République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieuret de la recherche scientifique
UNIVERSITÉYAHIA FARES - MÉDÉA
FACULTÉ DES SCIENCES



Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de

Master en Physique

Spécialité Physique des Matériaux

Par :

** REZETANE Nedjoua*

** BAHOUT Meriem*

Thème:

Simulation de la jonction CuO(p)/ZnO(n) Par le logiciel COMSOl MULTIPHYSICS, en vue des applications photovoltaïques

Soutenue le 30 Septembre 2020 devant le jury composé de :

Dr. HOUATIS Djamel	**MCA**	Univ. Yahia FARES -Médéa	**Président**
Dr. LACHENANI Hanane	**MCB**	Univ. Yahia FARES -Médéa	**Examinatrice**
Dr. SEBBAR Djamel	**MCA**	Univ. Yahia FARES -Médéa	**Examinateur**
Dr. MEDIA El Mahdi	**MCB**	Univ. Yahia FARES -Médéa	**Encadreur**

Année universitaire : 2019/2020

DEDICACES



Je dédie ce travail…

À ma tendre Mère et mon cher Père, aucune dédicace ne peut exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours pour vous. Rien au monde ne vaut les efforts fournis jour et nuit pour mon éducation et mon bien être. Ce travail et le fruit de vos sacrifices que vous avez fait pour mon éducation et ma formation le long de ces années.

À mon cher Mari Djallal, mes remerciements à lui pour ses encouragements, et À ma nouvelle petite fille Alaa que j'aime de tous mon cœur.

À ma grand-mère Aïcha et ma petite sœur Rahaf, les mots ne suffisent guère pour exprimer l'attachement, l'amour et l'affection que je porte pour vous.

À mes chers frères, Rida, Islem, qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité.

Puisse Dieu vous protège et vous garde toujours près de moi,

Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui étaient à mes côtés, et qui m'ont accompagné durant mon chemin d'études supérieures, À tous mes collègues d'étude de promotion 2020,

A tous ceux qui me sont chères…



DEDICACES

On dit souvent que le trajet est aussi important que la destination. Les cinq années d'étude m'ont permis de bien comprendre la signification de cette phrase.

Ce parcours, en effet, ne s'est pas réalisé sans défis et sans soulever de nombreuses questions pour lesquelles les réponses nécessitent de longues heures de travail.

Je dédie cette modeste ***mémoire*** *à ceux m'ontdonné la vie, les symboles de tendresses, qui ont sacrifié pour mon bonheur et ma réussite, ma* ***Mère*** *et mon cher* ***Père****, école de mon enfance,qui sont le remettant dans ma vie. Ce travail est le fruit des sacrifices consentis pour mon éducation.*

Je dédie ce travail à mon adorable sœur ***Assia****, celle qui était proche de moi quand j'en avais le plus besoin, et à ses enfants* ***Imane****,* ***Mahmoud*** *et* ***Ihsen****. À mes frères* ***Abdellah****,* ***Oussama*** *et* ***Nadjib****.À ma belle-sœur* ***Fouzia****.*

Àtoutes mes copines qui m'ont je les soutenues moralement. À mes oncles et ma tente ***Aouaouch****, à mes cousins et cousines.Àma grand-mère* ***Aicha****, qui a toujours prié pour moi, je demande dieu le tout puissant de nous la gardé en vie le plus longtemps possible.*

Je dédie ce travail à tous mes fidèles amies je le remercie pour sa présence à mes côtés, À tous mes enseignants et À tous ceux qui me sont chers.mille mercis.

Nedjoua



REMERCIEMENTS



Avant tous nous remercions le tout puissant ***ALLAH*** *de nousavoir montréla voie, de nousdonner la force, le courage et de nos avoir guidé en bonne santé afin de mener à bien ce projet de fin d'étude.*

Nous*tenonsà exprimer notre profonde gratitude et nos sincères remerciements en premier lieu à notre promoteur* ***Mr.MEDIA EL Mahdi,*** *pour ses précieux conseils, ses encouragements, et ses orientations le long de notre travail.*

Nous*tenons à remercier aussi****Mr. HOUATIS Djamel*** *Maitre de conférences à l'université de Médéa pour avoir accepté de présider le jury de ce mémoire.*

Nes vifs remerciements vont également aux ***Mme. LACHENANI Hanane*** *et* ***Mr. SEBBAR Djamel*** *qui nous ont fait l'honneur et le plaisir d'accepter de juger ce modeste travail.*

A notresera impossible de ne pas remercier,nos proches surtout notre famille, nos parents, nos frères, nos sœurs et nos amies,pour leurs aides, leurs confiances et leurs encouragements.

Finalement, Notre sincères remerciements à tous les enseignants du primaire jusqu'à l'université, intervenants et toutes les personnes qui par leurs actions, leurs paroles, leurs écrits, leurs conseils et leurs critiques ont guidé les réflexions et ont accepté à répondre à nos questions durant la réalisation de ce projet recherches.

RÉSUMÉ



De nombreux travaux de recherche visent à développer de nouvelles structures permettant d'optimiser les cellules solaires et améliorer leur efficacité et diminuer leurs prix en agissant sur le coût de fabrication. L'augmentation du rendement de conversion photovoltaïque nécessite l'amélioration des mécanismes mis en jeu dans ce processus, en faisant un bon choix pour la structure des dispositifs, et l'optimisation des couches constituantes des cellules solaire à base de la jonction **pn**.

Dans notre travail, nous avons opté pour la simulation à l'aide du logiciel COMSOL MULTIPHYSICS, d'une structure de type **pn** d'un matériau CuO (p) et le ZnO (n), afin d'optimiser les épaisseurs des couches de la structure utilisée et les énergies de gap de cesmatériaux, de telle sorte à avoir une meilleure absorption d'énergie et une conversion optimum de cette énergie vers un signal électrique.

ABSTRACT

Manyresearchprojects are aimedatdeveloping new structures to optimizesolarcells and improvetheirefficiency and lowertheirprices by affecting the cost of manufacturing. Increasing the efficiency of photovoltaic conversion requires the improvement of the mechanismsinvolved in thisprocess, making a good choice for the structure of the devices, and the optimization of the constituent layers of solarcellsbased on the pn junction.
In ourwork, weopted for simulation using COMSOL MULTIPHYSICS software, a pn-type structure of a CuO material (p) and ZnO (n), in order to optimize the thicknesses of the layers of the structure used and the gap energies of thesematerials, so as to have a betterenergy absorption and an optimum conversion of thisenergy to an electrical signal.

الملخص

وتهدف العديد من مشاريع البحوث إلى تطوير هياكل جديدة لتحسين استخدام الخلايا الشمسية إلى أقصى حد وتحسين كفاءتها وخفض أسعارها من خلال التأثير على تكاليف التصنيع .وتتطلب زيادة كفاءة التحويل الكهروضوئي تحسين الآليات المشاركة في هذه العملية، والاختيار الجيد لبنية الأجهزة، وتحقيق الاستفادة المثلى من الطبقات المكونة للخلايا الشمسية استناداً إلى ملتقى طرق البين.

في عملنا، اخترنا المحاكاة باستخدام برنامج**COMSOL MULTIPHYSICS** ، وهو بنية من نوع **Pn** لمادة **CuO**

(p)و**ZnO (n)**، لتحسين سُمك طبقات البنية المستخدمة وفجوة طاقات هذه المواد، للحصول على امتصاص أفضل للطاقة وتحويل مثالي لهذه الطاقة إلى إشارة كهربائية.

TABLE DES MATIÈRES

DEDICACES i
REMERCIEMENTS iii
TABLE DES MATIÈRES vi
LISTE DES ABRÉVIATIONS vii
LISTE DES NOTATIONS viii
TABLE DES FIGURES x
LISTE DES TABLEAUX xii
INTRODUCTION GÉNÉRALE 1
..... 4
Chapitre I : Physique des Cellules Solaires 4
I.1 Introduction 5
I.2 Propriétés fondamentales des semi-conducteurs 5
I.3 Généralité sur les cellules solaires 9
I.4 Cellule solaire à base des TCO 12
I.5 Séparation et collection des porteurs 13
I.6 Jonction pn : 13
I.7 Equations fondamentales dans les semi-conducteurs 18
I.8 Conclusion 20
Chapitre II : Etude des matériaux ZnO et CuO 21
II.2 Introduction 22
II.3 Intérêt de choix des matériaux TCO 22
II.4 Propriétés des oxydes transparents conducteurs 23
II.5 Description de ZnO et CuO 24
II.6 Dopage 31
II.7 Conclusion 31
Chapitre III : Simulation d'une cellule solaire par logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 5.5 33
III.1 Introduction 34
III.2 Présentation de logiciel de simulation COMSOL MULTIPHYSICS 34
III.3 Résultats et Discussion 44
III.4 Conclusion 53
CONCLUSION GENERALE 54
Références bibliographiques 56

LISTE DES ABRÉVIATIONS

Abréviation	Signification
TCO	Oxydes conducteurs transparents
PECVD	Chemicalvapordeposition(Dépôt Chimique en phase Vapeur)
ZCE	Zone de charge d'espace
BV	Bande de valence
BC	Bande de conduction
UV	Spectre d'émission l'ultraviolet
PL	photoluminescence

LISTE DES NOTATIONS

λ : la longueur d'onde

ρ : densité totale des charges électriques

a, c : paramètre de maille

c : vitesse de la lumière ($c = 3.\ 10^{8}\ ms^{-1}$)

d_{hkl} : distance à séparent les plan réticulaires

ε_r : permittivité relative

ε_0 : permittivité de vide

E : l'énergie

E : le champ électrique

E_F : niveau de Fermi

E_g : l'énergie de gap

E_{Fn} : niveau de Fermi dans la région n

E_{Fp} : niveau de Fermi dans la région p

FF : facteur de Forme

ϕ : le potentiel

h : constant de Planck

I_S : courant de saturation

I_m : courant correspondant à la puissance maximale

I_{ph} : courant photovoltaïque

J_{SC} : Densité decourant de court-circuit

J_n : densités des courants des électrons

J_P : densités des courants des trous

N_d^+ : densité du donneur ionisé

N_a^- : densité des accepteurs ionisés

q : la charge élémentaire

R_a : Rayon de l'anion

R_c : Rayon de cation

r_n : taux de recombinaisons pour les électrons

r_p : taux de recombinaisons pour les trous

Si : le silicium

T : la température absolue

u : la longueur de lien parallèle à l'axe (OZ)

V_{CO} : tension de circuit ouvert

y_n : taux de génération optique des paires électrons trous

TABLE DES FIGURES

Figure I.1 : Niveaux énergétiques dans un semi-conducteur. 6

Figure I.2: Position des niveaux de Fermi (EF) et distribution des porteurs majoritaires des deux semiconducteurs p (gauche) et n (droite). 8

Figure I.3: différence entre gap direct et indirect dans un semi-conducteur [4]. 9

Figure I.4: Structure (a) et diagramme de bande (b) d'une cellule photovoltaïque (Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées) [6]. 11

***Figure I.5** : Types de recombinaison [13](a) Recombinaison de bande à bande, (b) Recombinaison assistée par piège, (c) Recombinaison Auger.* 12

Figure I.6: Diagramme de bande de deux semi-conducteurs dopés p et n avant la mise en contact [13]. 14

Figure I.7: Formation d'une jonction pn [13]. 14

Figure I.8: Formation de la Zone de Charge d'Espace [13]. 15

Figure I.9: Jonction pn polarisée en directe [15]. 16

Figure I.10: Diagramme énergétique d'une jonction pn polarisée en inverse [15]. 16

Figure I.11: courbe I=f(V) d'une cellule solaire [14]. 18

Figure I.12: Densité de courant des porteurs entrants à travers une section unité [10]. 19

Figure II. 1 : Gap d'un OTC. Les photons de la lumière visible peuvent avoir suffisamment d'énergie pour exciter les électrons du niveau donneur vers la BC (type-n) ou de la BV vers le niveau accepteur (type-p). [19] 24

Figure II. 2: Les différentes phases cristallographiques de l'oxyde de zinc : les atomes O sont présentés comme de grandes sphères grises, les atomes de Zn sont les petites sphères noires[20]. 25

Figure II. 3: Les plans cristallographiques du ZnO [20]. 25

Figure II. 4: La structure cristallographique de ZnO [21]. 26

Figure II. 5 : Représentation schématique de la structure cristallographique de CuO:les sphère grises représentent les ions Cu^{2+}et les sphère rouges les ions O^{2-}[22]. 27

Figure II. 7 :La structure de bande du ZnO [20]. 29

Figure III. 1:L'icône de COMSOL MULTIPHYSICS 5.5. 35

Figure III. 2: La première fenêtre delancement du logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 5.5. 35

Figure III. 3: Les modèles existent dansCOMSOL MULTIPHYSICS 5.5. 35

Figure III. 4: Les différentes dimensions de l'espace existent dans COMSOL. 36
Figure III. 5: Le choix de la physique utilisée. 37
Figure III. 6: Les différents domaines d'études existants dans la physique **Semiconductor (semi)**.....39
Figure III. 7: La création de la géométrie. 40
Figure III. 8: Le choix des matériaux Cu_2O et ZnO.....41
Figure III. 9: Le domaine (la position) des matériaux Cu_2O et ZnO. 41
Figure III. 10: Les paramètres de Cu_2O. 42
Figure III. 11: Les paramètres de ZnO.....42
Figure III. 12: Les paramètres de maillage. 43
Figure III. 13: Lancement de la simulation.....43
Figure III. 14: Les courbes I=f(V) et P=f(V) d'une jonction à base de Silicium [33]. 44
Figure III. 15: Les courbes I=f(V) et P=f(V) d'une jonction à base de Silicium. 45
Figure III. 16: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 35µm.....46
Figure III. 17: *Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 75µm.* 46
Figure III. 18: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 120µm.....46
Figure III. 19: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 55µm.....46
Figure III. 20: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 95µm.....46
Figure III. 21: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.42 eV]. 47
Figure III. 22: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.2 eV, Eg(n)= 3.42 eV]. 47
Figure III. 23 : Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.3 eV, Eg(n)= 3.42 eV]. 47
Figure III. 24: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1eV, Eg(n)= 3.5 eV]. 48
Figure III. 25: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.6 eV]. 48
Figure III. 26: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.7 eV]. 48
Figure III. 27: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.8 eV]. 48
Figure III. 28: La courbe **Icc** en fonction des variations des points (longueur des couches). 49
Figure III. 29: La courbe **Pm** en fonction des variations des points (longueur des couches). 49
Figure III. 30 : La courbe **FF** en fonction des variations des points (longueur des couches). 50
Figure III. 31: La courbe **Icc** en fonction des variations d'Eg de la couche « p ».....50
Figure III. 32: La courbe **Pm** en fonction des variations d'Eg de la couche « p ». 51
Figure III. 33 : La courbe **FF** en fonction des variations d'Eg de la couche « p ».....51
Figure III. 34 : La courbe **Icc** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ».....52
Figure III. 35: La courbe **Pm** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ». 52
Figure III. 36: La courbe **FF** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ».....53

LISTE DES TABLEAUX

Tableau I.1: Le dopage d'un semi-conducteur de type n et de type p. 7

Tableau II. 1: Propriétés requises pour obtenir un TCO, d'après le projet NATCO [18]. 22

Tableau II. 2 : Le paramètre U et la distance séparant les plans réticulaires et la condition de stabilité. 26

Tableau II. 3 : Données cristallographiques de ténorite [22]. 27

Tableau II. 4: Quelques propriétés électriques de ZnO [21]. 28

Tableau II. 5 :Origine proposée pour chaque pic photoluminescence (PL) de ZnO à 300 K [24]. 30

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Avec l'épuisement progressif des sources d'énergies fossiles (pétrole, gaz, charbon) et des besoins énergétiques toujours croissants, les énergies renouvelables joueront à l'avenir un rôle de plus en plus important dans notre société.

L'énergie renouvelable est un type d'énergie dont sa source provient de sources naturelles pratiquement infinies. Les ressources renouvelables peuvent se régénérer plus rapidement que la vitesse à laquelle elles sont consommées.

Parmi les énergies renouvelables, L'énergie solaire, qui est respectueuse de l'environnement, et présente de nombreux avantages spécifiques en raison notamment de l'épuisement prévisible des ressources d'énergie fossiles et l'accroissement des problèmes liés à la dégradation de l'environnement. Elle permet de produire de l'électricité par transformation du rayonnement solaire grâce à des cellules solaires, reliées entre elles pour former un module solaire photovoltaïque. Plusieurs travaux de recherche visent à développer de nouvelles structures permettant d'optimiser ces cellules, améliorer leur efficacité et diminuer leurs coûts de fabrication. Bien que les cellules solaires à base de la jonction pn soient les plus exploitées, les recherches sont intéressées à la fabrication des cellules solaires en couche mince à base d'oxyde métallique avec des procédés de déposition simples et peu couteux. Ce qui a donné un grand intérêt pour les dispositifs photovoltaïques composés de matériaux à faible coût, non toxiques, abondant et ayant une bonne absorbance de l'énergie solaire. Le choix de matériaux ayants de meilleures propriétés est un paramètre primordial pour améliorer les performances de ces structures, et parmi eux, les oxydes métalliques semi-conducteurs tels que le ZnO, Cu_2O, TiO_2 etc.

L'amélioration du rendement de conversion photovoltaïque nécessite l'amélioration desmécanismes mis en jeu dans ce processus, en faisant un bon choix pour la structure desdispositifs et l'optimisation des épaisseurs des différentes couches constituantes celle-ci.L'objectif d'optimisation des épaisseurs c'est de contribuer à l'amélioration du rendement dela conversion photovoltaïque en maximisant l'absorption et en augmentant la densité de courant délivrée.

Depuis les années 70, la simulation numérique est l'un des moteurs de l'innovationscientifique et industrielle. Car, de nombreuses problématiques industrielles exigent desnouvelles techniques de simulation. Une meilleure compréhension des phénomènes physiqueset leurs prises en compte en amont du processus de définition des produits ont abouti àl'amélioration des performances, de la durée de vie et des coûts de possession. Depuis 1998,COMSOL répond à ces attentes en apportant une solution innovante et pluridisciplinaire. Ilcombine puissance et souplesse pour simuler des applications impliquant une ou plusieursphénomènes physiques.

Dans notre travail, nous nous sommes focalisés sur l'amélioration de mécanisme de conversion en changeant quelques propriétés physiques pour avoir une optimisation des propriétés physiques d'une cellule solaire (dopage, épaisseur de la couche, propriétés optiques).

Notre manuscrit est structuré de la façon suivante :

Dans le premier chapitre, nous avons donné un aperçu général sur les propriétés fondamentales des semi-conducteurs et leurs structures de bande, nous avons également parlé généralement sur les cellules solaires ainsi que leur caractéristique.

Le deuxième chapitre, est focalisé sur la description des matériaux utilisé, le CuO et le ZnO, nous avons parlé sur les caractéristiques structurales avec quelquespropriétés physicochimiques et leurs techniques d'élaboration.

Finalement, le troisième chapitre est consacré à la description du logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 5.0 et la présentation des procédures de simulation de notre structure.

Quand à lui est basé sur notre modèle numérique, nous avons lancé une série de simulation pour avoir la répartition de l'onde électromagnétique au sein de la structure pn en faisant varier les épaisseurs et l'énergie de gapde chaque couche (n et p) afin de trouver les meilleurs résultats.

Chapitre I :

Physique des Cellules Solaires

I.1 Introduction

Les principaux matériaux présentant l'effet photovoltaïque sont les semi-conducteurs. Ces matériaux ont la caractéristique d'être parfois conducteurs, ou des isolants. Ils peuvent être caractérisés par leur gap d'énergie interdite (E_g), c'est-à-dire l'énergie à partir de laquelle ils deviennent absorbants et produisent de l'électricité quand ils sont éclairés par une lumière.

I.2 Propriétés fondamentales des semi-conducteurs

Un semi-conducteur est un matériau dont la concentration en charges libres est très faible par rapport aux métaux. Les cellules solaires à base de semi-conducteurs sont essentiellement des dispositifs simples. Les semi-conducteurs ont la capacité d'absorber la lumière et de délivrer une portion de l'énergie des photons absorbés aux porteurs du courant électrique : les électrons et les trous. Ce procédé, découvert par E. Becquerel en 1839, est appelé effet photovoltaïque. [1]

Les cellules solaires peuvent être fabriquées à partir d'un nombre de matériaux semi-conducteurs. Généralement, les plus utilisés sont le silicium (Si) monocristallin, poly-cristallin et amorphe. On trouve aussi les cellules à base de matériaux comme GaAs, GaInP, Cu(InGa)Se2, CdTe,…etc.[1]

Les matériaux des cellules solaires sont largement choisis sur la base de leurs caractéristiques d'absorption, et sur la base de leurs coûts de fabrication.

Les semi-conducteurs sont des matériaux utilisés pour la fabrication des dispositifs électroniques et optoélectroniques,dans cette partie on discutera sur la source d'énergie que représente le soleil et on parle ensuit sur le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques principales.

I.2.1 Structure de bande dans un semi-conducteur

Les structures de bande correspondent aux différents types de matériaux. Onen distingue trois catégories différentes : isolants, métaux, et semi-conducteurs.La figure I.1 définie ces types de matériaux ; On voit que la différence entre les matériaux,réside au niveau de l'éloignement de la bande de valence et de la bande de conduction. Dans les isolants, cette différence est assez importante de l'ordre d'une dizaine d'eV. Chez les métaux par contre, elle est inexistante, les bandes de valences et de conduction se chevauchent, permettant un passage aisé des électrons, dont la circulation induit un courant électrique. Chez les semi-conducteurs enfin, ce passage d'électrons entre les bandes de valences et de conductions n'est possible que si l'on fournit une certaine quantité d'énergie, par exemple sous forme de photon, pour franchir la bande interdite, aussi appelée gap, dont la largeur va de 0.6 à 4 eV, selon le matériau.

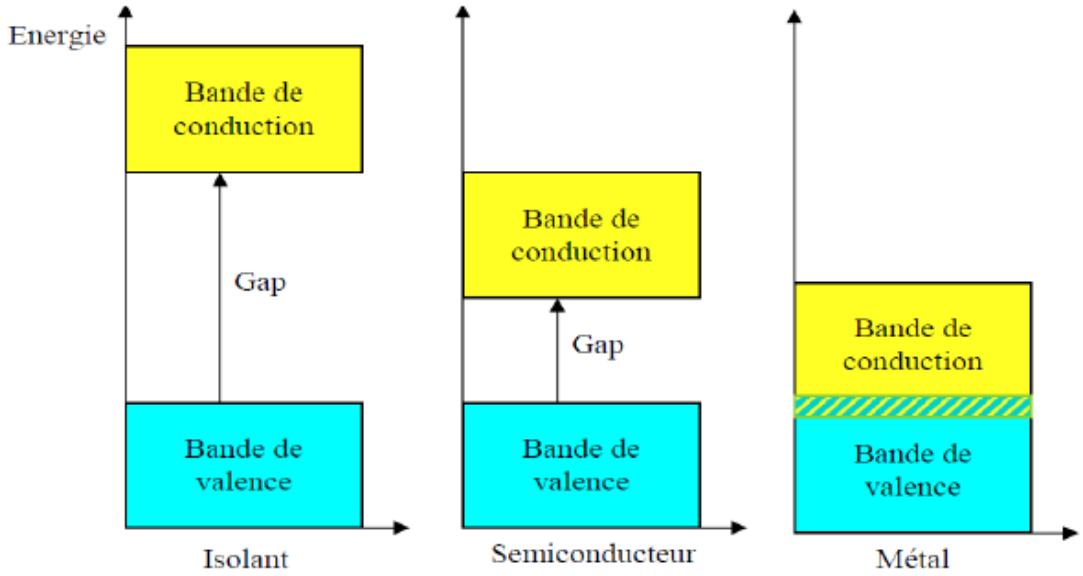


Figure I.1: *Structure de bande des trois catégories de matériaux.*

Les propriétés chimiques et électriques de l'atome sont liées aux électrons qui gravitent autour du noyau. L'électron possède, par rapport au noyau, une certaine énergie E à laquelle correspond un potentiel $\emptyset$

$$E = -q.\emptyset + constante \qquad (0I.1)$$

avec : E est en (eV)

La mécanique quantique montre que, pour un atome isolé, l'électron ne peut occuper que des niveaux discrets (quantifiés) d'énergie. Les orbites, c'est-à dire, les états d'énergie permis aux électrons, dépendent (équation de Schrödinger) de la fonction potentiel dans laquelle ces électrons se meuvent (fonction en 1/r dans l'atome isolé).

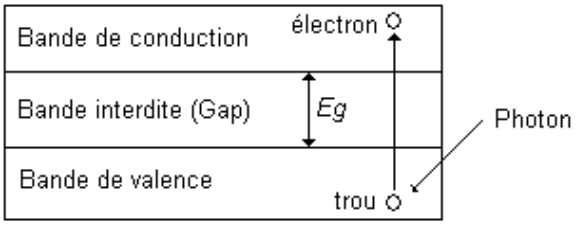


Figure I.1 : *Niveaux énergétiques dans un semi-conducteur.*

Dans un semi-conducteur à une température absolue nulle, la bande de valence est complètement pleine et la bande de conduction est vide de telle sorte qu'aucune conduction électrique n'est possible (tous les électrons sont liés à leurs atomes). Cependant, dans un semi-conducteur, l'énergie nécessaire pour séparer les électrons externes de leurs atomes est relativement faible. Cette énergie correspond à l'énergie du gap Eg,de telle sorte que les

électrons reçoivent une énergie suffisante pour faire une transition de la bande de valence vers la bande de conduction. Cette énergie peut être une perturbation thermiqueou une interaction avec un photon lumineux.

I.2.2 Dopage d'un semi-conducteur

Il est possible de changer la conductivité d'un semi-conducteur par un procédé appelé dopage, qui consiste à insérer un élément supplémentaire dans le semi-conducteur à faible concentration [3].

Le tableau suivant récapitule quelque propriété des Semi-conducteurs dopé p et dopé n :

	Semi-conducteur type-p	Semi-conducteur type-n
Dopage	élément de valence moins importante pour diminuer le nombre d'électrons de la BV	élément de valence supérieure pour ajouter des électrons à la BC
Résultat de dopage	niveau accepteur au-dessus de BV	niveau donneur au-dessous de BC
La conduction se fait par	déplacement des trous correspondants au manque d'électrons.	déplacement des électrons
L'énergie de passage	Faible	bien plus facilement atteinte que dans un semi-conducteur intrinsèque.

Tableau I.1:*Le dopage d'un semi-conducteur de type n et de type p[3].*

Dans un semi-conducteur intrinsèque, du fait de l'agitation thermique, il existe des électrons libres. Ces électrons libres laissent la place à des trous qui sont aussitôt comblés par des électrons libres. On dit qu'il y a recombinaison.

Le semi-conducteur extrinsèque est un semi-conducteur dopé dans lequel on a introduit des impuretés soient donneurs ou bien accepteurs.

Pour un semi-conducteur, à 0K, la bande de valence est pleine et la bande de conduction est vide. Lorsque la température augmente, le gap n'étant pas trop grand, les électrons peuvent passer de la bande de valence à la bande de conduction grâce à l'agitation thermique. Ce départ d'électrons laisse derrière lui des « trous » que l'on assimile à des charges positives, dans la bande de valence. Dans ce cas, il y a donc un nombre égal de trous dans la bande de valence (p) et d'électrons dans la bande de conduction (n), le matériau est dit **intrinsèque** [17].

I.2.3 Un Semi-conducteur de type-p et de type-n

- **Un Semi-conducteur de type-p :**

Un niveau accepteur au-dessus de la bande de valence (BV), et dont la densité des électrons libres dans la bande de conduction (BC) est beaucoup plus faible que celle des trous libres dans la bande de valence, c'est-à-dire que les trous sont les porteurs majoritaires. [3]

- **Un Semi-conducteur de type-n :**

Un niveau donneur au-dessous de la bande de conduction, et dont la densité des électrons libres dans la BC est plus élevée que celle des trous libres dans la BV, c'est-à-dire que les électrons sont les porteurs majoritaires [3].

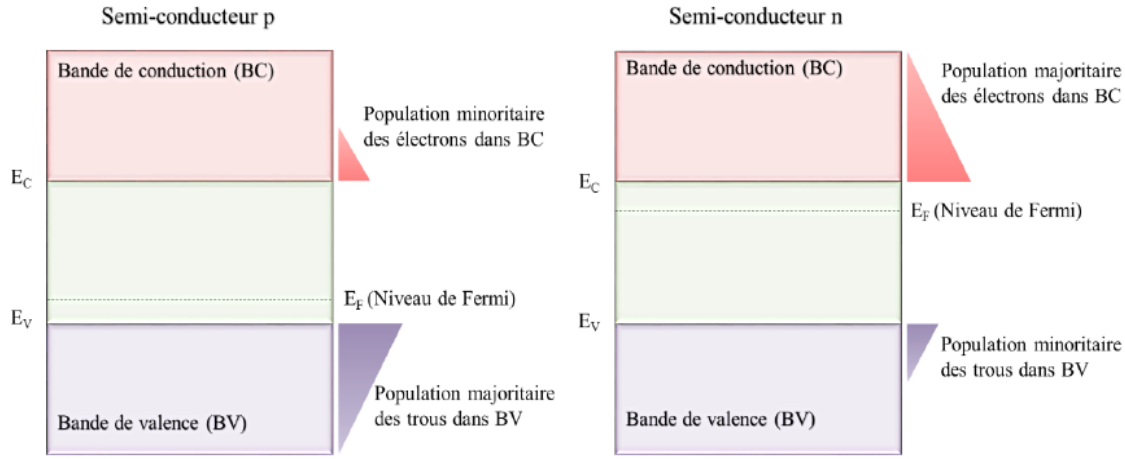


***Figure I.2**: Position des niveaux de Fermi (E_F) et distribution des porteurs majoritaires des deux semiconducteurs p (gauche) et n (droite).*

I.2.4 Semi-conducteur à gap direct ou indirect

Le courant produit par la cellule solaire est généré à travers les transitions optiques entre les bandes d'énergie du semi-conducteur. Ce dernier, peut être caractérisé selon son gap, à savoir, semi-conducteur à gap direct ou à gap indirect. Dans les semi-conducteurs à gap direct, les électrons et les trous possèdent le même vecteur d'onde k, le maximum d'énergie de la bande de valence et aligné avec le minimum d'énergie de la bande de conduction. Par contre, dans un semi-conducteur à gap indirect, le maximum d'énergie de la bande de valence et le minimum d'énergie de la bande de conduction son décalés, leur vecteurs d'onde sont donc différents. La figure (4) ci-dessus explique ce concept.

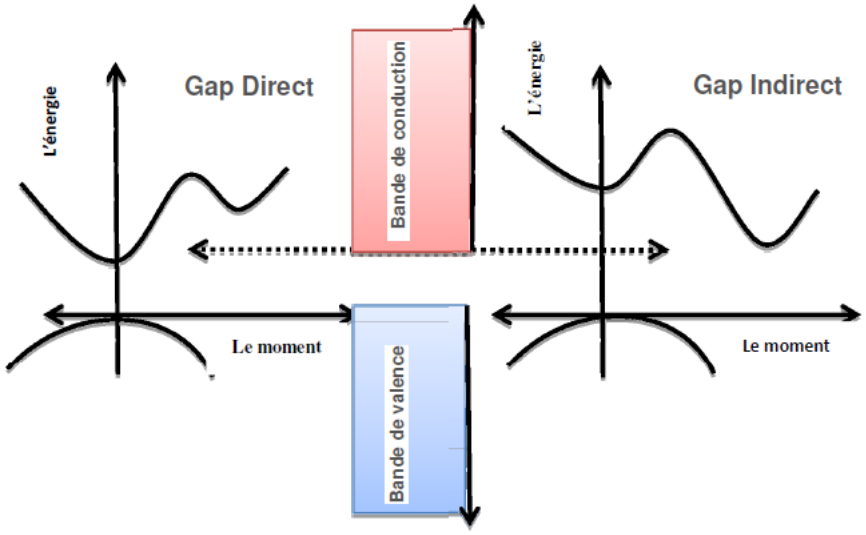


***Figure I.3**: différence entre gap direct et indirect dans un semi-conducteur [4].*

L'absorption optique dans les semi-conducteurs à gap indirect et considérablement plus faible que dans les semi-conducteurs à gap direct. Néanmoins, la durée de vie des porteurs majoritaires y est plus élevée. Typiquement, dans les semi-conducteurs à gap direct, la durée de vie des électrons et des trous ne dépasse pas 10^{-8}s. alors que dans un semi-conducteur à gap indirect la durée de vie des porteurs libres peut être 1000 fois plus grande.[4]

I.3 Généralité sur les cellules solaires

I.3.1 Le Rayonnement solaire

La lumière solaire est transporté par des particules appelées photons qui peuvent être décrits par l'énergie E,ces photons peuvent être différenciés par leur énergie. Pour évaluer cette énergie de photons, nous associons la fréquence des photons ν à la constante de Planck h ce qui donne l'équation suivante [5]:

$$E = h\nu = hc/\lambda \qquad (I.2)$$

Avec :

h:constante de Planck $h=6.62*10^{-34}$J.s

c:vitesse de la lumière dans le vide $3*10^{8}$ m/s

λ :longueur d'onde.

I.3.2 La conversion photovoltaïque

Le terme ''photovoltaïque" désigne le processus physique qui consiste à transformer l'énergie lumineuse en énergie électrique, par le transfert de l'énergie des photons aux électrons d'un matériau. Le préfixe photo,vient de grec « phỗs » (lumière)qui signifie lumière. Le terme

« volt » vient du patronyme d'Alessandro volta (1745-1827), physicien qui a contribué aux recherches sur l'électricité. [7]

Le scientifique Français Edmond Becquerel fut le premier à découvrir en 1839 l'effet photovoltaïque, il a trouvé que certains matériaux pouvaient produire une petite quantité de courant sous l'effet de la lumière.

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaire permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport, dans un matériau semi-conducteur, de charges électriques positives et négatives. Donc, on peut résumer le principe de l'effet photovoltaïque comme suite :

Le fonctionnement de la cellule photovoltaïque est fondé sur les propriétés de semi-conducteurs qui, percutés par les photons, mettent en mouvement un flux d'électrons . Les photons sont des particules élémentaires qui transportent l'énergie solaire à 300 000 km/s et qu'Albert Einstein appelait dans les années 1920 les « grains de lumière ». Lorsqu'ils frappent un élément semi-conducteur comme le silicium , ils arrachent des électrons à ses atomes . Ces électrons se mettent en mouvement, de façon désordonnée, à la recherche d'autres « trous » où se repositionner.

Mais pour qu'il y ait un courant électrique, il faut que ces mouvements d'électrons aillent tous dans le même sens. Pour les y aider, on va associer deux types de silicium. La face exposée au soleil est « dopée » avec des atomes de phosphore qui comportent plus d'électrons que le silicium, l'autre face est dopée avec des atomes de bore qui comportent moins d'électrons. Cette double face devient une sorte de pile : le côté très chargé en électrons devient la borne négative (N), le côté avec moins d'électrons devient la borne positive (P). Entre les deux il se crée un champ électrique.

Quand les photons viennent exciter les électrons, ceux-ci vont migrer vers la zone N grâce au champ électrique, tandis que les « trous » vont vers la zone P. Ils sont récupérés par des contacts électriques déposés à la surface des deux zones avant d'aller dans le circuit extérieur sous forme d'énergie électrique. Un courant continu se créé. Une couche anti-reflet permet d'éviter que trop de photons se perdent en étant réfléchis par la surface. [34]

I.3.3 Fonctionnement des cellules solaires

La cellule solaire est une photodiode à jonction pn de grande surface qui génère un signal électrique sans l'aide d'une source d'énergie auxiliaire.

Lorsque les photons issus du soleil frappent la cellule,certains sont réfléchis et d'autres sont transmisou absorbés dans la cellule solaire,seuls les photons absorbés participent à l'effet photoélectrique.

La conversion photovoltaïque met en jeu trois phénomènes physiques, intimement liés et simultanés :

- L'absorption de la lumière dans le matériau
- Le transfert d'énergie des photons aux charges électriques.
- La collecte des charges

Il est donc clair que les matériaux constituant une cellule solaire, doivent avoir des propriétés optiques et électriques spécifiques pour permettre la conversion photovoltaïque. [6]

Le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques est illustré sur la figure(5) :

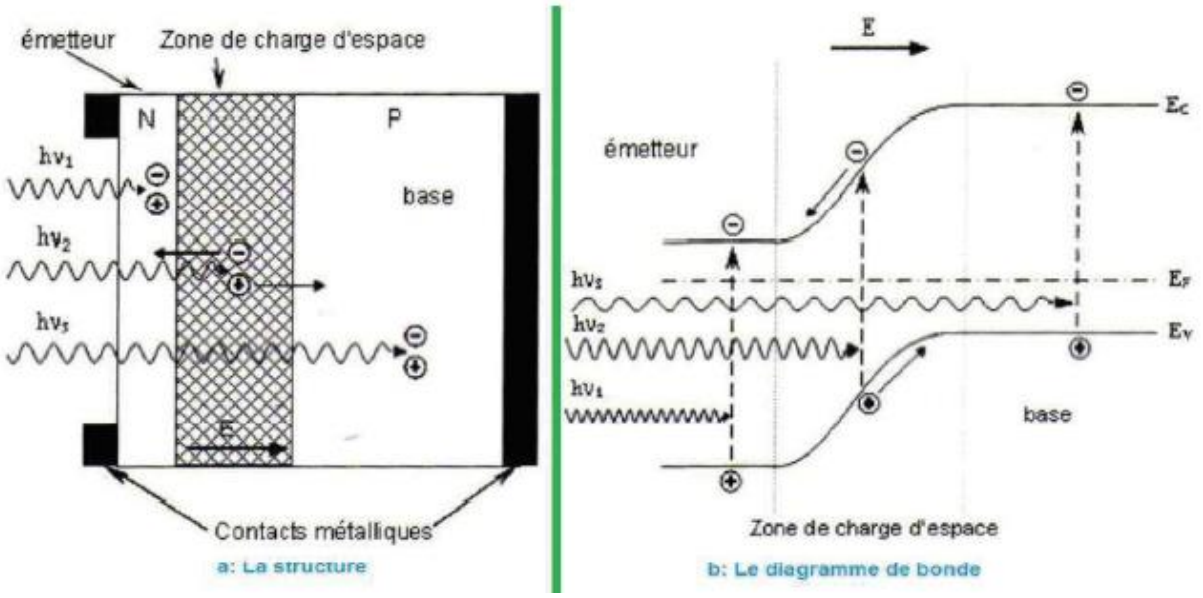


***Figure I.4**: Structure (a) et diagramme de bande (b) d'une cellule photovoltaïque (Les dimensions respectives des différentes zones ne sont pas respectées) [6].*

La longueur de diffusion des électrons photogénérésest plus grande que celle des trous. La ZCE est aussi appelée zone de charge d'espace ou zone désertée,correspond à la région qui apparaît dans une jonction pn entre la zone dopée n et la zone dopée p, présente une épaisseur relativement grande (≈250-300µm) et elle est donc le plus souvent de type p. Cette dernière, va fournir plus de porteurs. Afin de limiter les recombinaisons avec les porteurs majoritaires, la base est faiblement dopée (environ $10^{16}cm^{-3}$). L'émetteur, de type n, est de faible épaisseur ≈0.2µm et fortement dopé (environ $10^{20}cm^{-3}$, à afin d'obtenir un champ électrique suffisant dans la ZCE (≈0.3µm). L'épaisseur de la cellule doit être choisie de manière à ce qu'un maximum des photons soit absorbé par le silicium.

Même si nous ne l'aborderons pas dans ce travail, il est intéressant de noter que les cellules photovoltaïques en silicium de type n suscitent actuellement un intérêt important et que de nombreuses recherches sont menées sur ce matériau jusqu'ici sous –estimé. [2]

I.3.4 Phénomènes de Recombinaison

Ce phénomène estcaractérisé par sa vitesse qu'est proportionnelle au nombre de trous et d'électrons libres existants. Lorsque la recombinaison se produit, l'électron et le trou cessent d'être des porteurs libres. Au cours de ce phénomène, l'électron transite dans un état d'énergie inférieure. Pour cela, il doit libérer un quantum d'énergie égale à la différence de son origine et son état final. Cette énergie peut être classée en trois façons : radiative où l'émission d'un photon (lumière), non radiative où l'émission d'un phonon (chaleur), et Auger où un transfert d'énergie cinétique à un autre électron libre ou trou.

On distingue quatre types de Recombinaison :

-Recombinaison directe (de bande à bande)

- Recombinaison indirect (de bande aux impuretés, avec l'aide de pièges)
- Recombinaison Auger
- Recombinaison de surface

La figure (6) représente les processeurs de Recombinaison

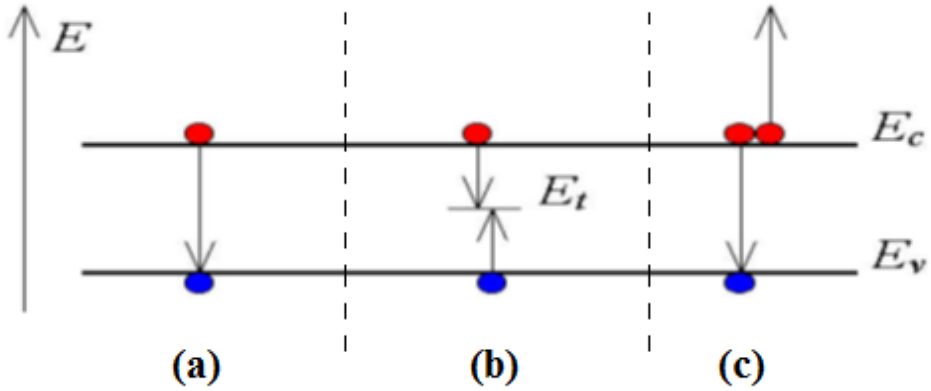


***Figure I.5** : Types de recombinaison [13]*

(a) Recombinaison de bande à bande, (b) Recombinaison assistée par piège, (c) Recombinaison Auger.

I.4 Cellule solaire à base des TCO

Les TCO dans les cellules solaires sont employés comme électrodes transparentes. Ils doivent nécessairement avoir une haute transmission optique (afin de permettre un transport efficace des photons jusqu'à la couche active) et une bonne conductivité électrique (pour obtenir le moins de pertes de transport des charges photo-générées).

Les TCO se trouvent dans différents types de cellules solaires. Ils peuvent être utilisés dans tous les types de cellules telles que a-Si : H, poly-Si : H, CIGS et polymères. Avec leurs propriétés qui diffèrent d'un TCO à l'autre, chacun sera plus ou moins efficace dans un type de cellule précis. [12]

I.5 Séparation et collection des porteurs

I.5.1 Courant de drift

Les paires électron-trou sont générées dans les semi-conducteurs grâce à l'absorption des photons. Ces porteurs ont une durée de vie limitée et vont se recombiner l'un avec l'autre après une durée de vie caractéristique. Afin d'utiliser l'énergie présente dans la paire électron-trou, il faut que les deux porteurs de charge soient séparées et puissent circuler vers les contacts externes de la cellule solaire avant qu'un éventuel processus de recombinaison ne survienne. Quand un champ électrique est appliqué dans un semi-conducteur uniformément dopé, les électrons de la bande de conduction, étant chargés négativement, se déplacent en direction opposée à celle du champ électrique et inversement, les trous de la bande de valence chargés positivement, vont se déplacer en même direction du champ électrique. Ces déplacements de charges (électrons et trous), lié à l'application du champ électrique, donne naissance à un courant appelé courant de drift. [1]

I.5.2 Courant de diffusion

À cause de leur déplacement thermique fortuit, les électrons et les trous dans un semi-conducteur tendent à se mouvoir (diffuser) des régions à fortes concentrations vers les régions à faibles concentrations. Comme de l'air dans un ballon, les porteurs, en l'absence de n'importe quelle force externe, tentent à se distribuer eux-mêmes équitablement. Ce processus de déplacement des porteurs, dû à une force statistique, est appelé courant de diffusion. [1]

I.6 Jonction pn :

La juxtaposition d'un semi-conducteur dopé positivement (p) et d'un semi-conducteur dopé négativement (n) donne naissance à une jonction pn. Lors de cet assemblage, les électrons en excès dans la région n diffusent vers l'interface, il en résulte une charge d'espace dans une région d'environ 1 mm autour de l'interface. Ce qui produit un champ électrique qui peut être calculé grâce à l'équation de Poisson.

La barrière de potentiel au niveau de la jonction est donnée par :

$$V_i = \frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{q} \qquad (I.3)$$

avec : E_{Fn}et E_{Fp}sont les niveaux de Fermi respectivement dans les régions n et pet ayant un même gap Eg (cas d'une homojonction).

q : c'est la charge élémentaire.

Tant que les deux semi-conducteurs de type p et n sont isolés l'un de l'autre, chacun est électriquement neutre.

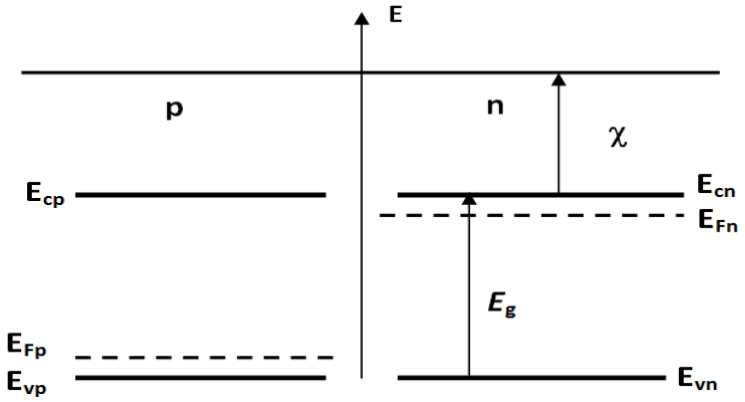


Figure I.6: *Diagramme de bande de deux semi-conducteurs dopés p et n avant la mise en contact [13].*

Lorsqu'on réalise un contact entre ces deux semi-conducteurs, on obtient ce que l'on appelle une jonction p-n. Il faut noter que ce contact n'est pas une simple juxtaposition du cristal de type n avec un cristal de type p. En pratique, le contact doit être à une échelleatomique, soit une continuité du cristal de part et d'autre de la surface de la jonction.

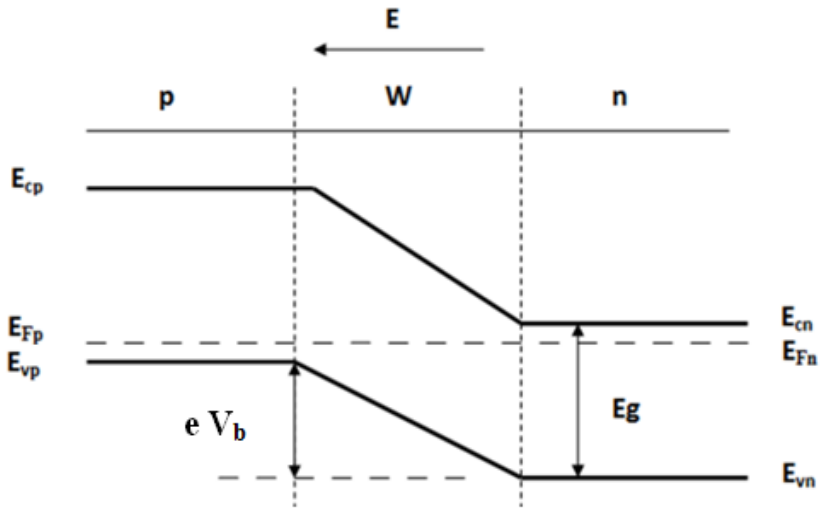


Figure I.7*: Formation d'une jonction pn [13].*

I.6.1 Zone de charge d'espace

Il en résulte de la diffusion des porteurs majoritaires au-delà de l'interface de la jonction, que les impuretés chargées (ions donneurs dans la région n et ions accepteurs dans la région p) ne seront plus compensées respectivement par les électrons et trous. [1]

La neutralité électrique des deux régions est rompue. Du côté p, la région dépeuplée aura une charge négative due aux ions négatifs accepteurs et du côté n elle aura une charge positive due aux ions positifs donneurs. Cette région de charges fixes est appelée zone de Charge d'Espace (zone de déplétion, zone désertée).

Cette zone est située de la surface de contact « jonction métallurgique » sans être nécessairement symétrique donc on peut dire que la zone de Charge d'Espace s'étend du côté le moins dopé.

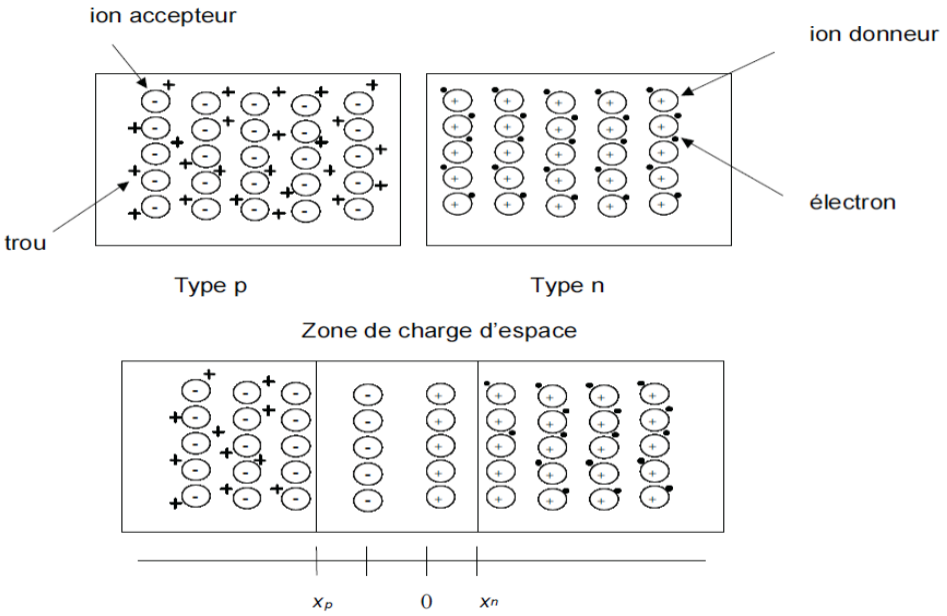


***Figure I.8**: Formation de la Zone de Charge d'Espace [13].*

I.6.2 Polarisation de la jonction pn

Après avoir examiné la formation d'une jonction entre deux semi-conducteurs de types différents,voyons maintenant le comportement de celle-ci lorsqu'elle est polarisée, c'est-à-dire lorsqu'une tension est appliquée sur la jonction.

I.6.2.a) Polarisation direct de la jonction pn

Si la borne positive de la source de tension est reliée au côté P et la borne négative au côté N de la jonction on dit que cette jonction est polarisée en direct. Le champ électrique dû à la polarisation s'oppose à celui de la diffusion. Le champ résultant de leur différence est inférieur à celui existant avant la polarisation. En conséquence que la ZCE diminue ainsi que la barrière de potentielle.

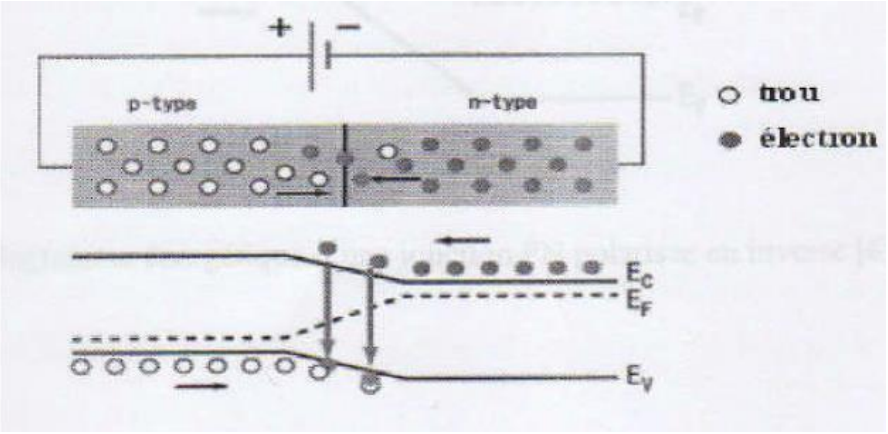


***Figure I.9**: Jonction pn polarisée en directe [15].*

I.6.2.b) Polarisation inverse de la jonction pn

La polarisation inverse consiste à relier la borne positive de la source au côté N et la borne négative au côté P. Dans ce cas le champ électrique s'ajoute au champ électrique interne donc le champ résultant de leur somme et plus important, ce qui nécessite un grand nombre de charge ionisée pour son maintien. En conséquence la ZCE augmente ; en terme de bande d'énergie, la polarisation inverse fait élever le diagramme énergétique de côté P et la baisse de côté N.

Le potentiel de polarisation s'ajoute à celui de diffusion, la barrière de potentiel est plus haute.

Les porteurs majoritaires de chaque côté rencontrent une plus grande opposition pour diffuser de l'autre côté de la jonction, tandis que les porteurs minoritaires sont mieux aidés à traverser la jonction.

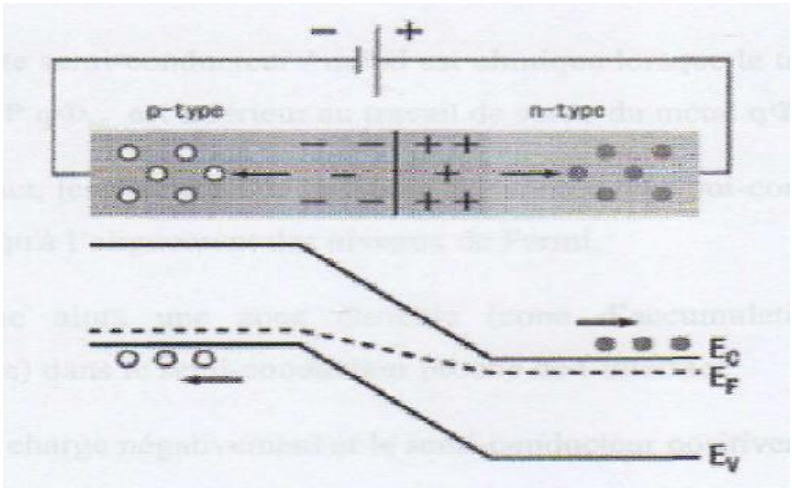


***Figure I.10**: Diagramme énergétique d'une jonction pn polarisée en inverse [15].*

I.6.3 Caractéristique I-V d'une cellule solaire

I.6.3.a) Courant de court-circuit

Le courant de court-circuit est le courant débuté par la cellule sous éclairement en court circuitant la sortie, c'est-à-dire que : $J_{sc}=J(V=0)$. Pour une cellule solaire idéale, le courant de court-circuit est égal au courant photovoltaïque I_{ph}.

I.6.3.b) Tension de circuit ouvert Vco

C'est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie.Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction pn,jonction Schottky), la nature des contacts, des matériaux de la couche active et de la couche active – électrode. Elle dépend aussi de l'éclairement de la cellule.

Pour une cellule solaire idéale, la tension de circuit ouvert est donnée (obtenu pour I=0) :

$$V_{co}=\frac{KT}{q}\ln\left(\frac{Iph}{Is}+1\right) \qquad (0I.4)$$

Avec :

$\frac{KT}{q}$: Potentiel thermodynamique.

T : température absolue.

q : constante de charge d'électron.

K : constante de Boltzmann.

I_{ph} : courant photonique.

I_s : courant de saturation.

I.6.3.c) Point de puissancemaximale

Suivant la formule P=V. I, la puissance soit maximale dans les conditions où le produit (V*I) est maximal :c'est le point de charge idéal de la cellule,ou point de puissance maximale Pm (figure I.11) elle est donnée par la relation suivante :

$$P_m=I_{pm}V_{pm} \qquad (I.5)$$

Avec :

I_{pm} : c'est le courant correspondant à la puissance maximale fournie.

V_{pm} : c'est la tension correspondante à la puissance maximale fournie.

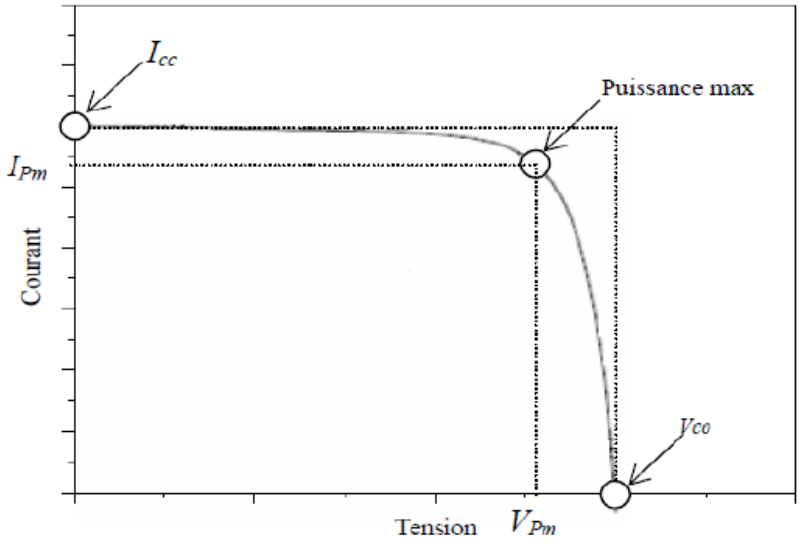


***Figure I.11**: courbe I=f(V) d'une cellule solaire [14].*

Le point de fonctionnement optimum d'une cellule solaire est donc en P_{max}, où le produit I*V est maximum. Sous un spectre AM1.5 à 25° C, cette puissance maximale est aussi appelée puissance crête et sert de référence pour comparer différentes cellules.

I.6.3.d) Facteur de forme

On appelle facteur de forme, le rapport de la puissance maximale au produit I_{cc*} V_{co} . Le facteur de forme indique la qualité de la cellule :

$$FF=\frac{Pm}{V_{co}\cdot I_{cc}} \qquad (I.6)$$

Avec I_{cc} : courant de court-circuit (obtenu pour V=0)

V_{co}: tension en circuit ouvert (obtenu pour I=0)

I.7 Equations fondamentales dans les semi-conducteurs

I.7.1 Equation de continuité

Les équations de continuité permettent de déterminer en tout point et à chaque instant la concentration des porteurs dans un semi-conducteur [4]. Dans un barreau semi-conducteur excité et parcouru par un courant dans la direction $\overrightarrow{ox}$, considérons un élément de volume de section unitaire s =1dans le plan perpendiculaire à $\overrightarrow{ox}$, et d'épaisseur dx: [10]

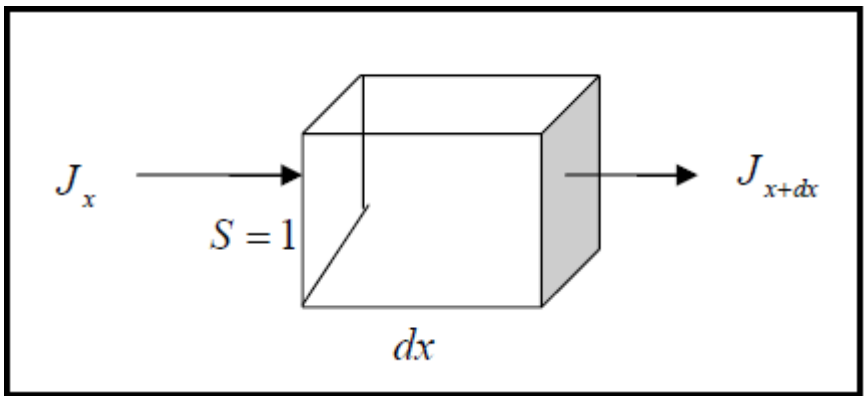


***Figure I.12**: Densité de courant des porteurs entrants à travers une section unité [10].*

En présence de génération et de recombinaison, la variation de la concentration des porteurs minoritaires obéit à la deuxième loi de Fick exprimée par : [10]

$$\frac{dt}{dn} = -div(j_x) \tag{I.7}$$

L'expression s'écrit pour les électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{dx}\left[\left(-\frac{1}{e}j_x\right) - \left(-\frac{1}{e}\left(j_x + \frac{dj_x}{dx}dx\right)\right)\right] + g_n + r_n \tag{I.8}$$

Soit, pour les électrons et les trous, le bilan des densités entrant et sortant à travers la section s, s'écrit :[10]

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e}\frac{\partial j_{nx}}{\partial x} + g_n - r_n \tag{I.9}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e}\frac{\partial j_{px}}{\partial x} + g_p - r_p \tag{I.10}$$

Ou, à trois dimensions :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e}\overrightarrow{\nabla J_n} + g_n - r_n \tag{I.11}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{e}\overrightarrow{\nabla J_p} + g_p - r_p \tag{I.12}$$

Où $g_n et\ g_p$ sont les taux de génération optique des paires électrons trous, $r_n et\ r_p$ sont respectivement les taux de recombinaisons pours les électrons et les trous, $\overrightarrow{J_n}$ et $\overrightarrow{J_p}$ sont les densités des courants des électrons et des trous. [4]

I.7.2 Equation de Poisson

L'équation de Poisson relie les variations du potentiel électrostatique (champ électrique) aux densités locales de charge. Elle s'exprime par: [4]

$$div\,(\overrightarrow{E}) = \frac{\partial E(x)}{\partial x} = \frac{\rho(x)}{\varepsilon} \qquad (I.13)$$

Où : $\vec{E}$ est le champ électrique.

$\rho = e(N_d^+ + p - N_a^- - n)$; est la densité totale des charges électriques ;N_d^+et N_a^- sont les densités des donneurs et accepteurs ionisés, $\varepsilon_r \; et \; \varepsilon_0$sont la permittivité relative et la permittivité du vide respectivement.

I.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté la physique fondamentale de la cellule solaire en vue de déférentes propriétés des matériaux semi-conducteurs et le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, et on a déduit les caractéristiques principales ainsi que les paramètre essentiels ($I_{cc}V_{co}$, FF ,P_m).

Enfin on a abordé les facteurs limitant le rendement de conversion et les modèles mathématiques pour une cellule photovoltaïque.

Chapitre II :

Etude des matériaux ZnO et CuO

II.2 Introduction

Le développement de la technologie des semi-conducteurs à base des matériaux (III-V) au cours de ces dernières années a révolutionné l'électronique et l'optoélectronique. Ce qui a abouti à l'apparition des structures à couches semi-conductrices très fines et de très bonne qualité (pureté) et à l'avènement de nouveaux produits (diode,transistor, circuit intégrés, diode laser à semi-conducteurs) ainsi que les nanostructures (puits, et boites quantiques).

Il y a une quarantaine d'années, de nombreux semi –conducteurs ont été étudiés.Parmi les plus célèbres, nous trouvons le Si et le Ge de la colonne IV du tableau périodique, ces deux semi-conducteurs sont composés d'atomes identiques, mais d'autre comme le ZnO et le CuO sont composé d'atomes d'élément différents.

L'objectif de ce chapitre est d'exposer les propriétés physiques de ces matériaux semi-conducteurs.

II.3 Intérêt de choix des matériaux TCO

La plupart des TCO fonctionnels sont des semi-conducteur qui présent une conductivité de type n, actuellement des efforts de recherche importants sont mise en œuvre pour obtenir des TCO de type p fonctionnels [17], donc les matériaux qui présente des applications multiples sont les TCO.Ces matériaux servent de contacts électriques transparents pour les cellules solaires mais aussi pour les écrans plats, les diodes électroluminescentes ou les dispositifs électroniques.

Le champ d'Applications possibles est bien plus large, mais limité par le manque de TCO type p. Le tableau 2 présente les caractéristiques qu'un TCO devrait posséder en fonction du fait qu'il soit de type n ou p, mais le gap optique doit être large d'un moins 3,1eV afin de permettre à l'ensemble de la lumière visible d'être transmise.

Paramètre	**Valeur requise pour un TCO**
Gap optique	> 3,1 eV (380 nm)
Transmittance à 550 nm	> 90% (type **n**) et > 85% (type **p**)
Résistivité	10-4 Ω.cm (type **n**) et 10-3 Ω.cm (type **p**)
Concentration de porteurs de charges	> 1020 cm-3 (type **n**) et > 1018 Ω.cm (type **p**)
Mobilité des charges	> 40 cm2.V-1.S-1 (type **n**) Et> 20 cm2.V-1.S-1 (type **p**)
Résistance carrée	≤ 10 kΩ/□

***Tableau II. 1**: Propriétés requises pour obtenir un TCO, d'après le projet NATCO [18].*

Dans le mesure où de nombreux TCO de type n aux performances supérieures à celles requises sont connus, il serait envisageable d'obtenir volontairement des TCO de type n aux performances moindres afin d'obtenir des TCO de type n et p affichant les mêmes performances. Mais les performances de tels matériaux ne devraient pas être inférieures au minimum requis pour le type p évoqué dans le *Tableau (II.1)*. La limitation se situe donc au niveau des TCO de type p, puisqu'à l'heure actuelle aucun TCO de type p n'affiche de telles performances. [18]

II.4 Propriétés des oxydes transparents conducteurs

Par définition, un TCO est un semi-conducteur à large gap, qui est à la fois, transparent dans le domaine des ondes électromagnétiques visibles, et conducteur grâce à sa concentration de porteurs libres relativement élevée. [19]

les TCO font l'objet de nombreuses recherches, c'est parce que d'une manière générale, les matériaux à la fois transparents et conducteurs sont rares. Les matériaux conducteurs connus ont tendance à être opaques (métaux, graphite…), tandis que les matériaux transparents sont isolants. Par ailleurs, dans le cas présent, puisque nous souhaitons à terme fabriquer des jonctions p-n transparentes, nous devons nous restreindre aux matériaux semi-conducteurs. [18]

En fait, il existe des semi-conducteurs théoriquement transparents dans le domaine visible, ce sont les oxydes ayant un gap supérieur à 3.1 eV, ce qui correspond à une longueur d'onde de 400 nm. Dans ce cas, les photons du spectre visible avec des énergies entre 2 et 3.1 eV [400 nm-620 nm] ne peuvent pas exciter les électrons de la BV vers la BC, par transmission à travers le semi-conducteur. La conduction des TOC est reliée à des niveaux d'énergie d'impuretés, qui résultent soit des défauts dans le matériau soit du dopage extrinsèque, ces niveaux sont proche de la BC (donneur d'électrons) pour un TCO de type-n ou de la BV (accepteur d'électrons) pour un TCO de type-p. [19]

Ainsi, un photon peut avoir suffisamment d'énergie pour exciter les électrons du niveau donneur vers la BC ou de la BV vers le niveau accepteur ; la Figure (II.1) illustre cette situation ci-après.[19]

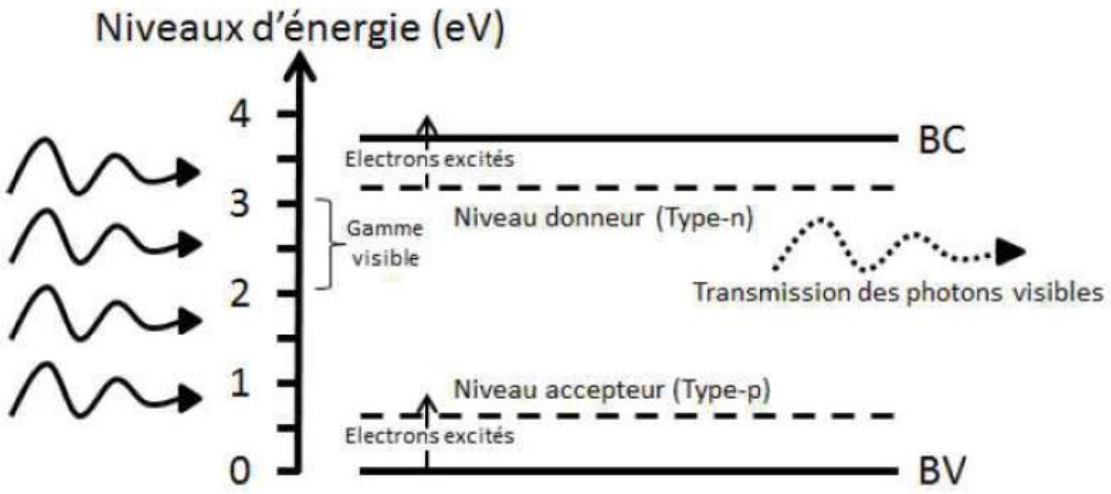


Figure II. 1 *: Gap d'un OTC. Les photons de la lumière visible peuvent avoir suffisamment d'énergie pour exciter les électrons du niveau donneur vers la BC (type-n) ou de la BV vers le niveau accepteur (type-p). [19]*

II.5 Description de ZnO et CuO

L'oxyde de zinc (ZnO)a attiré beaucoup d'attention au sein de la communauté scientifique comme étant le matériau de futur.

À partir de 1935, l'intérêt accru pour l'oxyde de zinc après l'émergence de ses propriétés d'émission, observées dans l'ultraviolet et le bleu combiné à une stabilité chimique supérieure à celle de GaN,une large énergie de Gap (≈ 3,4eV), une grande énergie de liaisonexcitonique (≈60 MeV)avec une conductivité naturelle de type n,ainsi que la capacité d'élaboration sur des substrats monocristaux et le faible seuil de puissance pour le pompage optique [20].En parallèle,l'oxyde de cuivre possède des propriétés semi-conductrices de type p, connues depuis les années 1917, il s'agit du premier oxyde connu possédant des propriétés semi conductrices, il a trouvé des applications dès 1926 grâce aux travaux de L.O Groundahl[18],qui l'utilisait pour fabriquer des diodes de redressement permettant de transformer le courant alternatif en courant continu qui lui à être utilisé vers la fin des années 40.La bande interdite large de 2,137 eV de ce dernier, fait que, en couche mince il laisse passer la lumière de longueur d'onde supérieure à 580 nm (domaine jaune) la lumière de longueur d'onde inférieure à 580 nm est partiellement ou totalement absorbée, ainsi le rayonnement vert est partiellement transmis alors que le rayonnement bleu est absorbé.

Il en résulte que les couches minces de CuO apparaissent jaune transparent à l'œil nu, cette transparence partielle à la lumière visible combinée à ses propriétés semi-conductrices, font de l'oxyde cuivreux un candidat comme oxyde transparent conducteur de type p. En tant que tel, il fait l'objet d'une activité de recherche significative. Les applications visées sont

principalement le photovoltaïque et l'électronique transparente, avec soit le développement de transistors soit la réalisation de jonctions p-n transparentes permettant à leur tour d'obtenir des diodes transparentes. [18]

II.5.1 Caractéristique structurelle

Le ZnO est un matériaupiézoélectrique, il est transparent dans le visible est dans la proche infrarouge.C'est un semi-conducteur du groupe 2-6 connu sous le nom de zincite à l'état naturel possède trois phases cristallographiques différentes:la phase Rocksalt,la phase Blende et la phase Wurtzite illustrées dans la figure (II.2).

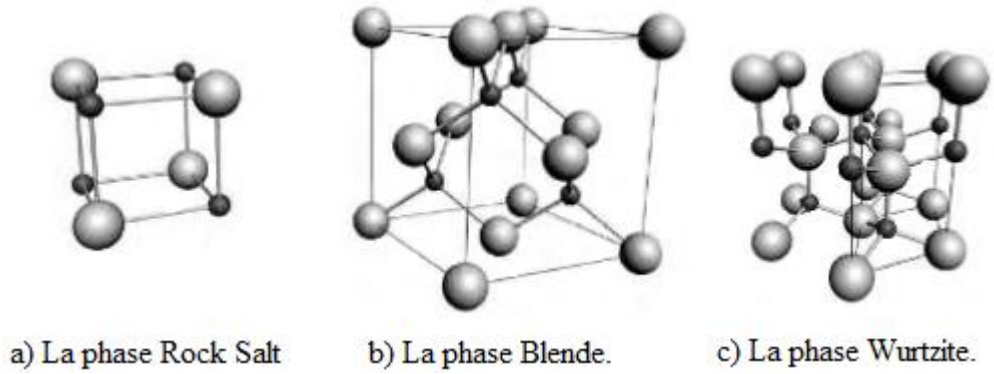


***Figure II. 2**: Les différentes phases cristallographiques de l'oxyde de zinc : les atomes O sont présentés comme de grandes sphères grises, les atomes de Zn sont les petites sphères noires[20].*

Dans notre travail, on s'est intéressé à la cristallisation selon la structure hexagonale compact de type Wurtzite de paramètre de maille a = 3.24, c = 5.20 cette structure est stable sous les conditions normales

Avec : u=3/8= 0.375

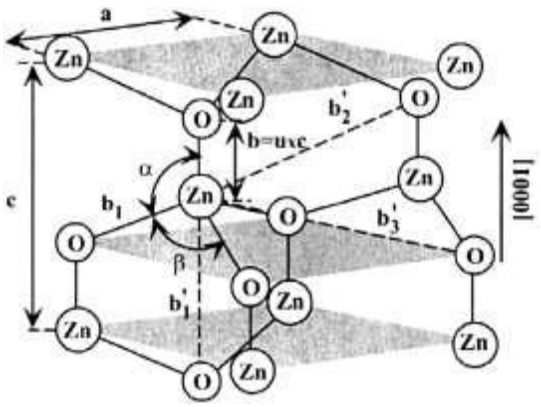


***Figure II. 3**: Les plans cristallographiques du ZnO [20].*

α et β dans la figure ci-dessus représentent les angles de liaison et ils sont égaux à 109.07° dans un cristal wurtzite idéal. Le tableau (II.2) représente quelques paramètres telque la distance séparant les plans réticulaires et la condition de stabilité.

u	La longueur de lien parallèle à l'axe (oz)	U=(1\3)(a^2\c^2)+1\4
1\d^2_{hkl}	Distance à séparant les plan réticulaires	4\3a^2(h^2+hk+k^2)+l^2\c^2
R_a\R_c	Condition de stabilité	0,225 <R_a\R_c<0,414
R_a	Rayon de l'anion	
R_c	Rayon de cation	

***Tableau II. 2** :Le paramètre U et la distance séparant les plans réticulaires et la condition de stabilité.*

L'oxyde de zinc cristallise selon la structure la plus stable ; c'est-à-dire la structure Wurtzite, dans laquelle les ions d'oxygène sont disposés suivant un réseau de type hexagonal compact, et les atomes de zinc occupent la moitié des positions interstitielles tétraédriques ayant le même arrangement que les ions d'oxygène (voir Figure II.4), En fait l'environnement de chaque ion n'est pas une symétrie exactement tétraédrique. La distance entre les proches voisins dans la direction c'est plus petite que pour les autres voisins, ceci est à l'origine de la piézoélectricité du ZnO.

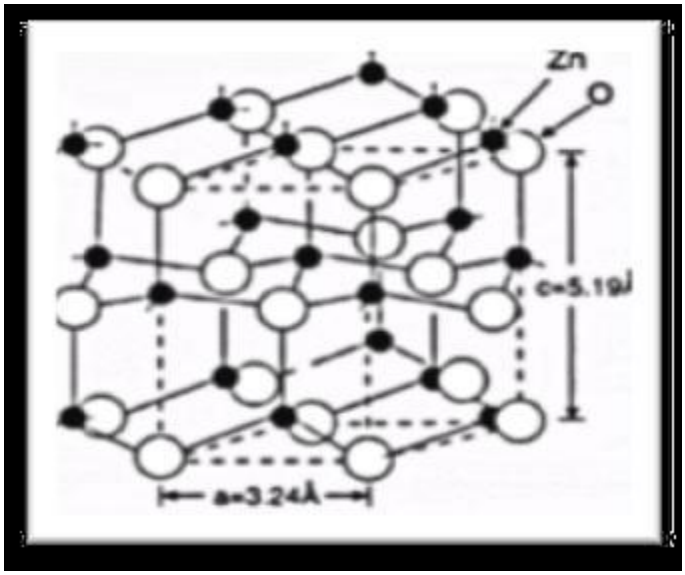


***Figure II. 4**:La structure cristallographique de ZnO [21].*

Chaque atome de zinc est entouré par quatre atomes d'oxygène situés aux sommets d'un tétraèdre. En fait, l'atome de zinc n'est pas exactement au centre du tétraèdre mais déplacé de 0,11 Å dans une direction parallèle à l'axe c. Les molécules d'oxyde maintiennent donc, dans une certaine mesure, leur individualité, contrairement à ce que l'on attendrait d'un cristal purement ionique. Ce phénomène est dû à l'homopolaire des liaisons Zn-O. [21]

De l'autre côté on va parler sur la caractéristique structurelle de l'oxyde de cuivre, le CuO ou ténorite se distingue des monoxydes de métaux de transition *3d* par sa structure monoclinique. Il s'agit d'un solide ionique noir ayant comme température de fusion et d'évaporation 1064°C et 1100°C respectivement. Dans cette structure, le cuivre se situe au centre de plans carrés définis par des anions oxygène. La ténorite cristallise dans le groupe d'espace C2/*c* avec des paramètres de maille définis dans le Tableau (II.3)

	CuO	
Groupe d'espace	C2/c	
Paramètre de maille (Å)	a = 4.6883 b = 3.4229 c = 5.1319	β = 99.51°
Volume ($Å^3$)	81.22	
Volume molaire ($cm^3.mol^{-1}$)	12.21	
Masse volumique ($g.cm^3$)	6.505	
Z	4	

Tableau II. 3 : *Données cristallographiques de ténorite [22].*

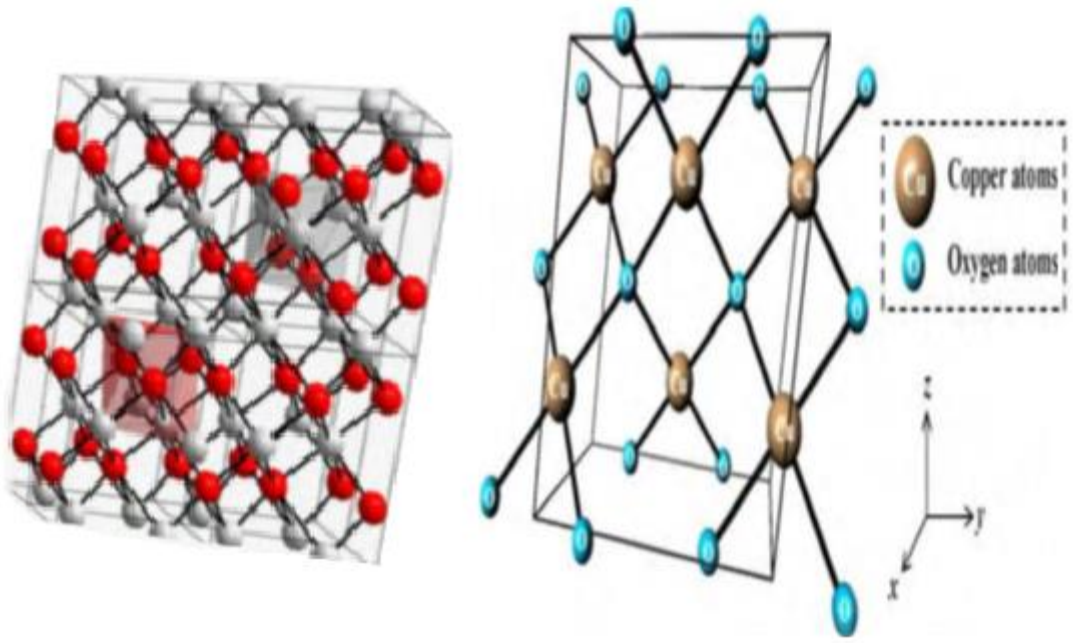


Figure II. 5 *: Représentation schématique de la structure cristallographique de CuO:les sphère grises représentent les ions Cu^{2+}et les sphère rouges les ions O^{2-}[22].*

la maille élémentaire de CuO (a = 4,6837Å,b = 3,4226Å,c=5,1288Å)comporte des ions Cu^{2+} coordonnés par quatre (4) ions O^{2-}dans une configuration planaire approximativement carrée[22].

II.5.2 Propriété électrique

La propriété la plus importante dans un semi-conducteur est sa structure de bandes. Celle-ci permet de tirer d'autres propriétés importantes. Pour déterminer la structure de bande on fait appel aux techniques d'émission par UV ou rayon X qui travaillent soit en réflexion ou absorption.

Le tableau(II.4) regroupe les principales propriétés électriques de ZnO. Sachant qu'il est possible de modifier largement les propriétés d'oxyde de zinc par son dopage :

Nature de la bande interdite	Directe
Largeur de la bande interdite à 4,2 K	3,4 eV
Largeur de la bande interdite à 300 K^0	3,34 eV± 0,02
Type de la conductivité	n et p
Mobilité maximale des électrons	200$cm^2/V.s$
Masse effective des électrons	0,28 m_0
Masse effective des trous	0,60 m_0
Densité d'états dans BC	3,71 .$10^{18}cm^{-3}$
Densité d'états dans BV	1,16 .10^{19} cm^{-3}
Vitesse thermique des électrons	2,2 .10^7 $cm.s^{-1}$
Vitesse thermique des trous	1,5 .10^7 $cm.s^{-1}$
Résistivité maximale	$10^6\Omega.cm$
Résistivité minimale	10^{-1} Ω.cm

Tableau II. 4:*Quelques propriétés électriques de ZnO [21].*

L'oxyde de cuivre est également un semi-conducteur de type p avec une bande gap $E_g$comprise entre 1.2 et 1.4 eV, le CuO montre généralement une faible conductivité. De grandes variations dans les valeurs de résistivité ont été reportées ainsi qu'une forte dépendance de la résistivité en fonction de la méthode d'élaboration de 1 à 107 W.cm,

L'évolution de la conductivité avec la température montre cependant un comportement original pouvant être utilisé en tant que composant clé pour les verres semi-conducteurs ou bien encore les capteurs de gaz à base de semi-conducteurs.Les possibles raisons de ce comportement sont : la faible quantité d'impureté dans le composé et sa stabilité en température dans une atmosphère à faible pression partielle d'oxygène.[22]

II.5.3 Gap d'énergie

Pour le ZnO la bande de valence et les limites de bande de conductionappartient aux mêmes valeurs de Γ, c'est le cas d'un semi-conducteur à gap direct. La figure (II.7) montre six bandes de valence entre -6 eV et 0 eV, ces six bandes de valence correspondent à l'orbitale 2p de l'oxygène,qui contribue à la structure de bande Srikant et Clark ont mesuré le gap d'énergie du ZnO à un température ambiante,ils ont trouvé qu'il est égal à 3,3 eV tandis qu'il a été démontré aussi qu'une bande de valence à la transition de Niveau de donneur à~3,2 eV donc on peut conclure que le gap d'énergie de ZnO à la température ambiante est en générale compris entre 3,2 et 3,3 eV.[20]

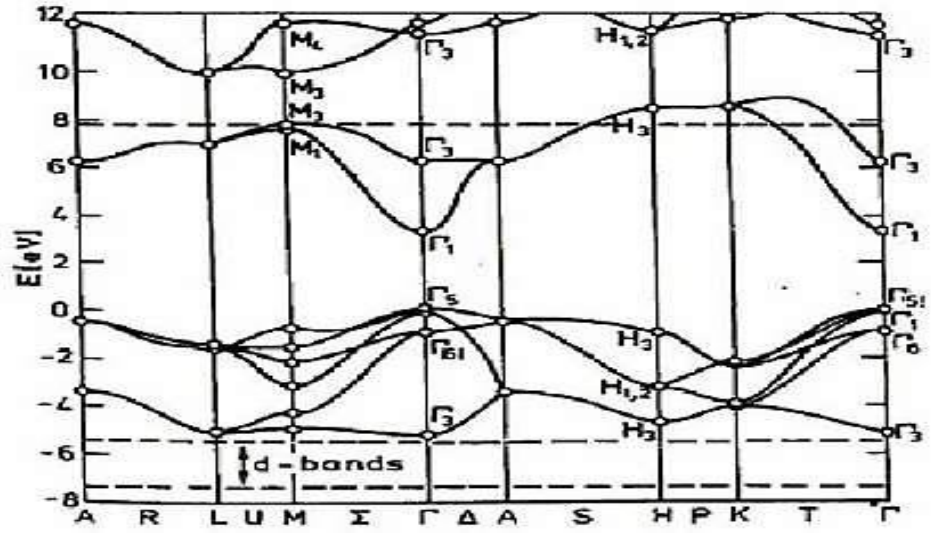


Figure II. 6 *:La structure de bande du ZnO [20].*

II.5.4 Propriétés Optiques

II.5.4.a) Propriétés optiques de ZnO

Les propriétés optiques des couches minces de ZnO dépendent des conditions de préparations et de la méthode de dépôt utilisée.[24]Le ZnO est un semi-conducteur à grand gap (3.3 eV à 300 K) lorsqu'il est préparé dans les conditions classiques, ce qui lui permet d'être transparent au spectre solaire dans le domaine du visible. Dans le cas d'un dopage élevé, le gap peut augmenter jusqu'à 3.9 eV [25]. Cette caractéristique est nécessaire pour que le matériau soit transparent. En effet, avec un gap supérieur à 3 eV, l'énergie du spectre du visible hν (1,65 <hν< 3,26 eV) est insuffisante pour être absorbée par un mécanisme de transition électronique, de la bande de valence à la bande de conduction. [25]

L'indice de réfraction de l'oxyde de zinc sous la forme massive est égal à 2,0[26]. En couches minces, son indice de réfraction et son coefficient d'absorption varient en fonction des conditions d'élaboration des couches. L'indice de réfraction a une valeur variant entre 1,7 et 2,2

suivant les auteurs [27,28]. L'amélioration de la stœchiométrie du ZnO conduit à unediminution du coefficient d'absorption et à une augmentation de l'énergie de la bande interdite [29,30].

L'émission UV ou l'émission excitonique à 380 *nm* due à la recombinaison de pair électron trou, tandis que les émissions dans la partie du visible sont dues aux défauts de ZnO. L'origine de chaque position de la bande photoluminescence (PL) de ZnO, déterminée par les calculs théoriques, est présentée dans le tableau (II.5). [24]

Position de pic (*nm*)	**Origine proposée**
273-390	Gap
~ 402	O_{Zn}
~ 446	niveaux peu profonds-lacunes d'oxygène
~ 449	zinc interstitiel (Zn_i)
~ 495	lacune d'oxygène (V_o)
~ 510	défauts de surface
~ 510	lacune d'oxygène simplement ionisée (V_o^*)
~ 520	lacune de zinc (V_{Zn})
~ 520	O_{Zn}
~ 520	Lacune d'oxygène et zinc interstitiel (V_O, Zn_i)
~ 540	lacune d'oxygène doublement chargée (V_o^{**})
~ 560	défauts de surface
~ 566	les niveaux donneurs peu profonds-accepteurs profonds (V_{Zn})
~ 580	O_i
~ 590	H_i
~ 526	O_i

***Tableau II. 5** :Origine proposée pour chaque pic photoluminescence (PL) de ZnO à 300 K [24].*

II.5.4.b) Propriétés optiques de CuO

Les cations de métaux de transition (sous-couche d incomplète) forment des oxydes stables, souvent colorés. Pour les pierres précieuses tout comme les simples pigments, ceux sont principalement des transitions électroniques qui sont responsables des propriétés d'absorption de ces oxydes. Deux grandes classes de transitions sont à distinguer : Les transitions interatomiques qui donnent généralement naissance à de larges fronts d'absorption

et les transitions interatomiques autorisées pour certaines, et pour d'autres non permises pour l'ion libre mais qui le deviennent sous l'effet du champ des ligands. Ces dernières sont à l'origine de transitions souvent moins intenses que les précédentes car la probabilité de transition ou la force d'oscillateur associée à la transition demeure plus faible.[31]

L'indice de réfraction du CuO sous forme de couche mince et son coefficient d'absorption varient en fonction des conditions d'élaboration. L'indice de réfraction a une valeur qui est comprise entre 1,90 et 3 selon la méthode de dépôt. [32]

II.6 Dopage

Le dopage consiste à introduire un élément supplémentaire dans la couche à faible concentration (typiquement, 3% ou moins). Cet élément a pour but de rajouter des niveaux d'énergie dans le matériau qui, à leur tour, peuvent en s'ionisant introduire des électrons dans la bande de conduction ou des trous dans la bande de valence, et donc augmenter la densité de porteurs de charges de celui-ci, et par suite diminuer la résistivité. Le dopage peut également exercer une influence sur les propriétés optiques en rendant le gap optique plus faible.

II.6.1 Dopage de ZnO

Le ZnO est considéré comme étant un semi-conducteur de type n. Pour un ZnO non dopé de haute qualité, la concentration en donneurs est généralement autour de $10^{17}cm^{-3}$[20]. Le dopage du type n de l'oxyde de zinc s'effectue en substituant des atomes de zinc ou d'oxygène du réseau par des atomes étrangers.

II.6.2 Dopage de CuO

Dans notre cas, nous souhaitons élargir la bande interdite optique du CuO tout en conservant une bonne conduction de type p. Cela implique que le dopant choisi doit introduire des accepteurs, le plus proche possible du sommet de la bande de valence, afin qu'ils s'ionisent facilement et donc introduisent un grand nombre de trous dans la bande de valence. Par ailleurs, afin d'élargir le gap optique, l'effet Moss-Burstein pourrait ici s'avérer utile, ce qui implique des taux de dopage élevés.

II.7 Conclusion

Nous avons vu dans ce chapitre les caractéristiques et les propriétés deZnO/CuO tant sur le plan structurel, qu'électronique et optique et leur dopage.

Nous avons choisir le matériau ZnO et CuOpour la simulation de la jonction pn, a cause de coût de fabrication, et ils ont des bonnes propriétésqui aident à fabriquer des panneaux solaires de haute qualité,

Parmi les grandeurs caractéristiques principales des cellules solaires : Le courant de court-circuit Icc, qui est obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule, il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule. La tension du circuit ouvert Vco, qui est obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul. La puissance maximale, Le facteur de forme FF.

De point de vue expérimentale, nous pouvons changer l'énergie de gap à partir de la température de cristallisation des couches de ZnO ou de CuO ou bien on peut avoir un changement de l'énergie de gap a partir du nombre de couches de même espèce de même matériau. Comme on peut aussi avoir un shift de l'énergie de gap en fonction du dopage (changer la concentration l'élément dopant).

Chapitre III : Simulation d'une cellule solaire par logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 5.5

III.1 Introduction

Dans ce présent travail, nous avons utilisé une simulation numérique pour étudier les cellules photovoltaïques en couche mince à base de matériaux TCO, ayant des dimensions de l'ordre du micromètre, nous allons pouvoir procéder dans ce dernier chapitre à la modélisation et simulation de notre modèle sous les environnements COMSOL MULTIPHYSICS. Mais avant cela, on va d'abord faire une petite présentation du logiciel utilisé (COMSOL MULTIPHYSICS).

III.2 Présentation de logiciel de simulation COMSOL MULTIPHYSICS

COMSOL MULTIPHYSICS (FEMLAB) est un logiciel de simulation numérique capable de simuler quasiment tous les phénomènes physiques et de nombreuses applications dans l'ingénierie. Ce logiciel basé sur la méthode des éléments finis est apparu pour la première fois en 1986, ce dernier a été conçu par des étudiants de l'institut royal de technologie de Stockholm en Suède.

La modélisation d'un système sous COMSOL MULTIPHYSICS passe généralement par cinq étapes essentielles. On commence d'abord par définir la géométrie de notre système en définissant les caractéristiques de son environnement ou de son milieu (dimension, repères et volumes…etc.). Après on va déterminer la physique du système. Et enfin, dans la dernière étape on va résoudre les équations du systèmeet afficher les résultats obtenus.

Dans notre simulation, on a étudié le modèle de cellule solaire consiste en une jonction p-n en CuO(p)/ZnO(n) à 2D avec génération de porteurs et Recombinaison Shockley-Read-Hall. Le mécanisme de génération de porteurs à partir de l'effet photovoltaïque n'est pas modélisé en détail. Au lieu de cela, par souci de simplicité, une variable dépendante de l'espace définie par l'utilisateur est créée pour le taux de génération, le modèle Shockley-Read-Hall est utilisé pour capturer l'effet de recombinaison principal. Dans des conditions de fonctionnement normales, les supports photo-générés sont balayés de chaque côté de la région d'appauvrissement de la jonction pn. Une petite tension de polarisation directe est appliquée pour extraire la puissance électrique, donnée par le produit du photo-courant et de la tension appliquée. Nous avons choisis pour faire ce travail le COMSOL MULTIPHYSICS version 5.5 qui a de diverses fonctionnalités.

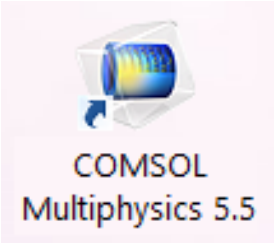


***Figure III. 1**:L'icône de COMSOL MULTIPHYSICS 5.5.*

Pour lancer le logiciel on clique sur l'icône de COMSOL, la fenêtre de logiciel s'ouvre.



***Figure III. 2**: La première fenêtre delancement du logiciel COMSOL MULTIPHYSICS 5.5.*

III.2.1 Choix du modèle

Nous avons choisir le modèle Wizard.

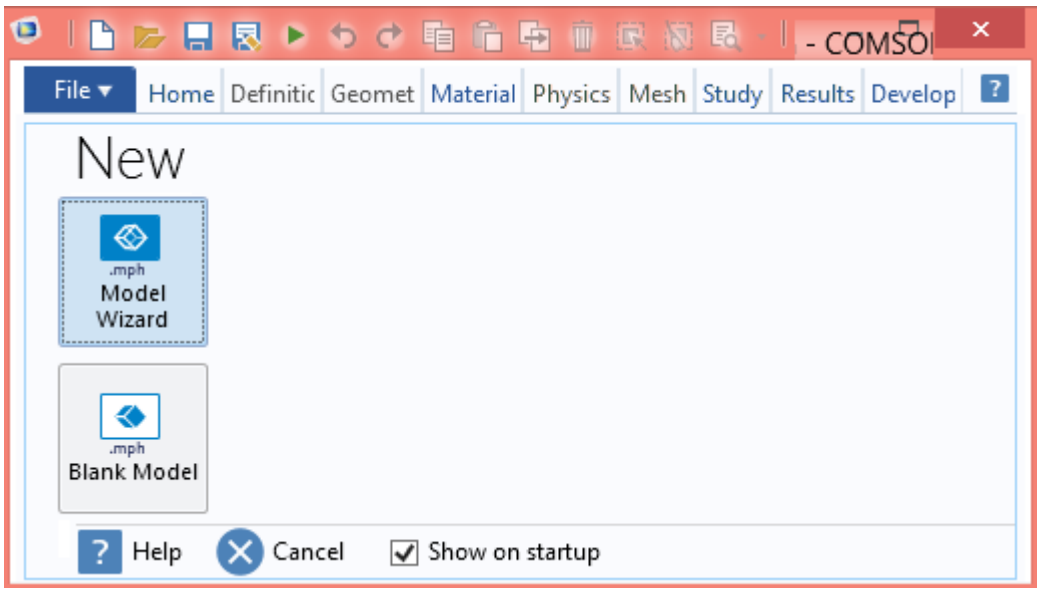


***Figure III. 3**: Les modèles existent dansCOMSOL MULTIPHYSICS 5.5.*

III.2.2 Sélection de la dimension d'espace

Il existe plusieurs dimensions de l'espace, pour chaque étude nous choisissons une dimension spécifique.

Dans notre simulation, nous avons choisi 1D, car la jonction possède une symétrie axiale.

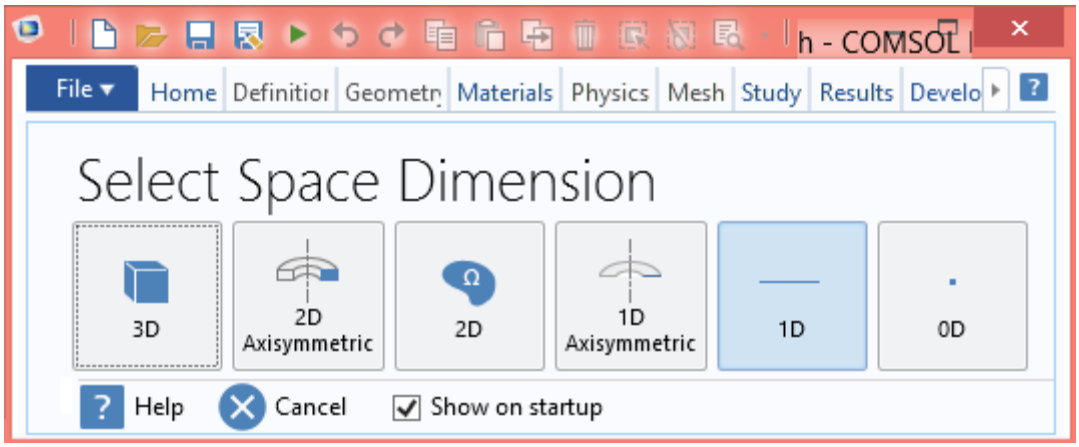


***Figure III. 4**: Les différentes dimensions de l'espace existent dans COMSOL.*

III.2.3 Choix de la physique

Après la sélection de la dimension d'espace, on procède au choix de la physique à utiliser selon la simulation qu'on va faire, la figure(III.5) montre les différentes physiques existantes dans le logicielCOMSOL MULTIPHYSICS 5.5.

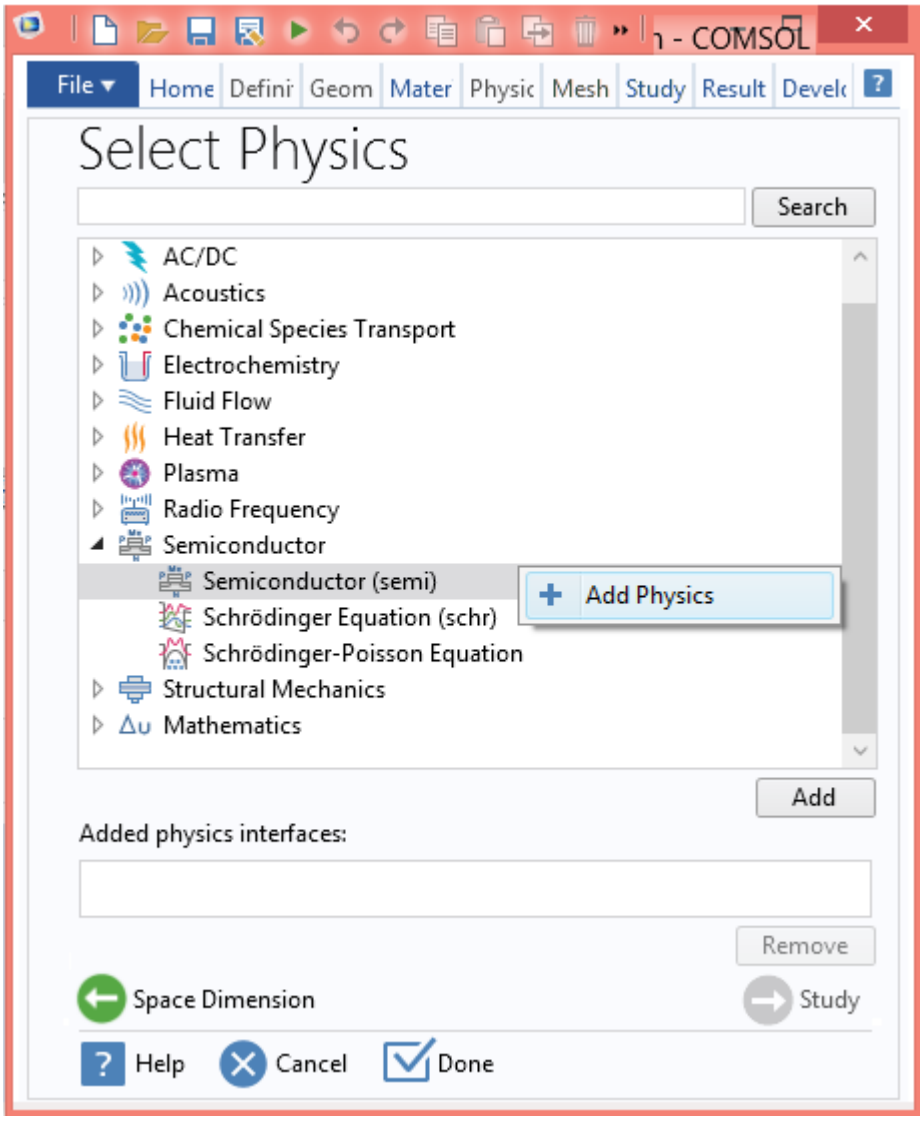


Figure III. 5*: Le choix de la physique utilisée.*

- **Modèle AC/DC** : les interfaces d'AC/DC sont employées pour calculer les champs électriques et magnétiques dans les systèmes statiques et de basse fréquence.

- **Modèle Acoustique** : les interfaces d'acoustique sont employées pour calculer la propagation des champs acoustiques dans de diverses conditions dans le domaine de fréquence et de temps.

- **Modèle Transport d'espèces chimiques** : les interfaces de transport d'espèce chimiques sont employées pour calculer les champs de concentration des espèces chimiques dans les solutions.

- **Modèle Electrochimie** : la branche d'électrochimie contient les interfaces génériques de physique pour modeler des distributions potentielles et courantes en cellules électrochimiques.

- **Modèle Ecoulement fluide** : les interfaces de flux de fluide sont employées pour simuler des champs d'écoulement et de pression des liquides et des gaz.

- **Modèle Transfert de chaleur** : les interfaces de transfert thermique sont employées pour calculer la température et les champs radiatifs d'intensité. Les interfaces de COMSOL calculent également d'autres champs physiques comme la vitesse, la pression ou les champs électromagnétiques.

- **Modèle Optique** : les interfaces de système optique sont employées pour calculer les champs électriques et magnétiques pour des systèmes dont la longueur d'onde est comparable ou plus petite que le dispositif ou le système étudié.

- **Modèle Plasma** : la branche de plasma contient des interfaces de physique pour modèle de plasma.

- **Modèle Radio fréquence** : les interfaces de fréquence par radio sont employées pour calculer les champs électriques et magnétiques dans les systèmes à haute fréquence.

- **Modèle Mécanique des structures** : la branche structurale de mécanique contient des interfaces de physique pour analyser des déformations, des efforts, et des contraintes des structures pleines.

- **Modèle Semi-conducteur** : la branche de semi-conducteur contient l'interface de semi-conducteur, qui résout l'équation de Poisson pour le potentiel électrique et les équations de diffusion de dérive pour les électrons et les trous dans un matériel de semi-conducteur.

- **Modèle Mathématiques** : la branche de mathématiques contient des interfaces pour l'analyse de sensibilité, modèlent les mailles mobiles et les géométries déformés, et plus.

Nous avons choisi la physique **Semiconductor**>**Semiconductor (semi)**.

III.2.4 Sélectionner l'étude

La rubrique d'étude nous permet de sélectionner ou bien de définir un domaine d'étude approprié à la physique utilisé.

Nous avons choisi **SemiconductorEquilibrium**

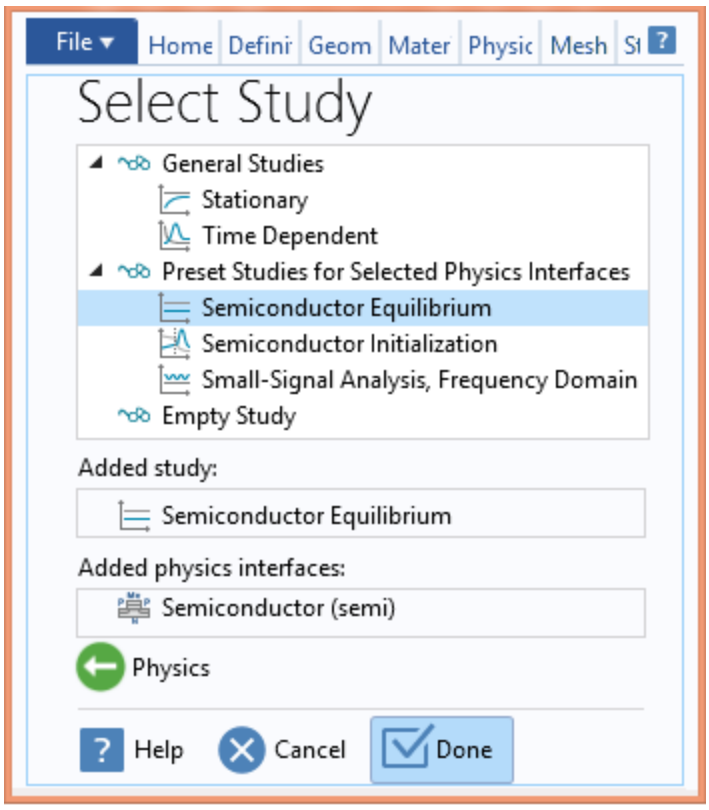


***Figure III. 6**: Les différents domaines d'études existants dans la physique**Semiconductor (semi)**.*

III.2.5 Définir la géométrie

Une fois le domaine physique et le domaine d'étude ont été choisis, on commence à déterminer la géométrie de notre structure. La figure (III.7) montre l'interface de travail qui nous permet d'obtenir la géométrie voulue.

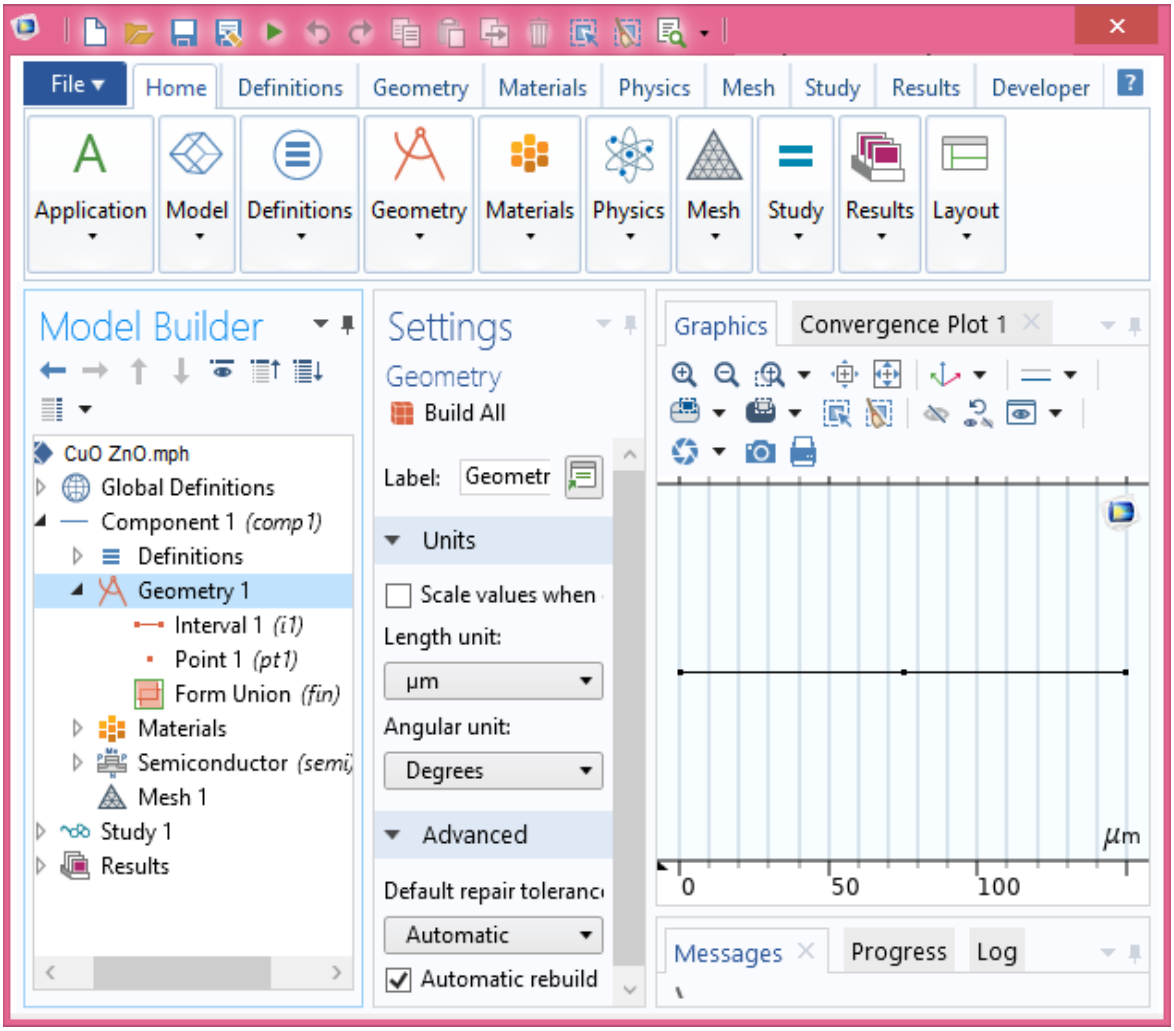


***Figure III. 7**: La création de la géométrie.*

Nous avons dessiné la géométrie comme une ligne droite de 150 µm de long, puis l'avons divisée en deux parties en ajoutant un point à 75 µm, pour obtenir deux région (création de la jonction « pn »Cu_2O(p) 75 µm et ZnO (n) 75 µm).

III.2.6 Choix de matériaux

La rubrique de choix de matériaux comporte une large gamme de matériaux qui sont disponible sur le logiciel, et du même, ce logiciel nous offre une possibilité de créer un matériau en lui associant toutes les caractéristique disponible dans les études théoriques.

Dans notre travail on va choisir le matériau Cu_2O [solide] pour la première région « p » et le matériau ZnO[solide,a-axis] pour la deuxième région « n ».

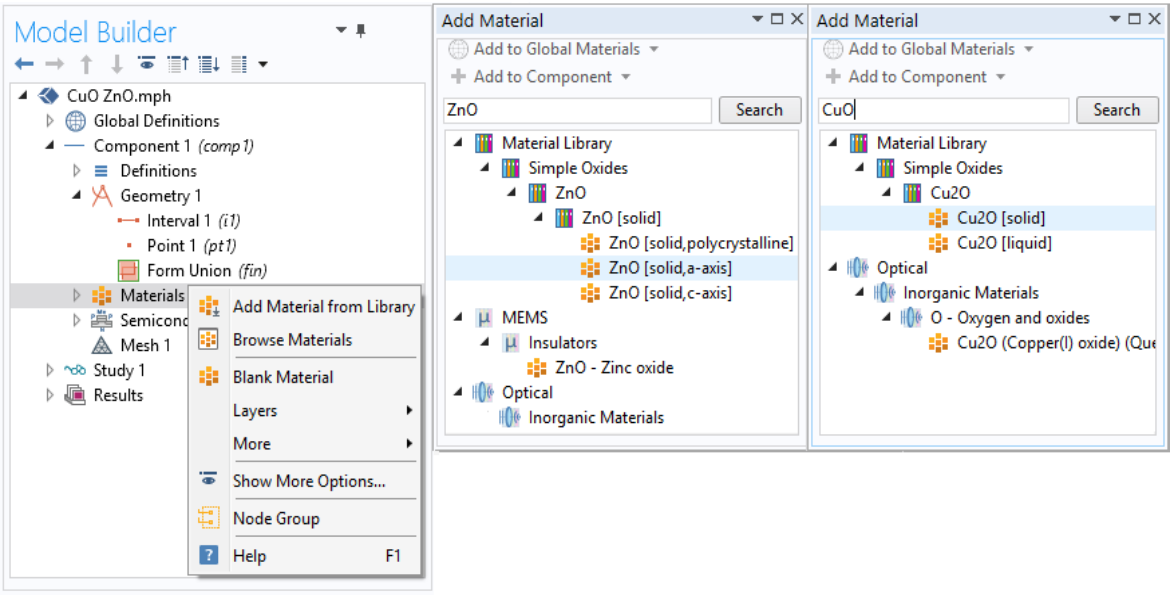


***Figure III. 8**: Le choix des matériaux Cu_2O et ZnO.*

Après avoir ajouté les matériaux, nous avons définir de domaine (la position) de chacun sur la ligne tracée.

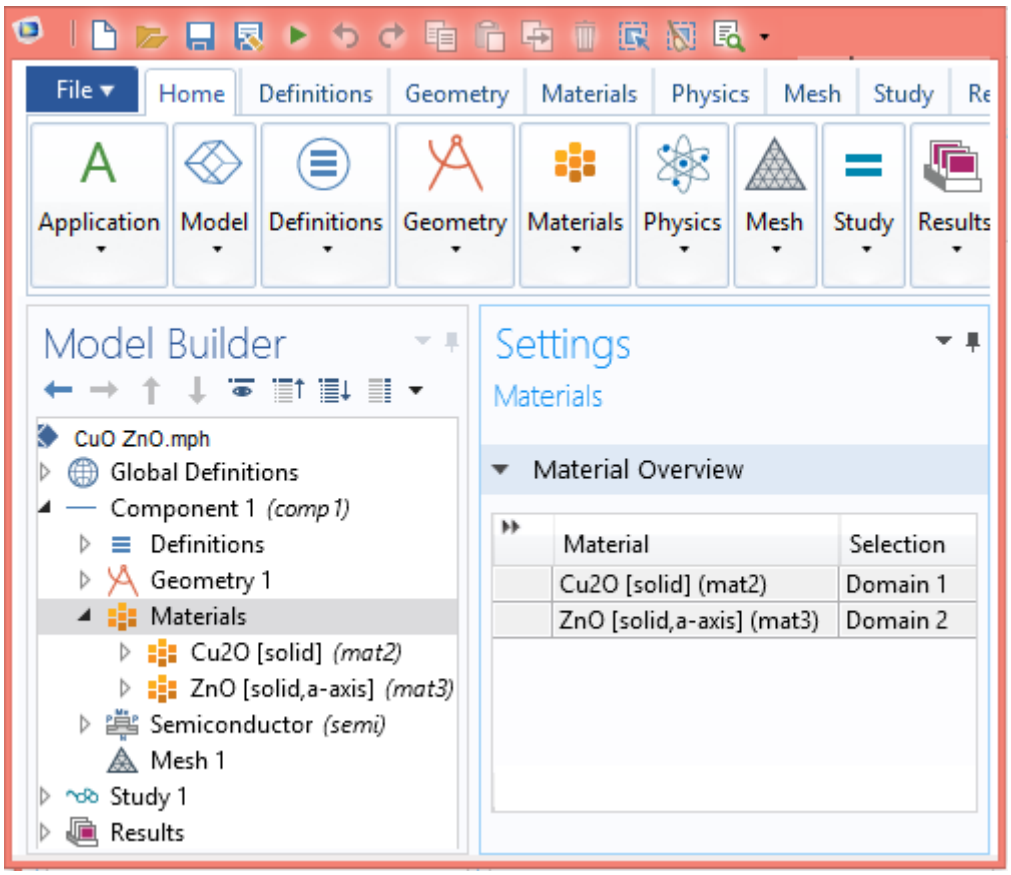


***Figure III. 9**: Le domaine (la position) des matériaux Cu_2O et ZnO.*

III.2.7 Paramètre de simulation

Pour le matériau Cu_2O, la figure (III.10) représente les paramètres de Cu_2O.

Property	Variable	Value	Unit	Property group
Relative permittivity	epsilonr_...	8.8	1	Basic
Band gap	Eg0	2.09[V]	V	Semiconductor material
Electron affinity	chi0	3.2[V]	V	Semiconductor material
Effective density of states, valence band	Nv	1.11*10^19[cm^-3]	$1/m^3$	Semiconductor material
Effective density of states, conduction band	Nc	2.47*10^19[cm^-3]	$1/m^3$	Semiconductor material
Electron mobility	mun	47[cm^2/(V*s)]	$m^2/(V·s)$	Semiconductor material
Hole mobility	mup	0.1[cm^2/(V*s)]	$m^2/(V·s)$	Semiconductor material
Electron lifetime, SRH	taun	10[us]	s	Shockley-Read-Hall recombination
Hole lifetime, SRH	taup	10[us]	s	Shockley-Read-Hall recombination

***Figure III. 10**: Les paramètres de Cu_2O.*

Pour le matériau ZnO, la figure (III.11) représente ses paramètres.

Property	Variable	Value	Unit	Property group
Relative permittivity	epsilonr_...	10.9	1	Basic
Band gap	Eg0	3.42[V]	V	Semiconductor material
Electron affinity	chi0	4.35[V]	V	Semiconductor material
Effective density of states, valence band	Nv	7.155*10^19[cm^-3]	$1/m^3$	Semiconductor material
Effective density of states, conduction band	Nc	4.45*10^18[cm^-3]	$1/m^3$	Semiconductor material
Electron mobility	mun	102[cm^2/(V*s)]	$m^2/(V·s)$	Semiconductor material
Hole mobility	mup	160[cm^2/(V*s)]	$m^2/(V·s)$	Semiconductor material
Electron lifetime, SRH	taun	10[us]	s	Shockley-Read-Hall recombination
Hole lifetime, SRH	taup	10[us]	s	Shockley-Read-Hall recombination

***Figure III. 11**: Les paramètres de ZnO.*

III.2.8 Maillage

Le maillage correspond à la discrétisation spatiale de la géométrie en volumes élémentaires appelés mailles. Le maillage est réalisé automatiquement par le logiciel. On peut utiliser les tailles prédéfinies extra grossier ; grossier ; normal ; fine ou extra fine...etc.

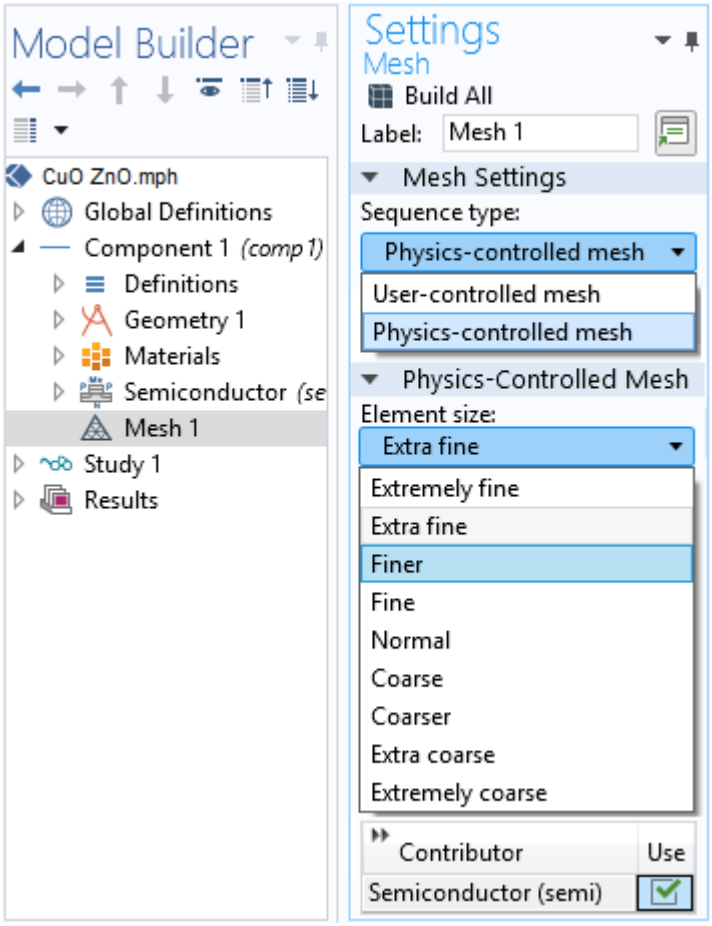


***Figure III. 12**: Les paramètres de maillage.*

III.2.9 Lancement de la simulation et analyse des résultats

Le lancement de la simulation se fait une fois que toutes les étapes citées au part avantsont réalisées. Le logiciel compile toutes les données, et nous donne à la fin tous les résultatsobtenu lors de la simulation.

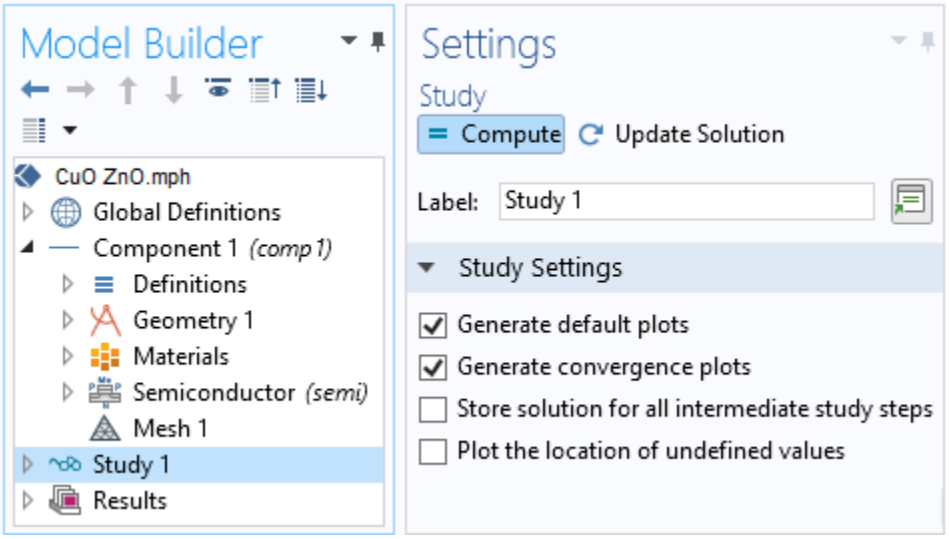


***Figure III. 13**: Lancement de la simulation.*

III.3 Résultats et Discussion

Ce didacticiel utilise un modèle 1D simple d'une cellule solaire en silicium pour illustrer les étapes de base de la configuration et de l'exécution d'une simulation physique de dispositif avec le module semi-conducteur. Une expression définie par l'utilisateur est utilisée pour le taux de photo-génération et le résultat montre les courbes I-V et P-V typiques des cellules solaires [33].

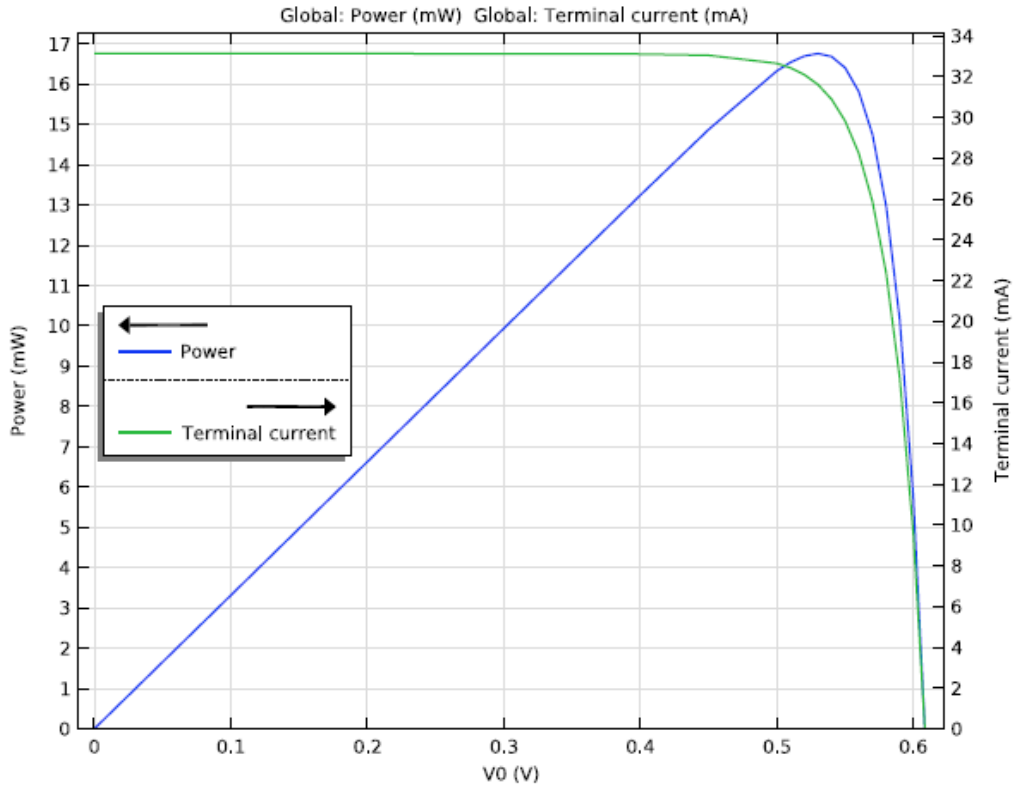


***Figure III. 14**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)d'une jonction à base de Silicium[33].*

Pour valider le travail de logiciel on va essayer le modèle de la jonction pn à base de Silicium en 1D, Nous avons été refaire le même travail,La résultat obtenu présente dans la ***Figure III.15.***

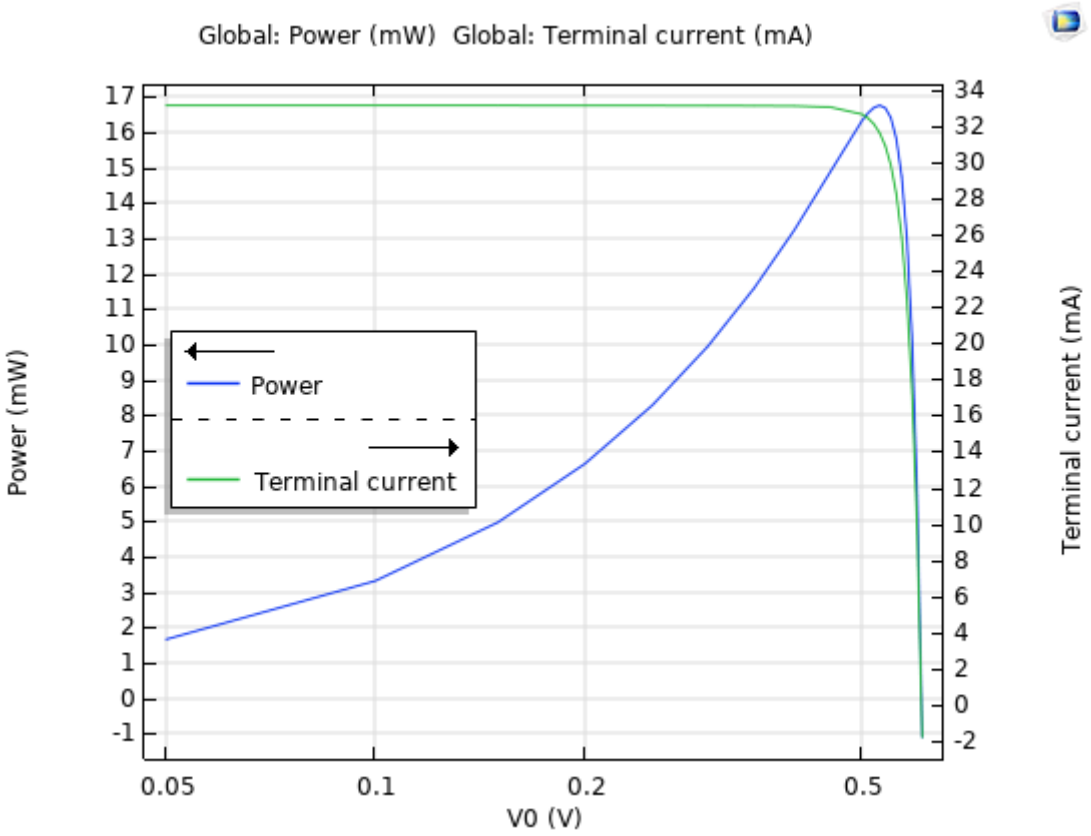


Figure III. 15: Les courbes I=f(V) et P=f(V)d'une jonction à base de Silicium.

A partir de la comparaison entre le travail obtenu de [33] et le travail qui nous avons fait on remarque que l'allure générale de la variation de *I=f(V) et P=f(V)*ça ressemble exactement à l'allure de ce modèle de Si [33], ce qui preuve la fiabilité de notre programme.

III.3.1 Variation de la longueur des couches n et p par la variation de la position du point centré.

On applique par la variation de la position du point centré, les dimensions de la zonen et la zonep.

Les résultats obtenus au cours de nos simulations sont représentés dans les figures (III-16) jusqu'à (III-12).

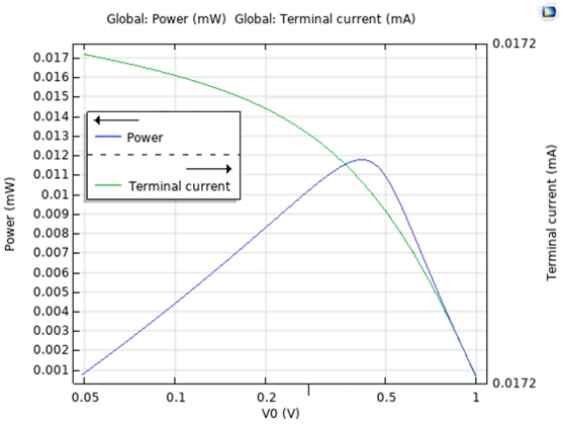


***Figure III. 16**: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 35µm.*

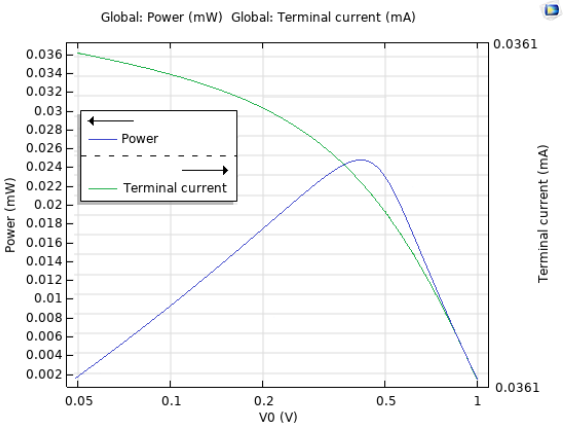


***Figure III. 19**: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 55µm.*

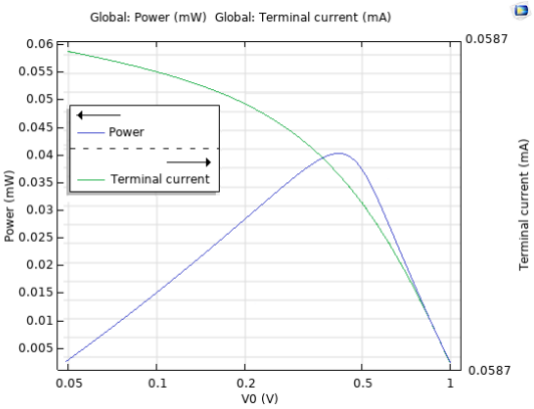


Figure III. 17: *Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 75µm.*

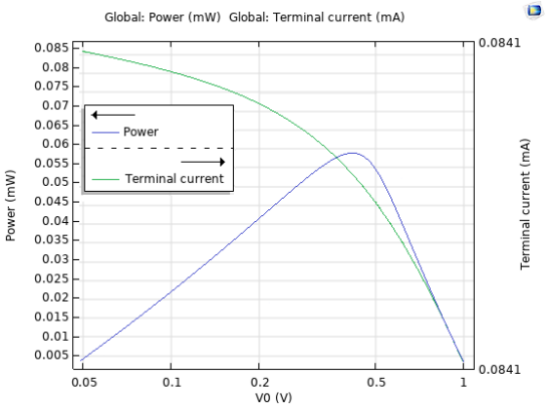


***Figure III. 20**: Les courbes I=f(V) et P=f(V) au point 95µm.*

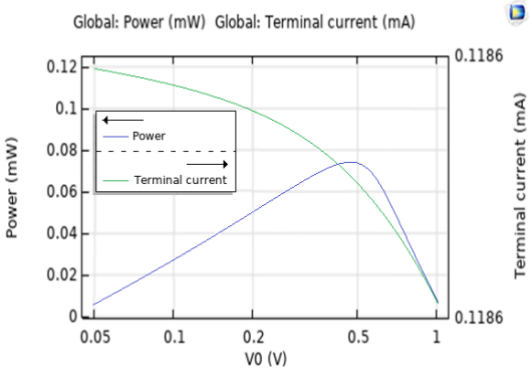


***Figure III. 18**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)au point 120µm.*

Ces graphiques nous permettent de lire les paramètres de fonctionnement essentiels tels que la tension en circuit ouvert, le court-circuit courant et la puissance maximale.

En comparant les résultats obtenus en faisant varier la longueur de la couche p et n,on constate d'après (les figuresde III.16 jusqu'à III.20)que l'allure générale des courbes restepratiquement la même, et quel'effet de la varierons des longueurs des couche pn

(augmente la longueur de la couche p et minimise la longueur de la couche n au même temps) fait augmenter le courant terminalde la cellule photovoltaïque, et aussi la puissance

III.3.2 La Variation des valeurs de l'énergie de gap des couches p et n

- Variation de l'énergie de gap de la couche p (de 2.1 eV jusqu'à 2.3 eV) en fixons celles des couches n (Eg = 3.42 eV) ;
- Variation de l'énergie de gap de la couche n (de 3.42 eV jusqu'à 3.8 eV) en fixons celle de couches p (Eg = 2.1 eV) ;

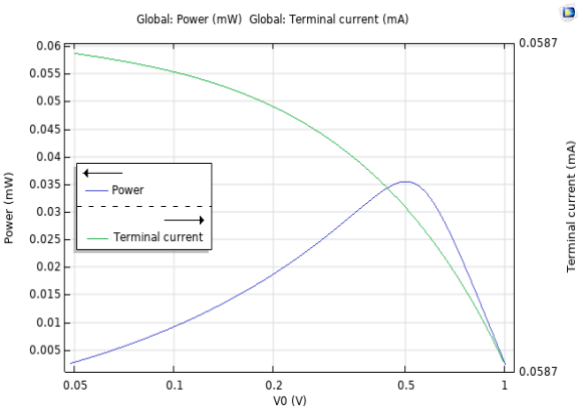


***Figure III. 21**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)[Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.42 eV].*

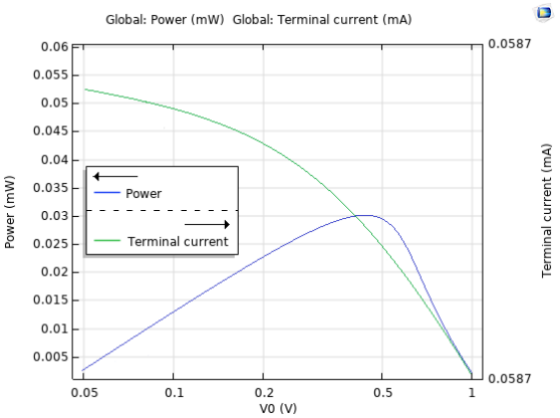


***Figure III. 23** : Les courbes I=f(V) et P=f(V)[Eg(p)=2.3 eV, Eg(n)= 3.42 eV].*

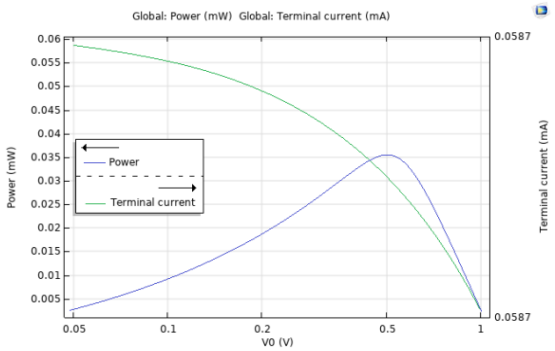


***Figure III. 22**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)[Eg(p)=2.2 eV, Eg(n)= 3.42 eV].*

En faisant varier l'énergie de gap de la couche p et n, nous avons constaté que : l'allure générale des graphes est presque identique, mais les valeurs de la puissance maximal ont une légère différence.

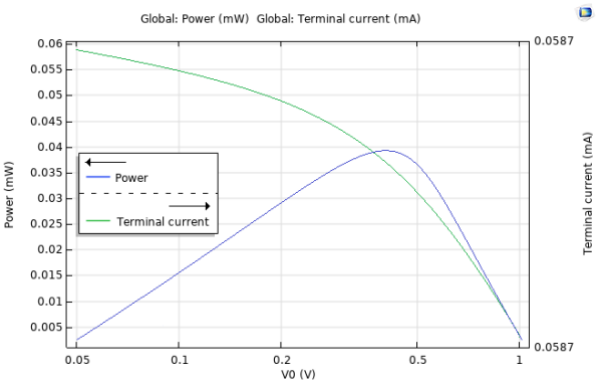


***Figure III. 24**: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1eV, Eg(n)= 3.5 eV].*

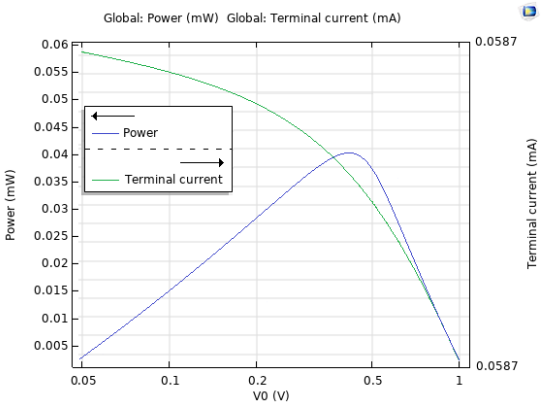


***Figure III. 26**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)[Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.7 eV].*

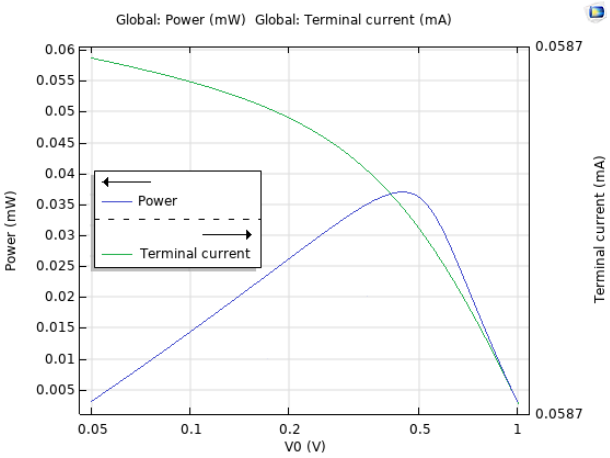


***Figure III. 25**: Les courbes I=f(V) et P=f(V) [Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.6 eV].*

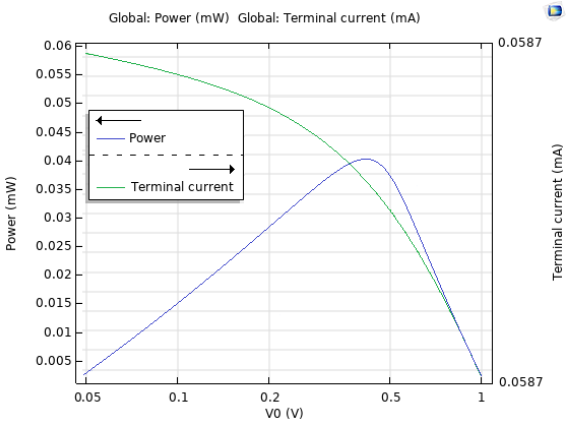


***Figure III. 27**: Les courbes I=f(V) et P=f(V)[Eg(p)=2.1 eV, Eg(n)= 3.8 eV].*

En faisant varier l'énergie de gap de la couche p et n, nous avons constaté que l'allure générale des graphes est presque identique, il y a unfaible effet de l'épaisseur sur les valeurs de la puissance maximal et le courant de court-circuit et la tension de circuit ouvert.

Àpartirdes graphes précédentsnous avons fait déterminer les puissancesmaximales**P_m** et lescourants de court-circuit **Icc**et le facteur de forme **FF**sont présenté sur lesfiguressuivantes :

- **L'effet de la variation de la position sur le courant de court-circuit (Icc)**

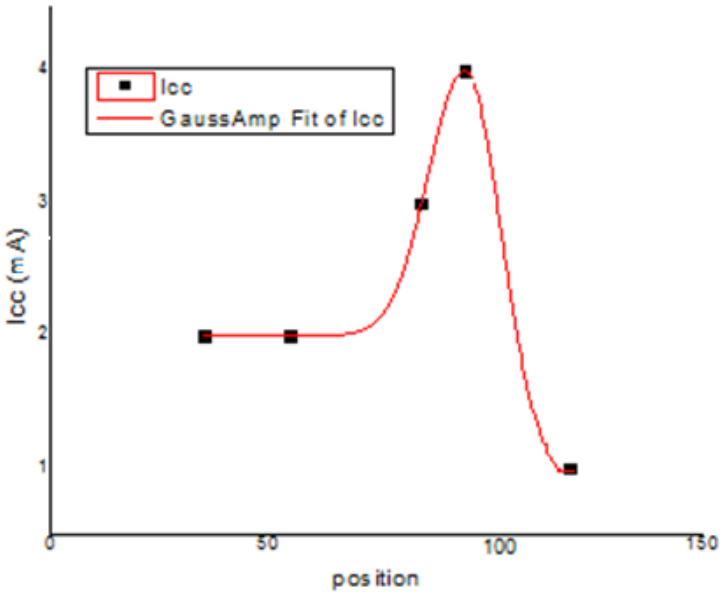


***Figure III. 28**: La courbe**Icc** en fonction des variations des points (longueur des couches).*

On peut constater que l'augmentation de la longueur des couches p a le même effet sur courant de court-circuit (**Icc**) au point 35 et 55 (valeur constante 2 mA), et mène àune augmentation du courant de court-circuit (**Icc**)depuis la point 55 jusqu'à 95 (4 mA) quiconsidéré commele point le plus favorable (95), puis une diminution au point 120 (jusqu'à 1mA).

- **L'effet de la variation de la positionsur la puissance maximale (Pm)**

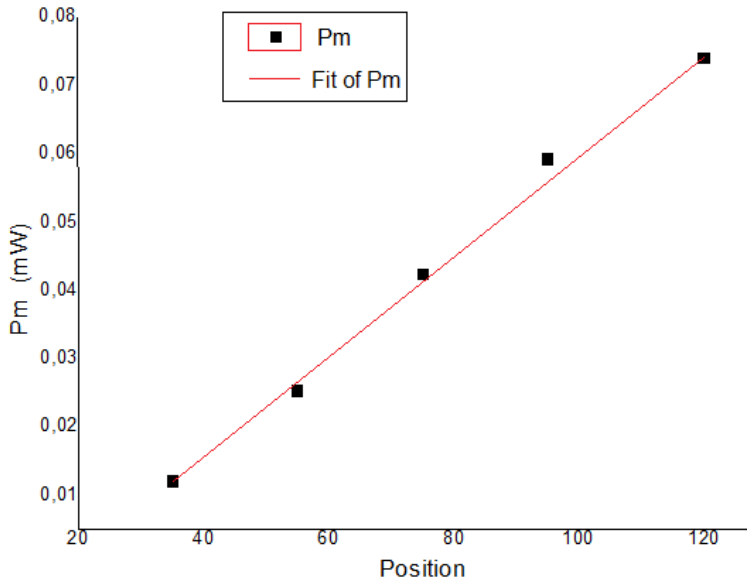


Figure III. 29: La courbe**Pm** en fonction des variations des points (longueur des couches).

On peut constater que l'augmentation de la position (longueur des couches) mène àune augmentation dela puissance maximale (Pm). Nous avons également observé une augmentation linéaire dePm avec la longueur de la couche P.

- **L'effet de la variation de la positionsur le Facteur de Forme (FF)**

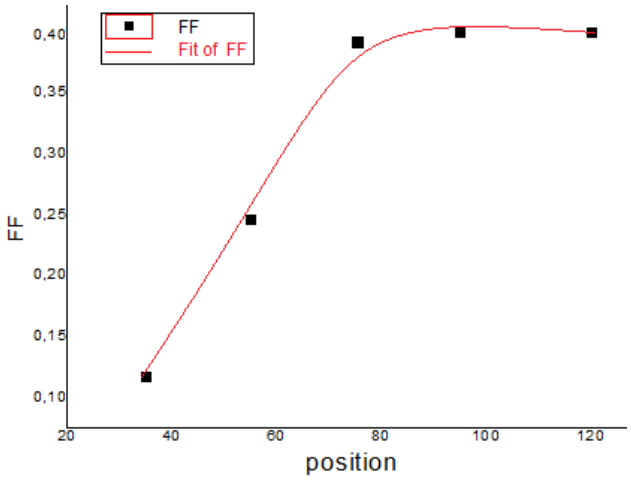


***Figure III. 30**: La courbe **FF** en fonction des variations des points (longueur des couches).*

Pour le facteur de forme, on remarque un accroissement jusqu'à un facteur de forme proche de 0.40% qui correspond à la position 75, puis se stabilise à partir de cette position.

- **L'effet de l'énergie de gap de la couche « p » sur le courant de court-circuit (Icc)**

D'après *la figure III.31* on remarque que l'énergie de gap (Eg) influe sur le courant de court-circuit (Icc) qui diminue à partir de 3,0 jusqu'à 1,0 durant l'augmentation de la valeur deEg de la couche p.

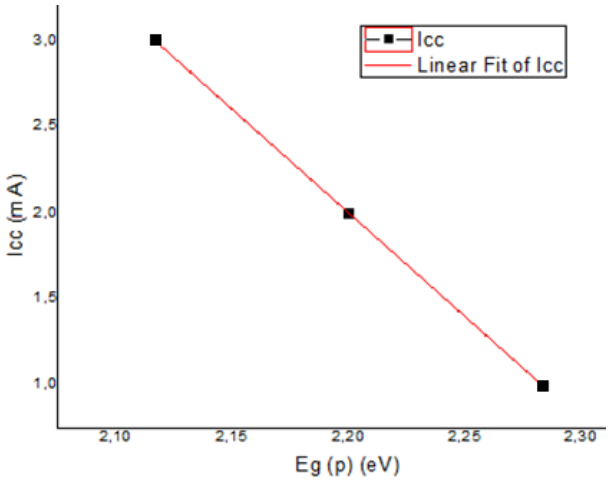


***Figure III. 31**: La courbe **Icc** en fonction des variations d'Eg de la couche « p ».*

- **L'effet de l'énergie de gap de la couche « p » sur la puissance maximale (Pm)**

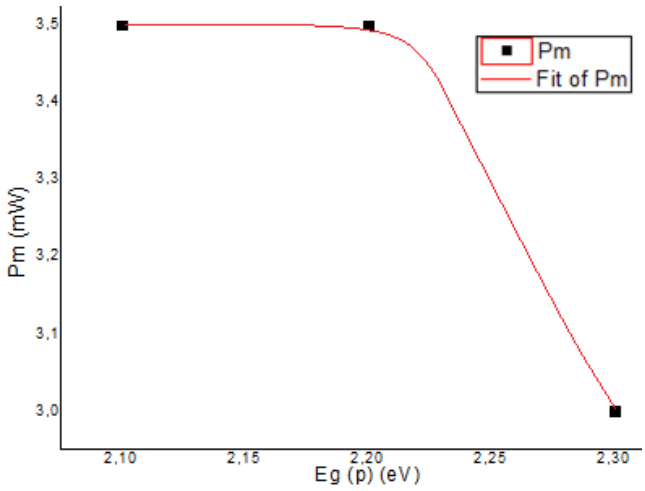


***Figure III. 32**: La courbe **Pm** en fonction des variations d'Eg de la couche « p ».*

On remarque une stabilité de la puissance maximaleà 3,5 mWqui correspond aux énergies de gap 2,1 et 2,2 eV, puis undécroissementà 3 mW à une énergie de gap 2,3 eV.

- **L'effet de l'énergie de gap de la couche « p » sur le Facteur de Forme (FF)**

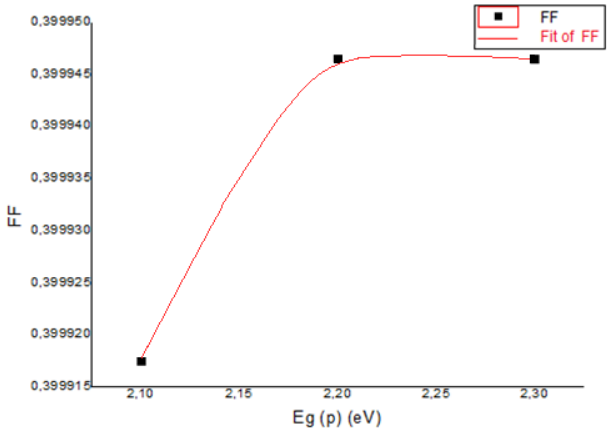


***Figure III. 33 :**La courbe **FF**en fonction des variations d'Eg de la couche « p ».*

La figure III.33 montre que l'accroissement de facteur de forme FF entraîne une augmentation de l'énergie de gap.

.

- **L'effet de l'énergie de gap de la couche « n » sur le courant de court-circuit (Icc)**

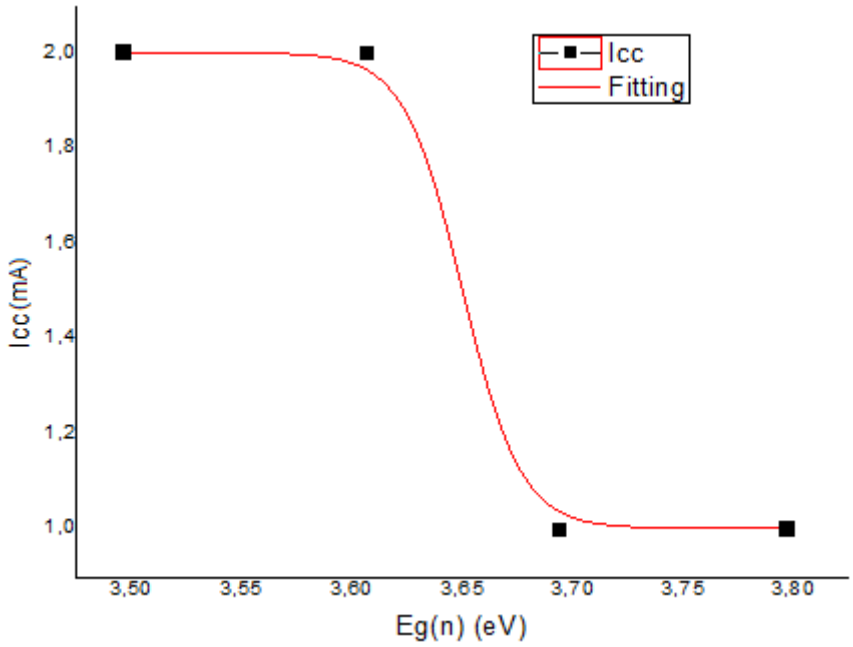


***Figure III. 34** : La courbe**Icc** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ».*

On constate que le courant de court-circuit est élevé dans l'intervalle de l'énergie de gap de 3.5 jusqu'à 3.6 , et bas dans l'intervalle de l'énergie de gapde 3.6 jusqu'à 3.8 .

- **L'effet de l'énergie de gap de la couche « n » sur la puissance maximale (Pm)**

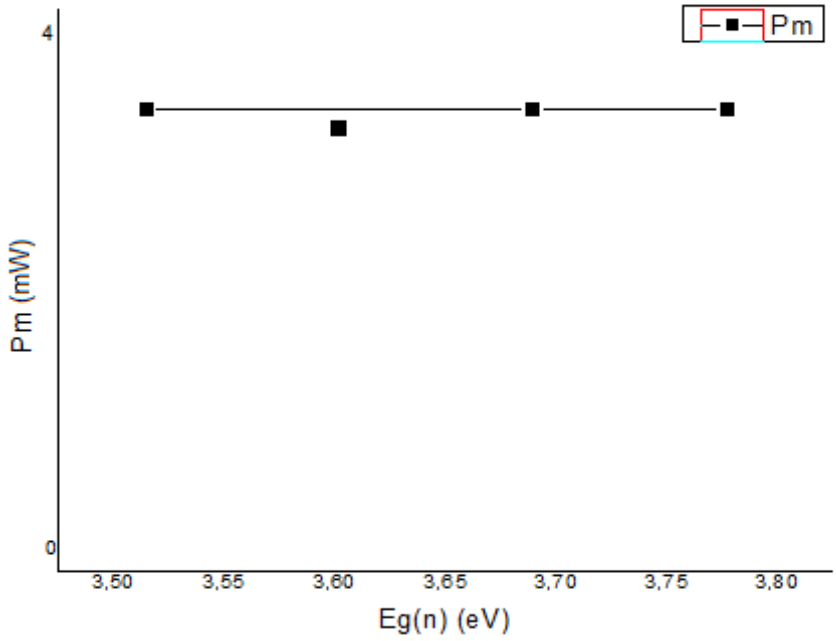


***Figure III. 35**: La courbe **Pm** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ».*

La puissance maximale de la couche « n » reste constante de dépond pas de la variation d'énergie de gap.

L'effet de l'énergie de gap de la couche « n » sur le Facteur de Forme (FF)

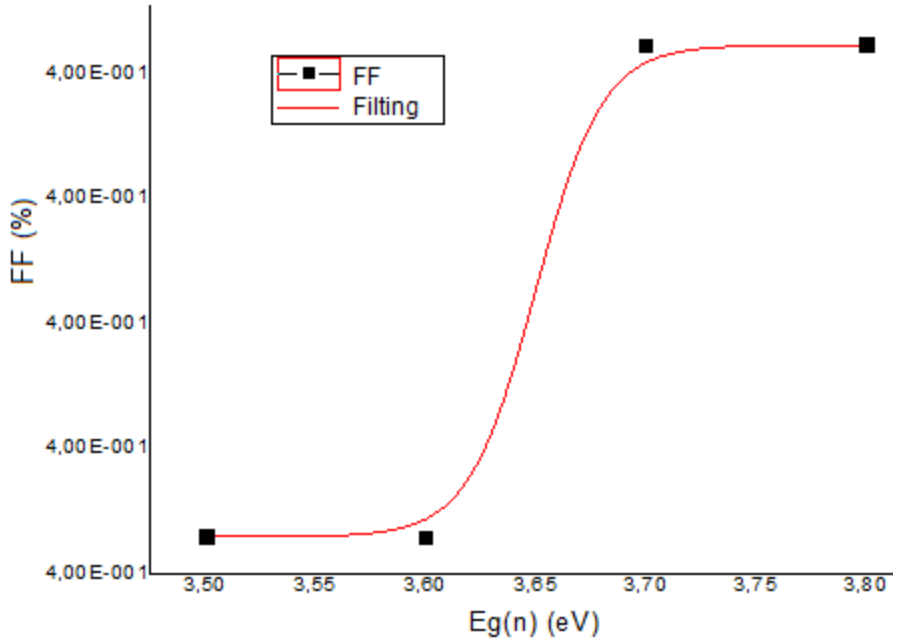


***Figure III. 36**: La courbe **FF** en fonction des variations d'Eg de la couche « n ».*

On remarque quele Facteur de Formeest faible dans l'intervalle de l'énergie de gap de 3.5 jusqu'à 3.6 , et il est élevé dans l'intervalle de l'énergie de gapde 3.6 jusqu'à 3.8 .

III.4 Conclusion

Une étude des performances des cellules solaires a une jonction CuO(p) et ZnO (n) par des simulations numériques a été réalisée dans ce chapitre. Les résultats de simulation numériqueont été réalisés dans ce chapitre. Les résultats de simulation ont clairement montré que les paramètres de la cellule tels que l'épaisseur et le gap de la couche absorbante jouent un rôle important, ainsi que les propriétés intrinsèques de l'oxyde de cuivre et l'oxyde de zinc sur les performances de la cellule photovoltaïque.

CONCLUSION GENERALE

La protection de l'environnement est devenue, ces dernières années, une préoccupation majeure. De nombreuses voies de recherches se sont donc orientées vers l'utilisation des énergies renouvelables, dont l'énergie solaire. L'énergie solaire photovoltaïque est une énergie verte car elle utilise une source d'énergie d'origine naturelle qui est le soleil.

L'objectif de ce travail est l'étude pae Simulation de la jonction CuO(p)/ZnO(n) avec le logiciel COMSOl MULTIPHYSICS, en vue les caractéristique I(V) et P(V) pour différents longueur des couche n et p, et pour plusieurs valeurs d'énergie de gap.

La caractéristique courant-tension I(V) nous renseigne sur le comportement électrique de la cellule solaire et de ses paramètres. La cellule se comporte comme un générateur dont la tension V à ses bornes et le courant I et la puissance P qu'il débite représentent les caractéristiques I(V) et P(V).

L'amélioration du rendement de conversion photovoltaïque nécessite l'amélioration des mécanismes mis en jeu dans ce processus en faisant un bon choix pour la structure desdispositifs et l'optimisation des épaisseurs et une variation d'énergie de gap des différentes couches constituants celle-ci.

Dans ce présent travail et en se basant sur notre modèle numérique cité dans ce dernier chapitre, nous avons simulé une cellule solaire a structure pn à l'aide du logiciel, de simulation COMSOL MULTIPHYSICS 5.5 afin d'optimiser les épaisseurs des couches de la structure pn respectivement, et de variation de l'énergie de gap de défirent couche parfois de CuO (couche P) et parfois de ZnO (couche n).

Sachant que l'objectif principale c'est d'avoir une répartition optimale de l'énergiedans la zone de charge d'espace (ZCE) ou bien tout près de celle-ci du moment que la séparation des paires électrons trous s'effectue dans cette zone.

Comme perspectives, il serait intéressant de lancer de nouvelles simulations pour déterminer les paramètres photovoltaïques en tenant compte de nos résultats obtenu dans le cadre d'optimisation de la propagation de l'énergie au sein de nos structures. Cette étape va nous permettre de choisir la meilleure combinaison parmi celles trouvées.

Références bibliographiques



[1] SADOK, Mohammed. "Détermination des Paramètres, Performances et Etude de la Dégradation des Modules Photovoltaïques en milieu saharien." (2011).

[2] Généralités sur les technologies des cellules solaires, dspace. Univ-tlemcen.dz, capitre I d'un cours.

[3] Bouderbala, Ibrahim Yaacoub. *Fabrication des homo-jonctions np d'oxyde de cuivre pour des applications aux photovoltaïques et à l'optoélectronique*. Diss. 2019.

[4] Mahfoud, Abdrrezek. *Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement*. Diss. 2018.

[5] EL-assedZemallachOuarriKada,"simulation et Modélisation des caractéristiques électrique C(V)et I(V) d'une Jonction p-n :Application a la cellule solaire organique a base de ITO/MoO_3/CuPc /C_{60}/ALq_3/MoO_3/AL/Se" ,thèse de doctorat ,université d'Oran Ahmed Ben Bella,(07/062015)

[6] généralité sur les cellules solaires, cours chapitre I, ''https\\fr-static .z-dm.net''.

[7] H.HAMIDI, ''la conversion photovoltaïque'' dspace.Univ-tlemcen.dz, chapitre I d'un cours

[8] La conversion photovoltaïque de l'énergie solaire(DANIEL LINCOT)directeur de recherches au CNRS www.martin –bucher.de,Stuttgart/Germany

[9] LASLADJ, Meriem. Simulation numérique des cellules solaires de troisième génération pour des applications spatiales. Diss.2015.

[10] Benloucif, Nisrine. "Potentialités de films de silicium polycristallin LPCVD destinés à l'étude d'une cellule solaire multicouches." (2011).

[11] B.AMANA ,Ch.RICHTER ,O.HECKMANN,"cellulesphotovoltaiques Etude et comparaison de deux types de cellules",Masret 1 physique ,université de cergy-pontoise.

[12] CHAOUA Makhlouf ,"Effet des couches conductrices et transparentes sur les performances des cellules solaires Cu(In,Ga)Se_2",thèse de Magister ,université FERHAT ABBAS –SETIF-1-,(30/12/2014).

[13] BALI AMINA ,"Etude comparative entre les cellules solaire de type p+-AlGaAs/ p-GaAs /n-GaAs et une autre detype n+-AlGaAs/n-GaAs/p-GaAs", thèse de Magister en physique,université MOHAMED KHEIDER-BISKRA

[14] BOUGHANEMdjamaia **,** "Influence des propriétés du silicium amorphe hydrogéné sur la performance d'une Cellule solaire HIT",diplôme de MASTER,Université Abdelhamid Ben Badis– Mostaganem.

[15] BENABED Karima,"Etude et simulation d'une cellule solaire à base de chalcopyrites CuInSe2 avec TCAD - SILVACO",diplôme de Master ,Université Abdelhamid Ibn Badis– Mostaganem ,22/05/2017 .

[16] Abdelghani, B., Massiva, B., &Ouiza, B. (2010). Etude et optimisation d'une cellule solaire à base de Si et SiGe (Doctoral dissertation, Université Mouloud Mammeri).

[17] Germain Rey , "Etude d'oxydes métalliques nanostructurés (ZnO, SnO2) pour applicationsPhotovoltaïques ", Pour obtenir le grade de DOCTEUR , UNIVERSITÉ DE GRENOBLE ,(23 mai 2012) .

[18]Laurent Bergerot. Etude de l'élaboration d'oxyde transparent conducteur de type-p en couches minces pour des applications à l'électronique transparente ou au photovoltaïque. Matériaux. Université Grenoble Alpes, 2015. Français. NNT : 2015GREAI003. tel-01168478

[19] NAKRELA, Abdelkader. *Elaboration et caractérisation des fenêtres transparentes et conductrices (ZnO dopé Aluminium)*. Diss. 2017.

[20] M. Amara Saâd , "Caractérisation optique et structurale des couches minces d'oxydes complexes pour applications photoniques ",Pour l'obtention du diplôme de Doctorat En Sciences, Université Ferhat Abbas Sétif 1 ,(10-12-2015) .

[21] ImenBENKOUIDER ," Élaboration et caractérisation des couches minces nano-structurées à base de ZnO, pour usage photovoltaïque", pour l'obtention Du diplôme de Master Académique , UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA ,(27-06-2018) .

[22] *MEHADJEBI SARA*," La synthèse des nano poudres de Cu O avec la méthode précipitation Sol-Gel en utilisant le précurseurCuSO4 et l'étude de leurs propriétés structurales et optiques" ,obtenir le diplôme de Magister en Physique,(12-11-2015) .

[23] Y. Wang, S. Lany, J. Ghanbaja, Y. Fagot-Revurat, Y. P. Chen, F. Soldera, D. Horwat, F. Mücklich, J. F. Pierson ," Electronic structures of Cu2O, Cu4O3, and CuO: A joint experimental and theoretical study" ,

[24] ABD-LEFDIL, M. Mohammed, et al. "Contribution à l'étude des propriétés structurales, optiques et électriques des couches minces de l'oxyde de zinc (ZnO) dopé (fluor, indium, aluminium et néodyme)."

[25] WardaHadouchi. Etude de l'utilisation du ZnO comme contact de type n dans des dispositifs photo- voltaïques à base de pérovskite hybride. Matériaux. Université Paris-Saclay, 2017. Français. NNT : 2017SACLX012. tel-01633008

[26] Handbook of Chemistry and Physics, 56th Edition, Ed. R.C. Weast, CRS Press, (1975).

[27] E.M. Bachari, G. Baud, S. Ben Amor, M. Jacquet, Thin Solid Films, 348, 165 (1999).

[28] T.K. Subramanyam, B. Srinivasulu Naidu, S. Uthanna, Cryst. Res. Technol., 35, 1193 (2000).

[29] M. Rebien, W. Henrion, M. Bär, C.H. Fischer, App. Phys. Lett., 80, 3518 (2002).

[30] F. Ng-Cheng-Chin, M. Roslin, Z.H. Gu. T.Z. Fahidy, J. Phys. D :Appl. Phys., 31, L71 (1998).

[31] Addala, Samiya. "Elaboration et caractérisation de matériaux composites à base des nanoparticules du semi-conducteur CuO et de l'oxyde de terre rare Dy2O3 dispersées dans les matrices diélectriques KBr, KCl et NaCl." (2015).

[32] Bejaoui, Amina. *Capteurs à base des couches minces d'oxyde de cuivre (II)(CuO): Optimisation et modélisation en vue de la détection de gaz*. Diss. Aix-Marseille, 2013.

[33] https://www.comsol.fr/model/si-solar-cell-1d-35661.

[34]https://www.planete-energies.com/fr/medias/decryptages/la-cellule-photovoltaique-comment-ca-marche.