents a contribution to improving the performance of a-Si-based solar cells.

1. Introduction

The photovoltaic industry is over 95% focused on the use of silicon as a base material [1]. The cost of synthesizing this material has made it possible to switch from crystalline silicon (c-Si) to amorphous silicon (a-Si). Thin-film silicon, mainly the amorphous silicon (a-Si:H) solar cells, has the potential to be less expensive due to low material consumption, lower thermal budget manufacturing steps, and low temperature coefficient of solar cell efficiency [2]. However, the commercially available stabilized efficiency and reliability of a-Si:H solar cells are greater than many of the third generation solar cells as reported so far [3]. When synthesizing amorphous silicon, it has a high concentration of dangling bonds in its structure. To overcome this failure, it is necessary to incorporate hydrogen [4]. This defect reduction allowed the doping of hydrogenated amorphous silicon with boron and phosphorus [5]. The a-Si:H has the advantage of having an adjustable band-

gap and a high optical absorption coefficient. This optical bandgap varies between 1.6 eV and 1.8 eV [6]. The efficiency limit for a single bandgap thin film-based solar cell predicted by Shockley and Queisser is around 31% [7]. Nowadays, the maximum conversion efficiency of a-Si:H solar cells is 10.2% [8], which is still far from the theoretical value. There are several methods of manufacturing a-Si:H-based solar cells such as photo PECVD [9], sputtering [10]. The most suitable for manufacturing single-junction solar cells is the PECVD process [11]. However, some limits should be placed on the preeminence of a-Si:H-based solar cells, since a degradation effect caused by exposure to light was highlighted by the Staebler-Wronski effect [12]. Indeed, they observed that exposure to the light of an a-Si:H-based solar cell, stretched over time, caused a drop of its electrical parameters: this is known as a light-induced degradation (LID) effect. This limitation can be reduced by controlling the thickness of the intrinsic (i) layer in the structure of solar cell [13, 14]. In the a-Si:H-

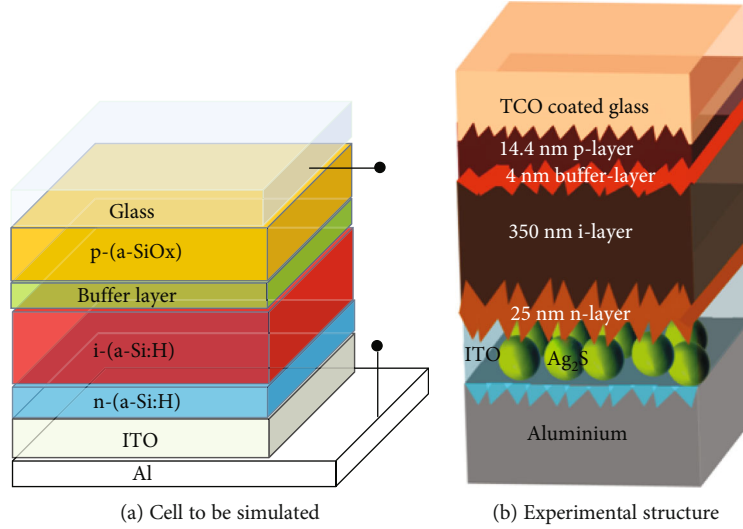


FIGURE 1: Schematic diagram of solar cells.

based solar cell, the thickness of the *i*-layer controls the short-circuit current [3].

To facilitate light absorption in a-Si:H-based solar cell, some advanced tricks are required to utilize the major portion of the incident light in the active layer of the cell, like light-trapping techniques in order to enhance the optical path length (OPL) of photons [3]. The optical absorption and carrier collection can be increased by improving the reflection characteristics of a back reflector layer (BRL). There are multiple approaches to suppress the optical losses in the device; hence, properly designing the device is crucial [3]. This work presented how to use numerical simulation in the case of a-Si:H-based solar cell with a nonconventional back reflector layer (BRL) in their structures. A nonconventional BRL is definite as BRL containing semiconductor nanoparticles. This type of BRL improves the reflection characteristics of a back reflector layer. Nonconventional BRL contributes in reducing optical losses by light scattering behaviour, improves absorbance, and ameliorates photon management. In this approach, this can be numerically modelled through the rate of reflection at the rear contact and the absorption coefficient of the active layer (*i*) of the a-Si:H-based solar cell in the SCAPS-1D software. As is known to all, the device quality is mainly determined by factors including emitter quality and interface quality [15]. In order to validate our solar cell model, we start from a comparative study of the J-V characteristic of the results of the experiment and simulation, and on the other hand, we study the influence of the various parameters (thickness, bulk defects density, and properties of buffer layer/absorber interface) on the performance of the solar cell, using SCAPS-1D software.

2. Method and Materials

2.1. Method. Numerical modelling is an approach and an important tool which allows to understand the complexity of solar cells and the development of these; it also helps to

understand the phenomena that are at the origin of the limitation of the conversion efficiency of solar cells. SCAPS-1D is a one-dimensional numerical simulation software of solar cells [16]; it was developed at the University of Gent in Belgium and was previously tested on the structures of CuInSe₂ and CdTe family [17]. But with the evolution of research, its functions have extended to crystalline (Si, GaAs) and amorphous (a-Si, micromorphic Si) structures. Thus, his choice is justified in this work by the fact that it allows to have simulation results in agreement with experience [16].

The descriptive equations used by SCAPS-1D software are the basic semiconductor equations (equations (1)–(3)). They are three coupled and nonlinear differential equations that are solved simultaneously in SCAPS-1D.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\epsilon_0 \epsilon \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) = -q \left(p - n + N_D^+ - N_A^- + \frac{\rho_{\text{def}}}{q} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} - U_n + G = \frac{\partial n}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial J_p}{\partial x} - U_p + G = \frac{\partial p}{\partial t}. \quad (3)$$

Equation (1) is called the Poisson equation; it describes the phenomena of an electrostatic nature, where ψ is the electrostatic potential, n and p are the density of free electrons and holes, respectively, N_D^+ and N_A^- are the concentrations of ionized donors and acceptors, respectively, and ρ_{def} is the density of deep defect centers. Equations (2) and (3) are the continuity equations of electrons and holes; they govern the condition of dynamic equilibrium in a semiconductor; G is the generation rate; U_n and U_p are the recombination rates of electrons and holes, respectively. J_n and J_p represent the current densities of electrons and holes, respectively; and their expressions are given, respectively, by equations (4) and (5), where μ_n is the electron mobility and μ_p the hole

TABLE 1: Input parameters in SCAPS-1D.

Parameters	<i>p</i> -(a-SiO _x)	Buffer layer	<i>i</i> -(a-Si:H)	<i>n</i> -(a-Si:H)	ITO
Thickness (μm)	0.500	0.004	0.350	0.025	0.060
Bandgap energy (eV)	1.950	1.800	1.800	1.800	3.650
Electron affinity (eV)	4.000	3.900	3.900	3.900	4.800
Dielectric permittivity (relative)	9.000	11.900	11.900	11.900	8.900
CB effective density of states (cm ⁻³)	2.20 × 10 ¹⁸	1.0 × 10 ²⁰	1.0 × 10 ²⁰	1.0 × 10 ²⁰	5.2 × 10 ¹⁸
VB effective density of states (cm ⁻³)	1.80 × 10 ¹⁹	1.0 × 10 ²⁰	1.0 × 10 ²⁰	1.0 × 10 ²⁰	1.0 × 10 ¹⁸
Electron thermal velocity (cm/s)	10 ⁷	10 ⁶	10 ⁶	10 ⁷	2.0 × 10 ⁷
Hole thermal velocity (cm/s)	10 ⁷	10 ⁶	10 ⁶	10 ⁷	2.0 × 10 ⁷
Electron mobility (cm ² /Vs)	5.0	50	20	30	50
Hole mobility (cm ² /Vs)	1.0	10	5.0	5.0	25
Donor density <i>N_D</i> (cm ⁻³)	0.0	0.0	1.0 × 10 ⁶	1.0 × 10 ¹⁸	1.0 × 10 ²⁰
Acceptor density <i>N_A</i> (cm ⁻³)	1.0 × 10 ¹⁷	7.0 × 10 ¹⁵	1.0 × 10 ⁶	0.0	0.0
Absorption coefficient	SCAPS	SCAPS	SCAPS	SCAPS	SCAPS

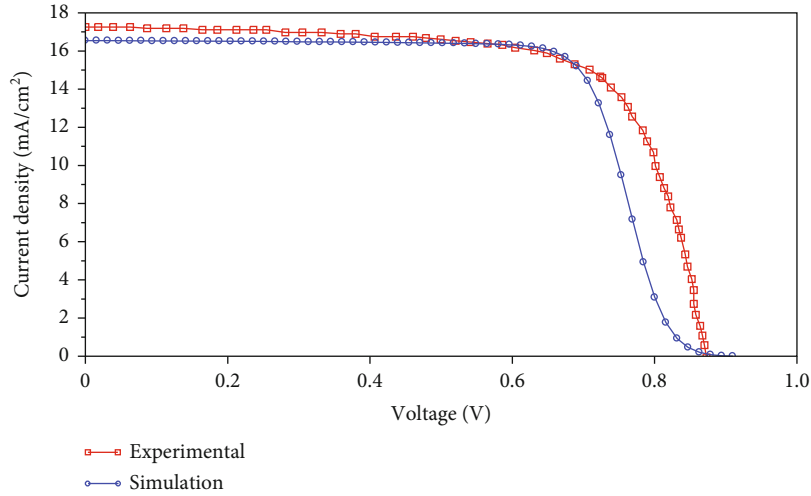


FIGURE 2: Experimental and simulated J-V characteristics of the a-Si:H-based solar cell.

mobility; E_{Fn} is the Fermi level of electrons, and E_{Fp} the Fermi level of holes.

$$J_n = -\frac{\mu_{n^n}}{q} \frac{\partial E_{Fn}}{\partial x}, \quad (4)$$

$$J_p = -\frac{\mu_{p^p}}{q} \frac{\partial E_{Fp}}{\partial x}. \quad (5)$$

2.2. Materials. Generally, the performance of solar cells is dependent on three main factors: material selection, material growth technique, and device architecture [18]. A solar cell consists of a semiconductor material that absorbs light and then generates excess electrons and holes [15]. Figure 1 is the structure of a-Si:H-based solar cells. Figure 1(a) shows the structure of the solar cell investigated in this work, while Figure 1(b) represents the schematic diagram of the solar cell

TABLE 2: Experimental and simulated electrical parameters of the a-Si:H-based solar cell.

Parameters	Experimental	Simulation
J_{SC} (mA·cm ⁻²)	17.2	16.55
V_{OC} (V)	0.87	0.905
FF (%)	70.0	70.62
η (%)	10.58	10.58

from the experimental work of Banerjee et al. [3]. In this subsection, we describe the structure of the solar cell to be optimized. This single-junction cell (Figure 1(a)) is based on hydrogenated amorphous silicon and is constructed using SCAPS-1D software. The improvement of its electrical parameters depends on the different properties and the arrangement of the layers in the structure. Cell to be

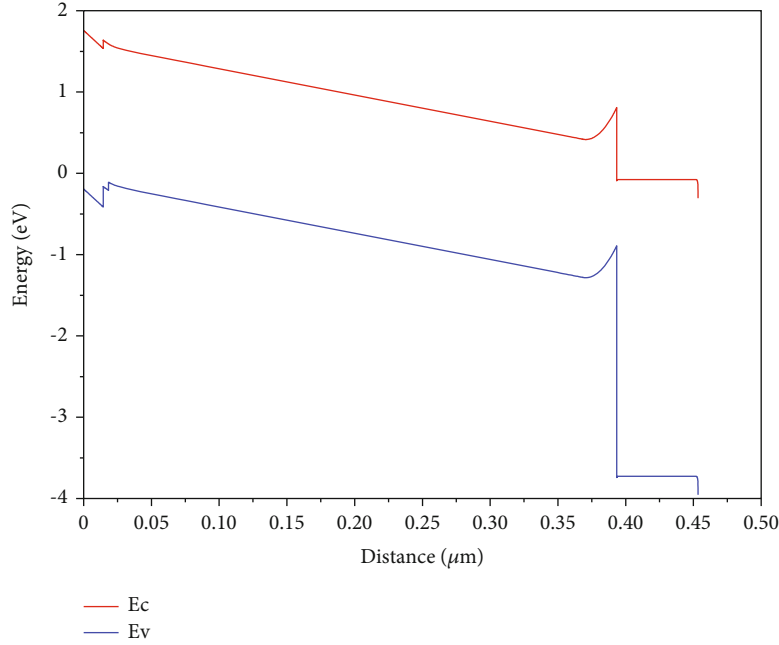


FIGURE 3: Energy band diagram of p -(a-SiO_x)/buffer layer/ i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H)/ITO/Al solar cell.

simulated is structured as follows: p -(a-SiO_x)/buffer layer/ i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H)/ITO/Al, as shown in Figure 1(a).

The i -(a-Si:H) layer, intrinsic type, is situated between the p -doped buffer layer and the n -doped n -(a-Si:H) layer; it is the fundamental element of the solar cell in which the photovoltaic conversion takes place. This layer is called an absorber layer. The light enters the structure through the p -(a-SiO_x) window layer, its bandgap depends on the O/Si ratio, and when this ratio is 34%, it has an intermediate bandgap of 1.95 eV, with a conductivity of 3.3 S/cm [19]. This layer maximizes the absorption of light in the structure. The photons absorbed by the i -layer create the electron-hole pairs. The induced electric field, by the n - and p -layers through the i -layer, causes the electrons to drift towards the n region and the holes towards the p region. The p -type-doped buffer layer reduces the height of the Schottky barrier and the recombination at the p -(a-SiO_x)/ i -(a-Si:H) interface [20]. The ITO layer is an important layer in this numerical simulation; it can increase the optical absorption and carrier collection by improving the reflection characteristics of a back reflector layer (BRL, which is a layer between the metal back contact and the bottom n -layer in a-Si:H solar cell) [3]. The ITO layer also reduces transmission losses at the rear contact (Al metallic contact) and promotes adhesion between the amorphous silicon and the metallic contact [21]. Improving the photovoltaic conversion efficiency requires improving the utilization of the major portion of the solar spectrum in the active layer, in order to enhance the OPL of photons [3]. In this work, we are trying to understand how the presence of ITO BRL in a-Si:H solar cell contributes to enhance its performances with SCAPS-1D software.

To model this type of amorphous silicon solar cell structure, taking into account the effect of ITO BRL containing semiconductor nanoparticles which ameliorates photon

management and increases the generation of electron-hole pairs, in the environment of SCAPS-1D, the optical absorption submodel applied at the i -layer is based on the square-law model, given by equation (6). The value of the absorption coefficient represents how efficiently the photon energy will be harvested using the materials [7]. BRL plays a crucial role in light reflection by backscattering to the active layer of the cell; thus, the reflection rate at the rear contact is taken at more than 93% in this numerical simulation as suggested by the experimental work of Banerjee et al. [3].

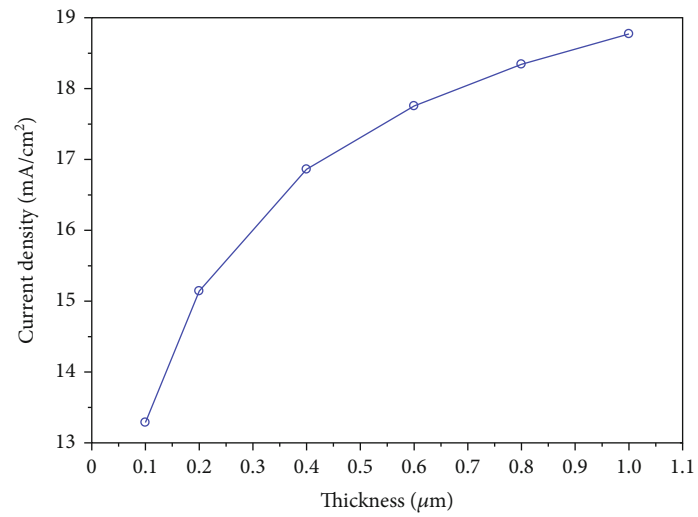
$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_g}, \quad (6)$$

where E_g represents the gap, and A (cm⁻¹·eV^{-1/2}) and B (cm⁻¹·eV^{+1/2}) are the parameters of the model in SCAPS-1D.

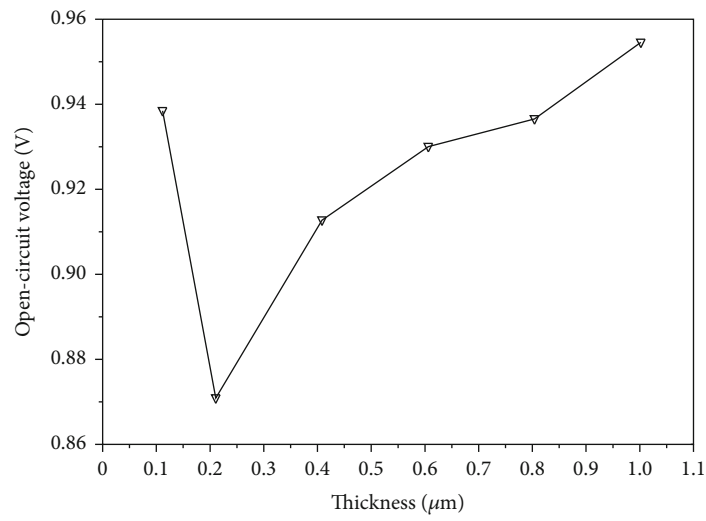
The electrical input parameters of all materials used in this numerical simulation, for the resolution of the previous equations, are given in Table 1; these data are taken from the literature [3, 19, 22, 23]. In this simulation study, metal contacts (front and back contacts) are assumed to be flat bands.

3. Results and Discussion

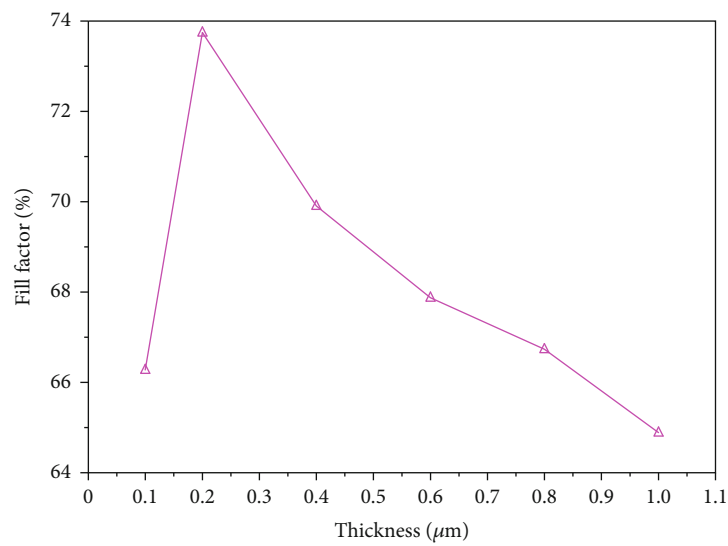
3.1. Comparison between Simulation and Experience. First, we validate our solar cell structure model (Figure 1(a)), by comparing the experimental results of the current-voltage characteristic from the work of Banerjee et al. [3] to those of the numerical simulation as shown in Figure 2. The modelling of the a-Si:H-based solar cell (Figure 1(a)) is made under AM1.5 solar spectrum, a light power of 1000 W/m², and at 300 K, using the parameters of Table 1. In this numerical simulation model, the silver sulfide nanomirrors in ITO



(a)



(b)



(c)

FIGURE 4: Continued.

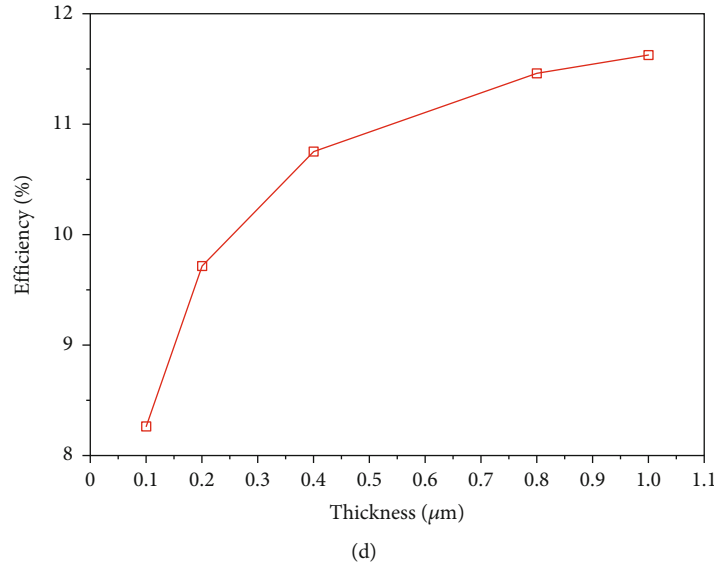


FIGURE 4: Influence of the variation of the intrinsic layer i -(a-Si:H) thickness on the electrical parameters: (a) J_{SC} , (b) V_{OC} , (c) FF, and (d) η .

BRL (nonconventional BRL) of the experimental model were taken into account, assuming a reflection of the order of 95% at the rear contact of the a-Si:H-based solar cell and the absorption coefficient given by equation (6) for the i -layer of the solar cell.

Further, the short-current density (J_{SC}), fill factor (FF), open-circuit voltage (V_{OC}), and conversion efficiency from experiment and simulation are illustrated in Table 2. In view of the data from Table 2, we can therefore conclude that there is a good agreement between the experimental and simulation results; this confirms the validity of the a-Si:H-based solar cell model (Figure 1(a)). Figure 3 represents the band diagram of this simulated cell at thermal equilibrium.

3.2. Influence of the Intrinsic Layer Thickness Variation. The main drawback of a-Si:H solar cells is light-induced degradation (LID), which can be minimized by controlling the thickness of the intrinsic (i) layer [3]. It is useful to be able to appreciate the importance of studying the variation of thickness of the intrinsic layer on the performance of a-Si:H-based solar cell, because it is in this layer that happens the phenomenon of photovoltaic conversion, resulting in the production of photovoltaic energy. Thus, this subsection allows us to investigate the effect of the variation of the thickness of the intrinsic layer on the electrical parameters of the solar cell, as shown in Figure 4. For this study, the thickness of the intrinsic layer varies from 0.1 μm to 1 μm in the case of solar cells with ultrathin absorber layer, by keeping constant the other parameters of the layers of the structure of solar cell (Figure 1(a)) and by neglecting the properties of interfaces between the different layers. Within this variation range of the intrinsic layer thickness, we observe an increase in the short-circuit current density from 13.28 $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ to 18.75 $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ (Figure 4(a)). Therefore, the short-circuit current density increases with the thickness. This result is explained by the considerable absorption of incident photons in the intrinsic layer, which increases

the number of photogenerated carriers [6], through the generation rate as shown in equation (7). Similarly, the work of Chelvanathan et al. [24] has shown that the current density also increases with thickness in the case of the CIGS-based solar cell.

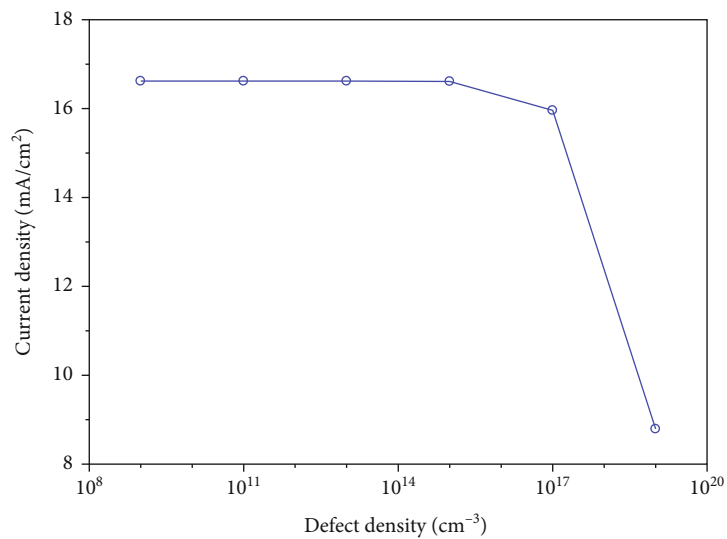
$$J_{ph} = q \cdot G \cdot (L_n + W + L_p), \quad (7)$$

where L_n and L_p are the diffusion lengths of electrons and holes, respectively, and W is the width of the space charge region.

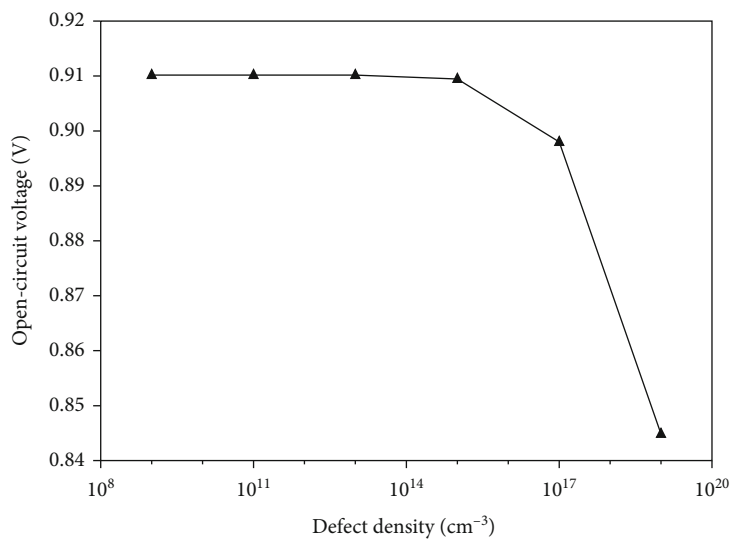
The open-circuit voltage V_{OC} (Figure 4(b)) increases as the thickness of the intrinsic layer increases in the range [0.2 μm , 1 μm]; this can be attributed to a decrease in the phenomenon of bulk recombination and at the level of back contact, and better passivation of the i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H) interface as suggested by Lachaume [25] and De Wolf et al. [26] in their works. The increase of the open-circuit voltage thus reflects the nondegradation of the i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H) junction. On the other hand, the decrease in V_{OC} in the range [0.1 μm , 0.2 μm] can be attributed to the degradation of the i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H) junction and to the recombination phenomenon at the interface of this junction.

In addition, the fill factor FF (Figure 4(c)) also shows two trends: a first in the range [0.1 μm , 0.2 μm] and a second in the range [0.2 μm , 1 μm]. The increase in FF in the interval [0.1 μm , 0.2 μm] may be due to the reduction in the double diode effect observed in the i -(a-Si:H) layer [27]. However, the decrease in FF in the interval [0.2 μm , 1 μm] is due to the presence of coordination defects in the absorber layer, and secondly, the resistance of the intrinsic layer increases with its thickness, which increases series resistance of the solar cell.

In view of the above, the combined action of these three parameters (J_{SC} , V_{OC} , and FF) contribute to an increase of conversion efficiency (equation (8)) of the a-Si:H-based solar

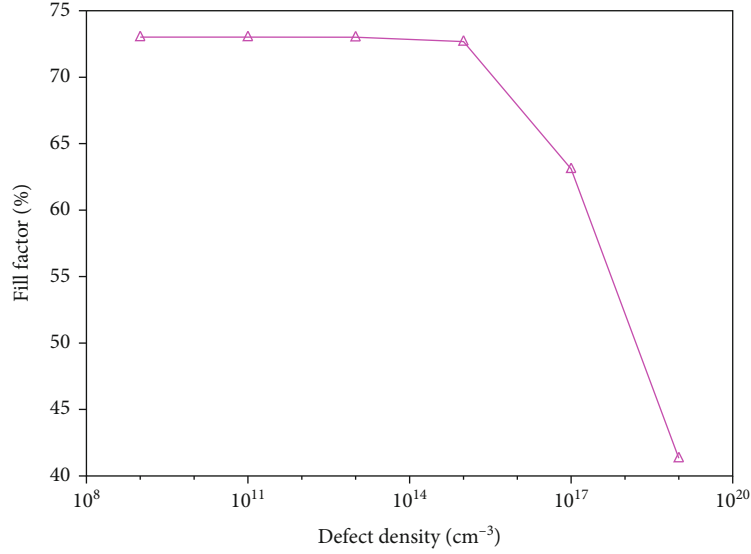


(a)

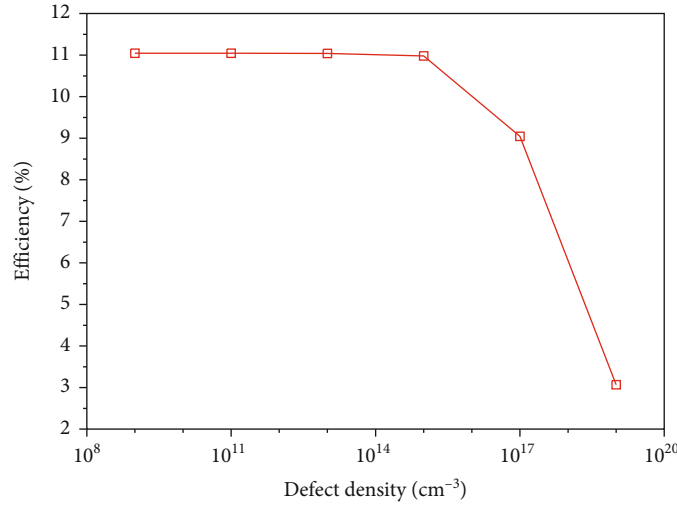


(b)

FIGURE 5: Continued.



(c)



(d)

FIGURE 5: Influence of the variation of the bulk defect density of the intrinsic layer *i*-(a-Si:H) on the electrical parameters: (a) J_{SC} , (b) V_{OC} , (c) FF, and (d) η .

cell, as a function of the thickness of the intrinsic layer (Figure 4(d)); therefore, we observe a variation of the conversion efficiency from 8.26% to 11.63%.

$$\eta = \frac{J_{SC} \cdot V_{OC} \cdot FF}{P} \quad (8)$$

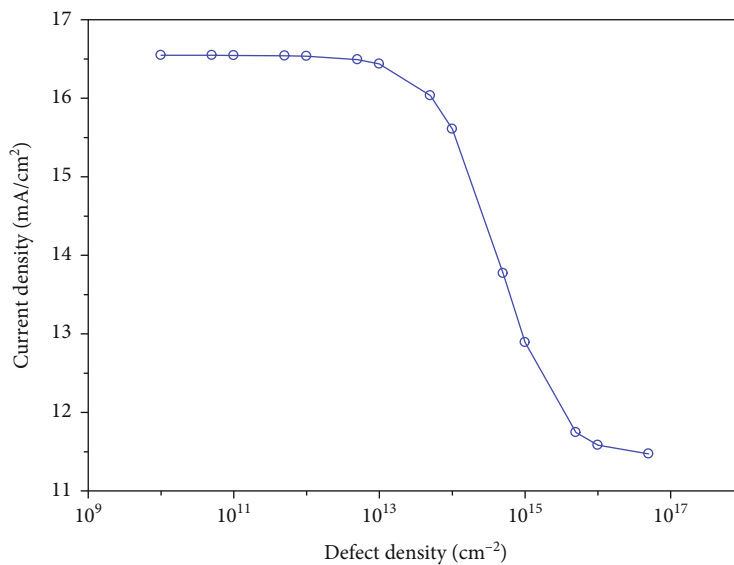
3.3. Influence of the Defect Density in the Intrinsic Layer.

Figure 5 shows the effect of varying deep bulk defect density (N_t), acceptor type, of the intrinsic layer on the performance parameters of the a-Si:H-based solar cell using the data from Table 1 and for N_t ranging from 10^9 cm^{-3} to 10^{19} cm^{-3} . These defects form following the breakdown of the chemical equilibrium of the weak Si-Si bonds during the deposition of amorphous silicon [28]. Their energy distribution in the bandgap varies depending on the incorporation of the pro-

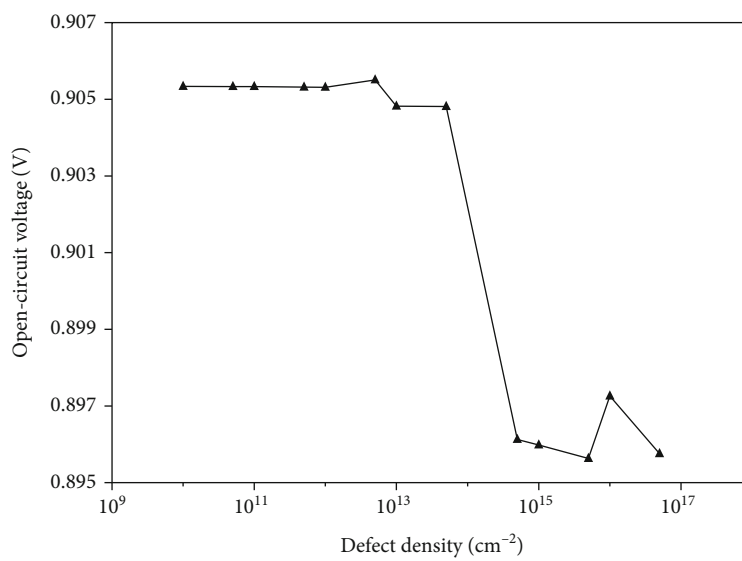
TABLE 3: Properties of buffer layer/absorber layer interface.

Parameters	Buffer layer/ <i>i</i> -(a-Si:H)
$D_{it} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$	Variable (A)
$\sigma_n \text{ (cm}^2\text{)}$	10^{-15}
$\sigma_p \text{ (cm}^2\text{)}$	10^{-15}

portions of hydrogen in the intrinsic layer; by convention, these defects are located in the upper part of the bandgap. The results obtained show that, for N_t took in the range $[10^9 \text{ cm}^{-3}, 10^{15} \text{ cm}^{-3}]$, the electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF, and η) are constant (Figure 5). In this region, the donor density (10^6 cm^{-3}) is the same as acceptors. Taking into account the amorphous nature, the intrinsic layer can be considered to be heavily doped; therefore, the combined effects



(a)



(b)

FIGURE 6: Continued.

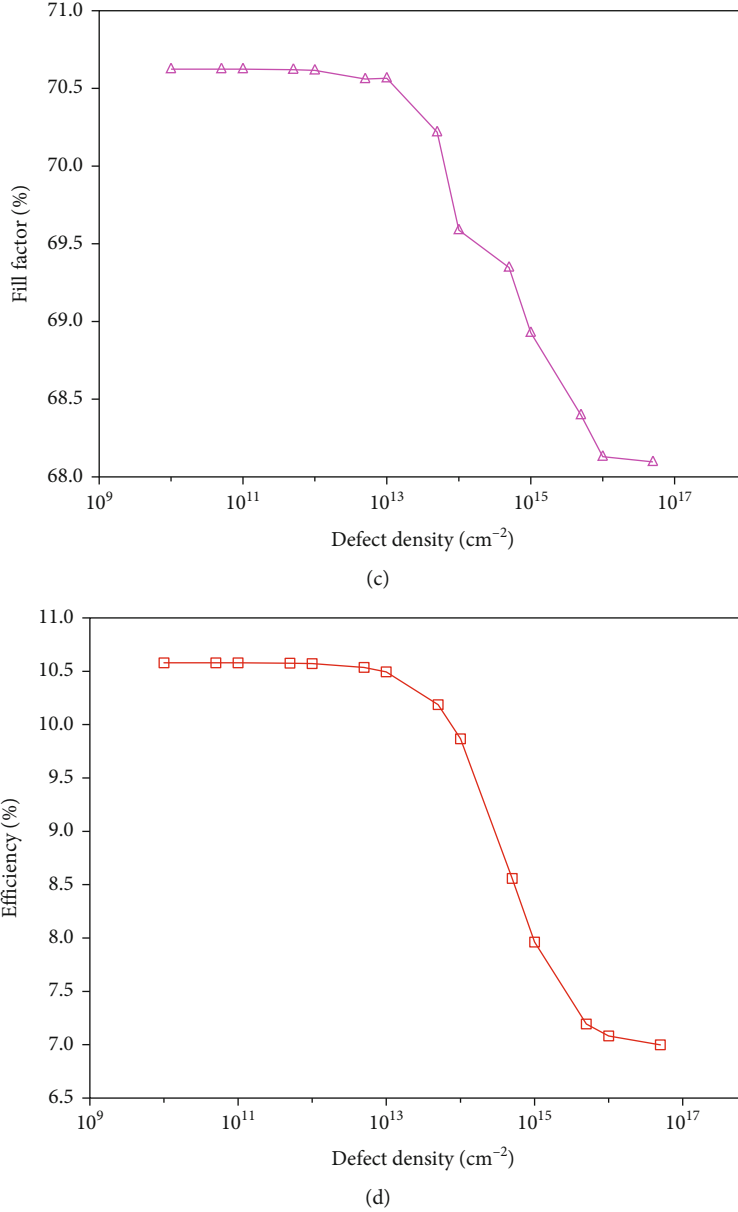


FIGURE 6: Effect of varying buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface states on electrical parameters: (a) J_{SC} , (b) V_{OC} , (c) FF, and (d) η .

of acceptors and donors compensate that of bulk defects. In other words, the recombination rate is negligible in the intrinsic layer.

On the other hand, we observe that, for N_t took in the range $[10^{15} \text{ cm}^{-3}, 10^{19} \text{ cm}^{-3}]$, all the electrical parameters are greatly affected by the variation of the bulk defect density; there is an abrupt decrease of all these parameters (Figure 5). This decrease is reflected in the fact that the increase of these defects creates localized states in the bandgap [29, 30]. These localized states influence the intrinsic Fermi level by creating tail states and by inducing additional charges, which are taken into account in the ρ_{def} term of equation (1). Thus, the phenomena of recombination of the photogenerated carriers in this layer predominate over the phenomena of generations. The current density J_{SC} decreases

from 16.61 mA/cm² to 8.79 mA/cm², the open-circuit voltage V_{OC} from 0.910 V to 0.845 V, the fill factor FF from 73.0% to 41.33%, and the efficiency from 11.04% to 3.07%. The presence of these defects is the cause of optical loss due to a high Shockley-Read-Hall recombination rate, resulting in a sharp decline in all electrical parameters. These results are in agreement with those of the work of Ghahremani and Fathy [31].

3.4. Effect of State Density of Buffer Layer/Absorber Interface. Defect states at the interface of two layers can cause strong interface recombination in solar cell. A low interface state in the midgap can be achieved by the insertion of intrinsic hydrogenated amorphous silicon in the a-Si/c-Si passivated contact (a-PC) solar cell [15]. Modelling and optimizing a solar cell require controlling the interface states between the

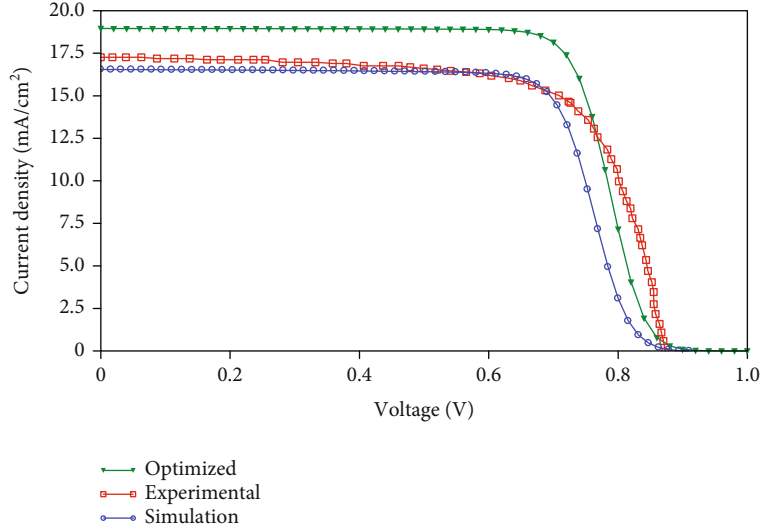


FIGURE 7: Experimental, simulated, and optimized J-V characteristics of the a-Si:H solar cell.

different layers that constitute it, in order to ensure the passage of charge carriers through a junction. The previous results are obtained by neglecting the interface properties between the different layers. The buffer layer/absorber interface plays a crucial role in the charge transport mechanism in a-Si:H solar cells [32]. In this section, we explore the influence of the density of surface defects D_{it} (Table 3) at the buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface, using the data from Table 1 and for $N_t = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ in the intrinsic layer, on the electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF, and η) of the a-Si:H-based solar cell, as presented in Figure 6. This density of surface defects (D_{it}) varies from 10^{10} cm^{-2} to $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$.

For surface defect densities ranging from 10^{10} cm^{-2} to 10^{13} cm^{-2} , the electrical parameters are almost insensitive. Moreover, when the density of the surface defects increases from 10^{13} cm^{-2} to $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$, the short-circuit current density decreases drastically from 16.43 mA/cm^2 to 11.47 mA/cm^2 (Figure 6(a)). This decrease is due to increased recombination centers at the interface buffer layer/*i*-(a-Si:H), favouring electron traps but also the loss by optical absorption of the incident light [33].

Figure 6(b) shows that, for D_{it} took in the range [10^{14} cm^{-2} , $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$], the open-circuit voltage decreases considerably from 0.908 V to 0.896 V. This decrease is the consequence of dangling bonds in the absorber layer, which cause recombination phenomena, and atomic interdiffusion of the buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface.

Figure 6(c) shows the variation of the fill factor as a function of the density of the surface defects. For surface defect densities greater than 10^{13} cm^{-2} , the fill factor decreases from 70.56% to 68.09%. FF is affected by surface recombination at the buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface. This decrease can also be explained by an empirical expression of FF as a function of V_{OC} (equation (9)) [32, 34].

$$FF = \frac{v_{oc} - \ln(v_{oc} + 0.72)}{1 + v_{oc}}, \text{ where } v_{oc} = \frac{qV_{OC}}{AkT}. \quad (9)$$

TABLE 4: Comparison of the electrical parameters of the experimental and optimized solar cell structures.

Parameters	Experimental	Optimized
J_{SC} ($\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$)	17.2	18.95
V_{OC} (V)	0.87	0.973
FF (%)	70.0	68.86
η (%)	10.58	12.71

These three electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , and FF) contribute to the decrease of the conversion efficiency (Figure 6(d)) given by equation (8); these results are in agreement with the works of Rached and Rahal [35]. The trend of the influence of interface state density on cell performance is similar to that obtained in the work of Zhou et al. [36].

3.5. Optimized a-Si:H Solar Cell. Optimizing a solar cell consists of finding the values of the parameters that make it the most efficient. In this paper, it is to determine the optimal electrical parameters of our model ultrathin film hydrogenated amorphous silicon solar cell. Our approach in this subsection consists in using the optimal values of the parameters studied in the previous subsections, in order to simulate the electrical parameters of the optimized solar cell. The optimal parameters, previously determined, are $1 \mu\text{m}$, 10^9 cm^{-3} , and 10^{10} cm^{-2} , respectively, of the thickness and the bulk defect density of the intrinsic layer and of the density of surface defects of the buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface. The optimized cell thus leads to a conversion efficiency of 12.71%. Figure 7 gives the current-voltage characteristics of the three structures used in our work, and Table 4 summarizes the electrical parameters of experimental and optimized solar cells. The decrease in FF from the experimental solar cell to the optimized one is due to the phenomenon of surface recombination at the buffer layer/*i*-(a-Si:H) interface and to the increase in the series resistance of the solar cell, which increases with the thickness of the intrinsic layer.

4. Conclusion

In this work, we present the factors that can be at the origin of the electrical losses in the ultrathin a-Si:H-based solar cell with a ITO BRL, through a study by numerical simulations using the SCAPS-1D software. From the p -(a-SiO_x)/buffer layer/ i -(a-Si:H)/ n -(a-Si:H)/ITO/Al structure of the solar cell, we simulated the current-voltage characteristic whose electrical parameters ($J_{SC} = 16.55 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$, $V_{OC} = 0.905 \text{ V}$, $FF = 70.62\%$, and $\eta = 10.58\%$) reproduce the experimental data, and we have shown how the thickness and bulk defects of the absorber and the density of the surface defects of the buffer layer/ i -(a-Si:H) interface affect the electrical parameters of the ultrathin a-Si:H-based solar cell. These properties are crucial for high-performance solar cells. Increasing the thickness of the intrinsic layer contributes a lot to the process of generation of photogenerated carriers, which increases the performance of the solar cell. We have also observed that the increase in the density of the bulk defects of the intrinsic layer and the surface defects at the buffer layer/ i -(a-Si:H) interface increases the recombination phenomena, which contribute to the reduction of a-Si:H-based solar cell performance. The optimized structure of the ultrathin a-Si:H-based solar cell gives a conversion efficiency of 12.71% for a thickness of $1 \mu\text{m}$ and a bulk defect density of 10^9 cm^{-3} of the intrinsic layer and a surface defect density of 10^{10} cm^{-2} at the buffer layer/ i -(a-Si:H) interface.

Data Availability

All data used in our work has been cited in the reference list.

Conflicts of Interest

The authors declare that there is no conflict of interest regarding the publication of this paper.

Authors' Contributions

F. X. Abomo Abega performed the conceptualization, methodology, software use, and investigation and wrote the original draft. A. Teyou Ngoupo performed the conceptualization, methodology, software use, validation, and project administration and wrote the original draft. J.M.B. Ndjaka performed the conceptualization, methodology, supervision, and validation.

Acknowledgments

The authors acknowledge the use of SCAPS-1D software, developed by Marc Burgelman and colleagues at the University of Gent, in all the simulations reported in this paper.

References

- [1] C. Case, N. Beaumont, and D. Kirk, "Industrial insights into perovskite photovoltaics," *ACS Energy Letters*, vol. 4, no. 11, pp. 2760–2762, 2019.
- [2] L. Martini, L. Serenelli, F. Menchini, M. Izzi, and M. Tucci, "Silicon heterojunction solar cells toward higher fill factor," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 28, no. 4, pp. 307–320, 2020.
- [3] S. Banerjee, S. Mandal, S. Dhar, A. B. Roy, and N. Mukherjee, "Nanomirror-embedded back reflector layer (BRL) for advanced light management in thin silicon solar cells," *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 58, no. 28, pp. 12678–12686, 2019.
- [4] S. Sriraman, S. Agarwal, E. S. Aydil, and D. Maroudas, "Mechanism of hydrogen-induced crystallization of amorphous silicon," *Nature*, vol. 418, no. 6893, pp. 62–65, 2002.
- [5] J. É. Bourée and P. Roca i Cabarrocas, "Cellules solaires en couches minces à base de silicium," *Reflats de la physique*, no. 6, pp. 12–15, 2007.
- [6] M. I. Kabir, S. A. Shahahmadi, V. Lim, S. Zaidi, K. Sopian, and N. Amin, "Amorphous silicon single-junction thin-film solar cell exceeding 10% efficiency by design optimization," *International Journal of Photoenergy*, vol. 2012, Article ID 460919, 7 pages, 2012.
- [7] M. K. Hossain, "Hydrogenated amorphous silicon-based thin film solar cell: optical, electrical and structural properties," *Advanced Materials Research*, vol. 1116, pp. 59–64, 2015.
- [8] M. A. Green, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, and A. W. Ho-Baillie, "Solar cell efficiency tables (version 54)," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 27, no. 7, pp. 565–575, 2019.
- [9] C. Iliescu, B. Chen, D. P. Poenar, and Y. Y. Lee, "PECVD amorphous silicon carbide membranes for cell culturing," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 129, no. 1, pp. 404–411, 2008.
- [10] X. Zhang, A. Cuevas, B. Demareux, and S. De Wolf, "Sputtered hydrogenated amorphous silicon for silicon heterojunction solar cell fabrication," *Energy Procedia*, vol. 55, pp. 865–872, 2014.
- [11] J. Plá, E. Centurioni, C. Summonte et al., "Homojunction and heterojunction silicon solar cells deposited by low temperature-high frequency plasma enhanced chemical vapour deposition," *Thin Solid Films*, vol. 405, no. 1-2, pp. 248–255, 2002.
- [12] T. Shimizu, "Staebler-Wronski effect in hydrogenated amorphous silicon and related alloy films," *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 43, no. 6A, pp. 3257–3268, 2004.
- [13] E. L. Salabaş, A. Salabaş, B. Mereu et al., "Record amorphous silicon single-junction photovoltaic module with 9.1% stabilized conversion efficiency on 1.43 m²," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 24, no. 8, pp. 1068–1074, 2016.
- [14] M. Stuckelberger, A. Billet, Y. Riesen et al., "Comparison of amorphous silicon absorber materials: kinetics of light-induced degradation," *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 24, no. 4, pp. 446–457, 2016.
- [15] T. Pu, H. Shen, and Q. Tang, "Simulation of a charged Al₂O₃ film as an assisting passivation layer for a-Si passivated contact P-type silicon solar cells," *Silicon*, 2021.
- [16] K. Decock, S. Khelifi, and M. Burgelman, "Modelling multivalent defects in thin film solar cells," *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 21, pp. 7481–7484, 2011.
- [17] M. Burgelman, K. Decock, A. Niemegeers, J. Verschraegen, and S. Degraeve, *SCAPS Manual. Version: 23 January 2018*, 2018.
- [18] B. P. Rand, J. Genoe, P. Heremans, and J. Poortmans, "Solar cells utilizing small molecular weight organic semiconductors,"

- Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 15, no. 8, pp. 659–676, 2007.
- [19] C. H. Hsu, X. Y. Zhang, H. J. Lin, S. Y. Lien, Y. S. Cho, and C. S. Ye, “Numerical simulation of crystalline silicon heterojunction solar cells with different p-type a-SiO_x window layer,” *Energies*, vol. 12, no. 13, p. 2541, 2019.
- [20] J. Park, V. A. Dao, C. Shin et al., “A buffer-layer/a-SiO_x:H(p) window-layer optimization for thin film amorphous silicon based solar cells,” *Thin Solid Films*, vol. 546, pp. 331–336, 2013.
- [21] K. Hayashi, M. Kondo, A. Ishikawa, and H. Yamagisi, “ZnO-Ag sputtering deposition on a-Si solar cells,” in *Proceedings of 1994 IEEE 1st World Conference on Photovoltaic Energy Conversion-WCPEC (A Joint Conference of PVSC, PVSEC and PSEC)*, pp. 674–677, Waikoloa, HI, USA, 1994.
- [22] W. H. Kouider and A. Belfar, “Window layer thickness effect on amorphous silicon oxide solar cell performances,” *Journal: Algerian Journal of Renewable Energy and Sustainable Development*, vol. 2, no. 1, pp. 67–74, 2020.
- [23] N. Dwivedi, S. Kumar, S. Singh, and H. K. Malik, “Oxygen modified diamond-like carbon as window layer for amorphous silicon solar cells,” *Solar Energy*, vol. 86, no. 1, pp. 220–230, 2012.
- [24] P. Chelvanathan, M. I. Hossain, and N. Amin, “Performance analysis of copper-indium-gallium-diselenide (CIGS) solar cells with various buffer layers by SCAPS,” *Current Applied Physics*, vol. 10, no. 3, pp. S387–S391, 2010.
- [25] R. Lachaume, *Contribution à la caractérisation électrique et à la simulation numérique des cellules photovoltaïques silicium à hétérojonction*, [Ph.D. thesis], Grenoble, 2014.
- [26] S. De Wolf, A. Descoedres, Z. C. Holman, and C. Ballif, “High-efficiency silicon heterojunction solar cells: a review,” *Green*, vol. 2, no. 1, pp. 7–24, 2012.
- [27] R. V. K. Chavali, J. R. Wilcox, B. Ray, J. L. Gray, and M. A. Alam, “Correlated nonideal effects of dark and light I–V characteristics in a-Si/c-Si heterojunction solar cells,” *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 4, no. 3, pp. 763–771, 2014.
- [28] J. S. Park, S. Kim, Z. Xie, and A. Walsh, “Point defect engineering in thin-film solar cells,” *Nature Reviews Materials*, vol. 3, no. 7, pp. 194–210, 2018.
- [29] M. Rahmouni and S. Belarbi, “Defect pool numerical model in amorphous semiconductor device modeling program,” *Journal of Nano-and Electronic Physics*, vol. 11, no. 2, pp. 02008-1–02008-5, 2019.
- [30] T. Ouslimane, L. Et-Taya, L. Elmaimouni, and A. Benami, “Impact of absorber layer thickness, defect density, and operating temperature on the performance of MAPbI₃ solar cells based on ZnO electron transporting material,” *Heliyon*, vol. 7, no. 3, article e06379, 2021.
- [31] A. Ghahremani and A. E. Fathy, “High efficiency thin-film amorphous silicon solar cells,” *Energy Science & Engineering*, vol. 4, no. 5, pp. 334–343, 2016.
- [32] A. Teyou Ngoupo, S. Ouédraogo, and J. M. Ndjaka, “Numerical analysis of interface properties effects in CdTe/CdS:O thin film solar cell by SCAPS-1D,” *Indian Journal of Physics*, vol. 93, no. 7, pp. 869–881, 2019.
- [33] O. Astakhov, V. Smirnov, R. Carius et al., “Relationship between absorber layer defect density and performance of a-Si:H and μc-Si:H solar cells studied over a wide range of defect densities generated by 2 MeV electron bombardment,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 129, pp. 17–31, 2014.
- [34] G. M. Tcheum, A. T. Ngoupo, S. Ouédraogo, N. Guirdjebaye, and J. M. B. Ndjaka, “Numerical analysis of ultrathin Cu(In,Ga)Se₂ solar cells with Zn(O,S) buffer layer,” *Pramana*, vol. 94, no. 1, pp. 1–10, 2020.
- [35] D. Rached and W. L. Rahal, “Investigation of the interface defect density at pm-Si:H/c-Si and the surface recombination speeds on silicon heterojunction solar cells,” *Optik*, vol. 223, article 165575, 2020.
- [36] B. Zhou, X. Yin, J. Zhang et al., “Numerical simulation of an innovative high efficiency solar cell with CdTe/Si composite absorption layer,” *Optical Materials*, vol. 110, article 110505, 2020.



Theoretical simulation of a-Si:H-based $p-i-n$ ultrathin-film solar cell using ZnO as a back reflector layer (BRL) via SCAPS-1D

Ariel Teyou Ngoupo¹ · François Xavier Abomo Abega¹ · Aimé Magloire Ntougua Abena¹ · Jean-Marie Bienvenu Ndjaka¹

Received: 1 September 2022 / Accepted: 7 November 2022
© The Author(s), under exclusive licence to Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2022

Abstract

Hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) is a promising material for low-cost photovoltaic technology. In this study, different optimization processes were used to investigate the best $p-i-n$ configuration of the a-Si:H-based ultrathin-film solar cells using SCAPS-1D software. $J-V$ characteristics of the solar cell with different BRL materials (ITO, IGZO, ZnO, PCBM, TiO₂, and CdS:O) were designed, simulated, and compared. Thus, the solar cell with ZnO BRL material achieves the best efficiency of 17.65%. By varying the charge carrier lifetime of the absorber (i -layer), we have seen how p - and n -layers regulate the performance of the a-Si:H-based ultrathin-film solar cell; the results show that the p -(a-Si:H) buffer layer must be thicker than the p -(a-SiOx:H) window layer. Furthermore, these improvements have resulted in an efficiency of 21.38% and a temperature coefficient of $-0.191\%/^{\circ}\text{C}$ for the Glass/ p -(a-SiOx:H)/ p -(a-Si:H)/ i -(a-Si:H)/ n^+ -(a-Si:H)/ZnO/Al architecture of the a-Si:H-based ultrathin-film solar cell.

Keywords Hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) · Window layer thickness · ZnO layer · Doping · Numerical approach · SCAPS-1D

1 Introduction

Extensive research of alternative solar materials to silicon has become a necessity as industries need high efficiency solar cells with low production cost, due to the high cost of silicon-based solar cells [1, 2]. Thus, in recent years, hydrogenated amorphous silicon [3–6] and crystalline silicon [2, 7–12] solar cells have been widely studied, both experimentally and theoretically. Hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) is the improved form of amorphous silicon (a-Si). PECVD is the most successful and low-cost method for the fabrication of single-junction a-Si:H solar cells [3]. The certified efficiency of 10.2% [13] of an amorphous silicon solar cell is still below the limit calculated by the Shockley–Queisser theory. The simulated results of an optimized a-Si:H-based solar cell with a p -nc-Si:H window layer, double p -nc-SiOx:H window layer, and p -a-SiOxCy:H window layer demonstrated a conversion efficiency of 12.93% [14],

10.21% [6], and 10.70% [15], respectively, which are also below the Shockley–Queisser limit. Thus, various techniques are generally used to overcome this low efficiency. Kim et al. [16], Banerjee C. et al. [17], Banerjee S. et al. [5] have used light trapping schemes, with a back reflector layer (BRL) introduced between the cell and the back metal contact, in their experimental work to achieve longer light paths in the absorbing film and increase the light absorption capacity and conversion efficiency. In the case of Banerjee S. et al. [5], an efficiency of 10.58% is achieved using a non-conventional indium tin oxide (spherical Ag₂S nanoparticles in indium tin oxide (ITO) matrix) as BRL. However, the ITO material used in this work contains indium, which is a resource-limited material with low toxicity. This material also has poor energy band alignment with the collector layer and back metal contact. In mass production, there may be an indium supply problem and the cost may rise suddenly [18]. It is therefore necessary to find an alternative material with good properties that can replace ITO BRL.

More research is still needed to understand the physics of the devices, and simulation studies provide a practical way to do so in order to improve the conversion efficiency [19]. In this simulation work using SCAPS-1D software, a

✉ Ariel Teyou Ngoupo
arieltyou@yahoo.fr

¹ Faculté des Sciences, Département de Physique, Université de Yaoundé 1, BP 812, Yaoundé, Cameroun

comparative study on a-Si:H-based ultrathin-film solar cells is carried out with different back reflector layers and solar cell electrical parameters are analyzed taking into account the window layer thickness, different properties of n -(a-Si:H) and buffer layers, and the operating temperature. To the best of our knowledge, only ITO material has been used as a back reflector in numerical simulation studies [20]. The main objective of this work is to propose a p - i - n configuration of the a-Si:H-based ultrathin-film solar cell without toxic BRL material and with high and stable efficiency. Our results show that by using ZnO as BRL material, in Glass/ p -(a-SiO_x:H)/ p -Buffer layer/ i -(a-Si:H)/ n^+ -(a-Si:H)/BRL/Al cell, a high conversion efficiency of 21.38% ($J_{SC} = 19.03$ mA/cm², $V_{OC} = 1.252$ V, and $FF = 89.75\%$) is obtained. This result is a significant contribution to the improvement in the performance of the a-Si:H-based solar cell.

2 Modeling software and solar cell structure

2.1 Numerical modeling

Solar cell simulation is a basic method used to design and to analyze various phenomena present in solar cells [3]. Since semiconductor is the basic element of solar cell, solar cell simulation software is designed to solve its basic equations which we can find in the literature [21, 22]. In this work, SCAPS-1D software is used to do all numerical simulations, and it allows to have simulation results in agreement with experience [20]. It was developed at the University of Gent in Belgium [23]. The flow chart of the numerical solution of SCAPS-1D is given by Salem et al. [24] in their work. SCAPS-1D uses the analytical physics of the solar cell devices including transport

mechanism, individual carrier current density, electric field distribution, and recombination profile [1].

2.2 Architecture and materials physical parameters

2.2.1 Architecture of the devices

The solar cell performance improvement depends on different properties and the arrangement of the layers in the structure. Figure 1 depicts different structures of a-Si:H-based solar cells used in this work. Figure 1.a shows the structure of the ultrathin-film solar cell described and investigated by Abomo et al. [20], and Fig. 1.b shows the schematic diagram of our proposed p - i - n configuration for high performance. Therefore, BRL acts as an electrode to the n -type photodiode layer and increases the optical absorption and carrier collection [5].

2.2.2 SCAPS-1D input parameters

By considering the effect of BRL material in the management of light absorbed, the reflection rate at the rear contact is set at 75% in this work; the optical absorption model applied for different BRL materials (IGZO, PCBM, CdS:O, and TiO₂) is given by Eq. 1, and the other layers use the default SCAPS-1D optical files.

$$\alpha(\lambda) = A_{\alpha} \sqrt{(h \times \nu) - E_g} \quad (1)$$

where α is the optical absorption coefficient, E_g represents the bandgap, λ is the wavelength, h is the Plank's constant, ν is the frequency, $h \times \nu$ is the incident light energy, A_{α} (cm⁻¹. eV^{-1/2}) is the parameter of the model in SCAPS-1D.

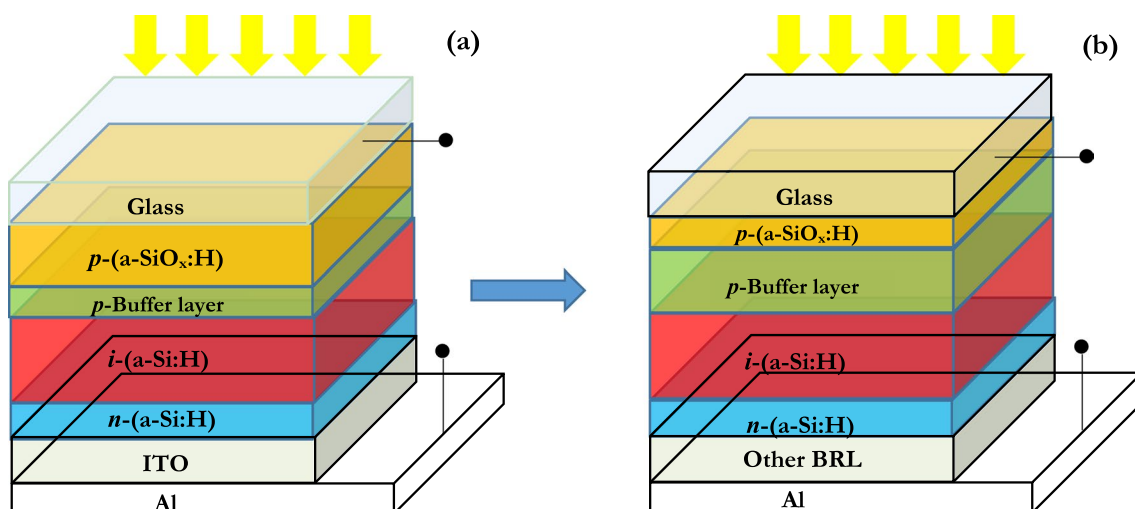


Fig. 1 Schematic diagram of a-Si:H-based solar cells: **a** a-Si:H-based ultrathin-film solar cell [20]; **b** proposed a-Si:H-based solar cell for high performance

The minority carrier diffusion length in a-Si:H layer is relatively short (~ 100 nm) [25, 26], and it is related to the lifetime by Eq. 2. The charge carrier lifetime is calculated using Eq. 3, and the impact of this parameter on the solar cell performance will be studied in this work.

$$L = \sqrt{D \times \tau} \tag{2}$$

$$\tau = 1 / (N_t \times \sigma \times v_{th}) \tag{3}$$

where L is the carrier diffusion length, D is the diffusion coefficient of electron/hole, τ is the carrier lifetime, N_t is the bulk defect density, σ is the capture cross section of the electron/hole, and v_{th} is the thermal velocity of electron/hole, respectively.

Table 1 gives the parameters of the front and back contacts, and the input parameters of each layer used in this numerical simulation are given in Table 2; these data are taken from the literature [5, 20, 27–29] and the others are reasonable estimates to allow the convergence of different solar cell structures. All defects present in each layer are located at the middle of the bandgap. The thermal velocities are 2×10^7 , 10^6 , and 10^7 cm/s, respectively, in the ITO BRL material, the buffer and absorber layers, and in the other layers of different cell structures. All simulations on the devices are measured under standard test condition (AM1.5G, 100 mW/cm², and 300 K).

3 Results and discussion

The simulation studies are based on experimental data. Abomo et al. [20] calibrated the simulation against the experimental measurements based on ultrathin a-Si:H-based solar cell [5] to validate the simulation parameters used. In their simulation results, Abomo et al. [20] achieved an efficiency of 12.71% by using 1000 nm of the absorber layer thickness and the ITO material as BRL (Fig. 1.a); this efficiency is still below the Shockley–Queisser limit. In this context, we will analyze and optimize the proposed device by exploring the effect of different BRL materials (see Table 2) and the parameters (thickness, doping) of other layers (window layer, buffer layer, n -layer or collector layer) on the performance of the a-Si:H-based solar cell.

Table 1 Contact parameters

Contact	Electron work function (eV)	S_e (cm/s)	S_h (cm/s)	Reflection rate
Front	Flat bands	10^5	10^7	–
Back	–4.5	10^7	10^5	0.75

3.1 Back reflector layer (BRL) selection

Maximization of light-trapping capability in solar cells is one of the most important aspects of high efficiency [12], and the use of BRL contributes to this trapping. According to Fig. 2 and Table 3, which, respectively, illustrates different J – V characteristics and details the electrical parameters associated with different solar cell structures, the insertion of another BRL (Fig. 1.b and Table 2) has led to an enhancement of V_{OC} and FF ; this observation expresses the correlation between these two electrical parameters (Eq. 4 [30]), and this is mainly due to the reduction in the bulk recombination phenomenon in the solar cell. The best efficiency of 17.65% is obtained by using ZnO as BRL.

$$FF = \frac{v_{oc} - \ln(v_{oc} + 0.72)}{v_{oc} + 1} \quad \text{with} \quad v_{oc} = qV_{oc}/nkT \tag{4}$$

where FF is the fill factor, V_{oc} is the open-circuit voltage, q is the electron charge, n is the diode ideality factor, k is Boltzman’s constant, and T is the absolute temperature.

The band alignment between n -(a-Si:H) (named n -layer) and different BRL is shown in Fig. 3. According to Fig. 3, all BRLs, except ITO, have a relatively good band alignment with the n -layer; so we have obtained an almost constant J_{SC} (Table 3), as expected by Ahmed et al. [31]. The interface states and band offsets (valence ΔE_V and conduction ΔE_C band offsets) are generally present in the solar cells. Furthermore, at the BRL/Al interface, there is a potential barrier (Φ_b) given by Eq. 5. Table 4 summarizes different values of ΔE_C , ΔE_V , and Φ_b obtained for various BRLs used in this work. SCAPS-1D uses the Anderson model (Eq. 6) to calculate band offsets. We can also note that the conduction band offset of all BRLs, except ITO and CdS:O, is less than 0.30 eV; this is suitable to obtain lower recombination [32]. According to Fig. 3, the conduction band of all BRLs is lower than or equal to that of the n -layer; the energy cliff is then formed at the n -layer/BRL interface and no barriers exist for the electron [33]. The low efficiency (12.71%, Table 3) in the case of the solar cell with ITO BRL is due to the high values of the band offsets at the n -layer/ITO interface; in addition, the energy spike and electron barrier are formed at the ITO/Al interface (Fig. 3). All these contribute to increase the photogenerated charge carrier recombination rate in the solar cell with ITO BRL. However, the a-Si:H-based solar cell with ZnO BRL material has the best conversion efficiency of 17.65% (Table 3), due to the high charge carrier mobility of this layer [25] and lower conduction band offset. In addition, zinc oxide (ZnO) also has the characteristics of high electron mobility, nontoxicity, adjustable refractive index [25], and it is now widely used in the relevant industries [34]. Thus, we will use the ZnO layer as BRL

Table 2 Input parameters of SCAPS-1D for different solar cell structures of Fig. 1

Reference	Material layers									
	Window layer	p-Buffer layer	Absorber	Collector	BRL					
	[20]	[20]	[20]	[20]	[20]	[29]	[27]			
Layers properties	p-(a-SiO _x :H)	p-(a-Si:H)	i-(a-Si:H)	n-(a-Si:H)	ITO	IGZO	ZnO	PCBM	TiO ₂	CdS:O
Layer thickness: w (nm)	14.40 [5]	4.0	1000	25	60	60	60	60	60	60
Bandgap: E_g (eV)	1.95	1.80	1.70	1.70	3.65	3.05 [28]	3.30 [28]	2.0 [28]	3.3	2.52
Electron affinity: x (eV)	4.0	3.90	3.90	3.90	4.80	4.16 [28]	4.10	3.90 [28]	3.9	4.3
Dielectric relative permittivity: ϵ_r	9.0	11.9	11.9	11.9	8.9	10.0 [28]	9.0 [28]	3.9 [28]	9.0	10.0
Density of states at conduction band: N_C (cm^{-3})	2.2×10^{18}	10^{20}	10^{20}	10^{20}	5.2×10^{18}	5×10^{18} [28]	4×10^{18}	2.5×10^{21} [28]	10^{19}	2.2×10^{18}
Density of states at valence band: N_V (cm^{-3})	1.8×10^{19}	10^{20}	10^{20}	10^{20}	10^{18}	10^{18}	10^{19}	2.5×10^{21} [28]	10^{19}	1.8×10^{19}
Electron mobility: μ_e ($cm^2/V.s$)	5	50	20	30	50	15 [28]	100	0.2 [28]	20	100
Hole mobility: μ_h ($cm^2/V.s$)	1	10	5	5	25	0.2	25	0.2 [28]	10	25
N_D doping concentration (cm^{-3})	0.0	0.0	10^6	10^{18}	10^{20}	10^{17}	10^{18}	2.93×10^{17} [28]	10^{16}	1.1×10^{18}
N_A doping concentration (cm^{-3})	10^{16}	10^{15}	10^6	0.0	0.0	0.0	10^5	0.0	0.0	0.0
<i>Bulk defects properties</i>										
Defect density and type: N_i (cm^{-3})	10^{15} (N)	10^{14} (D)	10^{15} (A)	10^{16} (A)	10^{19} (D)	10^{15} (A) [28]	2×10^{17} (D)	10^{15} (D) [28]	10^{15} (D)	10^{14} (D)
Capture cross-section electrons: σ_e (cm^2)	3.5×10^{-12}	10^{-14}	8.5×10^{-10}	1.5×10^{-13}	10^{-16}	2×10^{-14}	10^{-15}	10^{-15}	2×10^{-14}	2×10^{-14}
Capture cross-section holes: σ_h (cm^2)	10^{-12}	10^{-14}	1.35×10^{-10}	1.5×10^{-12}	10^{-15}	2×10^{-14}	10^{-15}	10^{-15}	2×10^{-14}	2×10^{-14}
<i>p-Buffer layer/absorber interface properties</i>										
Defect density and type: D_i (cm^{-2})	10^{10} (a)									
Capture cross-section electrons: σ_e (cm^2)	10^{-15}									
Capture cross-section holes: σ_h (cm^2)	10^{-15}									

“(A),”“(D),” and “(N)” stand for deep acceptor, donor, and neutral defects, respectively, while “(a)” is an acceptor interface defect

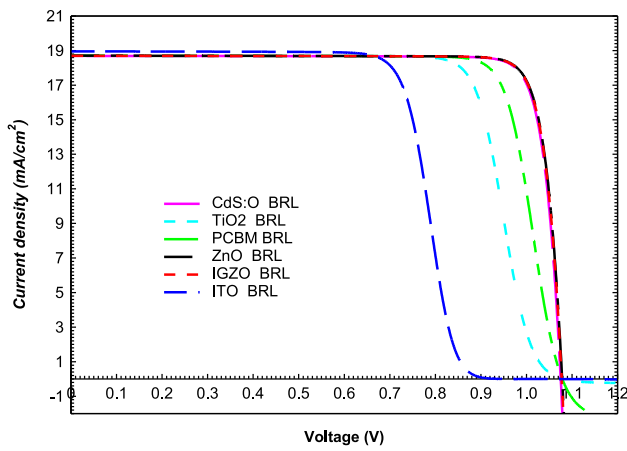
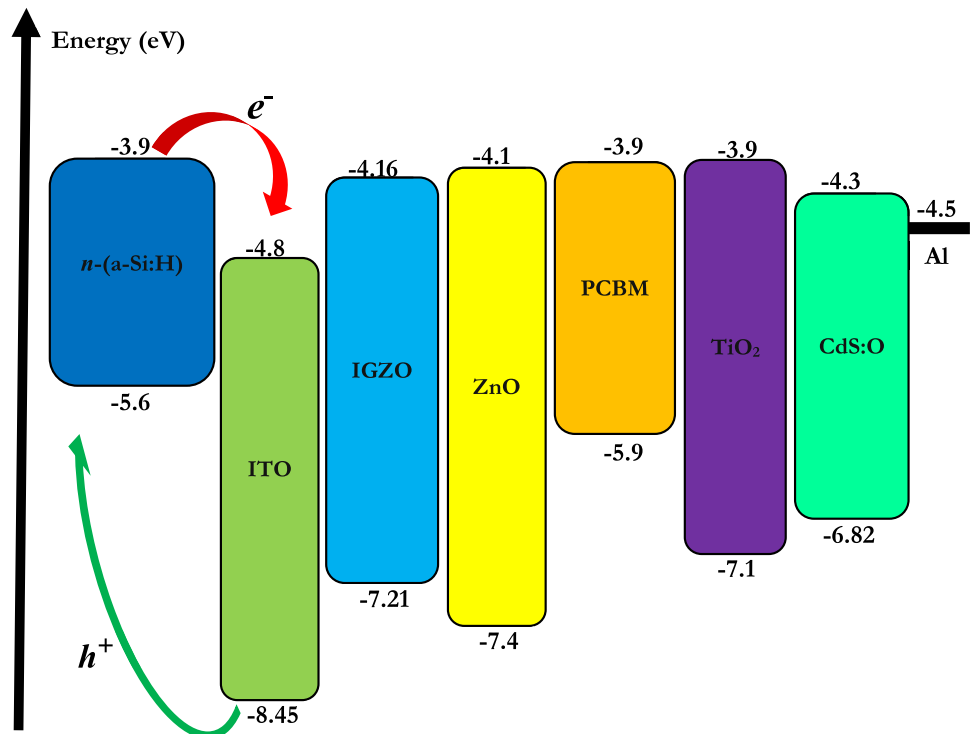


Fig. 2 Effect of different BRLs on J - V characteristics of a-Si:H-based ultrathin-film solar cells

Table 3 Comparison of solar cell electrical parameters with different BRLs

Electrical parameter	Cell with ITO BRL [20]	Cell with IGZO BRL	Cell with ZnO BRL	Cell with PCBM BRL	Cell with TiO ₂ BRL	Cell with CdS:O BRL
J_{SC} (mA/cm ²)	18.95	18.70	18.71	18.70	18.71	18.70
V_{OC} (V)	0.941	1.077	1.078	1.079	1.079	1.075
FF (%)	71.28	87.50	87.50	81.96	76.43	87.46
$Efficiency$ (%)	12.71	17.63	17.65	16.54	15.43	17.58

Fig. 3 Bandgap diagram at the n -layer/BRL and BRL/Al interfaces for a-Si:H-based ultrathin-film solar cell with different BRLs



material and as an optical buffer between the metal and the semiconductor [35] in our further simulations in this work.

$$\Phi_b = MWF - \chi_{BRL} \tag{5}$$

where Φ_b is the potential barrier; MWF and χ_{BRL} represent the metal work function of the back contact and the BRL electron affinity, respectively.

$$\Delta E_C = \Delta\chi(a); \Delta E_V = \Delta E_g - \Delta E_C(b) \tag{6}$$

where ΔE_C and ΔE_V represent the conduction and valence band offsets, respectively, $\Delta\chi$ is the difference between the electron affinities of two adjacent semiconductors, ΔE_g is the difference between the bandgaps of two adjacent semiconductors.

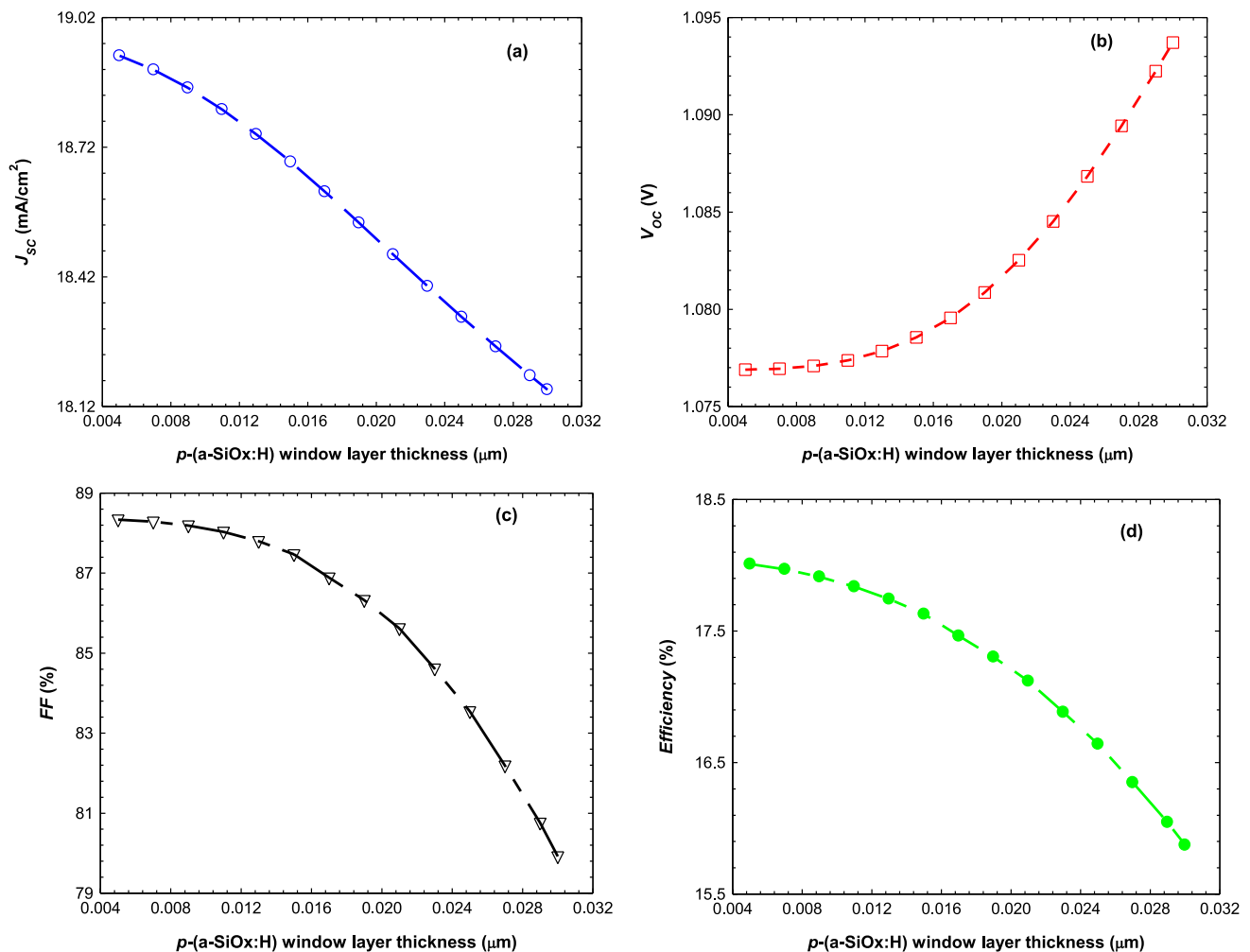
Table 4 Values of ΔE_C , ΔE_V , and Φ_b for different a-Si:H-based ultrathin-film solar cell structures

Parameter	Cell with ITO BRL	Cell with IGZO BRL	Cell with ZnO BRL	Cell with PCBM BRL	Cell with TiO ₂ BRL	Cell with CdS:O BRL
ΔE_C	0.90	0.26	0.20	0.0	0.0	0.40
ΔE_V	2.85	1.61	1.80	0.30	1.60	1.22
Φ_b	0.30	-0.34	-0.40	-0.60	-0.60	-0.20

3.2 Effect of window layer thickness

Estimating the layer thickness is a fundamental and crucial process for the design of a high efficiency solar cell [1]. A very thick window layer makes it difficult to filter the light and increases the parasitic absorption in the solar cell. Figure 4 shows the influence of the p -(a-SiOx:H) window layer thickness on the electrical parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF , and $Efficiency$) of the cell; the thickness varies between

5 and 30 nm. These curves are in agreement with those obtained by Kouider et al. [36] and Mehmood et al. [14] in the case of a-SiOx:H and a-Si:H solar cells, respectively. We can observe that J_{SC} (Fig. 4.a) and FF (Fig. 4.c) slightly decrease, while the V_{OC} (Fig. 4.b) slightly increases with the increasing p -(a-SiOx:H) layer thickness. The decrease in J_{SC} is the consequence of the increase in light trapping (caused by parasitic absorption) for thicker window layers, which contributes to the decrease in the generation rate

**Fig. 4** Variation in the electrical parameters as a function of window layer thickness: **a** J_{SC} , **b** V_{OC} , **c** FF , **d** $Efficiency$

of electron–hole pairs in the solar cell. Furthermore, the decrease in FF is due to the increase in the series resistance of the solar cell, which increases with the thickness of the window layer. The slight increase in the V_{OC} with the p -(a-SiOx:H) window layer thickness is due to the decrease in the recombination rate at the front contact. The *Efficiency* decreases from 18.00% ($J_{SC}=18.93$ mA/cm², $V_{OC}=1.077$ V, $FF=88.32\%$) to 15.87% ($J_{SC}=18.16$ mA/cm², $V_{OC}=1.093$ V, $FF=79.95\%$) when the value of the window layer thickness varies from 5 to 30 nm (Fig. 4.d). This loss can be attributed to the negative response of the increase in the p -(a-SiOx:H) layer thickness on J_{SC} (Fig. 4.a) and FF (Fig. 4.c). To optimize our cell structure, we set the p -(a-SiOx:H) window layer at 5 nm.

3.3 Effect of p-type buffer layer and charge carrier lifetime

3.3.1 Influence of p-type buffer layer thickness and charge carrier lifetime

The thickness of p -type buffer layer should be decreased to as thin as several nanometers. However, if this layer is too thin, the absorber directly contacts the front electrode, leading to electric micro-shunt paths [37]. Figure 5 shows the contour plots of the electrical parameters dependency on i -layer charge carrier lifetime and p -type buffer layer thickness. The photogenerated charge carrier lifetime and p -type buffer layer thickness are changed in the range 0.01 ns to 5 ns and 4 nm to 50 nm, respectively. The results show that

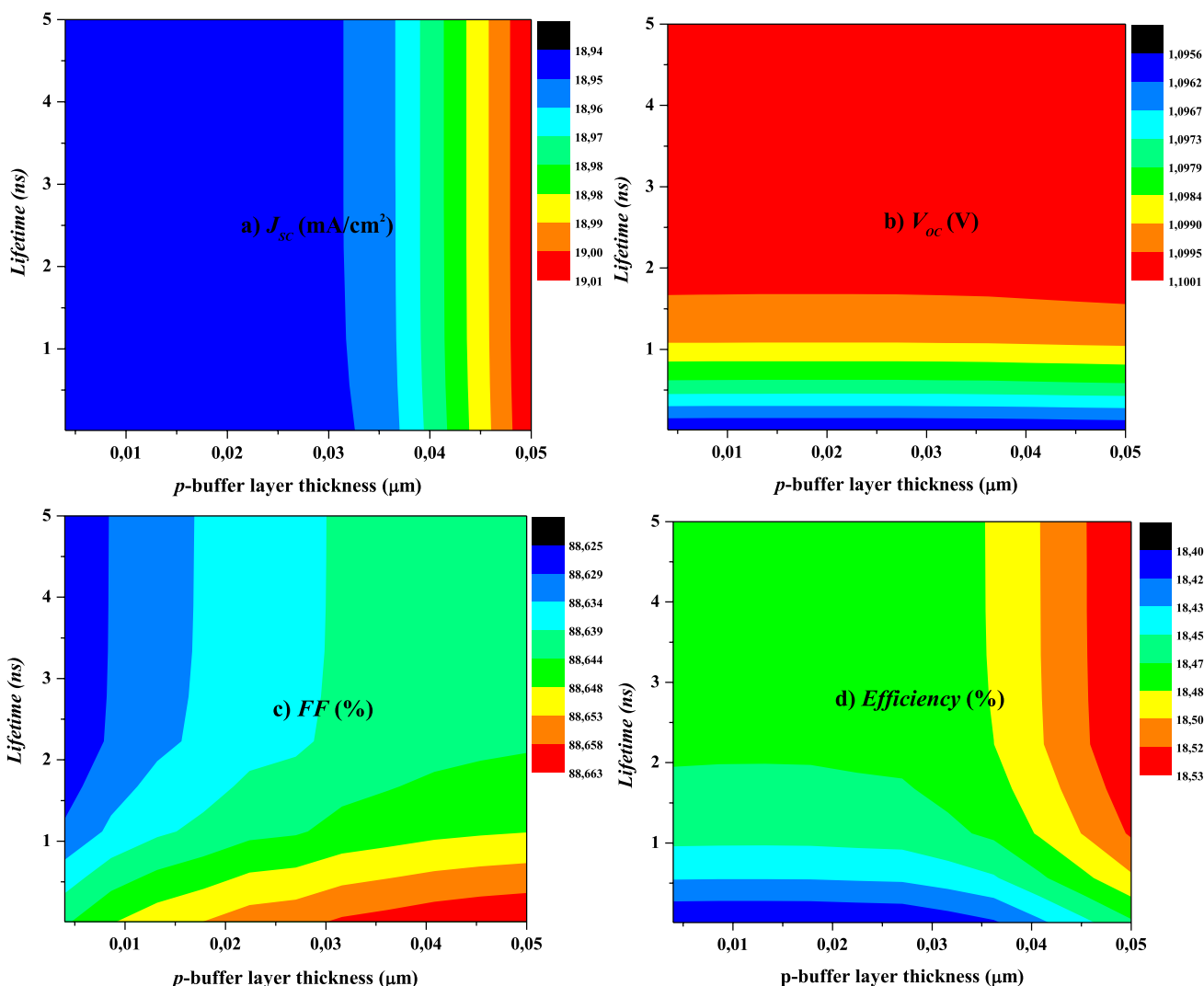


Fig. 5 Contour plot of carrier charge lifetime in absorber versus p -type buffer layer thickness for the electrical parameters of solar cell: **a** J_{SC} , **b** V_{OC} , **c** FF , **d** *Efficiency*

these variations have a very slight influence on the solar cell electrical parameters.

For a charge carrier lifetime fixed, the J_{SC} (Fig. 5.a) slightly increases with increasing buffer layer thickness as the leakage current at the p -buffer layer/ i -layer interface (Eq. 7 [38]) and the front contact decrease. The thickness of the window layer is very low (5 nm), and for a low buffer layer thickness, the recombination rate will be very high and would cause the decrease in J_{SC} . Conversely, for a fixed p -type buffer layer thickness, the J_{SC} is not affected by the increase in the photogenerated charge carrier lifetime; however, the V_{OC} (Fig. 5.b) increases slightly due to the reduction in the recombination phenomenon at the p -buffer layer/ i -layer interface. It is also observed that for a photogenerated charge carrier lifetime greater than or equal to 2 ns, this parameter does not affect the FF for a fixed p -buffer layer thickness (Fig. 5.c). For a charge carrier lifetime less than 2 ns, the FF slightly increases with increasing p -type buffer layer thickness (Fig. 5.c); this is due to the less recombination at the p -buffer layer/ i -layer interface. The current leakage is thus minimized for a slightly thicker p -buffer layer. For a fixed charge carrier lifetime (greater than 1 ns), the solar cell efficiency slightly increases with increasing buffer layer thickness (Fig. 5.d); this is due to the simultaneous increase in J_{SC} and FF . For a p -type buffer layer thickness of 50 nm and a photogenerated charge carrier lifetime greater than 1 ns, the maximum efficiency obtained for the cell under these conditions is approximately 18.53%. For further simulations, the p -type buffer layer thickness is set at 50 nm.

$$J_{SC} = J_{ph} - J_{bulk} - J_{surf} \quad (7)$$

where J_{ph} is the photogenerated current density, J_{bulk} is the current loss due to bulk recombination, and J_{surf} is the current loss due to surface recombination.

3.3.2 Impact of p-type buffer layer acceptor density and charge carrier lifetime

Short carrier lifetime leads to lower V_{OC} in solar cells [39]. Figure 6 depicts the contour plots of the electrical parameters dependency on charge carrier lifetime in i -layer and acceptor density in p -type buffer layer. The photogenerated charge carrier lifetime and the acceptor density of p -type buffer layer are varied from 0.01 to 5 ns and from 10^{16} cm⁻³, respectively. Figure 6 shows that all electrical parameters are not affected by the increase in the acceptor density of p -type buffer layer for giving charge carrier lifetime. Conversely, for a fixed p -type buffer layer acceptor density, the increase in J_{SC} (Fig. 6.a) is mainly due to the increase in the minority carrier diffusion length with the lifetime (Eqs. 8 and 2). The V_{OC} increases with increasing

photogenerated charge carrier lifetime (Fig. 6.b); this can be justified using Eq. 9 [40] and Eq. 2: the increase in J_{SC} and L_e induces that of V_{OC} . These observations are mainly due to the reduction in the bulk recombination phenomenon. The FF decreases with increasing lifetime (Fig. 6.c). The increase in $Efficiency$ (Fig. 6.d) is mainly due to J_{SC} and V_{OC} . For further simulations, the p -type buffer layer acceptor density is set at 10^{14} cm⁻³.

$$J_{SC} = q \cdot G \cdot (L_e + W + L_h) \quad (8)$$

where G is the generation rate, L_e (L_h) is the electron (hole) diffusion length, W is the depletion region width, and q is the electron charge.

$$V_{OC} = \frac{E_g}{q} - \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{q \cdot D_e \cdot N_C \cdot N_V}{J_{SC} \cdot N_A \cdot L_e} \right) \quad (9)$$

where E_g is the bandgap energy, k is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature, N_A is the acceptor concentration, and the other parameters are defined in the second section.

3.4 Effect of n-(a-Si:H) layer and lifetime of charge carriers

3.4.1 Impact of n-layer thickness and charge carrier lifetime

Figure 7 depicts the contour plots of the electrical parameters dependency on charge carrier lifetime in i -layer and n -layer thickness. The photogenerated charge carrier lifetime and the n -layer thickness are varied from 0.01 ns to 5 ns and from 10 to 100 nm, respectively. These variations have a very slight influence on the solar cell electrical parameters. The J_{SC} (Fig. 7.a) decrease with increasing in the n -layer thickness, for a given charge carrier lifetime, is due to the increase in the bulk recombination current (Eq. 7). We observe that V_{OC} (Fig. 7.b) and FF (Fig. 7.c) show the same trends. For n -layer thickness lower than 20 nm, and a fixed photogenerated charge carrier lifetime, V_{OC} (Fig. 7.b), FF (Fig. 7.c), and $Efficiency$ (Fig. 7.d) slightly increase with increasing n -layer thickness; the slightly increase in efficiency is mainly due to the increase in V_{OC} and FF and to the reduction in the recombination rate at the i -layer/BRL interface [41]. Conversely, for an n -layer thickness greater than 70 nm, the slightly decrease in efficiency is mainly due to the decrease in J_{SC} with increasing n -layer thickness. In addition, it is quite clear that the variation in photogenerated charge carrier lifetime and n -layer thickness has not really affected J_{SC} .

For an n -layer thickness of 25 nm and a photogenerated charge carrier lifetime greater than 0.5 ns, the efficiency obtained for the cell is approximately 18.55%

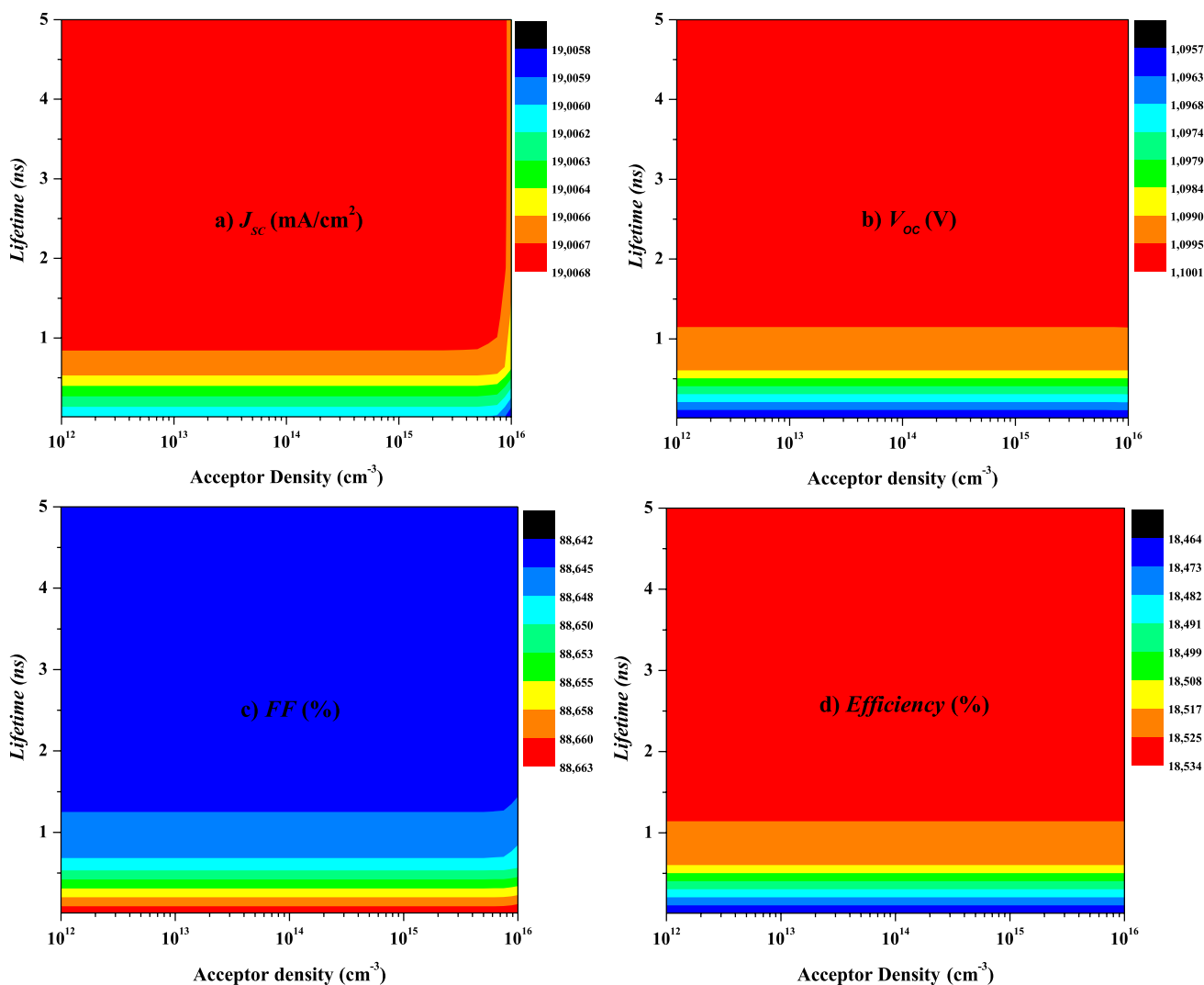


Fig. 6 Contour plot of carriers charge lifetime in absorber versus acceptor density in p -type buffer layer for the electrical parameters: **a** J_{SC} , **b** V_{OC} , **c** FF , and **d** $Efficiency$

($J_{SC} = 19.01$ mA/cm²; $V_{OC} = 1.101$ V; $FF = 88.67\%$). For further simulations, the n -layer thickness is set at 25 nm.

3.4.2 Influence of donor density of n -layer and charge carrier lifetime

Figure 8 depicts the contour plots of the electrical parameters dependency on charge carrier lifetime in i -layer and donor density of n -layer. The photogenerated charge carrier lifetime and the donor density of n -layer are varied from 0.01 to 5 ns and from 10^{19} to 10^{21} cm⁻³, respectively. We observe that the electrical parameters increase with the carrier concentration of n -layer and independent of the charge carrier lifetime in i -layer. Increasing the donor density of n -layer improves the induced electric field in the solar cell (Fig. 9.a), which maximizes the number of photogenerated

electron–hole pair separations in the absorber layer; this reflects the slight improvement in J_{SC} from 18.967 to 19.032 mA/cm², but remains almost unchanged with charge carrier lifetime variation for a given n -layer donor density (Fig. 8.a). The increase in V_{OC} (Fig. 8.b) is due to the combined effects of the increase in J_{SC} (or I_G) and the decrease in recombination rate (Fig. 9.b) or saturation current (I_0) at the back of the cell as shown in Eq. 10 [32]. FF also increases from 86.30 to 89.90% with the increasing of n -layer donor density and independent of the charge carrier lifetime in i -layer (Fig. 8.c). Improvement in $Efficiency$ is observed in Fig. 8.d when the donor density of n -layer increases, which is in agreement with the result of Abdelaziz et al. [32] in the case of electron transport layer (ETL) and hole transport layer (HTL). This observation is the combined effect of growing up of J_{SC} , V_{OC} , and mainly FF .

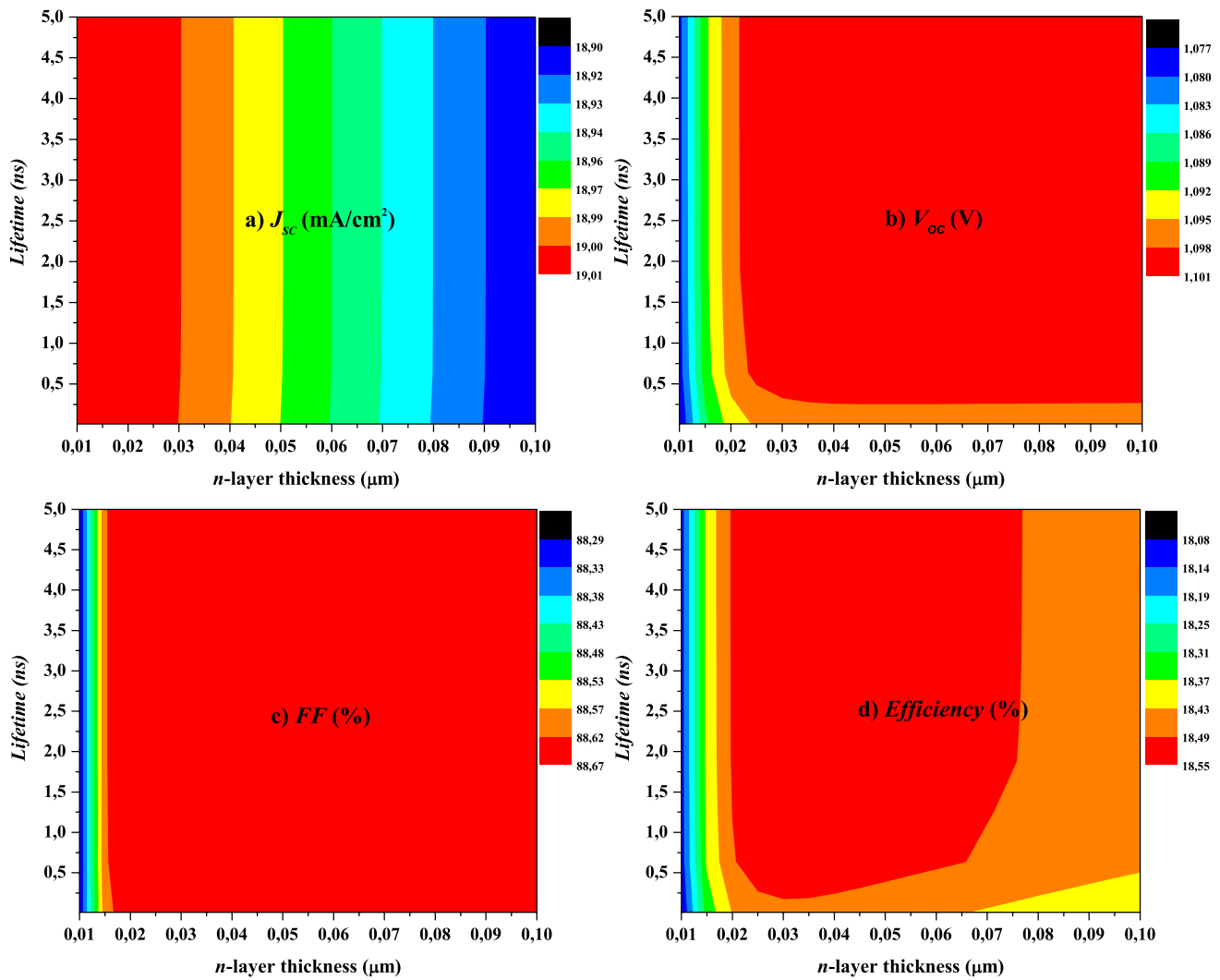


Fig. 7 Contour plot of carrier charge lifetime in absorber versus n -layer thickness for the solar cell electrical parameters: **a** J_{sc} , **b** V_{oc} , **c** FF , and **d** $Efficiency$

$$V_{OC} = n \cdot V_T \cdot \ln \left(1 + \frac{I_G}{I_0} \right) \quad (10)$$

where I_0 is the dark saturation current, n is the diode ideality factor, I_G is the light-generated current, and V_T is the thermal voltage.

For n -layer donor density of 10^{21} cm^{-3} and a photogenerated charge carrier lifetime greater than 1.5 ns, the efficiency obtained for the cell is approximately 21.40%. Thus, the donor density of n -layer is set at 10^{21} cm^{-3} .

3.5 Influence of ZnO BRL

The back reflector layer (BRL), introduced between the cell and the back metal contact, is generally used to manage light through the solar cell. Figure 10 depicts the dependency of the photovoltaic properties (J_{sc} (Fig. 10.a), V_{oc}

(Fig. 10.b), FF (Fig. 10.c), and $Efficiency$ (Fig. 10.d)) of cell on the donor concentration and thickness of the ZnO BRL. The carrier concentration and ZnO layer thickness varied between 10^{12} and 10^{21} cm^{-3} and 10 nm and 100 nm, respectively. It is seen from Fig. 10 that all these photovoltaic properties almost did not really change whatever the carrier concentration and the thickness of the ZnO BRL. To save material and manufacturing cost, we set the thickness and donor concentration of the ZnO BRL to 10 nm and 10^{18} cm^{-3} , respectively.

3.6 Comparison of results

The J - V characteristics and electrical parameters of the a-Si:H-based solar cell before and after optimization are presented in Fig. 11 and Table 5, respectively. These results are performed with a p -(a-SiOx:H) window layer

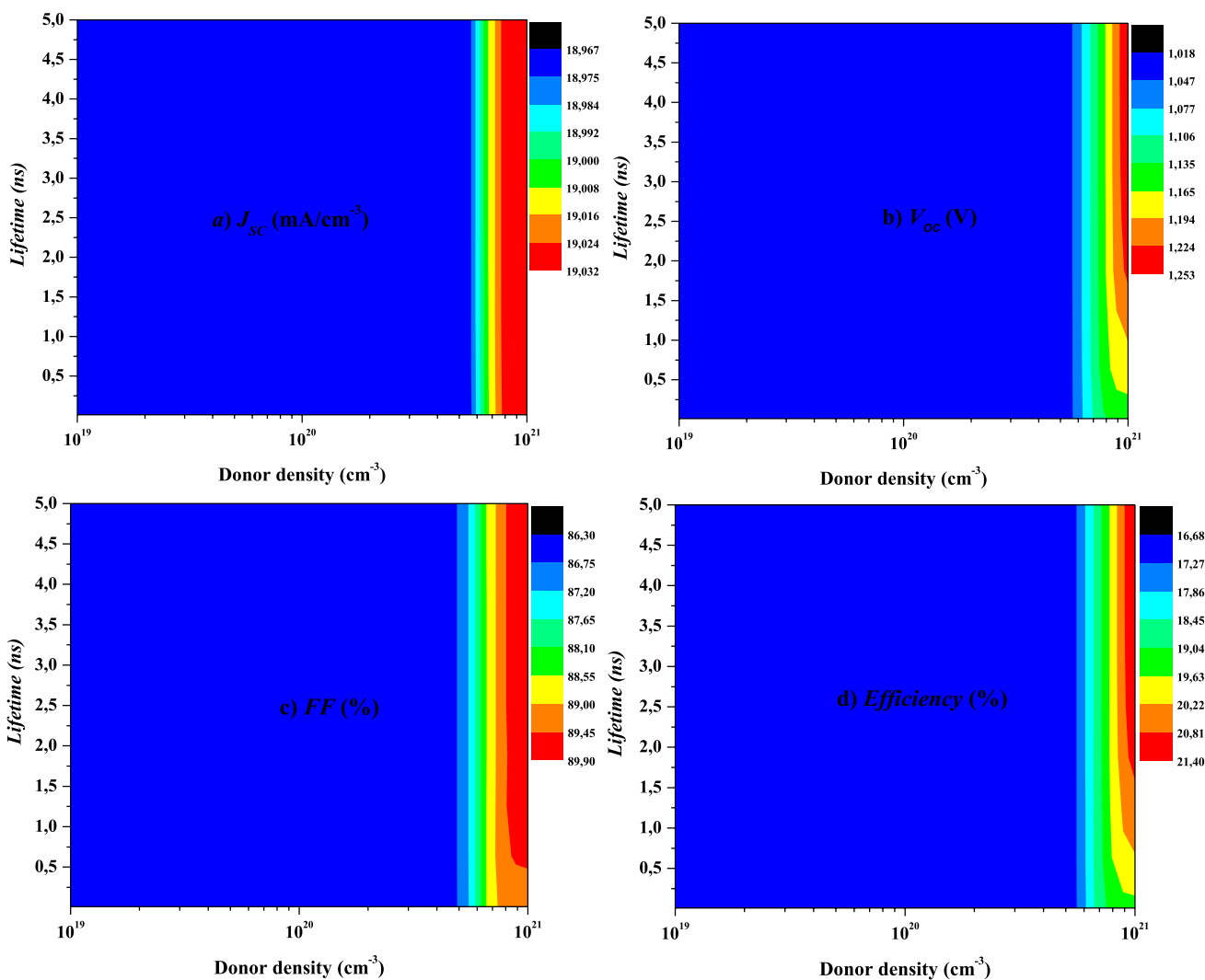


Fig. 8 Contour plot of carrier charge lifetime in absorber versus donor density of *n*-layer for the solar cell electrical parameters: **a** J_{SC} , **b** V_{OC} , **c** FF , and **d** $Efficiency$

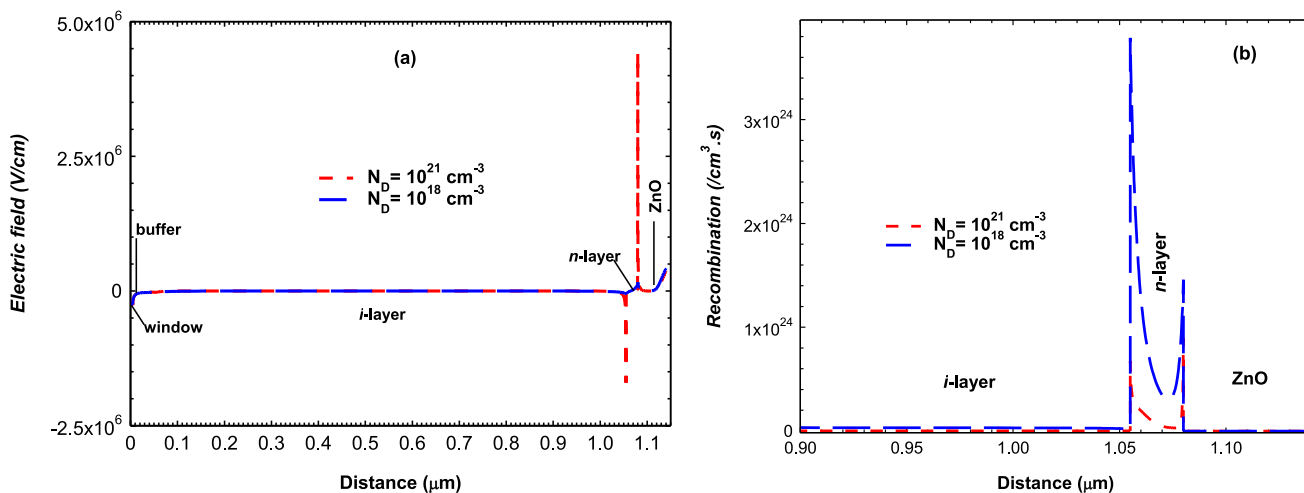


Fig. 9 Effects of *n*-layer doping on **a** the electric field and **b** recombination phenomenon in the solar cell

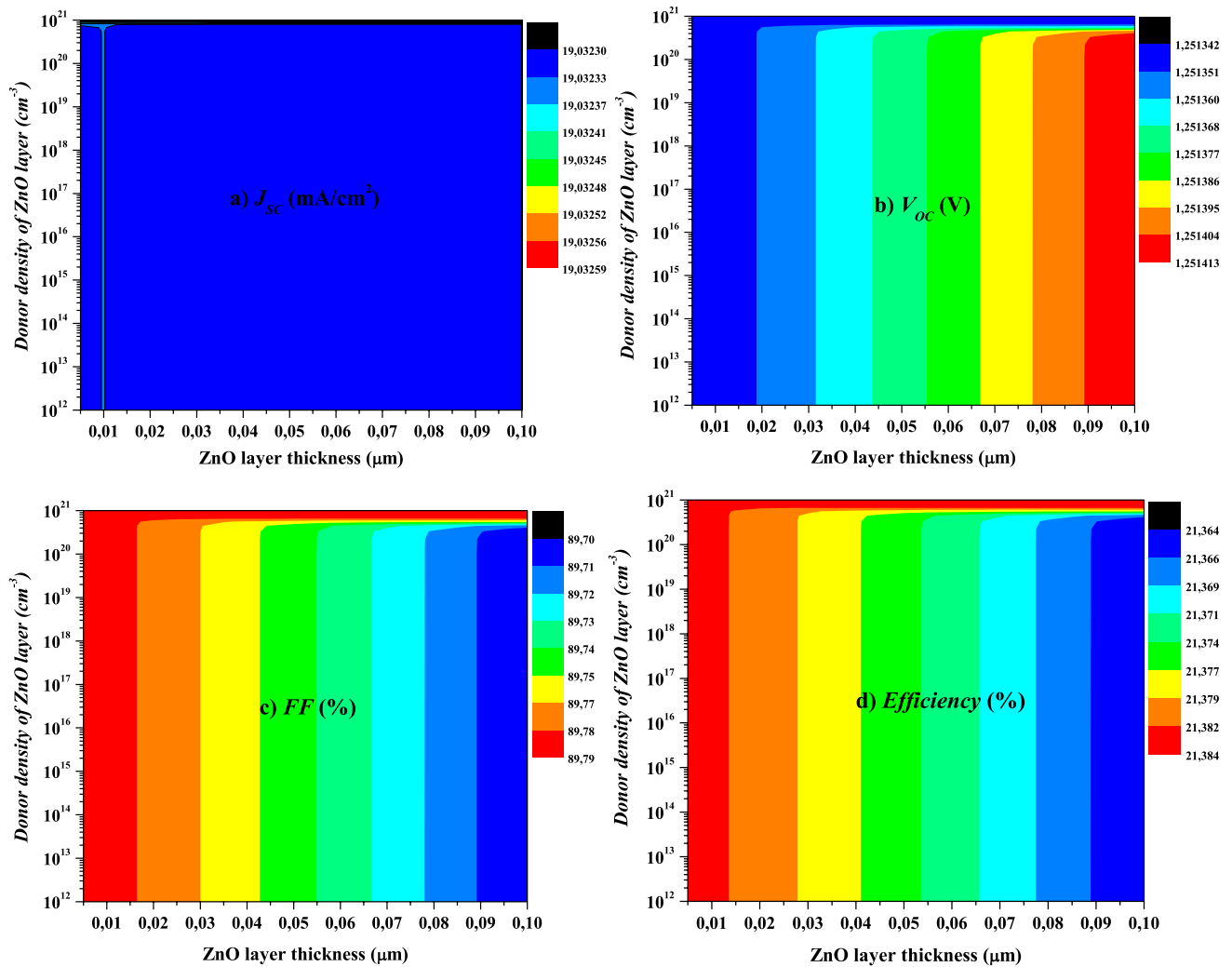


Fig. 10 Cell performance dependency on the donor concentration and thickness of the ZnO BRL: **a** J_{sc} , **b** V_{oc} , **c** FF , and **d** $Efficiency$

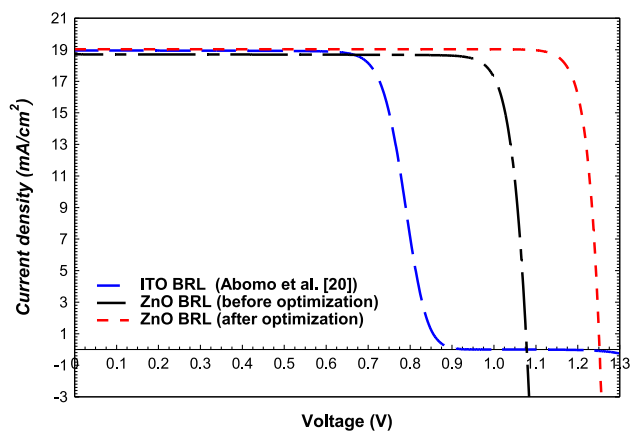


Fig. 11 J - V characteristics comparison of the a-Si:H-based solar cell before and after optimization

thickness of 5 nm, a thickness of 50 nm and an acceptor density of $1 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ for the p -buffer layer (p -(a-Si:H)), a thickness of 25 nm and a donor density of $1 \times 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ for the n -(a-Si:H) layer, as well as with a thickness of 10 nm and a donor density of $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ for ZnO BRL; these are the best values obtained in this numerical simulation. Table 5 also represents the comparison of the electrical parameters of the proposed optimized a-Si:H-based solar cell with other simulation works in the literature. It can be seen that the proposed device demonstrates good efficiency, mainly due to the high V_{oc} and FF resulting from: (i) the use of zinc oxide (ZnO) as BRL, which exhibits relatively good energy band alignment with the collector layer and the back metal contact (aluminum); (ii) the use of a buffer layer thicker than the window layer; (iii) and a heavily doped n -(a-Si:H) layer (n^+ -layer).

Table 5 Electrical parameters of the a-Si:H solar cell before and after optimization, and comparison with other simulation results

Solar cell structure	Electrical parameters				Reference
	J_{SC} (mA/cm ²)	V_{OC} (V)	FF (%)	$Efficiency$ (%)	
Glass/p-(a-SiOx:H)/p-Buffer layer/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/ZnO/Al (after optimization)	19.03	1.252	89.75	21.38	This work
Glass/p-(a-SiOx:H)/p-Buffer layer/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/ZnO/Al (before optimization)	18.71	1.078	87.50	17.65	This work
Glass/p-(a-SiOx:H)/p-Buffer layer/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/ITO/Al	18.95	0.973	68.86	12.71	[20]
ITO/p-(nc-SiOx:H)/p-(nc-SiOx:H)/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/metal	13.80	0.934	79.10	10.21	[6]
p^+ -(a-SiOxCy:H)/p-(a-SiOxCy:H)/i-(a-Si:H)/n-(nc-SiOx:H)/n-(nc-SiOx:H)	17.00	0.885	70.80	10.70	[15]
p^+ -(a-SiOx:H)/p-(a-SiOx:H)/i-(a-Si:H)/n-(nc-SiOx:H)/n-(nc-SiOx:H)	16.10	0.886	71.60	10.20	[15]
ZnO/p-(a-Si:H)/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/Ag/Al	9.97	0.910	75.72	6.86	[42]
ITO/p-(nc-Si:H)/i-(a-Si:H)/i-(a-Si:H)/n-(a-Si:H)/Al	21.70	0.865	69.00	12.93	[14]

3.7 Influence of the operating temperature

In general, solar cells are exposed to an environment where the temperature varies between 288 and 323 K [22]. Increasing the operating temperature affects the material’s carrier concentration, absorption coefficients, band gaps, electron and hole mobility, thermal velocity, diffusion coefficient, and all their derivatives [23, 43]. Thus, temperature-dependent performance is studied to let solar cells work under optimum conditions [44]. This temperature-dependent performance affects the semiconductor bandgap as shown by Eq. 11 [45], and on the other hand, increasing temperature results in increased internal carrier recombination rates [46]. SCAPS-1D is used to analyze temperature-dependent performance of an optimized a-Si:H-based ultrathin-film solar cell.

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha \cdot T^2}{(T + \beta)} \tag{11}$$

where $E_g(T)$ is the semiconductor bandgap at temperature T , T is the absolute temperature, $E_g(0)$ is the bandgap value at $T \approx 0$ K, α and β are constants that characterize the semiconductor material.

As shown in Fig. 12, the temperature ranges from 298 to 333 K (25 to 60 °C); an increase in environmental temperature reduces $Efficiency$, V_{OC} , FF , and slightly increases J_{SC} . The simulation results obtained are in agreement with those of Krajangsang et al. [2] and Sameera et al. [46]. The temperature coefficient (TC) value can be expressed as given by Eq. 12 [2]. The proposed a-Si:H-based ultrathin-film solar cell with high efficiency shows the temperature gradient of 0.0005%/°C, $-0.146\%/^{\circ}C$, $-0.046\%/^{\circ}C$, and $-0.191\%/^{\circ}C$ for J_{SC} , V_{OC} , FF , and $Efficiency$, respectively.

$$TC(part/^{\circ}C) = \frac{1}{Z} \times \left(\frac{\delta Z}{\delta T} \right) \Bigg|_{T_n} \tag{12}$$

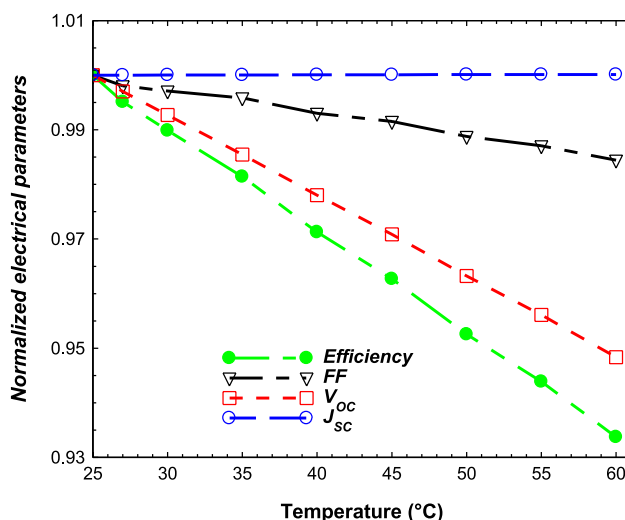


Fig. 12 Operating temperature dependence of the normalized electrical parameters of the a-Si:H-based solar cell

where Z means the solar cell parameters (J_{SC} , V_{OC} , FF , and $Efficiency$); T_n is a normalization temperature set at 25 °C in this work.

V_{OC} decreases with increasing temperature due to the increased recombination process [46, 47]. J_{SC} increases slightly with temperature due to the decreasing bandgap (Eq. 9), and more photons have enough energy to create photogenerated carriers [47]; moreover, J_{SC} is related to the conductivity which increases with temperature via Eq. 13. V_{OC} and FF are related (Eq. 4); the decrease in V_{OC} leads to FF reduction. Finally, the decrease in $Efficiency$ is due to the combined effect of decreasing V_{OC} and FF , despite the slight increase in J_{SC} .

$$\sigma = A \exp(-B/T) \tag{13}$$

where σ is the conductivity of the semiconductor, T is the absolute temperature, A and B are constants that characterize the semiconductor material.

4 Conclusion

In summary, in this work, we firstly investigated the effect of different BRLs (ITO, IGZO, ZnO, PCBM, TiO₂, and CdS:O) on the performance of the a-Si:H-based ultrathin-film solar cell in Glass/*p*-(a-SiOx:H)/*p*-Buffer layer/*i*-(a-Si:H)/*n*-(a-Si:H)/BRL/Al configuration, using SCAPS-1D software. The electronic affinities of the absorber (*i*-a-Si:H), *n*-a-Si:H, and BRL layers must be close enough to reduce the band offsets at their different interfaces and ensure good band alignment. The results show that all BRLs used, except ITO, have a relatively good band alignment with the *n*-(a-Si:H) layer, leading to a constant short-circuit current density (J_{SC}). The ZnO BRL achieves a better conversion efficiency of 17.65% ($J_{SC} = 18.71$ mA/cm², $V_{OC} = 1.078$ V, and $FF = 87.50\%$). Furthermore, the study of the influence of the *p*-(a-SiOx:H) window layer thickness shows that a thicker window layer decreases the recombination rate at the front contact of the solar cell, but increases the negative light trapping response; a conversion efficiency of 18.00% is obtained for 5 nm thickness. Subsequently, the high doping of the collector layer (*n*-(a-Si:H) layer) reduces the recombination rate at the back of the cell. By optimizing the other layers and investigating the effect of different back metal contacts of the solar cell, a conversion efficiency of 21.38% ($J_{SC} = 19.03$ mA/cm², $V_{OC} = 1.252$ V, and $FF = 89.75\%$) is achieved for *p*-(a-Si:H) (or buffer layer), *n*-(a-Si:H) (or collector layer), and ZnO BRL layer thicknesses of 50 nm, 25 nm, 10 nm, respectively, and using aluminum (Al) as the back contact. This performance results from: (i) the use of zinc oxide (ZnO) as BRL, which exhibits relatively good energy band alignment with the collector layer and the back metal contact (Al); (ii) the use of a buffer layer thicker than the window layer; (iii) and a heavily doped *n*-(a-Si:H) layer (n^+ -layer). The effect of operating temperature on the optimized structure results in a temperature coefficient of $-0.191\%/^{\circ}\text{C}$.

Acknowledgements The authors acknowledge the use of SCAPS-1D software, developed by Marc Burgelman and colleagues at the University of Gent, in all simulations reported in this paper.

Author's contribution A. T. N. involved in conceptualization, methodology, software, investigation, writing—original draft, validation, project administration. F. X. A. A. took part in conceptualization, methodology, software, investigation, writing—original draft. A. M. N. A. took part in conceptualization, software, investigation. J.-M. B. N. involved in conceptualization, methodology, supervision, validation. All authors read and approved the final manuscript.

Funding The authors declare that no funds, grants, or other support was received during the preparation of this manuscript.

Data availability The simulation software used and all data borrowed, generated, or analyzed during this study are included in this published article.

Declarations

Conflict of interest The authors declare that there is no conflict of interests regarding the publication of this paper.

References

1. Alam, I., Ashraf, M.A.: Effect of different device parameters on tin-based perovskite solar cell coupled with In₂S₃ electron transport layer and CuSCN and Spiro-OMeTAD alternative hole transport layers for high-efficiency performance. *Energy sour. Part A Recov. Util. Environ. Effects* (2020). <https://doi.org/10.1080/15567036.2020.1820628>
2. Krajangsang, T., Moollakorn, A., Inthisang, S., Limmanee, A., Sriprapha, K., Boriraksantikul, N., Taratiwat, T., Akarapanjavit, N., Sritharathikhun, J.: Study of an amorphous silicon oxide buffer layer for p-type microcrystalline silicon oxide/n-type crystalline silicon heterojunction solar cells and their temperature dependence. *Int. J. Photoenergy* **2014**, 1–5 (2014). <https://doi.org/10.1155/2014/251508>
3. Kabir, M.I., Shahahmadi, S.A., Lim, V., Zaidi, S., Sopian, K., Amin, N.: Amorphous silicon single-junction thin-film solar cell exceeding 10% efficiency by design optimization. *Int. J. Photoenergy* **2012**, 1–7 (2012). <https://doi.org/10.1155/2012/460919>
4. Hossain, M.K.: Hydrogenated amorphous silicon-based thin film solar cell: optical, electrical and structural properties. *Adv. Mater. Res.* **1116**, 59–64 (2015). <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.1116.59>
5. Banerjee, S., Mandal, S., Dhar, S., Roy, A.B., Mukherjee, N.: Nanomirror-embedded back reflector layer (BRL) for advanced light management in thin silicon solar cells. *Ind. Eng. Chem. Res.* **58**(28), 12678–12686 (2019). <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.9b01719>
6. Belfar, A., Kouider, W.H.: Improvement in a-Si: H silicon solar cells with using double p-type window layers based on nanocrystalline silicon oxide. *Optik* **244**, 167610 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167610>
7. Nagesh, M., Suresh, R., Jayapal, R., Subramanya, K.N.: Surface passivation studies of n-type crystalline silicon for HIT solar cells. *Trans. Electr. Electron. Mater.* (2021). <https://doi.org/10.1007/s42341-021-00316>
8. Rahal, W.L., Rached, D., Mahi, F., Azzemou, F.: Simulation and optimization of back surface field for efficient HIT solar cells. *Silicon* (2021). <https://doi.org/10.1007/s12633-021-01083-7>
9. Wang, J., Ru, X., Ruan, T., Hu, Y., Zhang, Y., Yan, H.: Performance of heterojunction solar cells with different intrinsic a-Si: H thin layers deposited by RF- and VHF-PECVD. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **1**, 2–3 (2021). <https://doi.org/10.1007/s10854-021-06991-3>
10. Rached, D., Rahal, W.L.: Investigation of the interface defect density at pm-Si: H/c-Si and the surface recombination speeds on silicon heterojunction solar cells. *Optik* **223**, 165575 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165575>
11. Hsu, C.H., Zhang, X.Y., Lin, H.J., Lien, S.Y., Cho, Y.S., Ye, C.S.: Numerical simulation of crystalline silicon heterojunction solar cells with different p-type a-SiOx window layer. *Energies* **12**(13), 2541 (2019). <https://doi.org/10.3390/en12132541>

12. Bhattacharya, S., John, S.: Beyond 30% conversion efficiency in silicon solar cells: a numerical demonstration. *Sci. Rep.* **9**(1), 1–15 (2019). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-48981-w>
13. Green, M.A., Dunlop, E.D., Hohl-Ebinger, J., Yoshita, M., Kopidakis, N., Hao, X.: Solar cell efficiency tables (Version 58). *Prog. Photovoltaics Res. Appl.* **29**(7), 657–667 (2021). <https://doi.org/10.1002/pip.3444>
14. Mehmood, H., Tauqeer, T.: Modelling and performance analysis of amorphous silicon solar cell using wide band gap nc-Si: H window layer. *IET Circuits Dev. Syst.* **11**(6), 666–675 (2017). <https://doi.org/10.1049/iet-cds.2017.0072>
15. Kouider, W.H., Belfar, A., Belmekki, M., Ait-kaci, H.: The benefit of using pa-SiOxCy: H as double window layers in hydrogenated amorphous silicon solar cells: correlation of simulation and experiment. *Optik* **238**, 166749 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.166749>
16. Kim, S., Lee, H., Chung, J.W., Ahn, S.W., Lee, H.M.: n-Type microcrystalline silicon oxide layer and its application to high-performance back reflectors in thin-film silicon solar cells. *Curr. Appl. Phys.* **13**(4), 743–747 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.cap.2012.11.017>
17. Banerjee, C., Srikanth, T., Basavaraju, U., Tomy, R.M., Sreenivasan, M.G., Mohanchandran, K., Mukhopadhyay, S., Barua, A.K.: Development of n- μ c-SiOx: H as cost effective back reflector and its application to thin film amorphous silicon solar cells. *Sol. Energy* **97**, 591–595 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.solener.2013.09.021>
18. Ramanujam, J., Singh, U.P.: Copper indium gallium selenide based solar cells—a review. *Energy Environ. Sci.* **10**(6), 1306–1319 (2017). <https://doi.org/10.1039/C7EE00826K>
19. Aksari, M.B., Eray, A.: Optimization of a-Si:H/c-Si heterojunction solar cells by numerical simulation. *Energy Procedia* **10**, 101–105 (2011). <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2011.10.160>
20. Abomo Abega, F.X., Teyou Ngoupo, A., Ndjaka, J.M.B.: Numerical design of ultrathin hydrogenated amorphous silicon-based solar cell. *Int. J. Photoenergy* **2021**, 7506837 (2021). <https://doi.org/10.1155/2021/7506837>
21. Rachidy, C., Hartiti, B., Touhtouh, S., Moujoud, S., Faddouli, A., Belhora, F., Ertugrul, M., Fadili, S., Stitou, M., Thevenin, P., Hajjaji, A.: Enhancing CZTS solar cell parameters using CZTSe BSF layer and non-toxic SnS2/In2S3 buffer layer. *Mater. Today Proc.* (2022). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2022.03.106>
22. Al-Hattab, M., Khenfouch, M., Bajjou, O., Chrafih, Y., Rahmani, K.: Numerical simulation of a new heterostructure CIGS/GaSe solar cell system using SCAPS-1D software. *Sol. Energy* **227**, 13–22 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.solener.2021.08.084>
23. Burgelman, M., Decock, K., Niemegeers, A., Verschraegen, J., Degrave, S.: "SCAPS manual. Version: 23 january 2018," 2018
24. Salem, M.S., Salah, M.M., Mousa, M., Shaker, A., Zekry, A., Abouelatta, M., Alshammari, M.T., Al-Dhlan, K.A., Gontrand, C.: On the investigation of interface defects of solar cells: lead-based vs lead-free perovskite. *IEEE Access* **1**, 2–3 (2021). <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3114383>
25. Lai, F.I., Yang, J.F., Hsu, Y.C., Kuo, S.Y.: Improvement of amorphous silicon thin-film photovoltaic cells with zinc oxide nanorods. *Crystals* **10**(12), 1124 (2020). <https://doi.org/10.3390/cryst10121124>
26. Derkacs, D., Lim, S.H., Matheu, P., Mar, W., Yu, E.T.: Improved performance of amorphous silicon solar cells via scattering from surface plasmon polaritons in nearby metallic nanoparticles. *Appl. Phys. Lett.* **89**(9), 093103 (2006). <https://doi.org/10.1063/1.2336629>
27. Ngoupo, A.T., Ouédraogo, S., Zougmoré, F., Ndjaka, J.M.B.: Numerical analysis of ultrathin Sb2Se3-based solar cells by SCAPS-1D numerical simulator device. *Chin. J. Phys.* **70**, 1–13 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2020.12.010>
28. Rai, N., Rai, S., Singh, P.K., Lohia, P., Dwivedi, D.K.: Analysis of various ETL materials for an efficient perovskite solar cell by numerical simulation. *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **31**(19), 16269–16280 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10854-020-04175-z>
29. He, Y., Xu, L., Yang, C., Guo, X., Li, S.: Design and numerical investigation of a lead-free inorganic layered double perovskite Cs4CuSb2Cl12 nanocrystal solar cell by SCAPS-1D. *Nanomaterials* **11**(9), 2321 (2021). <https://doi.org/10.3390/nano11092321>
30. Tcheum, G.M., Ngoupo, A.T., Ouédraogo, S., Guirdjebaye, N., Ndjaka, J.M.B.: Numerical analysis of ultrathin Cu(In, Ga)Se2 solar cells with Zn(O, S) buffer layer. *Pramana* **94**(1), 1–10 (2020). <https://doi.org/10.1007/s12043-020-01977-y>
31. Ahmed, S., Jannat, F., Khan, M.A.K., Alim, M.A.: Numerical development of eco-friendly Cs2TiBr 6 based perovskite solar cell with all-inorganic charge transport materials via SCAPS-1D. *Optik* **225**, 165765 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2020.165765>
32. Abdelaziz, S., Zekry, A., Shaker, A., Abouelatta, M.: Investigating the performance of formamidinium tin-based perovskite solar cell by SCAPS device simulation. *Opt. Mater.* **101**, 109738 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2020.109738>
33. Minemoto, T., Murata, M.: Theoretical analysis on effect of band offsets in perovskite solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **133**, 8–14 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2014.10.036>
34. Wang, F., Zhang, Y., Yang, M., Du, J., Xue, L., Yang, L., Fan, L., Sui, Y., Yang, J., Zhang, X.: Exploring low-temperature processed a-WOx/SnO2 hybrid electron transporting layer for perovskite solar cells with efficiency > 20.5%. *Nano Energy* **63**, 103825 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2019.06.021>
35. Yue, G., Sivec, L., Owens, J.M., Yan, B., Yang, J., Guha, S.: Optimization of back reflector for high efficiency hydrogenated nanocrystalline silicon solar cells. *Appl. Phys. Lett.* **95**(26), 263501 (2009). <https://doi.org/10.1063/1.3279143>
36. Kouider, W.H., Belfar, A., Belmekki, M., Ait-Kaci, H.: Window layer thickness effect on amorphous silicon oxide solar cells performances. *J. Alger. J. Renew. Energy Sustain. Dev.* **1**, 67–74 (2020)
37. Shen, K., Ou, C., Huang, T., Zhu, H., Li, J., Li, Z., Mai, Y.: Mechanisms and modification of nonlinear shunt leakage in Sb2Se3 thin film solar cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **186**, 58–65 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.06.022>
38. An, Y., Shang, A., Cao, G., Wu, S., Ma, D., Li, X.: Perovskite solar cells: optoelectronic simulation and optimization. *Solar RRL* **2**(11), 1800126 (2018). <https://doi.org/10.1002/solr.201800126>
39. Sobayel, K., Shahinuzzaman, M., Amin, N., Karim, M.R., Dar, M.A., Gul, R., Sopian, K., Hasan, A.K.M., Akhtaruzzaman, M.: Efficiency enhancement of CIGS solar cell by WS2 as window layer through numerical modelling tool. *Sol. Energy* **207**, 479–485 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.solener.2020.07.007>
40. Amiri, S., Dehghani, S., Safaiee, R.: Theoretical study of graded bandgap CZTSSe solar cells with two absorber layers. *Opt. Quant. Electron.* **52**(6), 1–12 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11082-020-02441-2>
41. Baig, F., Khattak, Y.H., Shuja, A., Riaz, K., Soucase, B.M.: Performance investigation of Sb2Se3 based solar cell by device optimization, band offset engineering and Hole Transport Layer in SCAPS-1D. *Curr. Appl. Phys.* **20**(8), 973–981 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.cap.2020.06.005>
42. Kashyap, S., Pandey, R., Madan, J., Sharma, R.: Design and simulation of a-Si:H/PbS colloidal quantum dots monolithic tandem solar cell for 12% efficiency. *Physica Status Solidi (A)* **217**(20), 2000252 (2020). <https://doi.org/10.1002/pssa.202000252>
43. Zyoud, S.H., Zyoud, A.H., Ahmed, N.M., Prasad, A.R., Khan, S.N., Abdelkader, A.F., Shahwan, M.: Numerical modeling of high conversion efficiency FTO/ZnO/CdS/CZTS/MO thin

- film-based solar cells: Using SCAPS-1D software. *Crystals* **11**(12), 1468 (2021). <https://doi.org/10.3390/cryst11121468>
44. Zhou, Y., Gray-Weale, A.: A numerical model for charge transport and energy conversion of perovskite solar cells. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**(6), 4476–4486 (2016). <https://doi.org/10.1039/c5cp05371d>
45. Abena, A.M.N., Ngoupo, A.T., Abega, F.X.A., Ndjaka, J.M.B.: Numerical investigation of solar cells based on hybrid organic cation perovskite with inorganic HTL via SCAPS-1D. *Chinese J. Phys.* (2021). <https://doi.org/10.1016/j.cjph.2021.12.024>
46. Sameera, J.N., Islam, M.A., Islam, S., Hossain, T., Sobayel, M.K., Akhtaruzzaman, M., Amin, N., Rashid, M.J.: Cubic Silicon Carbide (3C-SiC) as a buffer layer for high efficiency and highly stable CdTe solar cell. *Opt. Mater.* **123**, 111911 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2021.111911>
47. Mouchou, R.T., Jen, T.C., Laseinde, O.T., Ukoba, K.O.: Numerical simulation and optimization of p-NiO/n-TiO₂ solar cell system using SCAPS. *Mater. Today Proc.* **38**, 835–841 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.880>

Publisher's Note Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Springer Nature or its licensor (e.g. a society or other partner) holds exclusive rights to this article under a publishing agreement with the author(s) or other rightsholder(s); author self-archiving of the accepted manuscript version of this article is solely governed by the terms of such publishing agreement and applicable law.