

Simulation numérique d'une nouvelle structure de cellule solaire à base de deux couches absorbantes CIGS et CZTS

*Naceur SELMANE¹, Fakhereddine KHEMLLOUL²

¹Electronic department. Laghouat university, Laboratoire Matériaux, Systèmes Énergétiques, Énergies Renouvelables et gestion de l'Énergie (LMSEERGE), A- 03000 Laghouat, Algeria

²Laboratoire de Physique des Matériaux, Université Amar Telidji de Laghouat, Algérie

Received : 2022-11-09

Accepted : 2023-02-12

Abstract: CuInGaSe (CIGS)-based solar cells show promise, but involve a dangerous and expensive indium element. This work aims to solve these problems; The approach is to use thinner CIGS layers. However, very thin layers minimize absorption and reduce cell performance. Adding a second CuZnSnSe (CZTSe) layer absorber should maintain high cell performance. The proposed new cell that has been simulated is MgF₂/ZnO/Al/ZnO:i/CdS(n)/CZTSe(p)/CIGS(p)/Mo, with MgF₂ antireflection layer, ZnO:i passivation layer, emitter layer CdS, CZTSe/CIGS double absorber layer, ZnO-Al transparent conductive oxide (TCO) and back contact of Molybdenum (Mo) element. TCAD SILVACO using the ATLAS module was used in the simulation. Various parameters including layer thickness and doping concentration are optimized. The results show that the addition of CZTSe, the yield increased from 22.40 to 29.22%

Key-words: CZTSe-CIGS absorber layers; TCAD Silvaco module-Atlas; thickness and doping concentration

Résumé : Les cellules solaires à base de CuInGaSe (CIGS) sont prometteuses, mais impliquent un élément d'indium dangereux et coûteux. Ce travail vise à résoudre ces problèmes. L'approche consiste à utiliser des couches CIGS plus fines. Cependant, les couches très fines minimisent l'absorption et réduisent les performances des cellules. L'ajout d'un deuxième absorbeur de couche CuZnSnSe (CZTSe) devrait maintenir des performances élevées de la cellule. La nouvelle cellule proposée qui a été simulée est MgF₂/ZnO/Al/ZnO:i/CdS(n)/CZTSe(p)/CIGS(p)/Mo, il s'agit d'une couche antireflet MgF₂, couche de passivation ZnO:i, couche émettrice CdS, double couche absorbante CZTSe/CIGS, oxyde conducteur transparent ZnO-Al (TCO) et contact arrière de l'élément de molybdène (Mo). Nous avons utilisé TCAD SILVACO pour la simulation, notamment le module ATLAS. Divers paramètres sont optimisés, y compris l'épaisseur de couche et la concentration de dopage, Les résultats montrent que l'addition du CZTSe augmente le rendement de 22,40 à 29,22 %.

Mots-clés : couches absorbantes CZTSe-CIGS; TCAD Silvaco module -Atlas; Épaisseur et concentration de dopage

* Corresponding author: naceur_af@yahoo.fr

1. INTRODUCTION

L'énergie solaire est verte et durable, tant que le Soleil existe. Par conséquent, des efforts considérables sont consacrés à la technologie de l'énergie solaire, en particulier dans les cellules photovoltaïques p-n à couche mince. Cellules binaires, par ex. CdTe[1], cellules ternaires par ex. CIS [2, 3] et cellules quaternaires, par ex. CuInGaSe₂ (CIGS)[4] sont des domaines primordiaux de la recherche photovoltaïque.

La recherche implique divers aspects afin d'améliorer la stabilité des cellules, les performances, la réduction des coûts et la minimisation de l'impact environnemental. Par conséquent, les méthodes de préparation cellulaire, la composition, les rapports des éléments constitutifs, l'épaisseur de la couche et d'autres paramètres ont tous été pris en compte dans la recherche. Dans les cellules solaires à base de CIGS, la valeur de la bande interdite d'énergie peut être réglée en faisant varier la valeur de la fraction molaire x dans la formule générale CuIn_xGa_{1-x}S. La valeur de la bande interdite CIGS passe de 1,0 à 1,5 eV en fonction de la variation de la valeur x [4-9]. Malgré cela, la technologie CIGS n'est pas sans défi. Par exemple, les éléments indium et gallium sont très coûteux, pas suffisamment abondants et peuvent produire des composés dangereux dans leurs déchets[10-12]. Ainsi, il est nécessaire de développer de nouveaux matériaux à moindre coût, avec des éléments disponibles qui préservent de l'environnement avec des absorbances de rayonnement élevées. Une alternative appropriée pour CIGS Le CZTS est un dérivé du CIGS avec une structure cristalline similaire, où le zinc remplace l'indium et le sélénium remplace le gallium. Les problèmes de coût et de rareté peuvent ainsi être éliminés.

Il existe d'autres raisons pour lesquelles les matériaux CZTS sont largement considérés comme des couches absorbantes dans les cellules solaires[13-15]. Leurs bandes interdites directes accordables sont compatibles avec les rayonnements solaires incidents. Ils ont également des valeurs de coefficient d'absorption élevées de plus de 10⁴cm⁻¹[16]. De plus, la simulation est une méthode puissante pour comprendre les comportements électriques des matériaux. C'est un moyen efficace pour éviter les coûts expérimentaux élevés. Les simulations sont largement utilisées pour prédire les différentes propriétés des matériaux en optoélectronique, telles que : le logiciel wx-AMPS[16], le programme Afors[17], le programme Scaps [18] et le programme TCAD Silvaco [19, 20]. Dans de nombreux cas, les simulations ouvrent des nouvelles voies à la recherche expérimentale en montrant les valeurs d'efficacité théoriques de cellules solaires données. À notre connaissance, il existe peu d'études de simulation, [21] qui traitent des cellules basées sur des couches combinées CZTSe/CIGS, ce qui a incité la présente étude.

Dans ce travail, les propriétés électriques de nouvelles cellules solaires à couches minces, utilisant Cu₂ZnSn(S,Se)₄(écrit ici comme CZTSe) et Cu(In,Ga)Se₂(écrit ici comme CIGS), comme couches absorbantes combinées, sont simulées. Le CdS est utilisé comme couche émettrice et

le ZnO-Al comme TCO[22-24]. L'effet de l'insertion de CZTSe, en tant que couche absorbante supplémentaire à une fine couche CIGS, sur les performances de la cellule est le problème central. L'objectif de l'étude est triple : premièrement, utiliser une épaisseur de couche CIGS plus petite pour éviter les inconvénients décrits ci-dessus. Les éléments Cu, Zn et S sont utilisés dans le CZTSe ajouté au détriment de l'épaisseur de la couche CIGS. Deuxièmement, étudier les effets de divers paramètres, y compris l'épaisseur et la concentration de dopage, pour différentes couches, avec un accent particulier sur les deux couches absorbantes. Concevoir une nouvelle cellule solaire, basée sur CZTSe et CIGS avec une efficacité nettement supérieure à celle rapportée précédemment[32].

2. DÉTAILS DE LA SIMULATION

La simulation a été réalisée avec l'environnement de TCAD SILVACO en utilisant le module Atlas. Il s'agit d'un simulateur de modélisation de composants bidimensionnel très utile [25] avec la capacité de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des semi-conducteurs. En plus des propriétés électriques externes, le logiciel donne des informations sur les distributions internes de variables telles que les lignes de courant, le champ électrique et les potentiels. Ceci est réalisable en résolvant numériquement l'équation de Poisson avec les équations de continuité des électrons et des trous en un nombre fini de points formant le maillage de la structure défini par le programme. Toutes les propriétés des matériaux impliqués dans la présente cellule solaire sont définies. La cellule implique un réseau de fines couches semi-conductrices de MgF₂/ZnO/ZnO:i/n-CdS/p-CZTS/p-CIGS/Moto simulé par TCAD Silvaco-Atlas. La structure complète du dispositif est représentée schématiquement sur la "Fig1". Dans la présente étude, l'élément molybdène (Mo) est utilisé ici comme contact arrière, CIGS et CZTSe comme deux couches absorbantes, CdS comme couche tampon, ZnO non dopé: i comme couche intrinsèque, ZnO-Al comme TCO et MgF₂ comme antireflet. couche de revêtement (ARC). Les bons choix de maillage, de modèles et de méthodes jouent un rôle important dans la précision de la simulation. Tous les paramètres optiques utilisés ont été extraits de rapports antérieurs [26, 27]. Le rayonnement AM 1,5, avec une densité de puissance de 1000 W/m², est utilisé comme source d'éclairage dans la simulation.

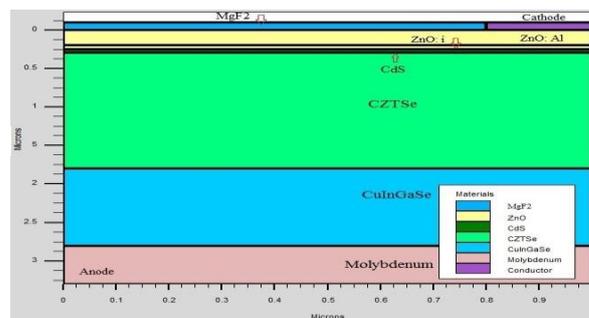


Figure 1: Structure de la cellule solaire simulée par TCAD Silvaco

Atlas

Lors de la simulation par atlas TCAD, les modèles physiques sont restés inchangés. Les principaux paramètres de simulation pour différentes couches, basés sur la littérature [2, 17, 28-31] sont présentés dans le tableau 1. L'épaisseur de couche mesurée de ZnO-Al a été fixée à 200 nm, avec une bande interdite à 3,4 eV, un indice de réflexion de la lumière n compris entre 1,8 et 2,8, une transmission T comprise entre 0,70 et 0,42 [26], un travail de sortie de 4 eV et une affinité électronique 4 eV. La couche MgF₂ ARC a été utilisée pour réduire les pertes de réflexion et améliorer le confinement optique, comme décrit dans la littérature [43]. La deuxième couche absorbante CZTSe est avantageuse pour le coefficient d'absorption élevé (>10⁴cm⁻¹)[21]. Sa bande interdite peut également être réglée de 1,0 eV (pour le CZTSe pur) à 1,5 eV (pour le CZTS pur). La bande interdite varie avec la valeur de x dans la formule générale du matériau Cu₂ZnSn(SexS_{1-x})₄. Les valeurs des bandes interdites CZTSe et CZTS ont été calculées à l'aide de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) [15, 32-35] avec le paramètre d'inclinaison (b ~ 0,1) comme indiqué dans l'équation (1) :

$$E_g(x) = (1 - x)E_g(\text{CZTSe}) + xE_g(\text{CZTS}) - bx(1 - x) \quad (1)$$

Une variation linéaire de Eg pour le matériau peut être obtenue en fonction de x dans le cas d'un petit paramètre de courbure b, en utilisant l'équation (2)

$$E_g(x) = (1 - x)E_g(\text{CZTSe}) + xE_g(\text{CZTS}) \quad (2)$$

Si x = 0, alors l'équation (2) donne la valeur de la bande interdite pour le CZTSe pur à 1,0 eV.

Tableau1. Principaux paramètres de simulation utilisés pour différentes couches de la cellule solaire.

Propriétés de couches	Type de semiconducteurs				
	n-ZnO	n-CdS	p-CZTSe	p-CIGS	ZnO:i
Permittivité Dielectrique ε _r	10	10	13.6	10	10
Epaisseur(μm)	0.2	variable	Variable	Variable	0.05
Energie de gap (eV)	3.4	2.45	1.096	1.2	3.4
Affinité Electronique (eV)	4.55	4.45	4.1	4.5	4.55
densité effective de la bande conduction N _c (cm ⁻³)	4 × 10 ¹⁸	2 × 10 ¹⁸	2.2 × 10 ¹⁸	2 × 10 ¹⁸	4 × 10 ¹⁸

densité effective de la bande valence N _v (cm ⁻³)	9 × 10 ¹⁸	1.5 × 10 ¹⁹	1.8 × 10 ¹⁹	2 × 10 ¹⁸	9 × 10 ¹⁸
Mobilité des électrons μ _n (cm ² /V.s)	5 × 10 ¹	5 × 10 ¹	5 × 10 ²	5 × 10 ¹	5 × 10 ¹
Mobilité de trous (cm ² /V.s)	2 × 10 ¹	2 × 10 ¹	2.5 × 10 ¹	2 × 10 ¹	2 × 10 ¹
concentration doping des donneurs N _d (cm ⁻³)	5 × 10 ¹⁸	1 × 10 ¹⁷	0	0	1.1 × 10 ¹⁸
concentration doping des accepteurs N _a (cm ⁻³)	0	0	5 × 10 ¹⁶	1 × 10 ¹⁵	1.1 × 10 ¹⁸

3. RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

3.1. mono couche-absorbante (CIGS)

L'effet de l'ajout de la deuxième couche absorbante CZTSe sur le dispositif est un objectif majeur de cette étude. Par conséquent, la structure conventionnelle ZnO-Al(TCO)/ZnO(i)/CdS/CIGS/Mo, sans deuxième couche CZTSe ou couche ARC (MgF₂), est simulée en premier. Les paramètres physiques de chaque couche sont présentés ci-dessus dans le tableau 1. L'épaisseur de la couche absorbante CIGS a été modifiée de 1,0 à 2,5 μm, en maintenant l'épaisseur de la couche tampon CdS fixée à 0,05 μm. Les effets de l'épaisseur de la couche CIGS sur les paramètres de la cellule sont résumés dans Fig 2. Les figures 2a à c montrent que les valeurs de performance des cellules sont améliorées avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche d'absorbant CIGS. La figure 6b montre que la tension de circuit ouvert (V_{oc}) et la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) atteignent des valeurs élevées de 0,784 V et 39,7 mA/cm², respectivement, avec une épaisseur de couche absorbante croissante à 2,5 μm. La figure 6c montre que les valeurs du facteur de remplissage (FF) et de l'efficacité de conversion (η) ont continué d'augmenter avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche CIGS. Les valeurs d'efficacité de conversion sont conformes aux travaux antérieurs [18, 36-38] . De même, la figure 6d montre une valeur d'efficacité quantique (QE) accrue avec une épaisseur de couche accrue.

Comme pour une couche d'absorbant CIGS, une épaisseur plus élevée donne des performances de cellule plus élevées. Parmi la gamme d'épaisseur utilisée, l'épaisseur optimale est de 2,5 μm, en accord avec la littérature [25] . Ceci est compréhensible car les photons de plus grande longueur

d'onde peuvent être absorbés par la couche absorbante plus épaisse, ce qui produit une génération de paires électron-trou plus élevée. Par conséquent, les valeurs J_{sc} , V_{oc} , FF et η augmentent.

Malgré ce qui précède, l'amélioration des performances des cellules par une épaisseur de couche CIGS accrue ne justifie toujours pas l'utilisation d'épaisseurs plus élevées, en aucun cas. Par exemple, lorsque l'épaisseur de la couche est plus que doublée, de 1,0 à 2,5 μm , l'efficacité de conversion η augmente de $\sim 22,3$ à $\sim 24,3$ % seulement. De même, d'autres valeurs de paramètre de la cellule augmentent dans une certaine mesure. Le problème qui se pose est que les améliorations des paramètres de la cellule ne justifient pas des épaisseurs plus élevées des matériaux CIGS coûteux, notamment l'indium et le gallium. Il devrait y avoir un autre moyen plus pratique d'obtenir des performances plus élevées.

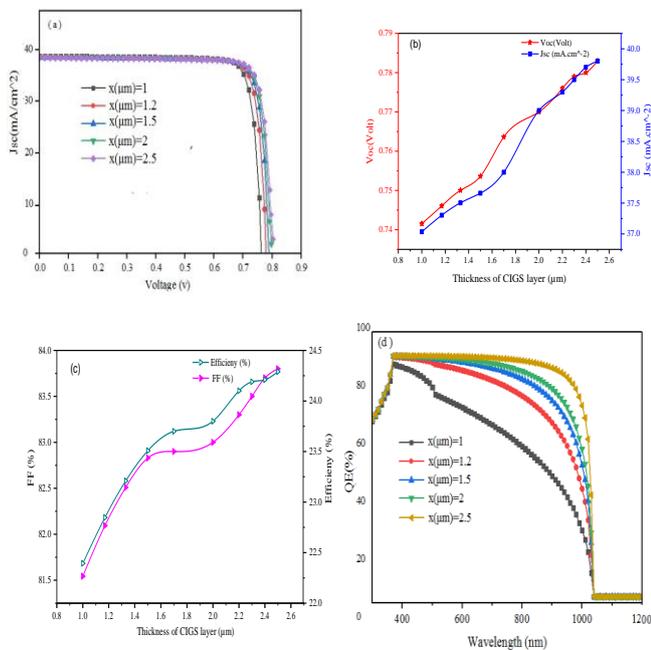


Figure 2: Effet de l'épaisseur de la monocouche d'absorbant CIGS sur les performances des cellules ZnO(TCO)/ZnO:i/CdS/CIGS/Mo. (a) J-V tracés, (b) J_{sc} & V_{oc} , (c) rendement & FF, (d) Rendement quantique

3.2. Deux couches absorbantes

La solution au problème ci-dessus est décrite ici. Si les performances de la cellule peuvent être augmentées, sans coût plus élevé hérité d'une épaisseur de couche CIGS plus élevée, cela devrait alors être la meilleure stratégie, comme décrit ici. L'utilisation d'une couche CIGS plus fine et d'une couche CZTSe à faible coût comme autre adsorbant supplémentaire pourrait être la solution pour obtenir des performances cellulaires plus élevées sans augmentation des coûts. L'épaisseur de la couche CIGS de 1,0 μm est

utilisée ici sur la base de la littérature[38]. Des études de simulation de la cellule à deux couches d'absorbant proposée sont présentées ici. L'optimisation de divers paramètres des composants de la cellule solaire pour obtenir les meilleures performances est primordiale.

3.2.1 Effets des épaisseurs des couches CdS et CZTSe :

En utilisant tous les paramètres des autres couches mentionnées ci-dessus. L'épaisseur de la couche absorbante CIGS a été fixée à 1,0 μm et la deuxième couche absorbante insérée CZTSe à 1,5 μm pour donner une épaisseur totale pour le CIGS + CZTSe combiné à 2,5 μm .

pour optimiser l'épaisseur de la couche tampon CdS. Les épaisseurs par défaut des couches CZTSe et CIGS sont respectivement de 1,5 et 1 μm , avec une épaisseur totale de 2,5 μm utilisée dans la simulation, l'épaisseur de la couche d'émetteur CdS est évaluée ici. La valeur d'épaisseur de la couche d'émetteur CdS dans la plage de 0,05 à 0,5 μm a été utilisée, comme décrit sur la figure 3. D'autres valeurs de paramètres optimales pour les autres couches restantes sont restées inchangées. Tous les paramètres de performance des cellules, tracés J-V, V_{oc} , J_{sc} , FF et η , sont plus élevés avec une épaisseur de couche CdS plus fine. L'épaisseur de 0,05 μm donne la valeur d'efficacité de conversion optimale de 25,88 %, conformément aux études expérimentales antérieures[17, 39]. Le J_{sc} diminue également de 41,3 à 33,3 mA/cm² avec l'augmentation de l'épaisseur de l'émetteur CdS. Les résultats sont justifiables. Le CdS est un semi-conducteur de type n avec une énergie de bande interdite de 2,3 eV (E_g) supérieure à celle du CIGS (type p 1,2 eV) et du CZTSe (type p 1,0 eV). Le courant photogénéré le plus élevé résulte des deux couches d'absorbant avec peu de contribution de la couche d'émetteur CdS à bande interdite plus large. Par conséquent, J_{sc} augmente avec une épaisseur de couche émettrice plus petite, ce qui entraîne un taux de combinaison plus faible dans cette zone. La petite épaisseur de 0,05 μm présente des valeurs de performance de cellule optimales pour FF, V_{oc} , J_{sc} et η . En cas de couche émettrice très fine, les porteurs minoritaires se déplacent librement vers l'électrode, assurant ainsi leur collecte. Une épaisseur de couche CdS plus élevée augmente la probabilité de recombinaison des porteurs dans la couche émettrice avant d'atteindre les électrodes des deux côtés.

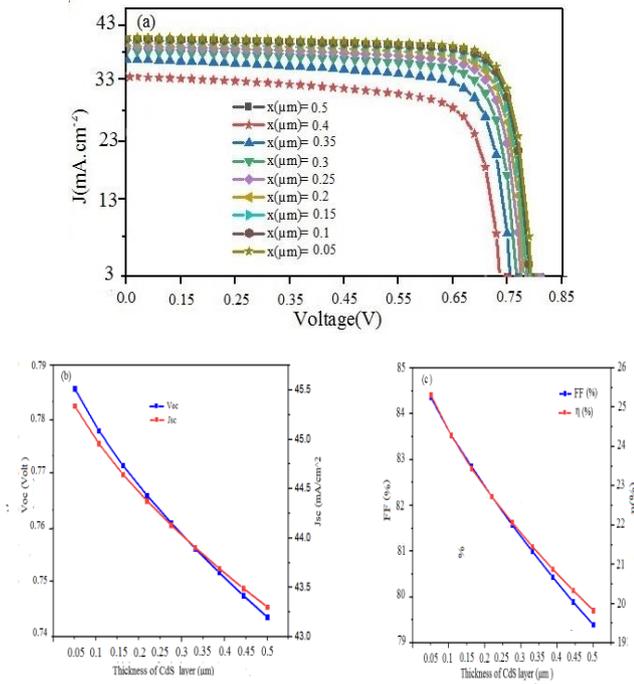


Figure3: Effet de l'épaisseur de la couche tampon de l'émetteur CdS sur les paramètres de performance des cellules solaires MgF₂/ZnO/ZnO:i/n-CdS/p-CTZS/p-CIGS/Mo. (a) tracés J-V, (b) valeurs J_{sc} et V_{oc} , (c) valeurs FF et η

L'épaisseur supplémentaire de la couche d'absorbeur CZTSe affecte les paramètres de la cellule. Comme la première couche absorbante du CIGS est responsable de la conversion des photons en excitons électron-trou, la couche absorbante totale doit avoir une absorption élevée, en particulier dans le visible. Il est donc préférable que ce matériau présente une bande interdite directe ; de l'ordre de 1,0 à 1,2 eV. La bande interdite pour le matériau de la couche absorbante doit être adaptée à diverses longueurs d'onde incidentes pour maximiser l'efficacité de conversion des cellules. Les deux couches absorbantes de CIGS et CZTSe, avec deux bandes interdites différentes de 1,2 et 1,0 eV, respectivement, sont donc utiles. Afin de maximiser l'absorption dans la plage de lumière incidente, la présente étude se concentre davantage sur la deuxième couche absorbante CZTSe. Comme discuté ci-dessus, l'épaisseur du CIGS est maintenue à une valeur minimale pour éviter des coûts inutiles. Dans l'étude d'optimisation de l'épaisseur de la couche CZTSe ici, la plage de 0,1 à 1,5 μm a été utilisée dans la simulation. L'effet de l'épaisseur de la couche CZTSe sur les performances des cellules solaires est examiné et les tracés J-V résultants sont décrits à la figure 4a. Les figures 4a et b montrent que le V_{oc} reste approximativement constant à 0,79 V. C'est parce que le V_{oc} est déterminé par l'écart à bande étroite de CZTSe. Le J_{sc} augmente significativement de 40,7 à 44,22 mA/cm² avec les épaisseurs élevées, comme le montre la fig 4b. L'amélioration est due à une épaisseur de couche absorbante plus élevée qui augmente le nombre de

photons absorbés et, par conséquent, augmente les paires électron-trou.

La valeur FF passe de 84 % à 86,2 % avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche CZTSe, Figure 4c. qui aide à comprendre les performances des cellules solaires à diverses longueurs d'onde incidentes, a également été étudiée ici. La figure 9d montre l'amélioration de l'efficacité quantique, à différentes longueurs d'onde, avec une épaisseur de couche absorbante accrue. Dans la plage de longueurs d'onde de 300 à 1 000 nm, la valeur d'efficacité quantique reste constante à 90 %, avec une épaisseur de couche d'absorbeur inférieure à 1,0 μm. Une réponse supplémentaire se produit également à 1 150 nm dans la région IR, avec une épaisseur supérieure de 1,15 μm. La réponse spectrale totale dans les trois régions spectrales (proche IR, visible et proche UV) est plus faible avec une épaisseur plus faible qu'avec des épaisseurs élevées. Les faibles valeurs de QE à des longueurs d'onde inférieures à 350 nm et supérieures à 1150 nm, Fig 4d, résultent de différents processus de recombinaison qui se produisent éventuellement aux contacts avant et arrière. Ils sont également dus à la faible absorption qui se produit dans ces plages. Par conséquent, le QE diminue fortement dans ces régions.

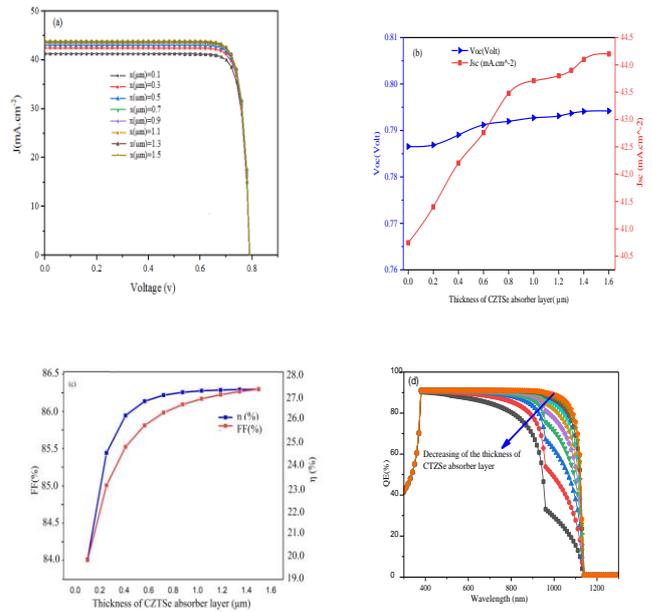


Figure4 Effet de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CZTSe sur les performances de la cellule solaire MgF₂/ZnO/ZnO:i/n-CdS/p-CTZS/p-CIGS/Mo. a) J-V plots, b) J_{sc} & V_{oc} , c) Efficacité & FF, d) r

3.2.2. Effets des concentrations de dopage de la couche semi-conductrice

La sensibilité de la présente cellule solaire simulée aux impuretés ou aux défauts dans diverses couches doit être étudiée. Les effets de la concentration de dopage, dans les couches puis-CdS, p-CIGS et p-CZTSe, sont évalués ici. Les

trois couches sont impliquées dans la formation de la jonction p-n, qui est le composant de base de la cellule solaire. Ayant optimisé les épaisseurs de couche comme décrit ci-dessus, tout en maintenant l'épaisseur du CIGS au minimum, l'effet des concentrations de dopant est évalué ici, tout en maintenant la densité de dopage (Nd) pour la couche de TCO (ZnO-Al) à $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

- Concentration de dopage dans la couche CdS

L'effet de la couche de CdS Nd sur les performances de la cellule est décrit à la "Fig 5". La valeur Nd pour les autres couches est indiquée dans le tableau I. La concentration de CIGS est fixée ici à $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Les figures 5a et b montrent que l'augmentation du Nd pour le CdS couche, dans la plage de 1×10^{17} à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, augmente tous les paramètres cellulaires, y compris η , FF, V_{oc} et J_{sc} . À des valeurs Nd supérieures à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, tous les paramètres de performance de la cellule diminuent. Par conséquent, la valeur optimale de densité de dopage de la couche de CdS est de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ avec une efficacité de conversion maximale de 28,5 %. L'effet négatif de concentrations de dopage plus élevées est justifiable. Avec une densité de dopage plus élevée, un champ électrique plus élevé se traduit par la région de la zone de charge d'espace (CSZ) entre la couche CdS et la couche absorbante CZTSe, ce qui encourage les porteurs minoritaires (trous) à se déplacer vers le contact arrière. De même, le champ électrique dans les couches absorbantes encourage les électrons à se déplacer vers la face avant. De plus, avec des valeurs de bande interdite de couche absorbante de 1,0 et 1,2 eV, les énergies photoniques supérieures à ces bandes interdites sont converties en chaleur sous forme de relaxation du réseau. Un tel procédé diminue le rendement de conversion. Par conséquent, des concentrations de dopage plus élevées dans la couche absorbante de l'émetteur doivent être évitées pour réduire les pertes par recombinaison. Sinon, le fort champ électrique dans la zone d'appauvrissement devient fort et accélère les porteurs minoritaires sans leur permettre de diffuser vers d'autres côtés. L'effet négatif de la concentration élevée de dopage de la couche tampon ($> 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) sur les performances des cellules, observé ici, est cohérent avec les résultats expérimentaux antérieurs]. [34, 40]

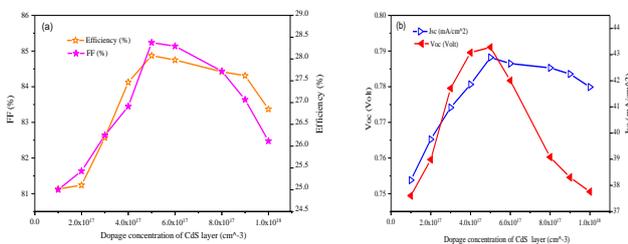


Figure 5 : Effet de la concentration de dopage de la couche émettrice de CdS sur les performances de la cellule solaire MgF₂/ZnO/ZnO : i/n-CdS/p-CTZS/p-CIGS/Mo. (a) J_{sc} et V_{co}, (b) Efficacité et FF

-Concentration de dopage dans la couche CIGS

La concentration de dopage dans la couche CIGS peut affecter de manière significative les performances de la cellule. L'effet de la concentration de CIGS sur la performance cellulaire est étudié. La concentration de dopage Na dans la couche absorbante CIGS a été variée dans la plage 1×10^{14} - $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Les concentrations de dopage Nd pour les couches CdS, ZnO et CTZSe ont été maintenues à 5×10^{17} , 10^{18} cm^{-3} et $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, respectivement

Les résultats sont résumés dans la figure 6. Tous les paramètres de performance de la cellule sont améliorés en augmentant la couche CIGS Nd dans la plage 1×10^{14} - $\sim 5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, en utilisant nous avons utilisé pour tracer l'échelle logarithmique pour l'axe de concentration. VOC, JSC, FF et η les valeurs augmentent et atteignent respectivement 79,6 mV, 43,37 mA/cm², 85,3 % et 28,6 %, comme le montrent les figures 6a et b. Toutes ces améliorations sont observées dans les cas de concentrations de dopage inférieures à $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

A des concentrations de dopage plus élevées, allant de 5×10^{15} à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, les choses sont différentes. Les valeurs de J_{sc}, FF et l'efficacité diminuent facilement avec une concentration accrue, tandis que le V_{co} reste presque constant à $\sim 0,796 \text{ V}$. Dans l'ensemble, la concentration de dopage plus élevée affecte négativement les paramètres de performance de la cellule, notamment J_{sc}. Cela peut réduire la possibilité de collecter des électrons libres générés par les rayonnements incidents au niveau du contact avant et peut réduire la valeur J_{sc}. Des concentrations de porteurs plus élevées augmentent le désordre cristallin et diminuent les performances de la cellule. Par conséquent, des concentrations de dopage très élevées doivent être évitées dans la couche CIGS pour éviter les pertes de recombinaison associées aux défauts. D'autres paramètres clés pour augmenter le J_{sc} sont les longueurs de diffusion pour l'électron (L_n) et le trou (L_p), comme décrit dans les équations (3-4) [41].

$$L_n = (D_n \tau_n)^{1/2} \tag{3}$$

$$L_p = (D_p \tau_p)^{1/2} \tag{4}$$

D_n et D_p parent respectivement les coefficients de diffusion des électrons et des trous, tandis que τ_n et τ_p sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous.

Les équations (3) et (4) démontrent la relation entre la longueur de diffusion et la mobilité et la durée de vie des porteurs minoritaires. La mobilité est également liée au coefficient de diffusion D_n par la relation d'Einstein, équation (5) :

$$D_n / \mu_n = kT / q \tag{5}$$

Où kT/q est le potentiel thermodynamique. Tous les paramètres mentionnés ci-dessus sont interdépendants. Avec une concentration de dopage supérieure à $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, la mobilité diminue, tandis que la durée de vie dépend de la concentration de dopage de manière complexe[42]. La durée de vie est affectée par plusieurs mécanismes de recombinaison, comme la recombinaison Auger. Cela résulte de défauts de réseau qui créent des niveaux de pièges dans la bande interdite. Des défauts cristallins sous diverses formes, tels que des défauts ponctuels, des dislocations ou des joints de grains, peuvent ainsi se produire en raison d'une concentration de dopage accrue. De tels défauts encouragent la recombinaison, donnant des valeurs J_{sc} abaissées[43].

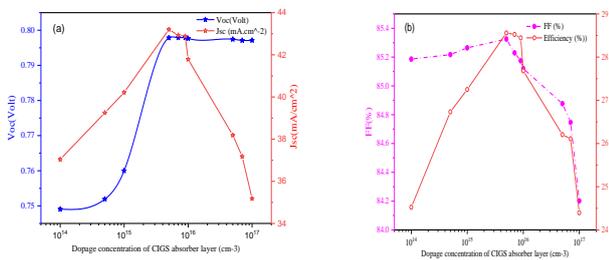


Figure 6: Effet de la concentration de dopage de la couche absorbante CIGS sur les performances de la cellule solaire $\text{MgF}_2/\text{ZnO}/\text{ZnO}:\text{i}/\text{n}-\text{CdS}/\text{p}-\text{CTZS}/\text{p}-\text{CIGS}/\text{Mo}$ (a) J_{sc} & V_{oc} , (b) Efficacité & FF

- Concentration de dopage dans la couche CZTSe

La couche CZTSe a ici une importance particulière car c'est la couche supplémentaire qui compense la couche CIGS plus fine. Il est impératif d'évaluer l'effet de la concentration de dopage CZTSe sur les performances de l'appareil. A cet effet, la concentration de dopage Na de la couche a été variée dans la gamme 1×10^{15} à $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Pour les couches CdS et ZnO, les concentrations de dopage sont respectivement de 5×10^{17} et 10^{18} cm^{-3} . Les performances de la cellule solaire actuelle sont influencées par la concentration de dopage de la couche CZTSe, comme résumé à la fig 7. La figure montre que les valeurs de J_{sc} et d'efficacité augmentent de manière significative avec l'augmentation concentration de dopage jusqu'à une limite à $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, après quoi elles diminuent fortement. Les résultats sont en accord avec les cellules solaires à couche absorbante unique à base de CZTSe décrites précédemment [43]. Une efficacité optimale et des valeurs J_{sc} de 29,22 % et 43,5 mA/cm^2 , respectivement, sont observées ici. La valeur FF augmente également de 82,8 % (à $\text{Nd } 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$) à 85,7 % (à $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$), après quoi la valeur diminue lentement. La valeur V_{oc} augmente avec la concentration de dopage jusqu'à $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, après quoi la valeur V_{oc} fluctue sans changement majeur.

Les résultats sont compréhensibles. Après une concentration de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, le petit changement de V_{oc} est dû à sa sensibilité aux bandes interdites de la couche absorbante CZTSe et CIGS. Avec une concentration de dopage plus élevée, les pertes de recombinaison augmentent et le J_{sc} diminue. La valeur J_{sc} est affectée par les excitations lumineuses incidentes et les pertes dues à divers processus de recombinaison. L'abaissement est associé à la durée de vie plus courte des excitons électron-trou générés, en raison de la forte concentration de dopage et de la mobilité des porteurs. Les porteurs minoritaires peuvent se recombiner avant leur diffusion vers l'électrode de la présente structure. De plus, avec des concentrations de dopage plus élevées au-dessus de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, la recombinaison Auger peut se produire dans la bande interdite. Comme décrit ci-dessus, des phases secondaires ou des défauts de réseau cristallin peuvent se produire et former des pièges qui réduisent la durée de vie des paires électron-trou. Par conséquent, les pertes de recombinaison augmentent. Par conséquent, le CZTSe ne doit pas avoir de fortes concentrations de dopage. Ceci est cohérent avec des études antérieures sur les systèmes CZTSSe[34]

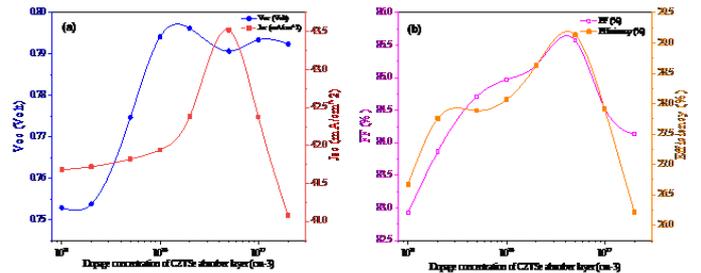


Figure 7 : Effet de la concentration de dopage de la couche absorbante CZTSe sur les performances de la cellule solaire $\text{MgF}_2/\text{ZnO}/\text{ZnO}:\text{i}/\text{n}-\text{CdS}/\text{p}-\text{CTZS}/\text{p}-\text{CIGS}/\text{Mo}$ (a) J_{sc} & V_{oc} , (b) Efficacité & FF.

Cellule solaire	$J_{sc}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	$V_{oc}(\text{mV})$	FF	$\eta\%$
$\text{MgF}_2/\text{ZnO}/\text{ZnO}:\text{i}/\text{n}-\text{CdS}/\text{p}-\text{CZTSe}/\text{p}-\text{CIGS}/\text{Mo}$	43.5	796	85.7	29.22

Le tableau 2 résume tous les paramètres de performance pour le $\text{MgF}_2/\text{ZnO}/\text{ZnO} \text{ i}/\text{n}-\text{CdS}/\text{p}-\text{CZTSe}/\text{p}-\text{CIGS}/\text{Mo}$ proposé: cellule solaire

4. CONCLUSION

Une cellule solaire de type $\text{MgF}_2/\text{ZnO-Al}/\text{ZnO:i/n-CdS/p-CTZS/p-CIGS}/\text{Mo}$ impliquant deux couches absorbantes CZTSe et CIGS a été simulée ici à l'aide du logiciel SILVACO TCAD (module ATLAS). MgF_2 est utilisé comme couche de revêtement antireflet (ARC), ZnO-Al comme couche d'oxyde conducteur transparent, CdS comme couche tampon, absorbeur CZTSe/CIGS et Mo comme contact arrière. L'inclusion de la couche d'absorbeur CZTSe ici, avec ses composants abondants, permet de minimiser l'épaisseur de la couche CIGS coûteuse, sans sacrifier les performances des cellules solaires. Les effets des épaisseurs de couche et des concentrations de dopage ont été optimisés pour produire une cellule solaire avec des paramètres de performance de : efficacité 29,22 %, V_{co} 0,79 V, J_{sc} 43,5 mA/cm^2 et FF 85,7 %. Les valeurs d'épaisseur de couche optimales sont : CZTSe 1,5 μm et couche tampon CdS 0,05 μm , tout en maintenant le CIGS fixé à 1,0 μm . Les concentrations de dopage optimales pour les couches CdS, CIGS et CZTSe sont de 5×10^{17} , 5×10^{15} et $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, respectivement. Les résultats indiquent que l'inclusion de la deuxième couche absorbante CZTSe permet d'utiliser une couche CIGS plus fine, ce qui réduit les coûts de production et réduit les risques environnementaux sans compromettre les performances de la cellule.

Acknowledgment

Financial support from Université Amar Telidji de Laghouat is acknowledged. The authors would thank the General Directorate of Scientific Research and Technological Development (DGRSDT), ALGERIA.

REFERENCES

- Gloeckler, M., I. Sankin, and Z. Zhao, *CdTe solar cells at the threshold to 20% efficiency*. IEEE Journal of Photovoltaics, 2013. **3**(4): p. 1389-1393.
- Jackson, P., et al., *New world record efficiency for Cu (In, Ga) Se₂ thin-film solar cells beyond 20%*. Progress in Photovoltaics: Research and Applications, 2011. **19**(7): p. 894-897.
- Ki, W. and H.W. Hillhouse, *Earth-abundant element photovoltaics directly from soluble precursors with high yield using a non-toxic solvent*. Advanced Energy Materials, 2011. **1**(5): p. 732-735.
- Lundberg, O., M. Edoff, and L. Stolt, *The effect of Ga-grading in CIGS thin film solar cells*. Thin Solid Films, 2005. **480**: p. 520-525.
- Kemell, M., M. Ritala, and M. Leskelä, *Thin film deposition methods for CuInSe₂ solar cells*. Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 2005. **30**(1): p. 1-31.
- Gloeckler, M. and J. Sites, *Band-gap grading in Cu (In, Ga) Se₂ solar cells*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 2005. **66**(11): p. 1891-1894.
- Amal, M.I., S.H. Lee, and K.H. Kim, *Properties of Cu₂ZnSn (SxSe_{1-x})₄ thin films prepared by one-step sulfo-selenization of alloyed metal precursors*. Current Applied Physics, 2014. **14**(7): p. 916-921.
- Wu, S.-H., et al., *Cu₂ZnSn (SxSe_{1-x})₄ thin film solar cell with high sulfur content (x approximately 0.4) and low Voc deficit prepared using a postsulfurization process*. Solar energy materials and solar cells, 2018. **175**: p. 89-95.
- Xue, C., et al., *Fabrication of Cu₂ZnSn (SxSe_{1-x})₄ solar cells by ethanol-ammonium solution process*. Applied Surface Science, 2016. **383**: p. 90-97.
- Huang, T.J., et al., *CZTS-based materials and interfaces and their effects on the performance of thin film solar cells*. physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters, 2014. **8**(09): p. 735-762.
- Ramasamy, K., M.A. Malik, and P. O'Brien, *Routes to copper zinc tin sulfide Cu₂ZnSnS₄ a potential material for solar cells*. Chemical communications, 2012. **48**(46): p. 5703-5714.
- Shi, Z., D. Attygalle, and A.H. Jayatissa, *Kesterite-based next generation high performance thin film solar cell: current progress and future prospects*. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 2017. **28**(2): p. 2290-2306.
- Persson, C., *Electronic and optical properties of Cu₂ZnSnS₄ and Cu₂ZnSnSe₄*. Journal of Applied Physics, 2010. **107**(5): p. 053710.
- Chen, S., et al., *Abundance of Cu Zn+ Sn Zn and 2Cu Zn+ Sn Zn defect clusters in kesterite solar cells*. Applied Physics Letters, 2012. **101**(22): p. 223901.

15. Wei, H., et al., *Tunable band gap Cu₂ZnSnS₄(1-x) nanocrystals: experimental and first-principles calculations*. CrystEngComm, 2011. **13**(7): p. 2222-2226.
16. Padhy, S., R. Mannu, and U.P. Singh, *Graded band gap structure of kesterite material using bilayer of CZTS and CZTSe for enhanced performance: A numerical approach*. Solar Energy, 2021. **216**: p. 601-609.
17. Xu, J., J. Lin, and C. Zhuang, *Analysis of the open-circuit voltage of Cu₂ZnSn(S, Se)₄ thin film solar cell*. Solar Energy, 2018. **164**: p. 231-242.
18. Chelvanathan, P., M.I. Hossain, and N. Amin, *Performance analysis of copper-indium-gallium-diselenide (CIGS) solar cells with various buffer layers by SCAPS*. Current Applied Physics, 2010. **10**(3): p. S387-S391.
19. Boukortt, N.E.I., S. Patané, and Y.M. Abdulraheem, *Numerical investigation of CIGS thin-film solar cells*. Solar Energy, 2020. **204**: p. 440-447.
20. Selmane, N., et al., *Cost-saving and performance-enhancement of CuInGaSe solar cells by adding CuZnSnSe as a second absorber*. Solar Energy, 2022. **234**: p. 64-80.
21. Heriche, H., et al., *Enhanced efficiency of Cu(In, Ga)Se₂ solar cells by adding Cu₂ZnSn(S, Se)₄ absorber layer*. Optik, 2017. **144**: p. 378-386.
22. Vilarica, M. and G. González-Aguilar, *Electrochemical behaviour of ZnO/flavonoid pairs*. Environmental Progress & Sustainable Energy, 2013. **32**(3): p. 804-809.
23. Qu, G., et al., *Electrochemical method for wet removal of phosphine*. Environmental Progress & Sustainable Energy, 2015. **34**(6): p. 1640-1646.
24. Selmane, N., et al., *Effect of ZnO-based TCO on the performance of a-Si H(n)/a-Si H(i)/c-Si H(p)/Al BSF(p+)/Al heterojunction solar cells*. Environmental Progress & Sustainable Energy, 2019. **38**(4): p. 13114.
25. Dabbabi, S., T.B. Nasr, and N. Kamoun-Turki, *Parameters optimization of CIGS solar cell using 2D physical modeling*. Results in physics, 2017. **7**: p. 4020-4024.
26. Loubat, A., et al., *Optical properties of ultrathin CIGS films studied by spectroscopic ellipsometry assisted by chemical engineering*. Applied Surface Science, 2017. **421**: p. 643-650.
27. Carron, R., et al., *Refractive indices of layers and optical simulations of Cu(In, Ga)Se₂ solar cells*. Science and Technology of advanced Materials, 2018. **19**(1): p. 396-410.
28. Ouédraogo, S., F. Zougmore, and J. Ndjaka, *Numerical analysis of copper-indium-gallium-diselenide-based solar cells by SCAPS-1D*. International Journal of photoenergy, 2013. **2013**.
29. Muhammad, A.J., A.I. Salih, and G. Fadel, *Numerical analysis of graded band gap CZT(S, Se) solar cells using AMPS-1D*.
30. Parisi, A., et al., *Graded carrier concentration absorber profile for high efficiency CIGS solar cells*. International Journal of photoenergy, 2015. **2015**.
31. Olopade, M., O. Oyebola, and B. Adeleke, *Investigation of some materials as buffer layer in copper zinc tin sulphide (Cu₂ZnSnS₄) solar cells by SCAPS-1D*. Advances in Applied Science Research, 2012. **3**(6): p. 3396-3400.
32. Chen, S., et al., *Crystal and electronic band structure of Cu₂ZnSnX₄ (X= S and Se) photovoltaic absorbers: First-principles insights*. Applied Physics Letters, 2009. **94**(4): p. 041903.
33. Chen, S., et al., *Compositional dependence of structural and electronic properties of Cu₂ZnSn(S, Se)₄ alloys for thin film solar cells*. Physical Review B, 2011. **83**(12): p. 125201.
34. Maklavani, S.E. and S. Mohammadnejad, *Reduction of interface recombination current for higher performance of p+-CZTSxSe(1-x)/p-CZTS/n-CdS thin-film solar cells using Kesterite intermediate layers*. Solar Energy, 2020. **204**: p. 489-500.
35. Grossberg, M., et al., *Photoluminescence and Raman study of Cu₂ZnSn(SexS_{1-x})₄ monocrystals for photovoltaic applications*. Thin Solid Films, 2011. **519**(21): p. 7403-7406.
36. Benmir, A. and M. Aida, *Analytical modeling and simulation of CIGS solar cells*. Energy Procedia, 2013. **36**: p. 618-627.

37. Tobbeche, S. and H. Amar, *Two-dimensional Modelling and Simulation of CIGS thin-film solar cell*. Journal of New Technology and Materials, 2014. **277**(1747): p. 1-5.
38. Rezaei, N., et al., *Optical optimization of a multi-layer wideband anti-reflection coating using porous MgF₂ for sub-micron-thick CIGS solar cells*. Solar Energy, 2019. **177**: p. 59-67.
39. Saha, U., A. Biswas, and M.K. Alam, *Efficiency enhancement of CZTSe solar cell using CdS (n)/(AgxCu_{1-x})₂ZnSnSe₄ (p)/Cu₂ZnSnSe₄ (p+) structure*. Solar Energy, 2021. **221**: p. 314-322.
40. Gloeckler, M., A. Fahrenbruch, and J. Sites. *Numerical modeling of CIGS and CdTe solar cells: setting the baseline*. in *3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 2003. Proceedings of*. 2003. IEEE.
41. Selmane, N., A. Cheknane, and H.S. Hilal, *Optimization of Al-Doped ZnO Transparent Conducting Oxide and Emitter Layers for Enhanced Performance of Si Heterojunction Solar Cells*. Journal of Electronic Materials, 2020. **49**(3): p. 2179-2190.
42. Möller, H.J., *Semiconductors for solar cell applications*. Progress in materials science, 1991. **35**(3-4): p. 205-418.
43. Burk, D. and V. De La Torre, *An empirical fit to minority hole mobilities*. IEEE electron device letters, 1984. **5**(7): p. 231-233.