

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
École Nationale Polytechnique



Département de Métallurgie

Centre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Énergétique

Mémoire de Projet de Fin d'Études

En vue de l'obtention du diplôme

INGÉNIEUR D'ÉTAT

Spécialité : Génie des matériaux

Étude et simulation d'un émetteur de type p pour les cellules photovoltaïques à hétérojonction en silicium

Nadine BELFIHADJ

Sous la direction de :

Mr. Fatah HELLAL, Professeur ENP, ENCADREUR

Mr. Faouzi KEZZOULA , Maître de recherche A CRTSE, CO-ENCADREUR

Présenté et soutenu publiquement le 30/08/2020

Composition du Jury :

Président
Examinateur
Examinateur

Mr. Mohamed Chitroub, Professeur ENP
Mr. Abderrahmane Daimellah, Docteur ENP
Mr. Choayb Bouhafs, Docteur ENP

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
École Nationale Polytechnique



Département de Métallurgie

Centre de Recherche en Technologie des Semi-conducteurs pour l'Énergétique

Mémoire de Projet de Fin d'Études

En vue de l'obtention du diplôme

INGÉNIEUR D'ÉTAT

Spécialité : Génie des matériaux

Étude et simulation d'un émetteur de type p pour les cellules photovoltaïques à hétérojonction en silicium

Nadine BELFIHADJ

Sous la direction de :

Mr. Fatah HELLAL, Professeur ENP, ENCADREUR

Mr. Faouzi KEZZOULA , Maître de recherche A CRTSE, CO-ENCADREUR

Présenté et soutenu publiquement le 30/08/2020

Composition du Jury :

Président
Examinateur
Examinateur

Mr. Mohamed Chitroub, Professeur ENP
Mr. Abderrahmane Daimellah, Docteur ENP
Mr. Choayb Bouhafs, Docteur ENP

ملخص

يعتبر التقاطع الغير متجانس للسيليكون غير المتبلور (a-Si:H) و السيليكون البلوري (c-Si) ذات أهمية تقنية كبيرة للخلايا الشمسية عالية الكفاءة. تم حساب فجوة النطاق من مودعة بواسطة الرش المهبطي. تم إجراء محاكاة باستخدام AFORS-HET لخلية شمسية من نوع a-Si:H/c-Si لإجراء تحليل منهجي لتأثير a-Si:H على معاملات الإخراج. تمت مناقشة التأثير والنتائج المثلى لسلك وتنشيط باعث a-Si:H وكذلك كثافة العيوب في الواجهة. تم إدخال طبقة غير مطلية من a-Si:H بساكنة متفاوتة بين تقاطع a-Si:H لإيجاد عيوب الواجهة.

الكلمات الدالة: التقاطع الغير متجانس, الخلايا الشمسية, السيليكون غير المتبلور, a-Si:H, AFORS-HET.

Abstract

The heterojunctions made of hydrogenated amorphous silicon and monocrystalline silicon (a-Si:H/c-Si) are high efficiency solar cells. The optical gap was calculated from a p doped a-Si:H deposited by sputtering. A simulation made with AFORS-HET of an a-Si:H/c-Si type solar cell on an n-type substrate was performed. The influence and optimal results of the thickness and doping of the a-Si:H emitter as well as the density of defects at the interface were discussed. An undoped a-Si:H layer of varying thickness was introduced between the a-Si:H junction to passivate the interface defects.

Key-words : heterojunction, photovoltaic, hydrogenated amorphous silicon, a-Si:H, AFORS-HET.

Résumé

Les hétéro-jonctions de silicium amorphe hydrogéné et de silicium monocristallin (a-Si:H/c-Si) présentent un grand intérêt technologique pour les cellules solaires à haut rendement. Le gap optique a été calculé à partir d'une couche de a-Si:H dopée p déposée par pulvérisation cathodique. Une simulation avec AFORS-HET d'une cellule solaire de type a-Si:H/c-Si sur un substrat de type n a été réalisée. L'influence et les résultats optimaux de l'épaisseur et du dopage de l'émetteur a-Si:H ainsi que la densité de défauts d'interface ont été discutés. Une couche a-Si:H intrinsèque d'épaisseur variable a été introduite entre la jonction a-Si:H pour passiver les défauts d'interface.

Mot-clés : hétérojonction, photovoltaïque, silicium amorphe hydrogéné, a-Si:H, AFORS-HET.

Remerciements

Avant tout développement sur ce travail, il apparaît plus opportun de commencer ce mémoire par des remerciements, à ceux qui m'ont beaucoup appris au cours de ce chemin, et même à ceux qui ont eu la gentillesse de faire de ce chemin un moment très profitable. Le présent travail porte, certes, ma signature mais il reste le fruit de toute une équipe. C'est donc la conjugaison des efforts des uns et des autres qui a aboutit aux résultats que je présente ici. Il me paraît, à ce titre, au moment où cette étude s'achève, de manifester ma gratitude et ma reconnaissance à toutes les personnes qui y ont contribué de près ou de loin.

Je remercie les membres du jury pour avoir accepté d'examiner ce mémoire.

Je remercie également Mr Faouzi KEZZOULA, qui m'a formé et accompagné tout au long de cette expérience avec beaucoup de patience et de pédagogie. Présent mais laissant beaucoup de liberté dans les choix d'approfondissement tout en m'accordant sa confiance. Ses compétences et son expérience ont permis une bonne orientation de ce travail.

Je ne serais pas indifférente également à l'égard de Mr Fatah HELLAL qui m'a suivi tout au long de cette période et m'a conseillé sur l'orientation que celui-ci devait prendre. Pour sa patience, sa disponibilité et surtout ses judicieux conseils, qui ont contribué à alimenter ma réflexion.

À ceux qui m'ont beaucoup appris au cours de ce chemin. À ma mère pour sa patience dévouée et sa douceur. À mon père pour le goût à l'effort qu'il a suscité en moi, de par sa rigueur. À ma famille et mes proches qui m'avez toujours soutenu et encouragé durant ces années d'études.

À toutes ces personnes, je souhaite leur exprimer toute ma gratitude pour m'avoir permis de réaliser ce travail dans les meilleures conditions durant ces derniers mois.

Table des matières

Liste des tableaux

Liste des figures

Liste des abréviations

Introduction	14
1 Introduction au photovoltaïque	18
1.1 Notions préliminaires sur le rayonnement solaire	18
1.2 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	20
1.2.1 Historique	20
1.2.2 Principe de fonctionnement	20
1.3 Structure des cellules photovoltaïques en silicium	22
1.3.1 Cellule photovoltaïque standard en silicium	22
1.3.1.1 Couche antireflet	23
1.3.1.2 Texturisation	23
1.3.1.3 Couche de passivation	24
1.3.1.4 Back Surface Field (BSF)	24
1.3.1.5 Contacts face avant et arrière	24
1.3.2 Structures avancées de cellules photovoltaïques en silicium	27
1.3.2.1 Cellules PERC et PERL	27
1.3.2.2 Cellule IBC	28
1.3.2.3 Cellules photovoltaïques à hétérojonction de silicium (HET)	29
1.4 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque	30
1.4.1 Tension de circuit ouvert (V_{co})	32
1.4.2 Courant de court-circuit (I_{cc})	33

1.4.3	Facteur de forme (FF)	33
2	Silicium et hétérojonction	35
2.1	Technologie du silicium	35
2.1.1	Silicium cristallin	35
2.1.1.1	Description du matériau	35
2.1.1.2	Dopage du silicium cristallin	37
2.1.1.3	Propriétés électroniques	38
2.1.2	Silicium amorphe hydrogéné	40
2.1.2.1	Description du matériau	40
2.1.2.2	Dopage du silicium amorphe	41
2.1.2.3	Rôle de l'hydrogène	42
2.1.2.4	Propriétés électroniques	43
2.1.3	Mécanismes de recombinaison, durée de vie des minoritaires et longueur de diffusion	45
2.1.3.1	Recombinaison radiative	45
2.1.3.2	Recombinaison Auger	46
2.1.3.3	Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)	46
2.2	Cellule à hétérojonction de silicium	47
2.2.1	Structure des cellules HET	48
2.2.2	Diagramme de bandes	49
3	Dépôt de la couche a-Si :H(p) et mesure du gap optique	53
3.1	Dépôt du a-Si :H(p) par pulvérisation cathodique	53
3.1.1	Préparation des substrats	53
3.1.2	Dépôt de la couche a-Si :H(p)	54
3.2	Mesure de la transmittance de la couche a-Si :H(p)	55
3.2.1	Principe de la mesure par spectrophotométrie UV-Vis-NIR	55
3.2.2	Mesure du gap optique par la méthode de Tauc	56
4	Simulation de la cellule solaire	59
4.1	Logiciel de simulation AFORS-HET	59
4.1.1	Présentation du logiciel	59

4.1.2	Équations	60
4.1.3	Étapes de la simulation	62
4.2	Simulation d'une cellule HET	64
4.2.1	Propriétés de la cellule à simuler	64
4.2.1.1	Substrat c-Si(n)	64
4.2.1.2	Emetteur a-Si :H(p)	65
4.2.1.3	Introduction de défauts à l'interface c-Si(n)/a-Si :H(p)	66
4.2.2	Influence de l'épaisseur de la couche de l'émetteur a-Si :H(p)	66
4.2.3	Influence du dopage de l'émetteur a-Si :H(p)	69
4.2.4	Influence de la densité de défauts à l'interface c-Si(n)/a-Si :H(p)	72
4.3	Simulation d'une cellule HIT	75
4.3.1	Etat de l'art des cellules HIT	75
4.3.2	Influence de l'addition d'une couche intrinsèque a-Si :H	76
	Conclusion	81
	Bibliographie	82

Liste des tableaux

2.1	Paramètres utilisés pour le calcul de la mobilité des porteurs majoritaires dans le silicium cristallin [25]	40
3.1	Paramètres de dépôt de la couche a-Si :H(p) par pulvérisation cathodique . . .	55
4.1	Tableau récapitulatif des paramètres utilisés pour la simulation	66

Liste des figures

1	Répartition des sources d'énergies utilisées dans le monde [6]	15
1.1	Irradiance en fonction de la longueur d'onde	19
1.2	Structure et diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque	21
1.3	Structure d'une cellule photovoltaïque standard avec contacts sur les deux faces	23
1.4	Évolution des rendements de conversion les plus élevés pour les cellules photovoltaïques en laboratoire de 1976 jusqu'à 2020 [14]	26
1.5	Structure des cellules PERC (a) et PERL (b)	27
1.6	Schéma d'une cellule à contacts interdigités en face arrière (IBC)	29
1.7	Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire idéale	30
1.8	Circuit électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle	31
1.9	Caractéristique courant-tension $I(V)$ d'une cellule solaire avec et sans éclair- ement	32
2.1	Gap direct (a) et indirect (b) du silicium cristallin	36
2.2	Silicium cristallin intrinsèque (a) silicium cristallin dopé au phosphore (type n) (b) silicium cristallin dopé au bore (type p)	37
2.3	Comparaison entre le silicium amorphe hydrogéné et le silicium cristallin . . .	41
2.4	Réponse spectrale de deux cellules en silicium cristallin et amorphe	42
2.5	Équilibre de passivation des liaisons pendantes des atomes de silicium par l'hydrogène	43
2.6	Modèle de Mott et Davis de la structure de bande d'un semi-conducteur amorphe	43
2.7	Recombinaison radiative dans un semi-conducteur	45
2.8	Recombinaison Auger dans un semi-conducteur	46

2.9	Les quatre interactions possibles entre les porteurs de charge et les défauts (Recombinaison SRH)	47
2.10	Cellule à hétérojonction de type a-Si :H/c-Si	49
2.11	Diagramme de bandes pour des hétérojonctions de silicium	50
3.1	Schéma de l'enceinte de pulvérisation cathodique	54
3.2	Représentation schématique d'un spectrophotomètre UV-Vis-NIR	56
3.3	Absorption du silicium amorphe hydrogéné en fonction de la longueur d'onde	57
3.4	Détermination du gap optique par la méthode de Tauc	57
4.1	Interface du logiciel AFORS-HET 2.5	62
4.2	Définition de la structure de la cellule à simuler	63
4.3	Définition des paramètres de la couche	63
4.4	Calcul de la courbe I(V) sous illumination	64
4.5	Schéma de la structure a-Si :H(p)/c-Si(n) de la cellule HET à simuler	65
4.6	Influence de la variation de l'épaisseur de l'émetteur sur les caractéristiques électriques de la cellule a-Si :H(p)/c-Si(n)	67
4.7	Influence de la variation du dopage de l'émetteur sur les caractéristiques élec- triques de la cellule a-Si :H(p)/c-Si(n)	70
4.8	Influence de la variation de la densité de défauts d'interface sur les caractéris- tiques électriques de la cellule a-Si :H(p)/c-Si(n)	73
4.9	Schéma de la structure de la cellule HIT proposée par SANYO	75
4.10	Schéma de la structure a-Si :H(p)/a-Si :H(i)/c-Si(n) de la cellule HIT à simuler	76
4.11	Influence de la variation de l'épaisseur de la couche a-Si :H(i) sur les caracté- ristiques électriques de la cellule a-Si :H(p)/a-Si :H(i)/c-Si(n)	78

Liste des abréviations

χ	Affinité électronique
α	Coefficient d'absorption
Δn	Concentration des électrons photogénérés
Δp	Concentration des trous photogénérés
ϵ_0	Constante diélectrique absolue
ϵ_r	Constante diélectrique relative
η	Rendement
λ	Longueur d'onde
μ_n	Mobilité électrons
μ_p	Mobilité des trous
ν	Fréquence de la longueur d'onde
ν_0	Seuil photoélectrique
ρ	Résistivité
σ	Conductivité
$\varphi(x, t)$	Potentiel électrostatique
E_c	Niveau d'énergie le plus bas de la bande de conduction
E_{F_n}	Quasi-niveau de Fermi des électrons
E_{F_p}	Quasi-niveau de Fermi des trous
$E_{g, Tauc}$	Gap optique de Tauc
E_g	L'énergie de gap

E_v	Niveau d'énergie le plus élevé de la bande de valence
$G_n(x, t)$	Taux de génération des électrons
$G_p(x, t)$	Taux de génération des trous
h	Constante de Planck
I_0	Courant de saturation de la diode
I_{cc}	Courant de court-circuit
I_{ph}	Photo-courant
I_{sh}	Courant de résistance de shunt
$j_n(x, t)$	Densité de courant des électrons
$j_p(x, t)$	Densité de courant des trous
k	Constante de Boltzmann
m	Masse de l'électron
m_c	Masse effective des électrons dans la bande de conduction
m_v	Masse effective des trous dans la bande de valence
$n(x, t)$	Densité d'électrons libres
N_a	Concentration des atomes accepteurs
N_c	Densité d'états au bord de la bande de conduction
N_d	Concentration des atomes donneurs
N_v	Densité d'états au bord de la bande de valence
p	Quantité de mouvement
$p(x, t)$	Densité des trous
q	Charge élémentaire
$R_n(x, t)$	Taux de recombinaison des électrons
$R_p(x, t)$	Taux de recombinaison des trous

R_{sh}	Résistance de shunt
R_s	Résistance série
T	Température
$T(\lambda)$	Transmittance
V_{co}	Tension de circuit ouvert
V_d	Tension de diffusion
V_{seuil}	Barrière de potentiel
V_{th}	Tension thermique
a-Si :H	Silicium amorphe hydrogéné
BSF	Back Surface Field
c-Si	Silicium cristallin
CAR	Couche antireflet
CVD	Chemical Vapor Deposition
DOS	Densité d'états
FF	Facteur de forme
HET	Cellule photovoltaïque à hétérojonction
HIT	Heterojunction with Intrinsic Thin layer
IBC	(Interdigitated Back Contact
PECVD	Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition
PERC	Passivated Emitter and Rear Cell
PERL	Passivated Emitter Rear Locally Diffused
QBC	Queue de bande de conduction
QBV	Queue de bande de valence
ZCE	Zone de charge d'espace

Introduction

En 27 ans, la consommation mondiale en électricité a augmenté de 117.37% pour atteindre une valeur de 23 696 TWh en 2017 [1]. Face à l'industrialisation et la croissance démographique mondiale, les demandes en énergie ne font qu'accroître, en contrepartie, les sources fossiles et fissiles, qui sont les principales ressources de production énergétique, sont en voie d'épuisement.

Au rythme de consommation actuelle, on estime l'épuisement des réserves de pétrole et de gaz d'ici une quarantaine d'année, un siècle pour le charbon [2] et 130 ans pour les réserves d'uranium [3]. Outre la raréfaction et le non renouvellement de ces réserves, leur exploitation est très polluante et représente un risque environnemental majeur. En effet, la combustion des fossiles, qui représente aujourd'hui près de 67% de l'électricité produite [1], est un des facteurs majeurs contribuant au réchauffement climatique à travers l'émission des gaz à effet de serre. Les réacteurs nucléaires, quant à eux, n'émettent pas autant de gaz, mais restent néanmoins nocifs pour l'être humain et l'environnement à cause des déchets nucléaires. En plus des accidents tels que Fukushima, Three Mile Island et Tchernobyl ainsi que le risque lié au terrorisme nucléaire, cette source d'énergie, dont le taux global est de 10,6% [1], reste très controversée.

Afin de diminuer la dominance de ces ressources éphémères et lutter contre le réchauffement climatique, des sources d'énergies alternatives sont sujet de développement et de recherche. Par opposition aux sources traditionnelles qui consistent à puiser dans un stock, les énergies renouvelables reposent sur l'exploitation d'un flux, tel que le vent, le soleil ou l'eau, qui sont inépuisables. L'énergie solaire photovoltaïque, comme l'indique la figure 1 est sous exploitée. En effet, le rayonnement solaire qui atteint le sol a une puissance d'environ 1000 Watt/m² [4], il suffirait d'équiper 5% de la surface des déserts pour couvrir les besoins planétaires en électricité [5].

Tout ces avantages font que le photovoltaïque peut prendre une part significative dans la production et la consommation d'énergie mondiale. Cependant, le défi réside dans la capacité à créer des dispositifs qui convertissent suffisamment et efficacement la lumière solaire

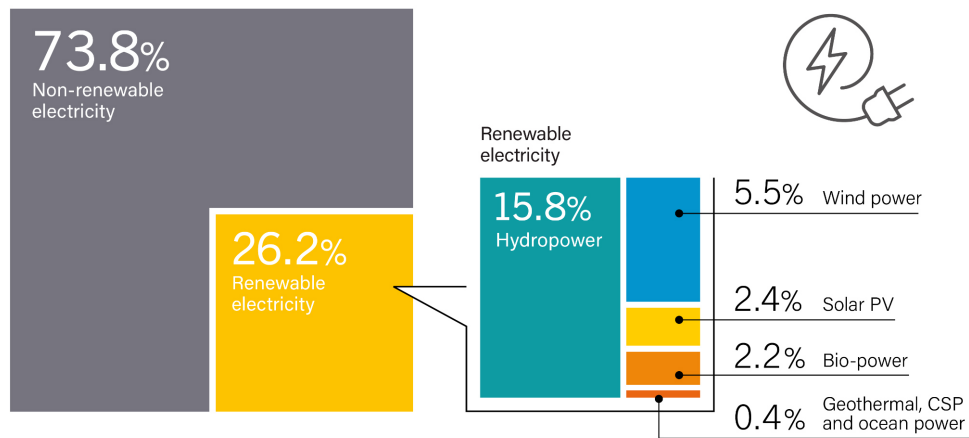


FIGURE 1 – Répartition des sources d'énergies utilisées dans le monde [6]

en énergie électrique tout en restant compatible avec les lois exigées par le marché. En effet, pour atteindre la parité du réseau, le coût de l'énergie photovoltaïque doit être abaissé. Deux stratégies peuvent être mises en place dans ce sens : réduire le coût de production (y compris les matières premières et la fabrication) et / ou augmenter l'efficacité de la conversion électrique.

Les cellules solaires conventionnelles à homojonction en silicium détiennent 90% de part de marché. Ces cellules sont à base d'un substrat en silicium cristallin (c-Si) dopé n (ou dopé p), tandis que la face avant est fortement dopée p (ou dopée n) par diffusion. Cependant, compte tenu de l'énergie requise pour la fabrication de ces cellules standards, le rendement de conversion du module industriel est encore trop faible (généralement de 12 à 14%). Au contraire, les cellules à homojonction en silicium amorphe, offrent la perspective de traiter de grandes surfaces à un coût extrêmement faible. De 6 à 8,5% de rendement a été atteint par des modules fabriqués à grande échelle. Le meilleur des deux technologies est combiné dans les cellules solaires à hétérojonction (HET) silicium amorphe/silicium cristallin (a-Si :H/c-Si) : le rendement élevé des cellules solaires à base de c-Si ainsi que le traitement à faible coût des cellules solaires en couches minces. En raison des basses températures de processus et l'amincissement de la couche d'aluminium à l'arrière, des substrats en silicium très fins peuvent être utilisés et ainsi diminuer le besoin du c-Si, tout en maintenant des rendements élevés grâce à une diminution drastique des pertes de recombinaison au niveau de l'interface a-Si :H/c-Si.

Ce travail a entièrement été consacré à l'étude des cellules solaires à hétérojonction en silicium et se concentre spécialement sur les paramètres critiques de l'émetteur a-Si :H et leur influence sur les caractéristiques électriques de la cellule.

Le premier chapitre est consacré à l'introduction au domaine photovoltaïque, aux struc-

tures des différentes technologies de cellules ainsi qu'à leurs caractéristiques électriques.

Le deuxième chapitre portera sur la technologie des cellules à hétérojonction tout en détaillant les propriétés du silicium cristallin et du silicium amorphe hydrogéné qui sont au coeur des cellules HET.

Dans le troisième chapitre, un dépôt de silicium amorphe hydrogéné par pulvérisation cathodique a été fait. Le gap optique de cet échantillon sera ensuite calculé par la méthode de Tauc.

Dans le quatrième chapitre, une simulation d'une cellule a-Si :H(p)/c-Si(n) a été effectuée grâce au logiciel AFORS-HET. Une étude de la variation des paramètres critiques de l'émetteur a-Si :H a été effectuée afin de mieux comprendre le fonctionnement de ce type de cellule. Pour une simulation plus réaliste, une densité de défauts d'interface a été ajoutée. Une couche de a-Si :H intrinsèque a ensuite été introduite à cette interface pour passiver les défauts.

Chapitre 1

Introduction au photovoltaïque

Le rayonnement solaire peut être converti en énergie par diverses technologies. L'énergie solaire thermodynamique consiste à concentrer les rayons du soleil avec un dispositif optique pour chauffer un fluide à faible température d'ébullition. Ce dernier produit de l'électricité par le biais de turbines à vapeur ou à gaz. L'énergie solaire thermique utilise les rayonnements pour chauffer un fluide, qui peut être exploité directement comme eau sanitaire ou pour le chauffage ou bien indirectement pour la production d'énergie électrique. Quant à l'énergie solaire photovoltaïque, les photons émanant du soleil sont transformés en électricité par effet photoélectrique au moyen de cellules photovoltaïques.

1.1 Notions préliminaires sur le rayonnement solaire

À 149 millions de kilomètres de la terre, une étoile appelée soleil est le siège de réactions de fusion nucléaire. En consommant de l'hydrogène pour créer de l'hélium, le soleil transforme une partie de la masse des atomes d'hydrogène en énergie selon la formule d'Einstein « $E = mc^2$ ». Cette énergie thermonucléaire émanant du noyau solaire est principalement émise sous forme de rayonnements électromagnétiques composés de photons ; ils leur faut environ 10 000 à 170 000 ans pour transiter à la surface du soleil [7]. Ces rayonnements, ayant une célérité de 300 000 km/s, mettent environ 8 minutes pour parvenir à notre planète. Leurs longueurs d'onde sont comprises entre 290 nm et 2770 nm, constituées d'ultraviolet, de lumière visible et d'infrarouges.

Afin d'évaluer l'effet de l'atmosphère sur le spectre solaire, la notion d'«*Air Mass*» (AM) a été introduite. Cette dernière quantifie la puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle zénithal (l'angle d'incidence du soleil par rapport au zénith). Une approximation au premier ordre de ce coefficient est donnée par $AM = 1/\cos\theta$ où θ est l'angle zénithal en

degrés. L'intégration de l'irradiance sur la totalité du spectre permet d'obtenir la puissance (en $\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$) fournie par le rayonnement.

Le spectre solaire reçu à l'extérieur de notre atmosphère est semblable au spectre d'un corps noir à la température de 5777°K . Comme toute étoile à température constante, le soleil est classé dans la catégorie des corps noirs. De ce fait, l'intensité du rayonnement à la surface du soleil peut être modélisée par la relation de Planck qui donne l'irradiance en fonction de la longueur d'onde représentée dans la figure 1.1.

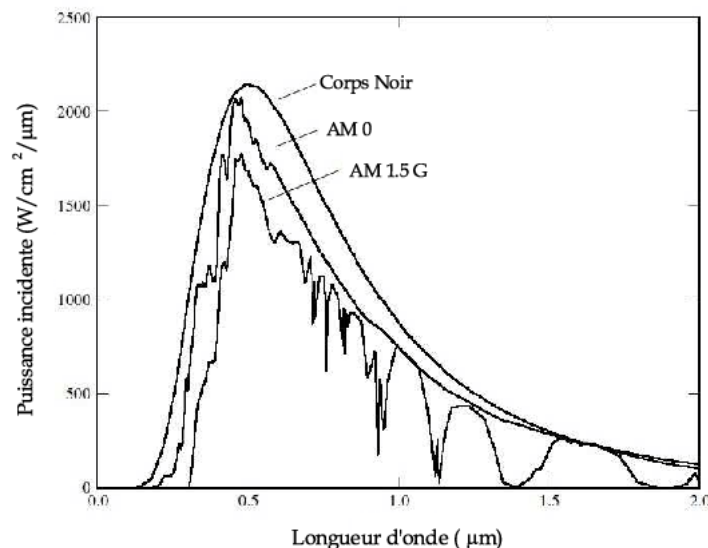


FIGURE 1.1 – Irradiance en fonction de la longueur d'onde

Cependant, on peut remarquer que le spectre solaire hors atmosphère représenté par AM 0 montre des creux profonds qui sont dûs à l'absorption par l'atmosphère du soleil. L'usage de ce spectre est restreint aux applications spatiales. À la surface du sol, le spectre solaire ne nous parvient pas tel quel, il subit plusieurs interactions durant son parcours jusqu'à la terre. En plus des absorptions présentes sur le spectre AM 0, les absorptions par l'atmosphère terrestre sont additionnées pour obtenir le spectre AM 1.5 (spectre solaire au niveau de la mer). En effet, une partie du rayonnement est absorbée quand celui-ci interagit avec les gaz qui composent l'atmosphère, tels que l'ozone, le dioxyde de carbone et la vapeur d'eau. Ces molécules absorbent les énergies des rayonnements proches de leur énergie de liaison. D'autre part, les aérosols et les particules présents dans l'air absorbent les rayonnements de façon uniforme.

Dans l'industrie photovoltaïque, le spectre AM 1.5G correspondant à un angle zénithal de 48.2° a été normalisé pour l'évaluation du rendement des cellules photovoltaïques. La lettre «G» représente le rayonnement global qui inclue les deux rayonnements directs et diffus.

1.2 Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

1.2.1 Historique

En menant des expériences sur une batterie, Alexandre Edmond Becquerel découvre en 1839 que le rendement de cette dernière est amélioré dès lors son exposition à la lumière [8]. En 1883, Charles Frittis est parvenu à créer la première cellule photovoltaïque en recouvrant du sélénium par de fines couches d'or. Mais le rendement étant de l'ordre de 1% et le coût de ses matériaux onéreux, le chercheur américain abandonna ses travaux. Cet effet ne peut être expliqué en considérant la lumière seulement comme une onde, c'est pour cela qu'il a fallu attendre la révolution quantique pour substituer la description ondulatoire classique.

En 1901, De Broglie a énoncé le principe de dualité onde-corpuscule qui stipule que la lumière émise par le soleil jouit d'une double nature; elle est à la fois ondulatoire, se comportant comme une onde électromagnétique de longueur d'onde λ , et corpusculaire sous forme de photons, ayant une masse au repos nulle et se déplaçant à la vitesse de la lumière. À chaque photon est associée une longueur d'onde λ telle que $E = h\nu$ où ν est la fréquence associée à la longueur d'onde et h la constante de Planck. Quatre ans plus tard, Albert Einstein réussit à exploiter le concept de photon pour expliquer le phénomène photoélectrique. Une découverte qui lui a valu le prix Nobel en 1921.

Mais ce n'est qu'en 1954 que les trois chercheurs américains, Pearson, Prince et Chapin [9] travaillant pour les laboratoires Bell ont pu mettre au point une cellule à base de silicium dopé affichant un rendement de 6%. En 1958, le satellite Vanguard 1 a été équipé par des modules photovoltaïques composés de silicium et ayant un rendement de 9%. Elles sont alors pour la première fois utilisées dans le domaine spatial jusqu'à lors dépendant uniquement du nucléaire. Il a fallu attendre jusqu'aux années 70 pour que le photovoltaïque prenne son essor grâce à la diminution graduelle de son coût.

1.2.2 Principe de fonctionnement

Le mot photovoltaïque est composé du préfixe grec « phos » qui signifie lumière et le patronyme d'Alessandro Volta « volt ». Le photovoltaïque signifie littéralement « électricité d'origine lumineuse ». Cet effet permet la conversion de l'énergie solaire en électricité par le biais d'une cellule photovoltaïque. Celle-ci est constituée d'un matériau semi-conducteur qui sert à transmettre l'énergie des photons aux électrons pendant qu'un circuit extérieur assure leur collecte.

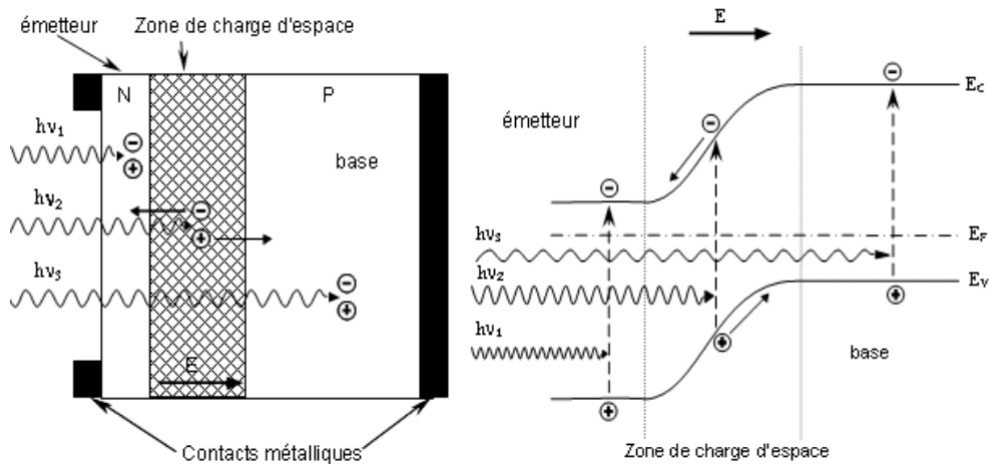


FIGURE 1.2 – Structure et diagramme de bande d’une cellule photovoltaïque

Quand l’énergie d’un photon incident est plus élevée que l’énergie du gap E_g ($h\nu_0 > E_g$ ou ν_0 est le seuil photoélectrique de conduction), les électrons périphériques seront libérés de l’attraction de l’atome, et passent de la bande de valence vers la bande de conduction. Cette migration d’électron va générer un trou dans la bande de valence ainsi qu’un électron libre localisé dans la bande de conduction. On a donc la création d’une paire électron-trou. Ce phénomène est appelé effet photoélectrique et il permet au semi-conducteur d’acquérir des propriétés conductrices.

L’aptitude des électrons à se déplacer librement augmente certes la conductivité du semi-conducteur, mais il ne peut générer de courant si ces charges ne sont pas orientées, autrement dit; si ces charges photogénérées ne sont pas séparées, elles vont finir par se recombinaison naturellement en dégageant de l’énergie thermique sans que leur récolte par un circuit extérieur soit possible. C’est pour cela qu’une force électromotrice est nécessaire pour orienter les porteurs de charge par suite de la création d’un effet photoélectrique au voisinage de la surface de contact de deux semi-conducteurs de type p et de type n; un semi-conducteur est soit de type p lorsqu’il possède un excès de charges positives (des trous), soit de type n quand il possède un excès de charges négatives (des électrons).

La jonction entre ces deux types de semi-conducteur donne naissance à une *zone de charge d’espace* (ZCE) appelée également *zone de déplétion*, dont le fonctionnement est illustré sur la figure 1.2. Au niveau de la ZCE, les électrons de la zone n et les trous de la zone p se recombinent par diffusion. En effet, quand ces deux types de semi-conducteurs se rencontrent, les porteurs de charges cherchent naturellement à rétablir l’équilibre au niveau de la surface de contact. Les électrons de la zone n (les trous de la zone p) sont naturellement attirés par les charges positives de la zone p (les charges négatives de la zone n). En conséquence, au niveau de la ZCE, le côté p est chargé négativement en raison de l’excès d’électrons

au détriment du côté n qui, lui, a un déficit d'électrons et est donc chargé positivement. Cette diffusion locale va créer un champ électrique interne unilatéral de n vers p; ce qui va empêcher le passage d'électrons de n vers p. En cas d'absence de ce champ électrique, les paires électron-trou photogénérées vont se recombiner en dégageant de l'énergie thermique. La ZCE va séparer ces paires de telle façon que les électrons soient majoritaires dans la zone n et respectivement les trous dans la zone p; la ZCE agit comme une diode en s'opposant au mouvement des porteurs majoritaires et en accélérant celui des minoritaires. De cette façon, la séparation des charges est maintenue en gardant les trous du côté p et les électrons du côté n.

Quand un électron est libéré, il va migrer de la zone p vers la zone n. Les électrons des atomes voisins vont se déplacer de proche en proche dans la direction de P vers N afin de combler ce manque d'électron. Comme mathématiquement il est plus aisé de suivre le mouvement d'une seule particule que de plusieurs, ce déplacement d'électrons est associé à un trou, une particule fictive qui a les mêmes grandeurs que l'électron mais de charge positive. Donc, le mouvement de ce trou est naturellement dans la direction opposée; c'est-à-dire de n vers p.

1.3 Structure des cellules photovoltaïques en silicium

Plus de 90% des cellules solaires vendues sont à base de silicium [10], ce semi-conducteur présente plusieurs avantages. Hormis son abondance sur la couche terrestre et sa facilité d'extraction, le silicium a été sujet de développement dans le domaine de la microélectronique. Ce qui a permis à l'industrie du photovoltaïque de bénéficier d'un bagage de connaissance physique sur ce matériau et de maîtriser sa technologie. La dominance du marché par la filière du silicium cristallin est également dûe à la parfaite adaptation de son énergie de gap au spectre solaire.

1.3.1 Cellule photovoltaïque standard en silicium

Certes, la jonction pn est au cœur du fonctionnement de la cellule photovoltaïque, elle permet la photogénération et la séparation des paires électron-trou qui seront par la suite collectées grâce aux contacts électriques. Cependant, le rendement de ces cellules reste très faible, il est de l'ordre de 6% [9]. Afin d'augmenter leur efficacité, des technologies ont été développées pour diminuer les recombinaisons et optimiser l'absorption des photons. Ces éléments sont illustrés sur la figure 1.3 qui représente la structure d'une cellule photovol-

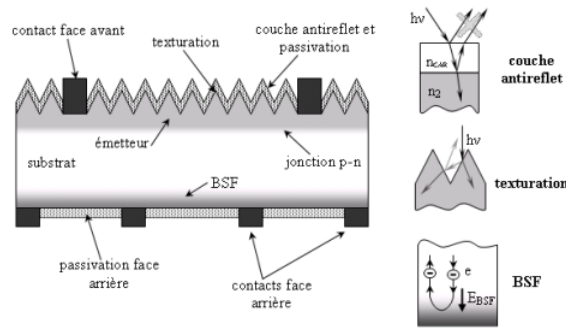


FIGURE 1.3 – Structure d’une cellule photovoltaïque standard avec contacts sur les deux faces.

1.3.1.1 Couche antireflet

En raison de l’indice de réfraction élevé du silicium, plus de 30% des rayons sont réfléchis à la surface de la cellule. Pour augmenter l’absorption des photons, une couche d’un matériau ayant un faible indice de réfraction (n_{CAR}) est déposée sur le substrat en silicium. La couche antireflet (CAR) est comme une couche mince diélectrique qui permet d’avoir une double interface, donc deux ondes réfléchies. L’interférence de ces ondes sera totalement destructive à la longueur d’onde λ_0 si la couche a une épaisseur de $\frac{2 \cdot n + 1}{4 n_{CAR}} \cdot \lambda_0$ (où n est un nombre entier). Les couches antireflets sont conçues pour atteindre une réflexion nulle au voisinage d’une seule longueur d’onde qui est généralement de 600nm, valeur à laquelle le flux des photons est maximal pour le spectre solaire AM 1.5. Quant aux autres longueurs d’ondes, la réflexion n’est pas autant atténuée, elle augmente sans dépasser la valeur initiale du silicium sans couche antireflet [11]. Pour y remédier, certaines cellules photovoltaïques à haut rendement sont munies d’une double CAR avec deux diélectriques différents. Les CAR les plus employées industriellement [11] sont le TiO_x qui est déposé par CVD (Chemical Vapor Deposition) ainsi que le SiN_x qui est déposé par PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition).

1.3.1.2 Texturisation

Pour atténuer davantage les pertes par réflectivité. M.A Green [12] a eu l’idée de réaliser une texturisation en face avant par voie chimique, ce qui a permis d’atteindre un rendement de 17%. Ce procédé consiste à créer un relief micrométrique, en surface, généralement de forme pyramidale, dont les dimensions sont supérieures aux rayons incidents (de l’ordre de quelques micromètres). La texturisation augmente l’absorption des rayons en augmentant

leur probabilité de pénétrer dans le matériau relativement à une surface plane. En effet, les rayons incidents, dont la longueur d'onde est inférieure aux dimensions des structures pyramidales, vont être réfléchis par rapport à la normale de la cellule sur la pyramide adjacente, ce qui signifie que les photons des rayons réfléchis ont plus de chance de rebondir sur la surface du silicium et donc d'être photogénérées. Cet effet équivaut à une augmentation du coefficient d'absorption.

1.3.1.3 Couche de passivation

La surface des substrats en silicium présente une densité de défauts structuraux assez importante, ce qui va introduire des niveaux énergétiques dans le gap du silicium et conduire à la recombinaison des paires électron-trou. Ces défauts électriquement actifs sont souvent sous forme de liaisons pendantes; un atome de silicium auquel il manque une liaison covalente, ce qui va engendrer l'instabilité de la configuration électronique. Ces défauts doivent être saturés en déposant un matériau qui agit comme une couche de passivation, l'oxyde de silicium et le nitrure de silicium sont le plus souvent utilisés dans l'industrie du photovoltaïque.

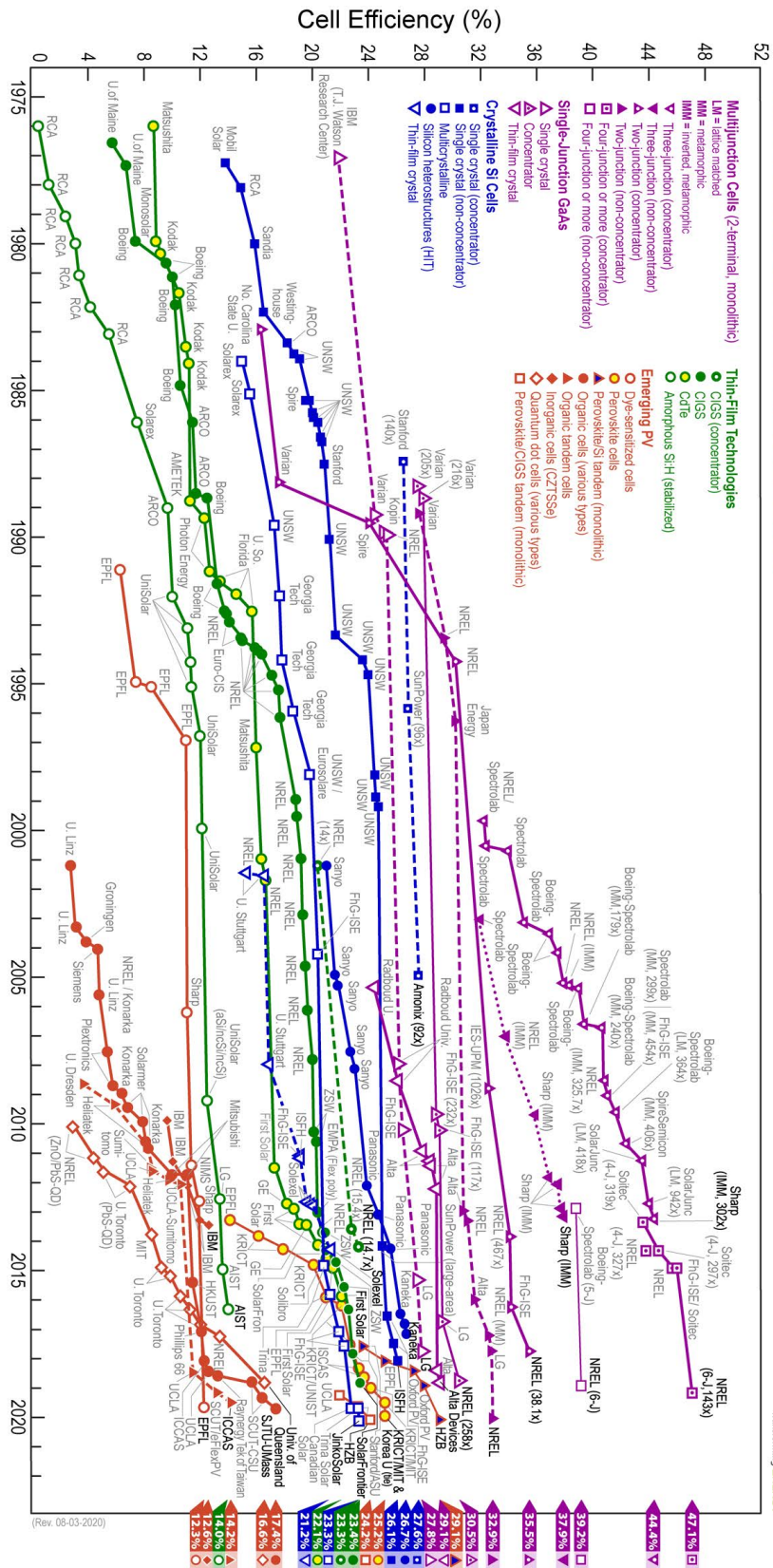
1.3.1.4 Back Surface Field (BSF)

Souvent, les recombinaisons en surface sont atténuées par la passivation des liaisons pendantes en utilisant un matériau isolant. La passivation de la surface arrière par un isolant est impossible à cause du contact ohmique. Ainsi, pour passiver la surface arrière, les cellules photovoltaïques sont généralement dotées d'un champ de surface arrière, une région fortement dopée à l'arrière de la cellule. Cet accroissement de dopage va créer une différence de concentration qui permet de confiner les porteurs de charge minoritaires loin du contact ohmique pour éviter les recombinaisons surfaciques. Cet effet est habituellement obtenu en faisant un recuit à haute température d'une couche d'aluminium déposée à l'arrière de la cellule jusqu'à la formation d'un alliage eutectique Al-Si.

1.3.1.5 Contacts face avant et arrière

Les contacts métalliques, déposés sous forme de grille sur la face avant, et généralement sur la totalité de la face arrière assurent la collecte des porteurs de charge. La taille des contacts avant est choisie de façon à faire un compromis entre l'ombrage de la cellule (nécessité de diminuer la surface métallisée) et les pertes résistives des contacts par effet joule (nécessité d'élargir les contacts pour une meilleure collecte). Ces derniers sont réalisés

de sorte que la partie métallisée n'occulte pas plus de 10% de la surface de la cellule [13]. La grille des contacts avants est réalisée par sérigraphie avec une pâte constituée de 70% d'argent, un liant organique et du verre fritté. Pour la métallisation arrière, la pâte est constituée d'aluminium et recouvre l'intégralité de la surface.



Best Research-Cell Efficiencies



FIGURE 1.4 – Évolution des rendements de conversion les plus élevés pour les cellules photovoltaïques en laboratoire de 1976 jusqu'à 2020 [14]

1.3.2 Structures avancées de cellules photovoltaïques en silicium

1.3.2.1 Cellules PERC et PERL

La cellule PERL (*Passivated Emitter Rear Locally Diffused*) n'est autre que l'amélioration de la cellule PERC (*Passivated Emitter and Rear Cell*). La technologie de ces deux cellules repose sur leur habilité à absorber plus de photons que la cellule standard.

En réalité, les différentes longueurs d'onde du spectre solaire génèrent des électrons à différents niveaux de la cellule, les faibles longueurs d'ondes généreront plus d'électrons à la surface de la cellule. Quant aux longueurs d'onde plus grandes, elles sont plus susceptibles de photogénérer des électrons à la face arrière de la cellule. Une cellule standard a tendance à absorber que les faibles longueurs d'ondes, car les longueurs d'ondes plus fortes vont traverser le substrat jusqu'à leur absorption par la métallisation arrière sans être photogénérées.

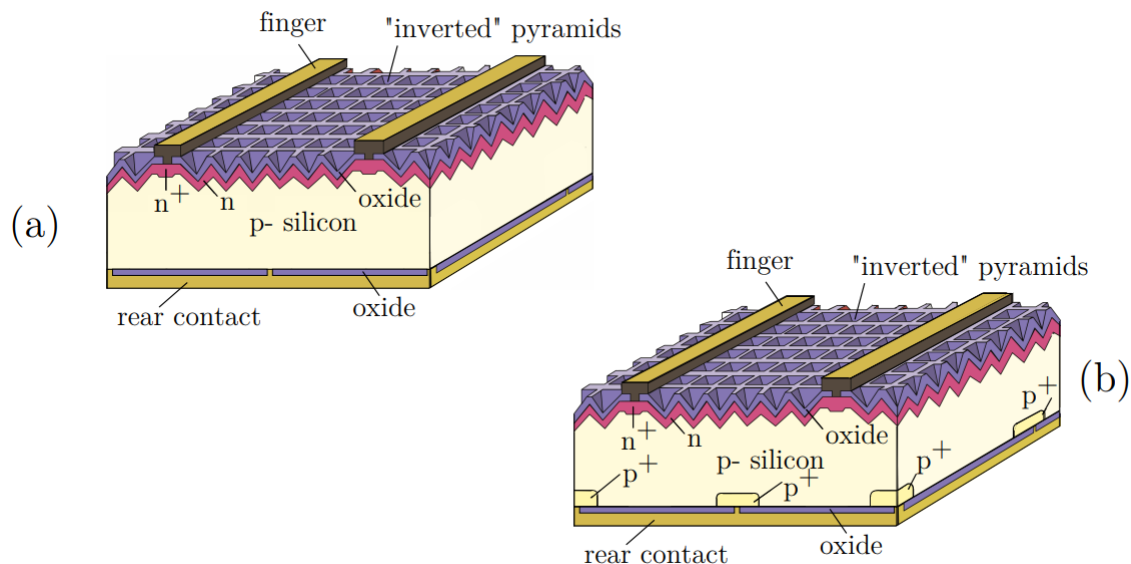


FIGURE 1.5 – Structure des cellules PERC (a) et PERL (b)

L'introduction de la technologie des cellules PERC a permis l'élargissement de la plage des longueurs d'ondes absorbées, en passivant la face arrière par une couche diélectrique qui permet de réfléchir les photons non absorbés et leur donner plus de chance de contribuer à la photogénération. Cette couche agit aussi comme un BSF en limitant l'attraction des électrons vers la métallisation arrière.

En 1989, les cellules PERC ont pu atteindre un rendement de 23.2% sous la radiation du spectre AM 1.5G, une nette amélioration par rapport à la valeur de 17% achevée 7 ans plus tôt. Cette structure, comme son nom l'indique, est constituée d'une jonction pn dont les faces avant et arrière sont passivées par un matériau diélectrique diminuant ainsi le taux de recombinaison. Ce qui a permis d'obtenir une tension de circuit ouvert V_{co} élevée de 700

mV et une densité courant de court-circuit J_{cc} qui atteint une valeur de $41\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$ [15]. En effet, la face arrière n'est que partiellement passivée afin d'assurer le contact ohmique par un alliage d'Al-Si. Le taux de recombinaisons est réduit en séparant les contacts électriques par une distance qui est supérieure à l'épaisseur du substrat en silicium. Cette séparation conduit à des facteurs de forme relativement faibles, à cause d'une forte résistance latérale.

Les cellules PERL, dont le schéma est donné sur la figure 1.5, ont été développées pour remédier à cet inconvénient. Le concept consiste à diffuser du bore uniquement dans les zones de contacts arrière, créant ainsi une couche BSF localisée qui assure non seulement la réduction des recombinaisons mais aussi un bon contact électrique. La réduction des porteurs minoritaires permet de réduire la distance qui sépare les contacts électriques arrières ce qui conduit à une augmentation considérable du facteur de forme.

En plus de la localisation du BSF, les cellules PERL bénéficient d'autres éléments qui ont contribué à l'augmentation de son rendement jusqu'à atteindre une valeur de 25% [16]. Par exemple, la réduction des pertes optiques grâce à une texturisation de la face avant en pyramides inversées recouvertes par une couche mince de passivation d'oxyde thermique. En plus de diminuer les recombinaisons, cette fine couche permet le dépôt d'une double couche antireflet. La combinaison de la texturisation en face avant avec le diélectrique en face arrière permet de créer un piège à photons permettant ainsi un plus grand nombre de photogénération. L'ombrage est également diminué par la réduction de la surface des contacts avant.

1.3.2.2 Cellule IBC

La cellule IBC (*Interdigitated Back Contact*), présentée par Schwartz en 1975 [17], a un potentiel évident pour atteindre un rendement élevé. Sa particularité est due au fait que ses deux contacts métalliques, la jonction et le BSF sont établis sur la face arrière du substrat de façon alternée (voir figure 1.6, éliminant ainsi l'effet d'ombrage sur la face avant. De plus, cette conception peut facilement être optimisée séparément ; le côté optique sur la face avant et le côté électrique sur la face arrière.

Dans les cellules IBC, la photogénération a lieu principalement sur la face avant de la cellule. Par conséquent, il est important que le substrat utilisé aie une bonne passivation pour minimiser les recombinaisons ainsi qu'une longueur de diffusion des porteurs de charge assez élevée pour atteindre la jonction pn avec de se recombiner. Ce modèle de cellule est plus adapté pour une utilisation sous concentration solaire élevée.

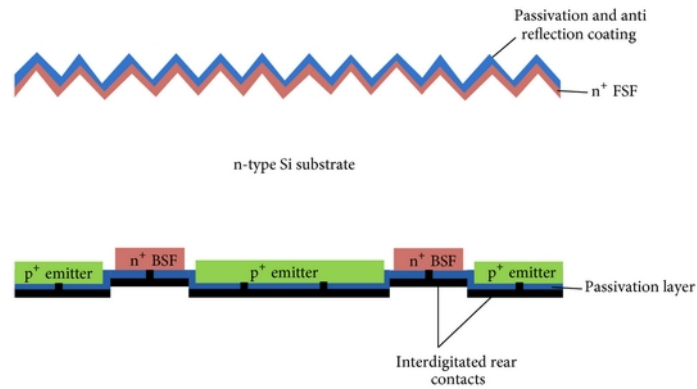


FIGURE 1.6 – Schéma d'une cellule à contacts interdigités en face arrière (IBC)

D'un point de vue industriel, ce type de structure (i.e : PERC, PERL et IBC) impose une fabrication plus complexe que dans le cas d'une cellule standard. Ces étapes supplémentaires consistant en la localisation du BSF et la couche de passivation, ce qui engendre des coûts supérieurs. De plus, pour toutes ces structures, les zones dopées sont obtenues avec des procédés exigeants des températures souvent supérieures à 800°C, ce qui peut endommager le substrat en silicium cristallin et avoir des conséquences sur sa durée de vie.

1.3.2.3 Cellules photovoltaïques à hétérojonction de silicium (HET)

La particularité des cellules à hétérojonction (HET) repose sur l'exploitation d'un matériau ayant un coefficient d'absorption élevé en tant que couche mince sur la surface avant afin de diminuer le taux de recombinaison. Cette structure est accomplie en mettant en contact deux matériaux d'énergie de gap E_g différentes. Dans le cas des hétérojonctions de silicium, les cellules sont composées d'un substrat en silicium cristallin c-Si et d'une couche mince de silicium amorphe hydrogéné a-Si :H dopé. Cette couche mince permet de créer une jonction pn, conventionnellement obtenue par diffusion d'un dopant sur un substrat de silicium à haute température.

Les hétérojonctions de silicium furent initialement créées à des fins électroniques par Fuhs et al. [18] en 1974. Avec l'intérêt grandissant pour le silicium amorphe quant à sa préparation et sa reproductibilité, ce groupe de chercheurs a voulu étudier les propriétés photoélectriques des jonctions entre le a-Si et le c-Si de type p. L'idée d'exploiter leur potentiel pour des applications photovoltaïques n'a été présentée qu'en 1983 [19] en passivant le silicium amorphe avec de l'hydrogène. Ces premières cellules à hétérojonction étaient dotées d'un substrat en c-Si dopé n et d'une fine couche en a-Si :H dopé p et ont abouti à un rendement de 12,4%.

1.4 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

Pour mieux comprendre les caractéristiques électriques d'une cellule solaire, cette dernière est souvent représentée par un circuit électrique équivalent.

Sans éclairage, la cellule solaire suit le comportement d'une diode classique ; lorsque la tension appliquée est inférieure à la barrière de potentiel V_{seuil} le courant est proche de zéro et lorsqu'elle est supérieure, le courant peut traverser la jonction pn. Donc, dans l'obscurité, on peut associer le courant de la cellule à celui d'une diode qui est elle-même caractérisée par une équation de type Shockley [20] :

$$I_d = I_0 \left[\exp\left(\frac{qV_d}{nkT}\right) - 1 \right] = I_0 \left[\exp\left(\frac{V_d}{V_{th}}\right) - 1 \right] \quad (1.1)$$

Où I est le courant qui passe par la diode quand une tension V_d est appliquée. I_0 est le courant de saturation de la diode, qui dépend du type, du dopage et de la qualité du semi-conducteur. $V_{th} = \frac{kT}{q}$ (où q est la charge élémentaire, k la constante de Boltzmann et T la température) est la tension thermique, elle vaut 0,02569 V à 25°C [20].

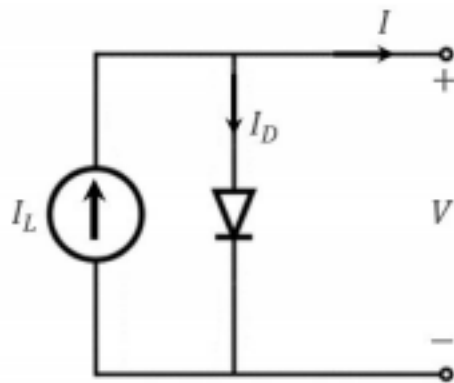


FIGURE 1.7 – Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire idéale

Lorsque la cellule solaire est éclairée, un courant supplémentaire est ajouté. En effet, quand l'énergie du photon est assez élevée, elle est absorbée par l'atome pour générer une paire électron-trou dont le comportement varie suivant la région où ils ont été photogénérés ;

- Dans la ZCE, les paires électron-trou sont séparées par le champ électrique qui les propulse vers la zone n (pour les électrons) ou vers la zone p (pour les trous). Il y aura un *photo-courant de génération*.

— Par contre, si les porteurs de charge minoritaires sont photogénérés dans les zones n ou p, elles doivent diffuser pour atteindre la ZCE sans se recombiner, pour ensuite être accélérée vers la zone p (pour les trous) et la zone n (pour les électrons). Dans ce cas on parle de *photo-courant de diffusion*.

Ces deux contributions sont associées pour former un photo-courant I_{ph} également appelé courant d'éclairement en court-circuit proportionnel à l'intensité lumineuse.

À partir du photo-courant I_{ph} et du courant de la polarisation de la jonction pn I_d (1.2), on peut caractériser la cellule par sa courbe $I(V)$ idéale qui est la somme de ces deux derniers.

$$I(V) = I_0 \left[\exp\left(\frac{qV_d}{nkT}\right) - 1 \right] - I_{ph} \quad (1.2)$$

Le signe négative dans l'équation 1.2 a été attribué par convention. Maintenant, le courant I n'est plus nul quand la tension est nulle, il est plutôt décalé de $-I_{ph}$. Afin de tenir compte des limitations de la cellule, on doit prendre en considération d'autres paramètres qui influencent ses propriétés électriques. La figure 1.8 représente le circuit électrique équivalent d'une cellule solaire réelle.

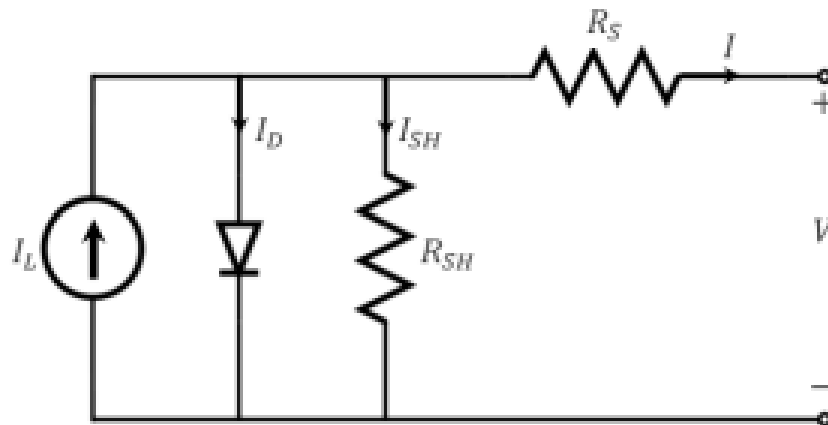


FIGURE 1.8 – Circuit électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle

Pour prendre en considération ces pertes électriques, deux résistances ont été ajoutées : la résistance Schunt R_{sh} qui correspond aux pertes dues aux défauts dans le matériau, et la résistance série R_s qui est liée à l'impédance des électrodes. Il en résulte naturellement que la tension aux bornes de la cellule est différente de celle aux bornes de la jonction. Sur la figure 1.8, il est illustré que le courant résultant est la différence entre le photo-courant I_{ph} , le courant de la diode I_d qui modélise la jonction pn et le courant de résistance de shunt I_{sh} , l'expression est donné dans l'équation 1.3 :

$$I(V) = I_d - I_{ph} - I_{sh} \quad (1.3)$$

Sachant que la tension aux bornes de la diode vaut $V_d = V + IR_s$ avec V la tension de sortie et IR_s la tension de la résistance en série.

L'équation caractéristique $I(V)$ de la cellule réelle s'écrit donc :

$$I(V) = I_0 \left[\exp\left(\frac{q(V + IR_s)}{nkT}\right) - 1 \right] - I_{ph} - \frac{V + IR_s}{R_{sh}} \quad (1.4)$$

Un exemple d'une caractéristique $I(V)$ en obscurité et sous éclairage AM 1.5 G est représenté sur la figure 1.9.

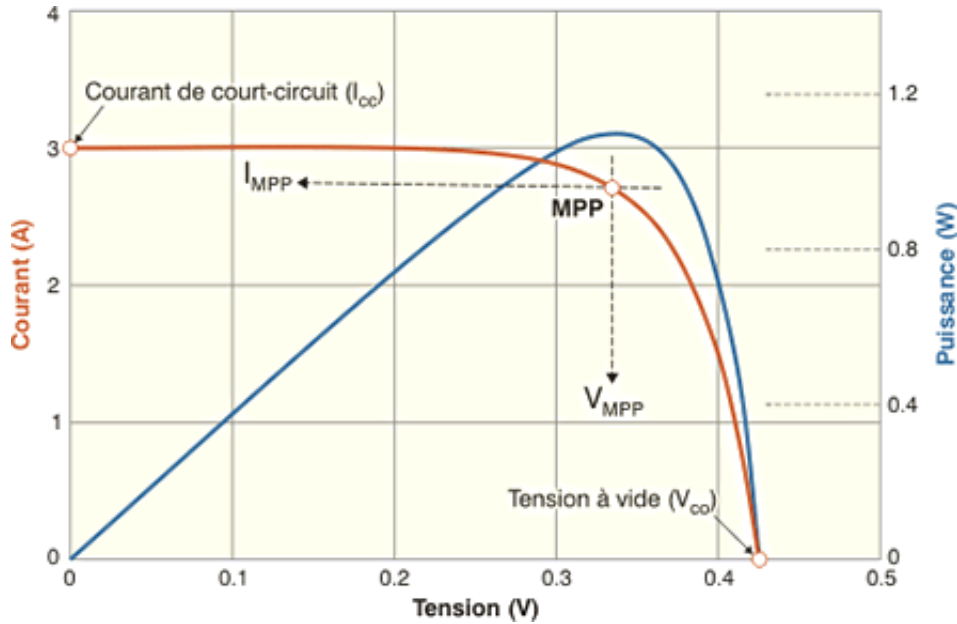


FIGURE 1.9 – Caractéristique courant-tension $I(V)$ d'une cellule solaire avec et sans éclairage

1.4.1 Tension de circuit ouvert (V_{co})

C'est la tension maximale d'une cellule sous éclairage, et cela se produit quand le courant est nul. En effet, quand la cellule est en circuit-ouvert, les paires électron-trou photogénérées vont être séparées par le champ interne de la ZCE (les électrons dans le côté n et les trous dans le côté p). Cette auto-polarisation de la jonction pn va induire un courant de diode dans le sens direct égal et opposé au photo-courant I_{ph} .

À partir de l'équation 1.4 de la cellule, V_{co} peut être déduit en définissant un courant nul :

$$V_{co} = \frac{nkT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_0} + 1\right) \quad (1.5)$$

À priori, d'après l'équation ci-dessus, il paraît évident que la tension V_{co} croîtrait linéairement avec la température. Cependant, le courant de saturation I_0 augmente rapidement

avec la température principalement en raison du changement de la concentration des porteurs de charges et donc du taux de recombinaison. V_{co} est une mesure de la quantité de recombinaison dans la cellule. Les cellules en silicium cristallin de haute qualité ont une tension en circuit ouvert qui va jusqu'à 764 mV [21] sous un éclairage AM 1.5G.

1.4.2 Courant de court-circuit (I_{cc})

C'est le courant qui traverse la cellule lorsque la tension à ses bornes est nulle. Pour une cellule idéale avec des mécanismes de perte résistives les plus modérées, le courant de court-circuit est identique au photo-courant I_{ph} [22]. Ce courant est intimement lié à la photogénération et à la collecte des porteurs de charge; I_{cc} dépend donc de plusieurs facteurs comme l'irradiance du spectre solaire, la passivation de la surface et les propriétés du semi-conducteur telles que la durée de vie des porteurs minoritaires et le coefficient d'absorption.

1.4.3 Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme ou facteur de remplissage est un indice sur la qualité de la cellule. Bien que le courant I_{cc} et la tension V_{co} sont les valeurs maximales de la cellule, à ces deux points de fonctionnement, la puissance est nulle. Le facteur de forme est le paramètre qui, conjointement avec V_{co} et I_{cc} , va déterminer la puissance maximale d'une cellule photovoltaïque. C'est le rapport entre la puissance maximale et la puissance idéale.

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{cc} \cdot V_{co}} = \frac{I_{max} \cdot V_{max}}{I_{cc} \cdot V_{co}} \quad (1.6)$$

Pour des cellules de qualité supérieure, le facteur de forme est au-dessus de 80%.

À partir de ces trois facteurs, on peut calculer le rendement η de la cellule solaire. Ce paramètre est le plus couramment utilisé pour comparer les performances des cellules solaires quand elles sont soumises aux mêmes conditions, il est défini comme le rapport entre la puissance photogénérée et la puissance lumineuse du rayon solaire :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{incidente}} = \frac{FF \cdot V_{co} I_{cc}}{P_{incidente}} \quad (1.7)$$

Chapitre 2

Silicium et hétérojonction

2.1 Technologie du silicium

2.1.1 Silicium cristallin

2.1.1.1 Description du matériau

Le silicium n'est jamais à son état pur dans la nature à cause de son affinité avec l'oxygène, avec qui il est combiné pour former des oxydes et des silicates. C'est le deuxième élément le plus abondant sur terre; 26% de la croûte terrestre y est constituée sous forme de silice (SiO_2) et de silicates associés à d'autres éléments tels que l'aluminium et le magnésium.

Comme tous les membres du groupe IVA dans le tableau de Mendeleïev, le silicium a quatre électrons de valence. À pression atmosphérique, le silicium cristallise en une structure cristallographique cubique de type diamant; chaque atome est à égale distance de quatre autres atomes. En conséquence, chaque atome est entouré de huit électrons; ses quatre électrons de valences et un de chacun de ses voisins. Une telle configuration, qui est similaire à celle des gaz nobles, est chimiquement très stable. Étant donné que la conductivité des matériaux dépend entièrement des électrons libres et que les électrons du silicium participent aux liaisons inter-atomique pour maintenir la structure diamant, il est alors nécessaire de briser quelques liaisons pour qu'une conduction électrique ait lieu. Cela peut se faire sous condition de fournir une énergie suffisante.

D'après Niels Bohr, les électrons d'un atome isolé ne peuvent occuper que certains niveaux d'énergie définis. Le rapprochement entre les atomes va induire une hybridation des niveaux d'énergie qui est autant plus importante que la distance interatomique est petite. Dans le cas du silicium cristallin, dont la distance interatomique vaut 2.37 \AA , il existe deux

bandes d'énergies continues permises (bande de conduction et bande de valence) séparée par une bande interdite. Cette bande interdite est appelée le gap, E_g , et est une caractéristique du matériau. Le niveau d'énergie le plus bas de la bande de conduction est noté E_c et le niveau d'énergie le plus élevé de la bande de valence est appelé E_v de sorte à avoir la relation $E_g = E_c - E_v$.

Au voisinage du zéro absolu, le silicium possède une conductivité nulle, parce qu'aucune de ses liaisons n'est rompue. Donc, sa bande de valence est saturée par des électrons et sa bande de conduction est vide. Contrairement aux isolants, les semi-conducteurs possèdent un gap relativement étroit. Cette spécificité permet l'augmentation de leur conductivité, par excitation d'électrons de la bande de valence à la bande de conduction sous certaines conditions; notamment par excitation optique, ce qui les rend particulièrement propices aux applications photovoltaïques.

L'absorption d'un photon par l'atome de silicium permet d'exciter l'électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Ce processus est régi par les principes de conservation de l'énergie et de la quantité de mouvement p , ces derniers sont reliés par la loi suivante :

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (2.1)$$

Où m est la masse de l'électron.

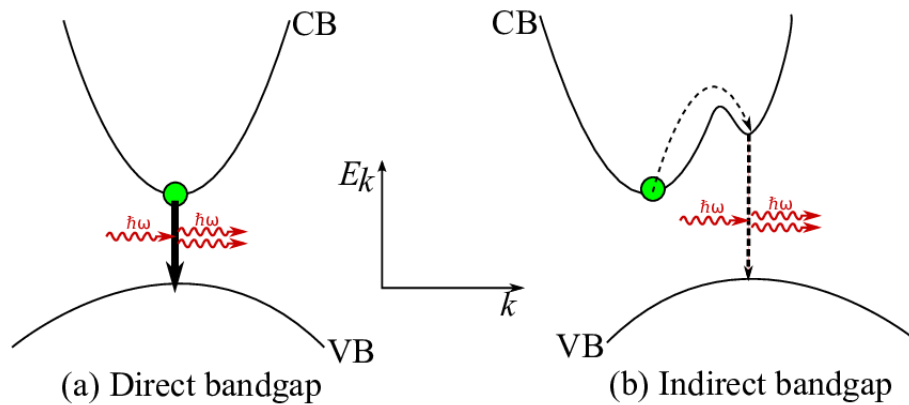


FIGURE 2.1 – Gap direct (a) et indirect (b) du silicium cristallin

Dans le cas d'une absorption à gap direct, le minimum de la bande de conduction par rapport à la quantité de mouvement du cristal est situé directement au-dessus du maximum de la bande de valence; ils coïncident dans l'espace des k . L'absorption d'un photon est dite radiative. Le silicium possède un gap indirect, comme il est illustré sur la figure 2.2, le minimum de la bande de conduction est décalé par rapport au maximum de la bande de valence.

Il est cependant possible d'exciter un électron vers le minimum de la bande de conduction grâce à la variation de la quantité de mouvement qui peut être induite par les vibrations thermiques dans le cristal, et donc grâce à un phonon. Par conséquent, pour satisfaire la conservation de la quantité de mouvement, l'absorption ou l'émission d'un phonon par l'électron est nécessaire pour que les vecteurs d'onde correspondent. L'énergie du gap direct vaut 3.4 eV qui est beaucoup plus grande que celle du gap indirect qui a une largeur de 1.12 eV.

2.1.1.2 Dopage du silicium cristallin

À température ambiante, la résistivité du silicium pur vaut approximativement $3.10^6 \Omega \cdot \text{cm}$. Cette valeur varie significativement avec la température. Il existe cependant, en plus de l'augmentation de la température, une méthode très efficace pour modifier la concentration des porteurs de charge et donc la conductivité du matériau. Cela se fait par l'introduction d'impuretés dans la structure cristalline du semi-conducteur. Si on substitue un atome de silicium de la structure par un élément du cinquième groupe du tableau périodique, par exemple un atome de phosphore, ce dernier va occuper un site tétraédrique local et sera donc contraint à se lier aux quatre atomes de silicium les plus proches voisins et à céder le cinquième électron de valence à la bande de conduction, laissant derrière lui un site donneur ionisé ou chargé positivement; les éléments du cinquième groupe sont qualifiés de donneurs. Ce dopage est de type n, les électrons sont majoritaires tandis que les trous sont minoritaires.

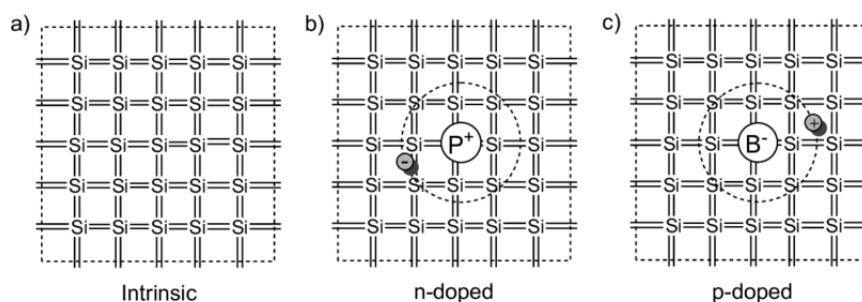


FIGURE 2.2 – Silicium cristallin intrinsèque (a) silicium cristallin dopé au phosphore (type n) (b) silicium cristallin dopé au bore (type p)

Le dopage peut également se faire avec des éléments du troisième groupe comme le bore. Ces éléments sont appelés accepteurs d'électrons. Ces atomes, possédant trois électrons de valence, vont se lier à quatre atomes de silicium et donc huit électrons seront nécessaires. L'électron manquant à ce dopant trivalent conduit ainsi à la création d'un trou et à l'augmentation de la conductivité du matériau. Le semi-conducteur est dit de type p; les porteurs majoritaires dans ce cas sont les trous et les électrons sont porteurs minoritaires. Le dopage

du silicium permet donc d'augmenter la conductivité σ du matériau et de diminuer sa résistivité ρ . La résistivité est inversement proportionnelle au nombre de porteurs de charge et leur mobilité selon l'équation 2.2 :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{e(\mu_n n + \mu_p p)} \quad (2.2)$$

2.1.1.3 Propriétés électroniques

Étant donné que le silicium est la base de notre cellule photovoltaïque, il est important d'introduire certaines quantités afin de comprendre les paramètres qui régissent ses propriétés. À l'équilibre thermique, la température et le niveau de Fermi sont constant à travers tout le dispositif photovoltaïque. Les densités de porteurs de charges libres des électrons et des trous, notées respectivement n_0 et p_0 sont données par les expressions :

$$n_0 = N_c \exp\left(\frac{E_c - E_f}{kT}\right) \quad (2.3)$$

$$p_0 = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{kT}\right) \quad (2.4)$$

avec :

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_c kT}{h^2}\right)^{3/2} \quad (2.5)$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_v kT}{h^2}\right)^{3/2} \quad (2.6)$$

Où N_c et N_v sont les densités d'états au bords des bandes de conduction et de valence respectivement, k la constante de Boltzmann, T la température, m_c la masse effective des électrons dans la bande de conduction et m_v la masse effective des trous dans la bande de valence. A partir du produit de ces deux expressions, on déduit la densité de porteurs intrinsèques n_i qui est donnée dans l'équation :

$$n_i = \sqrt{n_0 p_0} = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (2.7)$$

Où E_g est l'énergie de gap, elle est reliée à la température par la relation empirique donnée par Varshni pour des températures allant jusqu'à 750°K [23] :

$$E_g(T) = E_g(0) + \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (2.8)$$

Avec $E_g(0) = 1,17\text{eV}$ l'énergie de gap à température nulle, et les coefficients $\alpha = 4,73 \cdot 10^{-4}\text{eV.K}^1$ et $\beta = 636\text{K}$ [24].

Les équations précédentes s'appliquent uniquement dans le cas où le silicium est dans l'obscurité. Cependant, les cellules photovoltaïques visent à convertir l'énergie des photons en énergie électrique et doivent donc être éclairées. Suite à quoi, les concentrations des électrons et des trous vont significativement varier, elles sont beaucoup plus élevées que leur valeur à l'équilibre. Les nouvelles expressions des concentrations sont :

$$n = n_0 + \Delta n \quad (2.9)$$

$$p = p_0 + \Delta p \quad (2.10)$$

Où Δn et Δp sont les concentrations des porteurs de charges photogénérées.

Dans ce cas, il est nécessaire d'introduire les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous, respectivement E_{F_n} et E_{F_p} . Chacun de ces deux derniers est plus proche de la bande de conduction ou de valence pour décrire respectivement les densités d'électrons et de trous en tenant compte du fait que leur densité ait augmenté. Par conséquent, en prenant en considération ces changements de densités, on peut écrire les nouvelles densités d'électrons dans la bande de conduction et des trous dans la bande de valence par les expressions suivantes :

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_C - E_{F_n}}{k_B T}\right) \quad (2.11)$$

$$p = N_v \exp\left(-\frac{E_V - E_{F_p}}{k_B T}\right) \quad (2.12)$$

La mobilité μ des porteurs de charges caractérise la facilité de ces derniers à se déplacer en présence de champ électrique. Masetti et al. [25] ont proposé une formule analytique pour décrire la mobilité des porteurs majoritaires dans du silicium dopé au bore et au phosphore en fonction de la concentration de dopage. Suite à plusieurs données expérimentales, elle a été validée dans un intervalle de dopage allant de 10^{13} à $5 \cdot 10^{21}\text{cm}^{-3}$ pour le phosphore et de 10^{14} à $1,2 \cdot 10^{21}\text{cm}^{-3}$ pour le bore.

La mobilité des porteurs à 300K s'écrit comme suit :

$$\mu = \mu_{i,\min_1} \exp\left(-\frac{P_{c,i}}{N_{\text{dop}}}\right) + \frac{\mu_{i,\max} - \mu_{i,\min_2}}{1 + \frac{N_{\text{dop}}}{N_{i,\text{ref}_1}} x_{i,1}} - \frac{\mu_{i,1}}{1 + \frac{N_{i,\text{ref}_2}}{N_{\text{dop}}} x_{i,2}} \quad (2.13)$$

paramètre	unité	électrons $i = n$	trous $i = p$
μ_{\min_1}	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$	68.5	44.9
μ_{\min_2}	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$		0
μ_{\max}	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$	1414	470.5
μ_1	$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$	56.1	29.0
P_C	cm^{-3}	0	$9,23 \times 10^{16}$
N_{ref_1}	cm^{-3}	$9,20 \times 10^{16}$	$2,23 \times 10^{17}$
N_{ref_2}	cm^{-3}	$3,41 \times 10^{20}$	$6,10 \times 10^{20}$
x_1	–	0.711	0.719
x_2	–	1.98	2.00

TABLE 2.1 – Paramètres utilisés pour le calcul de la mobilité des porteurs majoritaires dans le silicium cristallin [25]

2.1.2 Silicium amorphe hydrogéné

2.1.2.1 Description du matériau

Le silicium peut également exister sous forme non cristalline; silicium amorphe (a-Si). La structure amorphe diffère considérablement des structures cristallines principalement à cause de l'absence de périodicité. En effet, le a-Si possède une structure cristalline mais à courte portée, c'est-à-dire qu'un atome de silicium partage des liaisons covalentes avec ses quatre atomes voisins, cependant, au-delà de quelques distances interatomiques, l'ordre structural est perdu. Cette structure est due à la présence de faibles variations de longueur et d'angle de liaison, qui a pour conséquence d'éliminer l'ordre à longue distance. En conséquence, les lois employées pour les cristaux de silicium ne sont plus valides dans ce cas. En particulier, l'absorption de la lumière qui se fait de façon direct, c'est pour cela que le a-Si possède un coefficient d'absorption beaucoup plus élevé dans le visible.

Le silicium amorphe a été découvert vers le début des années soixante, à cette époque il était très peu utilisé à cause du nombre conséquent de ses défauts structuraux. En effet, les premières couches étaient déposées par évaporation ou pulvérisation sans introduction d'hydrogène [26]. Quelques années après, Chittick [27] observa qu'en déposant ce matériau par dissociation du silane (SiH_4) dans un plasma, les atomes d'hydrogènes s'introduisent dans la structure du a-Si et rendent le matériau exploitable en saturant ses défauts. La concentration de l'hydrogène est comprise entre quelques pourcents à plus de 40% [28],

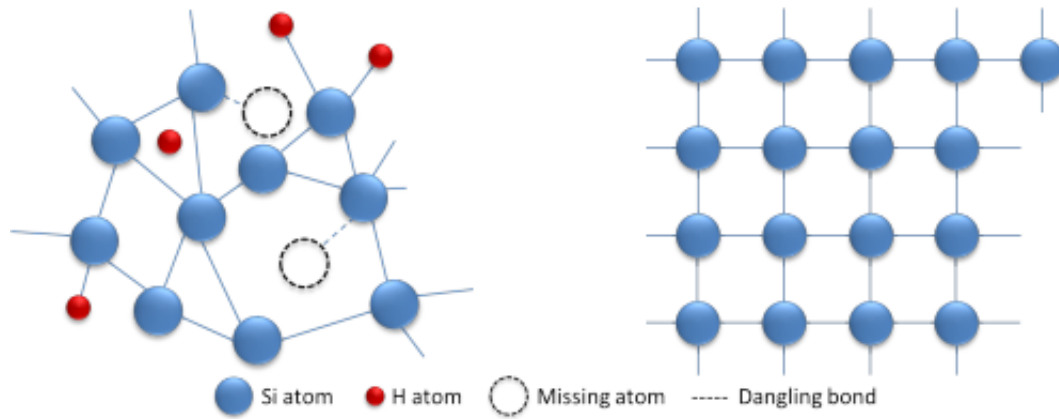


FIGURE 2.3 – Comparaison entre le silicium amorphe hydrogéné et le silicium cristallin

sa valeur est choisie de façon à obtenir des propriétés de photoconduction. De plus, l'introduction de l'hydrogène permet un dopage plus efficace du matériau au détriment de la mobilité des porteurs de charges qui se voit réduite [29]. De ce fait, l'augmentation du nombre d'atomes dopants dans le silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) n'est pas forcément corrélée à l'augmentation de sa conductivité. Néanmoins, l'ordre cristallin présent sur quelques distances interatomiques permet d'atteindre des valeurs de conductivité plus élevées que celle d'un silicium complètement amorphe [30]. L'énergie de gap du a-Si :H dépend de la composition atomique et structurale du matériau, elle peut varier de 1.55 à 2.10 eV [31], la valeur standard étant proche de 1.72 eV à 300°K.

La configuration désordonnée du a-Si :H est représentée sur la figure 2.3. Dans cette structure l'atome de silicium peut se lier à d'autres atomes de silicium et/ou d'hydrogène (de 1 à 4 atomes). Il s'ensuit que certaines orbitales du silicium restent non appariées, il y a donc des liaisons pendantes dites «*dangling bonds*». Une telle structure est obtenue quand le silicium est solidifié rapidement de sorte que les atomes n'aient pas le temps de s'organiser sous forme cristalline.

La figure 2.4 représente la réponse spectrale du silicium cristallin et du silicium amorphe. On peut voir que le a-Si est plus absorbant quand il s'agit de photons à faibles longueurs d'onde (domaine UV), d'où son utilisation en surface de la cellule en tant qu'émetteur.

2.1.2.2 Dopage du silicium amorphe

Comme pour le silicium cristallin, le but principal du dopage est le déplacement du niveau de Fermi dans le gap. Cependant, il fonctionne très différemment. Au début, le dopage par substitution du silicium amorphe n'était pas du tout évident. Mais en 1975, Spear et Le Comber [32] ont rapporté que le a-Si :H pouvait être dopé par l'ajout de bore et de phos-

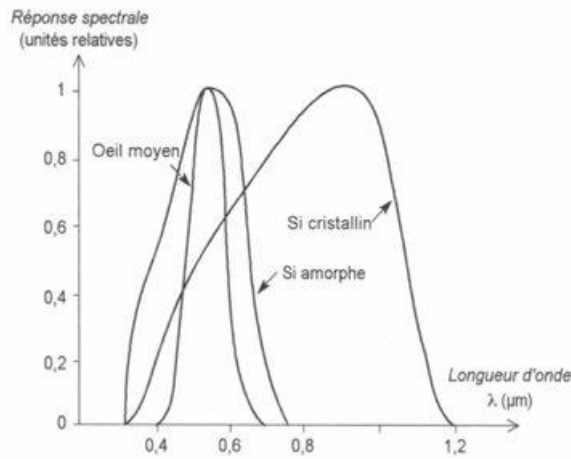


FIGURE 2.4 – Réponse spectrale de deux cellules en silicium cristallin et amorphe

phore. Cela représentait un tournant majeur pour ce matériau et dans le développement des semi-conducteurs amorphes.

En effet, la théorie a prédit que le dopage par substitution de ce matériau était impossible à cause de la règle de l'octet qui ne pouvait être respectée. Cette dernière stipule que tous les atomes d'un réseau amorphe doivent se lier en respectant leur valence optimale, et cela quels que soient les atomes voisins. Dans le cas d'un cristal, la périodicité de son réseau force l'impureté à avoir la même coordination que le silicium. En l'absence d'une matrice cristalline, comme c'est le cas pour le a-Si :H, la configuration tétraédrique n'est plus privilégiée. Or, pour que les impuretés jouent le rôle de dopant, ils doivent être coordonnés quatre fois avec l'atome de silicium. Par conséquent, l'efficacité du dopage reste très faible; elle est d'un ordre allant de 10^{-3} à 10^{-1} [33]. Par exemple, dans le cas d'un dopage au phosphore, seulement 20% des atomes jouent le rôle de dopants [34].

L'introduction d'une grande concentration de dopants provoque l'augmentation de la densité des défauts profonds et entraîne la diminution de la photoluminescence [28].

2.1.2.3 Rôle de l'hydrogène

La présence des liaisons pendantes dans le a-Si pur est une dérogation de la règle de l'octet, l'atome de silicium, pour combler ces liaisons, aura tendances à capter des électrons issus de la photogénération et les empêcher de participer à la génération du courant. Ces liaisons pendantes représentent donc un défaut qui agit comme un centre de recombinaison. C'est pour cela que, dans un cadre d'application photovoltaïque, le dépôt de silicium amorphe se fait en présence d'hydrogène qui va passiver chimiquement les liaisons pendantes. La concentration de défauts est diminuée, elle passe de 10^{19}cm^{-3} à 10^{14}cm^{-3} . L'hydrogène contribue également à réduire le désordre et à diminuer la largeur des queues de

bandes.

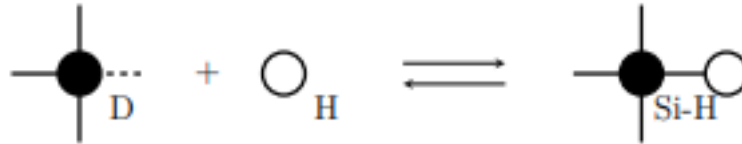


FIGURE 2.5 – Équilibre de passivation des liaisons pendantes des atomes de silicium par l'hydrogène

2.1.2.4 Propriétés électroniques

Dans la structure amorphe du silicium, l'ordre cristallin est préservé à courte distance, ce qui suggère que la structure de bande du a-Si :H est similaire à celle du c-Si; comme le c-Si, le a-Si :H possède une bande de conduction et de valence séparées par un gap. Cependant, la présence de défauts contrôle certaines propriétés électroniques importantes en modifiant la densité d'états énergétiques. La longueur des liaisons et la distorsion de leur angle pour les voisins d'ordre supérieur à quelques distances interatomiques sont aléatoires; l'ordre n'est pas respecté.

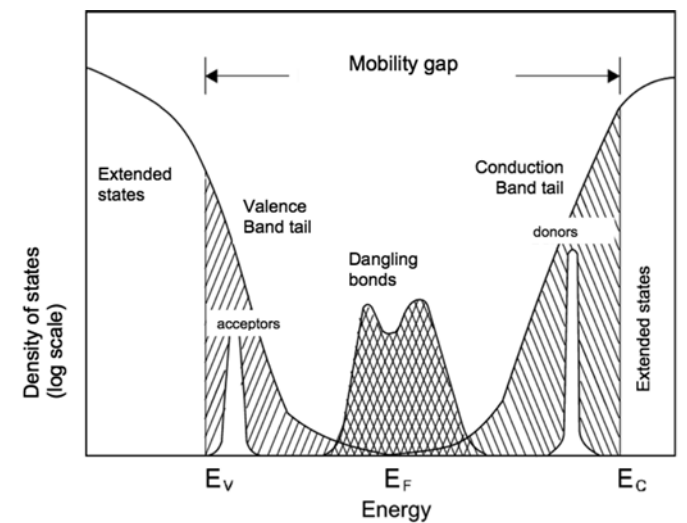


FIGURE 2.6 – Modèle de Mott et Davis de la structure de bande d'un semi-conducteur amorphe

En effet, ces différences entraînent une distribution particulière des états électroniques, comme le montre la figure 2.6, la bande interdite du a-Si :H n'est pas si « interdite » que ça. Au lieu d'être dépourvue d'états énergétiques comme c'est le cas du c-Si, le gap du a-Si :H fait apparaître des états électroniques aux alentours du niveau de Fermi, appelés défauts profonds [28]. Ces derniers sont provoqués par des défauts de coordinations présents dans le matériau sous forme de liaisons pendantes insaturées (alors que dans un réseau cristallin les

défauts se présentent sous forme de lacunes, atomes interstitiels ou dislocations). La bande de valence et la bande de conduction sont formées par des états étendus qui proviennent des états liants et anti-liants, respectivement, de l'hybridation sp^3 du silicium comme pour son homologue cristallin. Par conséquent, en l'absence d'atome pour créer une liaison, il n'y a pas de séparation des niveaux en niveau liant et anti-liant. Donc, l'orbitale qui n'a pas d'électron apparié garde la même énergie et génère un niveau non-liant qui se retrouve dans le gap.

Dans la figure 2.6, les bords des bandes de conduction et de valence du a-Si :H ne sont plus abrupts comme c'est généralement le cas pour le c-Si, ils se prolongent dans la bande interdite et créent des queues de bande. Cet élargissement est dû à la présence d'états électroniques localisés dans la bande interdite au niveau des bords des bandes de valence et de conduction, induit par l'élongation des liaisons et la distorsion des angles. À priori, ce détail peut sembler assez négligeable, mais en réalité il est d'une grande importance, puisque le transport des charges se fait au bord des bandes. Les états dans ces queues de bande participent à l'absorption des photons.

Le modèle le plus utilisé pour modéliser la densité d'états (DOS) est celui introduit par Davis et Mott. La DOS est constituée des deux distributions exponentielles pour les queues de bandes de conduction (QBC) et de valence (QBV), et la distribution gaussienne des états profonds dont le nombre varie de 2 à 4, elle est donnée par l'expression suivante :

$$N(E) = N_c e^{-\frac{E_c - E}{kT_c}} + N_{m1} e^{-\frac{(E_{m1} - E)^2}{2\sigma_1^2}} + N_{m2} e^{-\frac{(E_{m2} - E)^2}{2\sigma_2^2}} + N_v e^{-\frac{E - E_v}{kT_v}} \quad (2.14)$$

Où N_c (respectivement N_v) est la densité d'état au bord de la bande de conduction (respectivement de valence), T_c (respectivement T_v) la température caractéristique de la QBC (respectivement QBV), N_{m1} la densité d'état au sommet de la gaussienne, E_{m1} sa position dans le gap par rapport à E_c et σ_1 son écart-type.

Entre la bande de conduction et la bande de valence, la conduction se fait par transition entre les états localisés. Le gap de mobilité E_μ est défini comme l'écart d'énergie entre les bandes de valence et de conduction :

$$E_\mu = E_c - E_v \quad (2.15)$$

Ici, la bande interdite de mobilité se distingue de la bande interdite optique. Les états localisés dans les queues de bande participent au processus d'absorption. Par conséquent, le gap optique sera toujours plus petit que le gap de mobilité avec une différence comprise entre 0.1 et 0.2 eV [35]. Une autre définition utile, le gap E_{04} , qui correspond à l'énergie pho-

tonique pour laquelle le coefficient d'absorption α est de 10^4cm^{-1} . Mais la définition la plus largement utilisée pour le gap optique est celle de Tauc [36] :

$$\alpha(h\nu) = B(E - E_{g,\text{Tauc}})^2 \quad (2.16)$$

Où E est l'énergie des photons, B une constante, h la constante de Planck et ν la fréquence des photons.

2.1.3 Mécanismes de recombinaison, durée de vie des minoritaires et longueur de diffusion

Le silicium cristallin est soumis à des processus de recombinaisons qui affectent défavorablement le rendement final de la cellule. Comprendre ces processus et empêcher leur production est un facteur clé pour minimiser les pertes.

2.1.3.1 Recombinaison radiative

Il s'agit d'un processus inévitable qui existe dans tous les semi-conducteurs. La figure 2.7 représente les voies de recombinaison impliquées. Le premier chemin indique la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence. Au cours de cette recombinaison, une certaine énergie égale à la valeur de l'énergie de gap est perdue et transférée à un photon émis. Quant au deuxième chemin, c'est le processus inverse; un électron de la bande de valence est expulsé vers la bande de conduction. Ce mécanisme requiert une certaine concentration d'électrons et de trous (respectivement dans la bande de conduction et de valence).

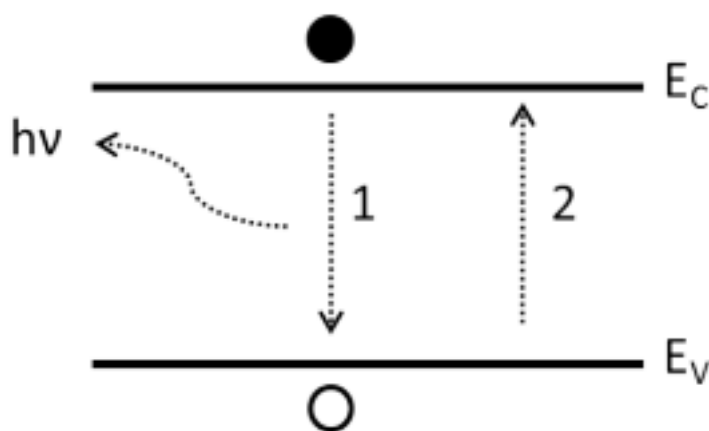


FIGURE 2.7 – Recombinaison radiative dans un semi-conducteur

2.1.3.2 Recombinaison Auger

Semblable à la recombinaison radiative, ce mécanisme est également inévitable et implique la recombinaison bande à bande entre un électron et un trou. Sauf que, dans ce cas, il n'y a pas d'émission de photons puisque l'énergie supplémentaire est soit transférée ou prélevée d'un troisième porteur. La figure 2.8 schématise les deux cas possibles : deux électrons et un trou ou un électron et deux trous. Le troisième porteur va ensuite perdre le supplément d'énergie en passant lentement de son état excité au bord de sa bande.

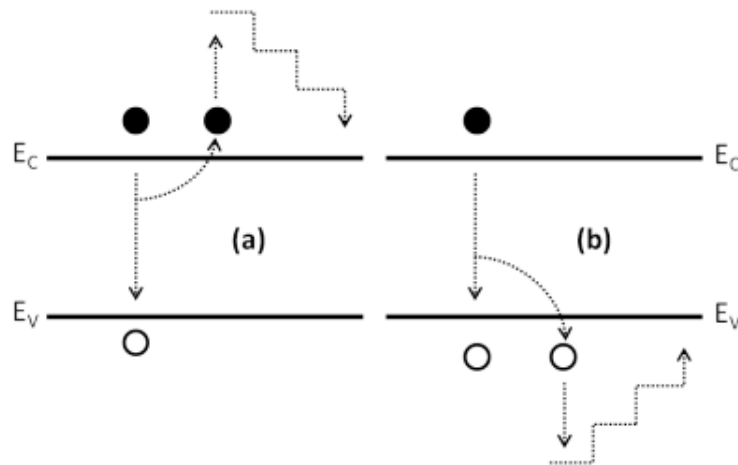


FIGURE 2.8 – Recombinaison Auger dans un semi-conducteur

2.1.3.3 Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)

Cette recombinaison est basée sur le piégeage et la recombinaison consécutive de deux porteurs de charge. En effet, l'électron en transition entre les bandes passe par un nouvel état d'énergie localisé créé dans le gap par un dopant ; ces états énergétiques sont appelés pièges. La figure 2.9 schématise les quatre interactions possibles qu'un dopant ayant une énergie E_t peut avoir avec les porteurs de charges :

1. Un électron de la bande de conduction est piégé.
2. L'électron piégé est libéré dans la bande de conduction.
3. Un trou de la bande de valence est piégé.
4. Le trou piégé est libéré dans la bande de valence.

À partir de ces processus de recombinaisons, on peut déduire la durée de vie effective des porteurs minoritaires dans le volume cristallin. Ce paramètre est un indicateur permettant de quantifier la qualité de la cellule. En effet, il est défini comme le temps moyen entre la photogénération d'un porteur de charge et sa disparition par recombinaison.

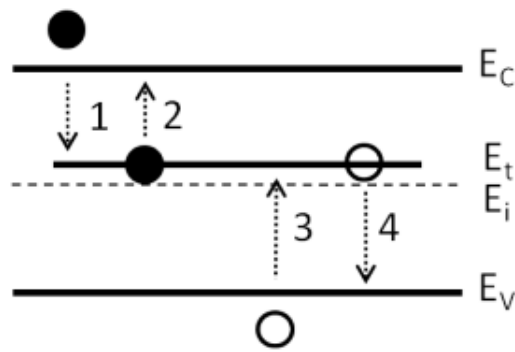


FIGURE 2.9 – Les quatre interactions possibles entre les porteurs de charge et les défauts (Recombinaison SRH)

$$\tau = \frac{\Delta n}{U} \quad (2.17)$$

Où Δn (ou Δn) est la concentration d'électrons (ou de trou) et U le taux de recombinaison totale pour les trois mécanismes cités ci-dessus. Son expression est la suivante :

$$U = U_{\text{Radiative}} + U_{\text{Auger}} + U_{\text{SRH}} \quad (2.18)$$

La longueur de diffusion est la distance moyenne sur laquelle ces porteurs minoritaires peuvent se déplacer avant de se recombiner. Elle est calculée à l'aide de la durée de vie τ et de la constante de diffusion des porteurs minoritaires D .

$$L = \sqrt{D\tau} \quad (2.19)$$

2.2 Cellule à hétérojonction de silicium

Le rendement théorique des cellules en silicium se situe entre 28 et 30% [37]. Le groupe Panasonic a pu atteindre un rendement de 24,7% [37] en laboratoire avec les cellules HET. Ainsi, ils ont pu rattraper le record mondial, qui est de 25% [14], détenu par l'Université de New South Wales en Australie depuis 1999 avec la technologie PERL sur un substrat en silicium monocristallin. Néanmoins, la complexité des étapes de fabrication de ces cellules les rend difficilement réalisables en milieu industriel et donc assez onéreuses. Le potentiel des cellules HET réside dans la possibilité d'obtenir un rendement quasi-égal de celui des cellules PERL à moindre coût.

Les avantages des cellules HIT peuvent être résumés dans les points suivants :

- Haut rendement de conversion photovoltaïque;

- Une faible température de traitement; tous les processus se produisent à une température d'environ 200°C résultant en un budget thermique faible;
- Un coût de matériau réduit, le traitement à basse température permet la réduction de l'épaisseur des substrats en silicium. Les températures élevées utilisées dans les cellules traditionnelles ont tendance à abîmer les substrats, d'où la nécessité que ces derniers soient épais;
- Une excellente stabilité, puisque le matériau de base de la structure continue d'être du c-Si qui est un matériau bandant et dont les paramètres sont vaguement étudiés;
- L'efficacité des cellules HIT ne se détériore pas autant que celle des cellules c-Si à homojonction diffusée à des températures plus élevées [38]. L'efficacité des cellules HIT se dégrade de 0,33% / °C avec l'augmentation de la température alors qu'elle est de 0,45% / °C pour les cellules solaires c-Si classiques. Cela signifie que les cellules HIT généreraient plus de puissance de sortie en été que leur homologue à jonction diffusée.

2.2.1 Structure des cellules HET

Comme toute autre cellule photovoltaïque, les cellules HET sont dotées d'une jonction pn, une structure de diode résultant d'une combinaison de deux zones dopées différemment. Usuellement, ces deux types de dopages sont réalisés sur un seul et même matériau. Or, dans le cas d'une hétérojonction, deux matériaux de dopages différents sont mis en contact pour créer une jonction.

La simplicité de la structure de cette cellule en fait d'elle une rivale remarquable par rapport aux autres, celle-ci se distingue par son aptitude à atteindre de hauts rendements tout en ayant une procédure de fabrication relativement moins coûteuse. Contrairement aux cellules à homojonction, les HET permettent de combiner les deux étapes de dopage et de passivation en un seul et unique dépôt de a-Si :H. Cette couche, de l'ordre de quelques nanomètres, est conventionnellement déposée par PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) sur un substrat en silicium cristallin. Ce processus requiert une température de dépôt assez basse (inférieure à 200°C) permettant ainsi d'empêcher la dégradation du substrat tout en assurant une excellente passivation [39]. L'absorbeur, qui est un substrat en c-Si d'une centaine de microns, est souvent de type n que ce soit dans la recherche ou l'industrie dans le cas des hétérojonctions. Il a été théoriquement démontré qu'un tel agencement permettrait d'avoir une tension de diffusion plus importante que dans le cas contraire (c'est-à-dire avec un substrat c-Si dopé p) [40].

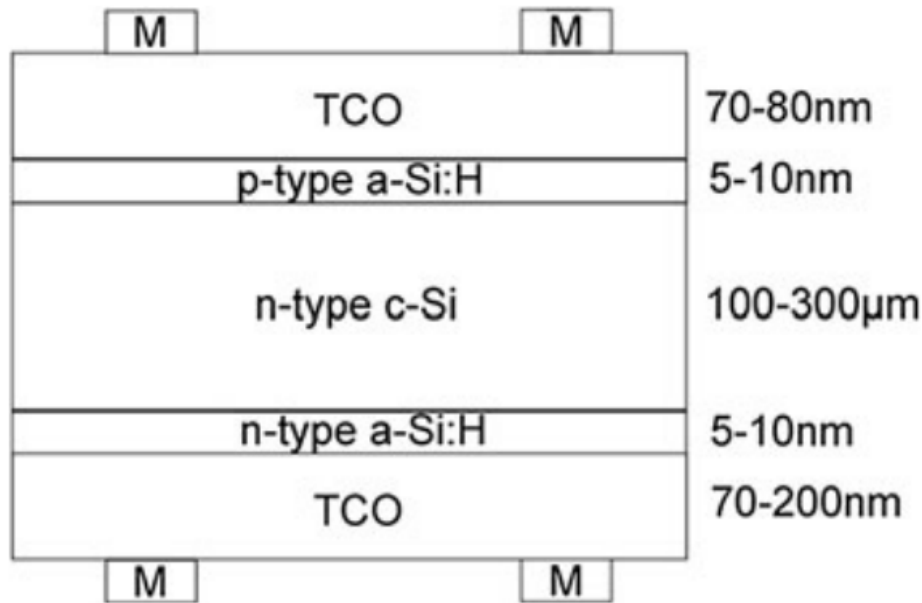


FIGURE 2.10 – Cellule à hétérojonction de type a-Si :H/c-Si

La figure 2.10 représente une structure à double hétérojonction, celle-ci est obtenue en déposant du a-Si :H sur les deux faces. Celle en face avant constitue l'émetteur de la cellule; une couche de a-Si :H fortement dopé p. Alors que la seconde, en face arrière, elle est fortement dopée n et joue le rôle de BSF. Ce double dépôt du a-Si :H permet de simplifier davantage la structure des cellules HET et donc de faciliter son élaboration.

Étant donné que la conductivité du a-Si :H est extrêmement inférieure à celle du c-Si, il est nécessaire d'ajouter une couche d'oxyde transparent conducteur (TCO pour Transparent Conductive Oxide) sur la face illuminée de la cellule. Le rôle primordial du TCO est de collecter les porteurs de charges en assurant le contact entre le a-Si :H et la métallisation avant, mais il sert également de couche antireflet. Les TCO régulièrement utilisés sont l'oxyde d'étain-indium (ITO) et l'oxyde de zinc (ZnO). Ces derniers sont généralement déposés par pulvérisation cathodique DC magnétron à une température d'environ 200°C. Les autres paramètres de dépôts sont ajustés de façon à obtenir une épaisseur d'environ 80nm (qui est un multiple impair de $\frac{\lambda_0}{4n_{CAR}}$) [41].

2.2.2 Diagramme de bandes

Comme on l'a vu dans la partie 1.2.2, la mise en contact de deux semi-conducteurs va engendrer un champ électrique interne dans la ZCE et va donc créer une barrière de potentiel V_{seuil} entre les trous et les électrons. L'apparition de cette tension seuil à l'interface

de la jonction pn va empêcher la pénétration d'électrons dans le côté p et des trous dans le côté n. Par conséquent, le potentiel électrostatique varie et donne naissance à une barrière de potentiel V_d appelée tension de diffusion (qui est de l'ordre de 0.8V pour le silicium). Cette tension de diffusion est proportionnelle à la différence des niveaux de Fermi des deux semi-conducteurs quand ils ne sont pas en contact :

$$V_d = \frac{1}{q} \cdot (E_{F_n} - E_{F_p}) = \frac{kT}{q} \cdot \ln \frac{N_a \cdot N_d}{n_i^2} \quad (2.20)$$

Où E_{F_n} et E_{F_p} sont les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous respectivement, et N_a et N_d sont les concentrations des atomes accepteurs et donneurs respectivement

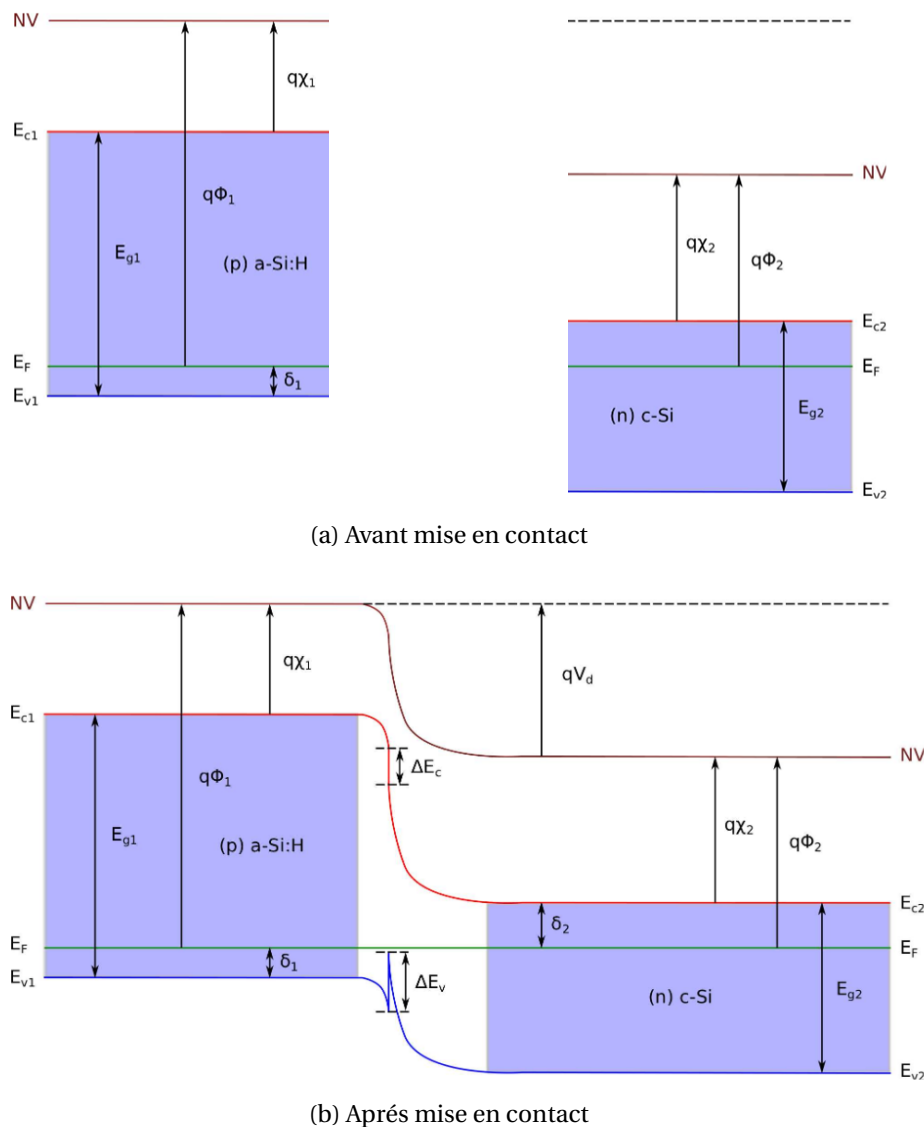


FIGURE 2.11 – Diagramme de bandes pour des hétérojonctions de silicium

Quand ces deux semi-conducteurs sont joints, l'équilibre thermodynamique va se créer et engendrer l'alignement des niveaux de Fermi de part et d'autre de la jonction, et par conséquent la courbure des bandes de conduction et de valence ; c'est ce qui permet le trans-

fert des charges au niveau de l'interface : les électrons peuvent circuler du c-Si(n) vers le a-Si :H(p). Suite à ça, une différence d'énergie potentielle électrostatique est créée. Cette dernière vaut $q.V_d$, c'est l'énergie à fournir à une particule dans un potentiel V_d à une position x pour qu'elle soit transportée de l'infini jusqu'à cette position.

Les hétérojonctions ont une énergie potentielle électrostatique plus élevée que celle des homojonctions. Car, en plus de la variation d'énergie due aux porteurs de charge, les hétérojonctions ont des discontinuités au niveau des bandes de conduction (ΔE_c) et de valence (ΔE_v). Les raisons pour lesquelles ces bandes ne peuvent pas être continues sont dues aux différences d'affinité électronique et de largeur du gap entre les deux matériaux. L'énergie de gap du a-Si :H, qui est située entre 1.55 et 2.10 eV, est plus élevée que celle du c-Si (qui vaut 1.12 eV) pour une température de 300°K [31]. Ces discontinuités permettent théoriquement d'augmenter la barrière de potentiel V_d de la jonction que les porteurs de charge devront franchir et cela à travers plusieurs mécanismes dépendamment de la hauteur de la barrière de potentiel; effet tunnel, effet thermoïonique et par sauts successifs. Par conséquent, on obtient des V_{co} plus élevées que pour une cellule à homojonction classique. C'est ce qui fait la particularité des cellules photovoltaïques à hétérojonction [42].

Le modèle le plus fréquemment utilisé pour la représentation du diagramme des bandes des hétérojonctions est celui d'Anderson, illustré sur la figure. Ce modèle permet de prédire la courbure des bandes à l'interface de deux matériaux d'énergie de gap différentes (E_{g1} et E_{g2}) et d'affinités électroniques différentes (χ_1 et χ_2).

$$E_{g1} - E_{g2} = \Delta E_c + \Delta E_v \quad (2.21)$$

$$\Delta E_c - q(\chi_2 - \chi_1) \quad (2.22)$$

Pour le silicium cristallin de type n :

$$\left. \begin{aligned} -\Delta E_v &= E_{g2} - (\delta_1 + \delta_2) - qV_d \\ qV_d &= q(\phi_1 - \phi_2) \\ \delta_1 &= E_t - E_{v1} \\ \delta_2 &= q(\phi_2 - \chi_2) = E_{c2} - E_r = kT \ln\left(\frac{N_c}{N_d}\right) \end{aligned} \right\} \quad (2.23)$$

Chapitre 3

Dépôt de la couche a-Si :H(p) et mesure du gap optique

À température ambiante, le silicium est cristallisé en un réseau stable de type diamant. Au-dessus de sa température de fusion de 1685°K, il se trouve à l'état liquide où, du fait de l'agitation thermique, il n'existe plus aucun ordre. Lors de la cristallisation, un réarrangement se produit, et les atomes se placent dans les positions qui sont énergiquement les plus favorables. Si le refroidissement est très rapide, de l'ordre de 10^{10} à 10^{12} degrés/sec, seules des réorganisations locales peuvent avoir lieu. On obtient alors un matériau amorphe présentant un ordre atomique bien défini sur les couches des premiers voisins, et une absence totale de corrélations entre les positions des atomes éloignés. Plusieurs techniques d'élaboration sont actuellement en cours de développement dans les laboratoires mondiaux. Afin d'obtenir des trempes suffisamment rapides, le dépôt en film mince directement à partir de la phase vapeur reste la méthode la plus efficace.

3.1 Dépôt du a-Si :H(p) par pulvérisation cathodique

3.1.1 Préparation des substrats

Le nettoyage des substrats de silicium est une étape de grande importance permettant l'adhérence des matériaux déposés par la suite. Un soin particulier est porté à cette étape et aux stockages de ces substrats. L'objectif de ce processus est l'élimination des impuretés chimiques et des particules sans altérer ou endommager la surface de la plaquette.

En premier lieu, les substrats sont dégraissés avec du trichloréthylène (TCE) à une température d'environ 80°C. Les résidus de TCE sont enlevés avec de l'acétone et de l'isopropanol,

le substrat est ensuite séché avec de l'azote pour éviter les réactions chimiques. Afin d'enlever les rayures sur la surface, une solution de NaOH 30% à 100°C est utilisée pour l'amincissement du substrat qui atteint une épaisseur de 375 µm. La décontamination se fait avec un mélange d'acide sulfurique et de peroxyde d'hydrogène appelé Piranha, son rôle est d'ôter les résidus organiques de la surface et la rendre hydrophobe. Les échantillons sont ensuite plongés dans une solution d'HCl pendant 10 minutes à température ambiante afin de neutraliser les défauts de surface. Une désoxydation avec le mélange HF (acide fluorhydrique) et eau oxygénée est primordiale avant tout dépôt, elle sert à enlever la couche d'oxyde natif. Suite à cette désoxydation, les substrats doivent être placés immédiatement dans l'enceinte de pulvérisation.

3.1.2 Dépôt de la couche a-Si :H(p)

Le principe de la pulvérisation cathodique est d'arracher les atomes d'une cible de silicium par bombardement. Sous l'effet du vide, les atomes libérés ont une trajectoire rectiligne et viennent se poser sur la surface qu'ils rencontrent. La cible et le substrat sont disposés face à face, pour une meilleure efficacité. Le mélange gazeux d'argon et d'hydrogène est ionisé par une décharge électrique produite au voisinage de la cible de silicium dopé P qui est polarisée négativement et joue le rôle de cathode; un plasma est créé. Une partie des ions d'argon transfère son énergie à la cible en rompant ses liaisons, ce qui permet de libérer des atomes de silicium qui pourront se déposer sur le substrat. L'incorporation de l'hydrogène dans la couche amorphe se fait par la formation de groupements Si – H_x (avec x allant de 1 à 3) sur la surface du film, à fur et à mesure que les atomes se déposent lors du bombardement de la cible. L'efficacité du système peut-être augmenté en disposant des aimants à l'arrière de la cible. Le champ magnétique ainsi créé, en piégeant les électrons, va faciliter l'ionisation des atomes du plasma et donc l'efficacité du bombardement de la cible.

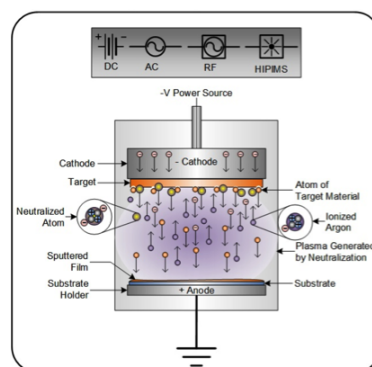


FIGURE 3.1 – Schéma de l'enceinte de pulvérisation cathodique

La cible de silicium utilisée étant initialement dopée, il n'est pas nécessaire d'introduire

un gaz dopant. Le cas contraire, le dopage aurait été effectué de la même façon lors de la fabrication de la couche, en introduisant dans le plasma du diborane (B_2H_6) pour un dopage p et de la phosphine (PH_3) pour un dopage n.

Un contrôle rigoureux du plasma, ainsi que du bombardement de la cible est nécessaire pour l'obtention d'un matériau présentant de bonnes caractéristiques électroniques. Différents paramètres caractérisant la décharge doivent ainsi être optimisés : la nature et la pureté de la cible, la température de la cible, les dimensions géométriques du réacteur, la pression et le flux des gaz, la puissance et la fréquence du courant de maintien de la décharge et le temps du dépôt.

Pour notre dépôt, nous avons utilisé un pulvérisateur cathodique magnétron dont l'alimentation est de type DC. Ce dernier a été minutieusement conçu par une équipe de chercheurs au sein du CRTSE. Les conditions de dépôt (tableau 3.1) ont spécialement été optimisées pour ce réacteur grâce à des études antérieures réalisées dans ce même centre.

Paramètres de dépôt	Valeur
Pression du vide	3.10^{-6} mbar
Pression de travail	5.10^{-6} mbar
Puissance	90 W en DC
Distance entre les électrodes	10cm
Polarisation	-30 V
Mélange gazeux	10% H_2 + 90% Ar_2
Débit du gaz	10 sccm

TABLE 3.1 – Paramètres de dépôt de la couche a-Si :H(p) par pulvérisation cathodique

Le gaz d'argon sert à la création du plasma tandis que l'hydrogène est utilisé pour la passivation de la couche en silicium amorphe. Le seul paramètre qui a été varié est le temps de dépôt de l'émetteur a-Si :H(p) et ceci dans le but d'étudier l'effet de son épaisseur sur les performances de la cellule solaire à hétérojonction.

3.2 Mesure de la transmittance de la couche a-Si :H(p)

3.2.1 Principe de la mesure par spectrophotométrie UV-Vis-NIR

Le spectre de transmission optique, à une longueur d'onde comprise entre 250 et 2500 nm, a été mesuré par un spectrophotomètre UV-Vis-NIR Varian Cary 500 à température ambiante. Ce dernier est opérationnel dans la gamme de l'ultraviolet, visible et proche infrarouge. Le principe de fonctionnement est représenté sur la figure 3.2. La source de rayons

UV est une lampe à deutérium, quant aux rayons de la gamme visible et proche infra-rouge, une lampe avec filament de tungstène est utilisée. Un monochromateur permet de sélectionner les longueurs d'onde de travail en les séparant selon le principe de diffraction à la manière d'un prisme. Le faisceau est ensuite séparé en deux de telle façon qu'une partie soit incidente sur l'échantillon (a-Si :H déposé sur du verre corning) et que l'autre soit utilisée comme référence (en verre). Deux détecteurs sont mis en place : un photomultiplicateur pour la détection des UV et du visible et une jonction au sulfure de plomb pour la détection du proche IR [43]. Cette mesure est réalisée dans le but de déterminer la valeur du gap optique à partir de la courbe l'absorption en fonction de la longueur d'onde dans le domaine spectral étudié.

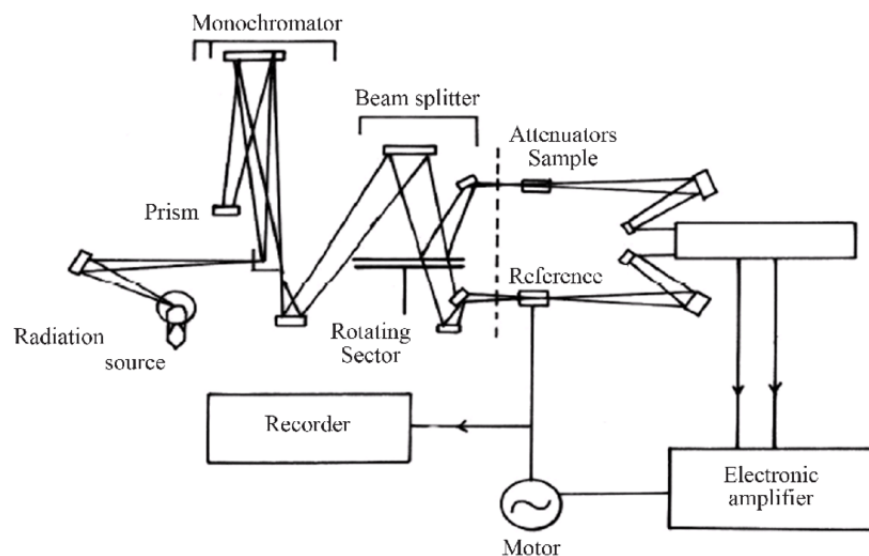


FIGURE 3.2 – Représentation schématique d'un spectrophotomètre UV-Vis-NIR

3.2.2 Mesure du gap optique par la méthode de Tauc

Le spectrophotomètre UV-Vis-NIR permet de mesurer la transmittance $T(\lambda)$ en fonction des longueurs d'ondes allant de 250 à 2500 nm, qui nous permet de déduire le coefficient d'absorption α par la relation suivante [44] :

$$\alpha = \log_{10} \frac{I_0}{I} = -\log_{10} T \quad (3.1)$$

La figure 3.3 représente l'absorption du silicium amorphe hydrogéné en fonction de la longueur d'onde. On peut clairement voir que ce matériau est très absorbant aux faibles longueurs d'ondes, d'où son utilisation à la surface de la cellule.

À partir de l'extrapolation du spectre d'absorption, nous pouvons définir le gap indirect de Tauc [45], qui est le plus communément utilisé pour les matériaux amorphes :

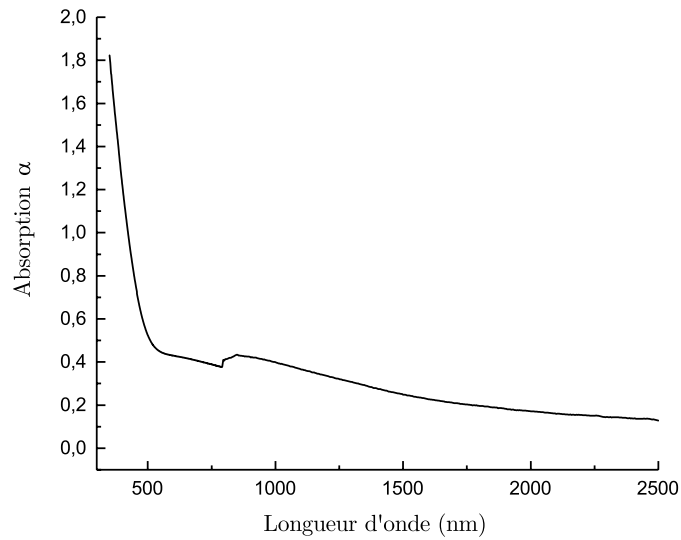


FIGURE 3.3 – Absorption du silicium amorphe hydrogéné en fonction de la longueur d'onde

$$\alpha(h\nu) = B (h\nu - E_{g,Tauc})^2 \quad (3.2)$$

Où α est le coefficient d'absorption, B est une constante, $h\nu$ est l'énergie du photon incident (h la constante de Planck et ν la fréquence des photons) et $E_{g,Tauc}$ est le gap optique de Tauc.

La valeur du gap est obtenue en extrapolant la partie linéaire de la courbe $(\alpha h\nu)^{1/2}$ en fonction de l'énergie comme il est représenté sur la figure 3.4. La valeur obtenue est de 1,72 eV et est en parfaite corrélation avec les valeurs obtenues en littérature. En effet, l'énergie de gap des a-Si :H varie entre 1.55 et 2.10 eV [31] selon la concentration d'hydrogène dans le matériau.

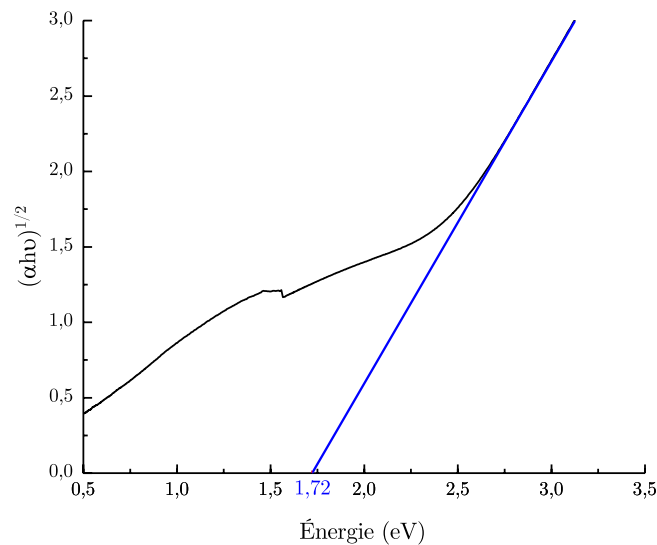


FIGURE 3.4 – Détermination du gap optique par la méthode de Tauc

Chapitre 4

Simulation de la cellule solaire

4.1 Logiciel de simulation AFORS-HET

Outre les recherches expérimentales, les études de simulation des performances des cellules solaires en silicium à hétérojonction sont très importantes pour comprendre leur fonctionnement et optimiser la conception des structures des cellules. Le logiciel AFORS-HET développé par HZB en Allemagne [46] a été largement utilisé pour l'étude de simulation de cellule solaire en silicium à hétérojonction.

En premier lieu, une cellule solaire de type a-Si :H(p)/c-Si(n) sera simulée en variant l'épaisseur et le dopage de l'émetteur a-Si :H(p) et également en variant la densité de défauts à l'interface des deux couches de l'émetteur et de l'absorbeur. Ensuite, une couche intrinsèque de a-Si :H d'épaisseur variable sera introduite afin de passiver les défauts de surface. La cellule simulée dans ce cas sera de type a-Si :H(p)/a-Si :H(i)/c-Si(n).

L'influence de ces paramètres sur la densité de courant de court-circuit (J_{cc}), la tension de circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque (η) de la cellule sont obtenus par simulation de la courbe $I(V)$ grâce au logiciel AFORS-HET.

4.1.1 Présentation du logiciel

La plupart des cellules solaires actuellement sur le marché peuvent être décrites comme une séquence unidimensionnelle de différentes couches semi-conductrices. Si ces cellules sont uniformément éclairées, leur modélisation en une dimension est suffisante (le courant des paires électron-trou ne peut circuler que dans une dimension). C'est le cas de la plupart des cellules solaires en silicium ainsi que de la plupart des cellules solaires à couches minces. Cependant, certaines cellules solaires utilisent des contacts métalliques en forme de bande ou de point, qui sont placés à l'arrière de la cellule solaire, évitant ainsi les ombres dues aux

contacts comme c'est le cas des cellules IBC (voir partie 1.3.2.2. Dans ces cas, les cellules résultantes doivent être modélisées en deux dimensions voire même en trois dimension (le courant des paires électron-trou peut circuler en deux ou trois dimensions). Dans la version 2.5 actuelle d'AFORS-HET, seules les simulations unidimensionnelles sont possibles ; cependant, un modèle 2D est en cours de développement.

Dans cette étude, nous avons utilisé le logiciel de simulation AFORS-HET 2.5 pour étudier les performances électriques des cellules à hétérojonction. Ce dernier a été spécialement conçu pour modéliser les structures de cellules photovoltaïques à hétérojonction comme le montre la figure 2.10 et comprend tous les modèles et fonctions nécessaires tout en offrant une interface facile d'utilisation. Il permet de créer des cellules dont les couches semi-conductrices et métalliques sont définies en saisissant leur différentes propriétés électriques. Les conditions aux limites peuvent être des contacts métal, semi-conducteur ou métal-isolant-semi-conducteur. Les calculs électriques sont basé sur l'équation fondamentale de Poisson et l'équation de continuité. Le transport des porteurs est simulé en utilisant le mécanisme de dérive ou de diffusion, l'émission thermoionique [47] et l'effet tunnel [46]. Les calculs optiques sont basés sur la loi de Beer-Lambert pour l'absorption de la lumière et la réflexion des surfaces peut être calculée en utilisant des données d'indice de réfraction pour toutes les sous-couches. Dans les simulations qui suivent, seulement les calculs électriques seront considérés.

Les étapes de la simulations ainsi que l'interface du logiciel sont présentés dans la partie 4.1.3.

4.1.2 Équations

Après avoir défini la structure de la cellule à simuler, AFORS-HET (Automate FOR Simulation of HETerostructures) résout numériquement l'équation de Poisson (équation 4.1) et les équations de continuité et de transport pour les électrons (équation 4.2) et les trous (équation 4.3) avec les conditions aux limites appropriées pour une dimension. L'ensemble d'équations aux dérivées partielles est transformé en un ensemble d'équations algébriques non linéaires par la méthode des différences finies (MDF). Ces équations résultantes sont ensuite résolues de manière itérative. Un schéma de discrétisation numérique est utilisé comme indiqué par Selberherr [48] afin de linéariser le problème. Il peut être résolu pour différents modes de calcul, celui qui a été sélectionné pour les simulations qui suivent est le mode de calcul en courant continu, il décrit les conditions de régime permanent sous une tension ou un courant externe appliqué avec ou sans éclairage. Les densités d'électrons

libres $n(x,t)$ et de trous $p(x,t)$ et le potentiel électrostatique $\varphi(x,t)$ à chaque point de grille sont utilisés comme variables indépendantes pour résoudre le système d'équations. Toutes les autres variables de l'ensemble discrétisé d'équations différentielles sont exprimées comme des fonctions de ces trois variables indépendantes. Ainsi, les caractéristiques internes des cellules, telles que les diagrammes de bande, les taux de génération et de recombinaison, et les densités de porteurs libres sont calculées, ce qui permet la simulation de diverses méthodes de caractérisation telles que les mesures courant-tension, l'efficacité quantique (réponse spectrale) ou la durée de vie.

L'équation de Poisson relie les variations du potentiel électrostatique aux densités locales de charge. Celle-ci est basée sur les statistiques de Maxwell-Boltzmann et est donnée par l'expression suivante :

$$\frac{\epsilon_0 \epsilon_r(x)}{q} \frac{\partial^2 \varphi(x, t)}{\partial x^2} = p(x, t) - n(x, t) + N_d(x) - N_a(x) + \sum_{trap} \rho_{trap}(x, t) \quad (4.1)$$

Où q la charge électronique, ϵ_r et ϵ_0 la constante diélectrique absolue et relative respectivement, N_d et N_a les concentrations des donneurs et accepteurs au point x et ρ la densité des pièges de type donneur et accepteur.

Les équations de continuité et de transport décrivent la façon dont les densités d'électrons (équation 4.2) et de trous (équation 4.3) évoluent en fonction des mécanismes de transport, de génération et de recombinaison. Elles sont données par les expressions suivantes :

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial j_n(x, t)}{\partial x} = G_n(x, t) - R_n(x, t) - \frac{\partial}{\partial t} n(x, t) \quad (4.2)$$

$$+\frac{1}{q} \frac{\partial j_p(x, t)}{\partial x} - G_p(x, t) - R_p(x, t) - \frac{\partial}{\partial t} p(x, t) \quad (4.3)$$

Où $G_n(x, t)$ et $G_p(x, t)$ sont les taux de génération des électrons et des trous, $R_n(x, t)$ et $R_p(x, t)$ sont les taux de recombinaison des électrons et des trous et $j_n(x, t)$ et $j_p(x, t)$ sont les densités de courant d'électrons et de trous données par les équations suivantes :

$$j_n(x, t) = q\mu_n n(x, t) \frac{\partial E_{F,n}(x, t)}{\partial x} \quad (4.4)$$

$$j_p(x, t) = q\mu_p p(x, t) \frac{\partial E_{F,p}(x, t)}{\partial x} \quad (4.5)$$

Avec :

$$E_{Fn}(x, t) = E_C(x) + kT \ln \frac{n(x, t)}{N_C(x)} = -q\chi(x) + q\varphi(x, t) + kT \ln \frac{n(x, t)}{N_C(x)} \quad (4.6)$$

$$E_{Fp}(x, t) = E_V(x) - kT \ln \frac{p(x, t)}{N_V(x)} = -q\chi(x) + q\varphi(x, t) - E_g(x) - kT \ln \frac{p(x, t)}{N_V(x)} \quad (4.7)$$

$j_n(x, t)$ et $j_p(x, t)$ sont entraînés par le gradient de l'énergie quasi de Fermi correspondante $E_{Fn}(x, t)$ et $E_{Fp}(x, t)$. Les paramètres d'entrée sont les mobilités des électrons et des trous μ_n, μ_p , l'affinité électronique $\chi(x)$, la bande interdite $E_g(x)$, l'énergie de la bande de conduction et de valence $E_C(x), E_V(x)$ et la densité de bande de conduction et de valence effective des états $N_C(x), N_V(x)$ de la couche semi-conductrice.

4.1.3 Étapes de la simulation

L'interface du logiciel AFORS-HET 2.5 est représentée sur la figure 4.1. Elle se compose de trois zones :

- *Program control*, c'est la zone où on peut définir la structure à simuler, le mode de calcul et les paramètres à varier.
- *External parameters*, il s'agit des paramètres externes relatifs aux conditions de simulation de la cellule comme la température, les conditions aux limites, le spectre solaire...
- *Measurements*, c'est la partie où on peut sélectionner la mesure à faire.

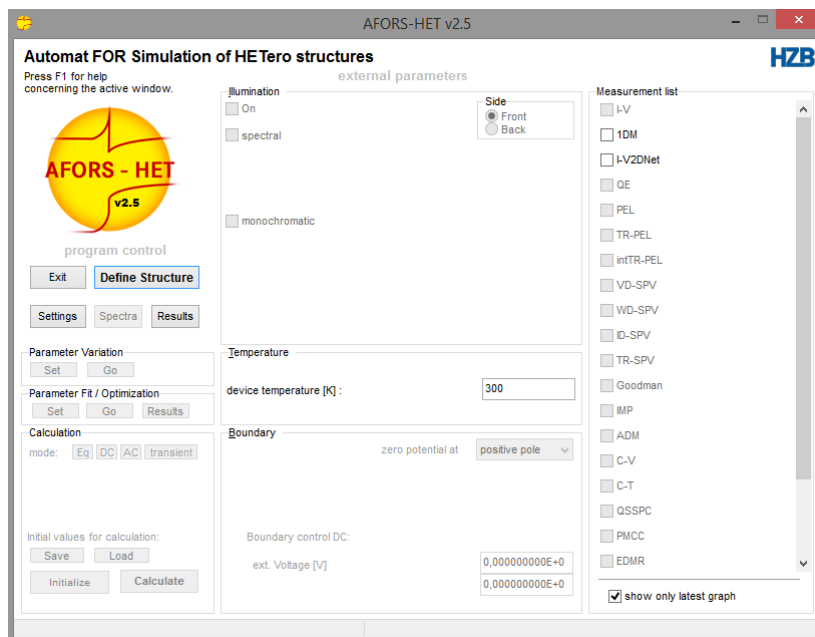


FIGURE 4.1 – Interface du logiciel AFORS-HET 2.5

Pour commencer à faire une simulation avec ce logiciel, il faut d'abord définir la structure de la cellule à simuler. Pour ce faire, il faut cliquer sur «*Define Structure*». La fenêtre représentée sur la figure 4.2 va apparaître. Pour ajouter une couche, il faut cliquer sur «*Add layer*» pour faire apparaître la fenêtre «*Layer*» (figure 4.3).

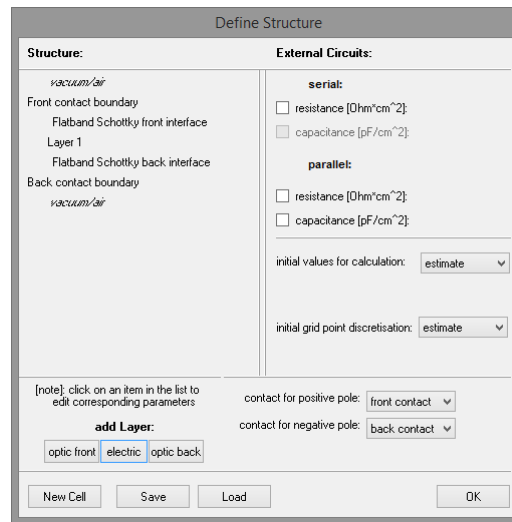


FIGURE 4.2 – Définition de la structure de la cellule à simuler

À partir de là, on peut empiler plusieurs couches de différents paramètres pour former une cellule solaire. Il est également possible d'introduire des défauts pour modéliser la qualité de la couche. Après avoir défini la structure, la simulation peut commencer.

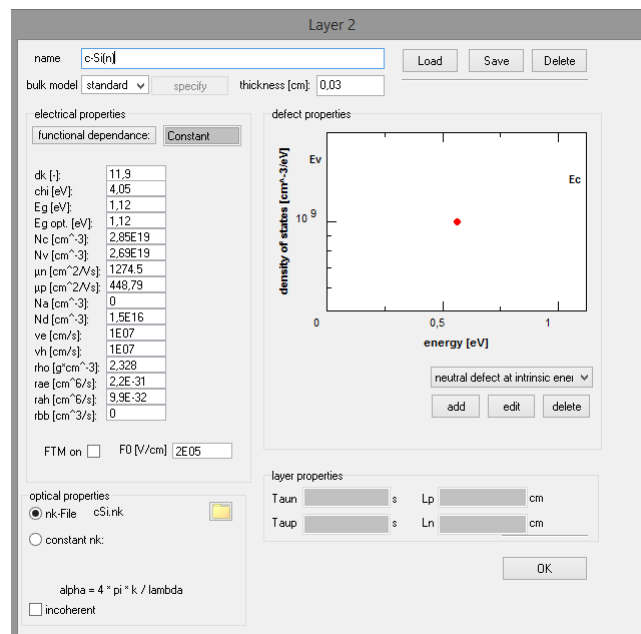


FIGURE 4.3 – Définition des paramètres de la couche

Pour simuler la courbe I(V) de la cellule sous éclairage, le mode de calcul DC doit être activé. Il est alors possible d'effectuer des calculs dans des conditions de non-équilibre et de sélectionner un éclairage externe constant et un courant ou une tension constants. Il existe différentes possibilités pour simuler une cellule sous éclairage. Il est possible de choisir plusieurs modes d'éclairages monochromatique ou polychromatique. Pour notre simulation, un mode de calcul DC avec un éclairage spectral AM 1.5G a été choisi. Un exemple de calcul de la courbe I(V) sous un rayonnement spectral 1.5G est représenté sur la figure 4.4.

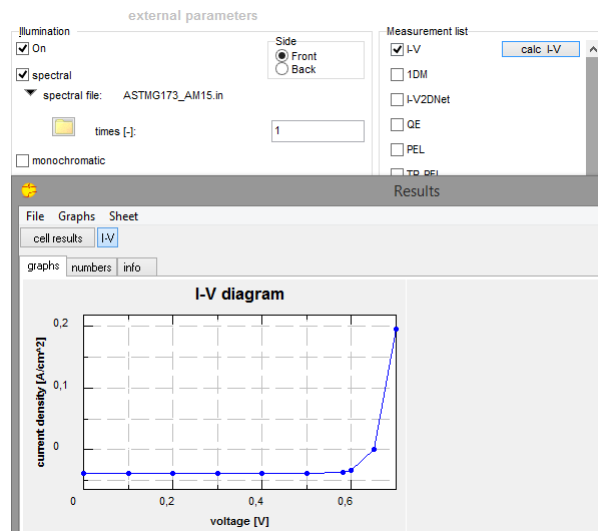


FIGURE 4.4 – Calcul de la courbe I(V) sous illumination

4.2 Simulation d'une cellule HET

4.2.1 Propriétés de la cellule à simuler

La structure de la cellule solaire utilisée pour la simulation, comme le montre la figure 4.5, est de forme a-Si:H(p)/c-Si(n), l'émetteur et l'absorbeur sont a-Si:H(p) et c-Si(n) respectivement, les contacts métalliques sont considérés comme une bande plate.

La simulation qui suit a été réalisée sous un éclairage de AM1.5(100mW/cm²) , correspondant aux gammes de longueurs d'onde effectives de 0,3µm à 1,1µm.

4.2.1.1 Substrat c-Si(n)

Pour cette couche, nous utiliserons une description assez simple, ses paramètres principaux sont résumés dans le tableau 4.1. L'épaisseur de l'absorbeur a été fixée à 300µm avec une densité d'atomes dopants donneurs de $1,5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Ses défauts sont caractérisés par un seul niveau accepteur centré au milieu du gap avec une densité de défauts de 10^9cm^{-3}

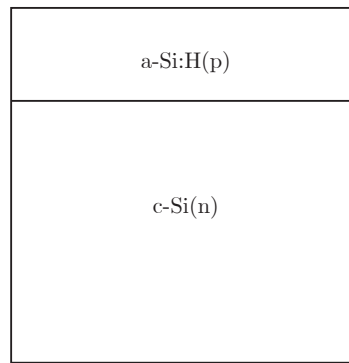


FIGURE 4.5 – Schéma de la structure a-Si:H(p)/c-Si(n) de la cellule HET à simuler

avec des sections efficaces de capture d'électron σ_n et de trous σ_p de 10^{-14}cm^2 , ce qui conduit à une durée de vie de porteur minoritaire équivalente à 10 ms. La largeur du gap vaut 1,12 eV, les recombinaisons Auger sont prises en compte selon la paramétrisation de Kerr et Cuevas [49] valent $2,2 \cdot 10^{-31}\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$ pour les électrons et $9,9 \cdot 10^{-32}\text{cm}^6 \cdot \text{s}^{-1}$ pour les trous.

La mobilité des électrons et des trous a été calculée en utilisant le modèle de Masetti [25] grâce à l'équation 2.13. Ainsi, pour un dopage de $1,5 \cdot 10^{16}\text{cm}^{-3}$, on obtient des mobilités de l'ordre de $\mu_n = 1273,5\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ pour les électrons et $\mu_p = 448,79\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ pour les trous à la température de 300K.

4.2.1.2 Emetteur a-Si:H(p)

Le choix des paramètres de simulation du silicium amorphe hydrogéné est assez ardu. En effet, ces paramètres sont fonction des conditions de dépôt et du type de dopage. C'est pour cela qu'il faut définir des paramètres «rationnels», conformes aux résultats obtenus expérimentalement dans la littérature. Les valeurs de la mobilité des électrons et des trous sont respectivement $\mu_n = 20\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ et $\mu_p = 5\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ [50]. La valeur de l'énergie de gap a été choisie selon celle calculée par la méthode de Tauc dans la partie 3.2.2. Les densités d'états en bords de bande de conduction et de valence sont prises égales à celles du silicium cristallin telles que $N_C = 10^{20}\text{cm}^{-3}$ et $N_V = 10^{20}\text{cm}^{-3}$.

Le modèle utilisé pour la distribution d'états dans la bande interdite est décrit dans la partie 2.1.2.4. Il s'agit de deux exponentielles décroissantes à partir des extrémités du gap (queues de bande de conduction et de bande de valence) et de deux distributions gaussiennes l'une de type donneur et l'autre de type accepteur qui représentent les états profonds dus aux liaisons pendantes. L'épaisseur et le dopage de la couche a-Si:H(p) seront variés au cours de la simulation.

4.2.1.3 Introduction de défauts à l'interface c-Si(n)/a-Si :H(p)

Pour une modélisation plus réaliste de l'hétérojonction, il est primordial de prendre en considération les défauts dans l'interface entre l'émetteur a-Si :H(p) et l'absorbeur c-Si(n) qui ne peuvent pas être totalement éliminés lors de la production des cellules solaires. Cette interface a été modélisée en insérant une fine couche d'environ 1nm qui a les mêmes propriétés que la couche c-Si(n), mais comprends des défauts de liaisons pendantes représentées par deux distributions gaussiennes. Bien qu'une caractérisation directe de l'interface n'ait pas été effectuée, il s'agit d'une approximation évidente, car il faut supposer que les liaisons pendantes du cristal atteignant le réseau amorphe agissent comme des centres de recombinaison à l'interface (les atomes du réseau cristallin qui ne sont pas liés vont rencontrer le réseau amorphe).

Paramètres	a-Si :H(p)	a-Si :H(i)	c-Si(n)
Épaisseur (nm)	Variable	Variable	3000
Constante diélectrique	11,9	11,9	11,9
Affinité électronique (eV)	3,9	3,9	4,05
Énergie du gap (eV)	1,72	1,72	1,12
Énergie du gap optique (eV)	1,72	1,72	1,12
Densité d'états effective d'électrons N_c (cm^{-3})	10^{20}	10^{20}	$2,85 \cdot 10^{19}$
Densité d'états effective de trous N_v (cm^{-3})	10^{20}	10^{20}	$2,69 \cdot 10^{19}$
Mobilité des électrons μ_n ($cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$)	20	20	1273,5
Mobilité des trous μ_p ($cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$)	5	5	448,79
Concentration d'atomes accepteurs N_a (cm^{-3})	Variable	0	0
Concentration d'atomes donneurs N_d (cm^{-3})	0	0	$1,5 \cdot 10^{16}$
Vitesse des électrons ($cm \cdot s^{-1}$)	10^7	10^7	10^7
Vitesse des trous ($cm \cdot s^{-1}$)	10^7	10^7	10^7
Densité de la couche ρ ($g \cdot cm^{-3}$)	2,328	2,328	2,328

TABLE 4.1 – Tableau récapitulatif des paramètres utilisés pour la simulation

4.2.2 Influence de l'épaisseur de la couche de l'émetteur a-Si :H(p)

Dans cette partie, l'optimisation de l'épaisseur de l'émetteur a-Si :H de type p est effectuée. Durant cette simulation, le dopage de la couche de l'émetteur est maintenu constants à $10^{19} cm^{-3}$ et la densité de défauts d'interface est supposée nulle. La variation de la tension en circuit ouvert V_{co} , la densité de court-circuit J_{cc} , le facteur de forme FF et l'efficacité η en fonction de l'épaisseur de la couche de l'émetteur sont représentés sur la figure 4.6.

On peut voir sur la figure 4.6 qu'en augmentant l'épaisseur de l'émetteur la tension en

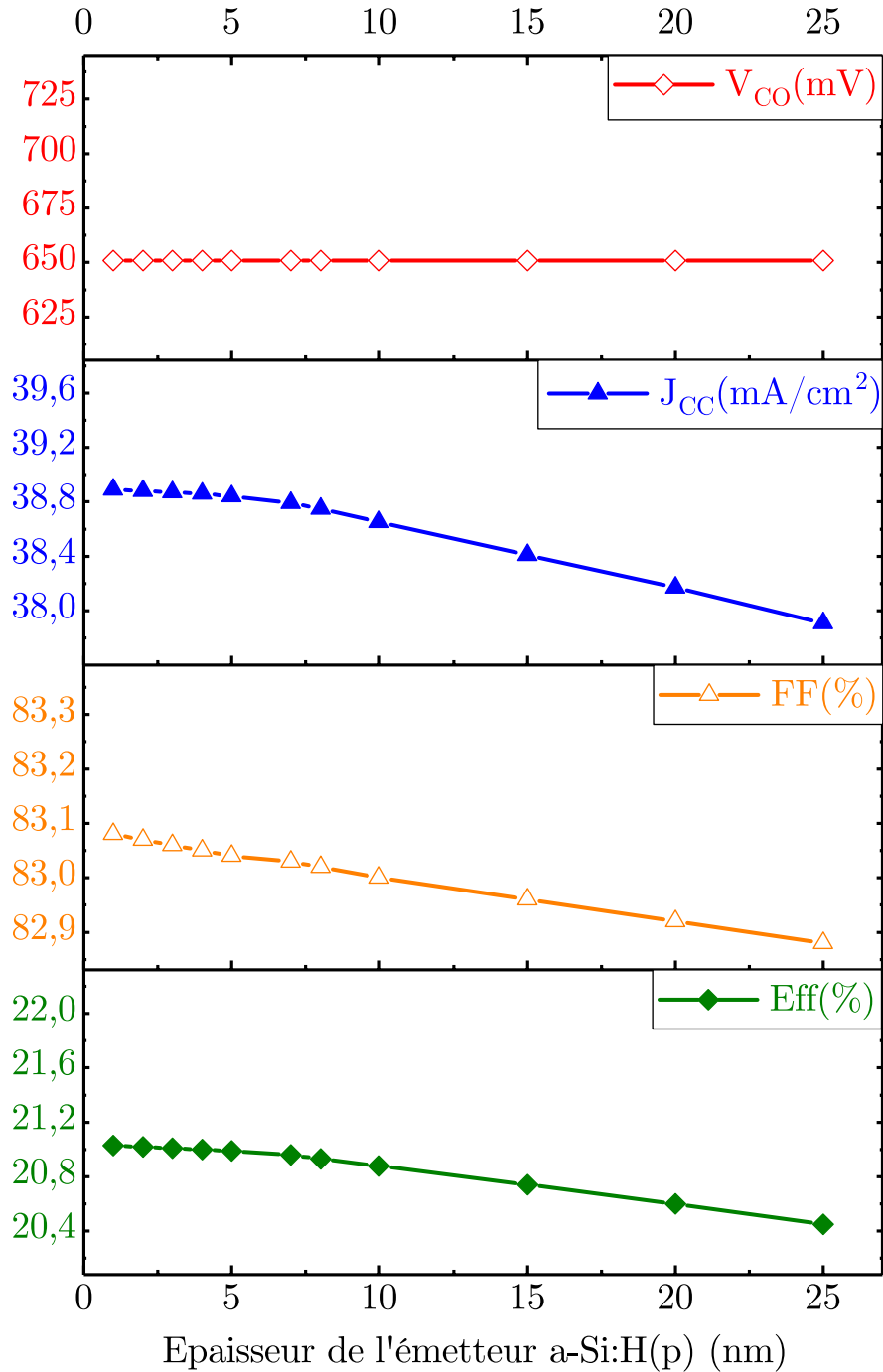


FIGURE 4.6 – Influence de la variation de l'épaisseur de l'émetteur sur les caractéristiques électriques de la cellule a-Si :H(p)/c-Si(n)

circuit ouvert reste constante à 650,8 mV tandis que le courant de court-circuit et l'efficacité de conversion diminuent. Néanmoins, la variation de l'épaisseur de l'émetteur ne montre aucun changement significatif sur le facteur de forme, ce dernier varie dans l'intervalle restreint allant de 83,08% à 82,88%. Étant donné que η varie proportionnellement avec V_{CO} et

J_{cc} selon l'équation 1.7, et qu'avec l'augmentation de l'épaisseur de l'émetteur V_{co} s'est avéré être presque constant pendant que J_{cc} a diminué, l'efficacité est par conséquent réduite avec l'augmentation de l'épaisseur. La valeur maximale de η pour cette cellule se révèle être de 21,03%, qui diminue ensuite jusqu'à atteindre une valeur minimale de 20,45% à une épaisseur de 25 nm.

Comme cela a été expliqué dans la partie 1.4, les paires électron-trous photogénérées hors de la ZCE doivent diffuser pour atteindre la ZCE sans se recombiner pour former un photo-courant de diffusion. Il est alors essentiel que la longueur de diffusion des porteurs minoritaires soit assez élevée pour qu'une bonne partie des paires électron-trou photogénérées puissent être séparées au niveau de la ZCE et contribuer ainsi à la génération du courant. Or que, d'après [51], la longueur de diffusion des porteurs dans la couche a-Si :H est très courte à cause de la densité de défauts et le dopage qui sont élevés. Il est donc évident que l'augmentation de l'épaisseur de la couche va contribuer à la diminution du courant de court circuit. En effet, l'influence proportionnelle de la longueur de diffusion des porteurs minoritaires en fonction du courant de court-circuit a été vaguement étudiée [52, 53, 54]. L'expression théorique généralement rapportée [55] reliant le courant de court-circuit de la cellule à la longueur de diffusion pour une source de lumière monochromatique peut être écrite sous la forme :

$$I_{cc} = C \left[\frac{\alpha L}{1 + \alpha L} \right] \quad (4.8)$$

Où α est le coefficient d'absorption et L la longueur de diffusion des porteurs minoritaires.

En plus, en augmentant l'épaisseur, l'intensité de la force du champ électrique de la couche diminue davantage. Sachant que les charges photogénérées au sein de la couche a-Si :H(p) sont principalement entraînées par cette force de dérive électrique afin d'être collectées et contribuer à la génération du photocourant; donc l'augmentation de l'épaisseur va inévitablement diminuer la valeur de J_{cc} . Donc les photons de faible longueur d'onde seront absorbés et ensuite les paires électron-trous vont se recombiner rapidement (une faible longueur de diffusion implique une faible durée de vie selon l'équation 2.19) dans le volume de l'émetteur avant d'atteindre la ZCE. De cette façon, la réponse spectrale de la cellule aux faibles longueurs d'onde sera considérablement diminuée.

En outre, comme la couche du silicium amorphe est une couche de dopage supérieur, la zone de déplétion de la jonction pn est principalement du côté du silicium cristallin, par conséquent, le champs électrique dans le a-Si :H(p) est faible. L'augmentation de l'épaisseur

va le diminuer encore plus, il devient facile de former une "couche morte", c'est à dire une région où l'intensité de champ est faible, et d'affecter ensuite le transport et la collecte des porteurs photogénérés. Donc, l'émetteur doit être préparé aussi fin que possible.

Lorsqu'il s'agit de l'épaisseur de l'émetteur, il faut faire un compromis. En effet, en raison des pertes d'absorption dans les films a-Si :H, les couches a-Si :H dopées doivent être aussi minces que possible pour maximiser J_{cc} des cellules solaires, et donc leur rendement. Cependant, la couche a-Si :H dopée doit être suffisamment épaisse pour éviter la déplétion complète de la couche, ce qui entraînerait une réduction drastique de la tension seuil. Par conséquent, en prenant en considération les limites technologiques de production, l'épaisseur de l'émetteur est choisie à 5 nm, correspondant à une séquence d'environ 20 longueurs de liaison Si-Si [79]. L'efficacité pour cette valeur d'épaisseur est de 20,99%.

4.2.3 Influence du dopage de l'émetteur a-Si :H(p)

Pour cette partie, la simulation est faite dans le but d'étudier l'influence de la concentration de dopage du a-Si :H de type p sur les performances de la cellule à hétérojonction a-Si :H(p)/c-Si(n). L'épaisseur de la couche a-Si :H(p) est maintenue à 5nm d'après l'optimisation faite dans la partie 4.2.2, le dopage du substrat c-Si(n) est gardée constant à $1,5 \cdot 10^{16} \text{cm}^{-3}$ et le dopage N_A de la couche de l'émetteur est varié de $6 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ à $2 \cdot 10^{20} \text{cm}^{-3}$. La densité de défauts de la surface a-Si :H(p)/c-Si(n) est toujours supposée nulle. La variation de la tension en circuit ouvert V_{co} , la densité de court-circuit J_{cc} , le facteur de forme FF et l'efficacité η en fonction du dopage de la couche de l'émetteur sont représentés sur la figure 4.7.

Nous pouvons voir que lorsque N_A augmente, l'efficacité augmente également, mais au-dessus de $2 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$, l'efficacité de la cellule solaire est saturée puis diminue lentement, de sorte qu'une valeur optimale de $2 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$ a été choisie car des concentrations d'accepteur plus élevées sont difficiles à obtenir en laboratoire [56]. Cette valeur correspond à un rendement de conversion de 21,45%.

Le a-Si :H est un matériau très résistif, sa conductivité intrinsèque vaut $10^{-11} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$. peut augmenter de $10^{-11} \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$. Tandis que la conductivité du silicium cristallin dopé peut aller jusqu'à $10^4 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ [57]. Néanmoins, les cellules à hétérojonction exigent que l'émetteur a-Si :H, qu'il soit de type n ou de type p, soit hautement conducteur pour augmenter la tension en circuit ouvert. Cette condition est difficile à satisfaire pour trois raisons. Premièrement, la mobilité des porteurs libres dans tous les semi-conducteurs amorphes est limitée par l'agencement aléatoire des atomes du matériau qui se traduit par un libre par-

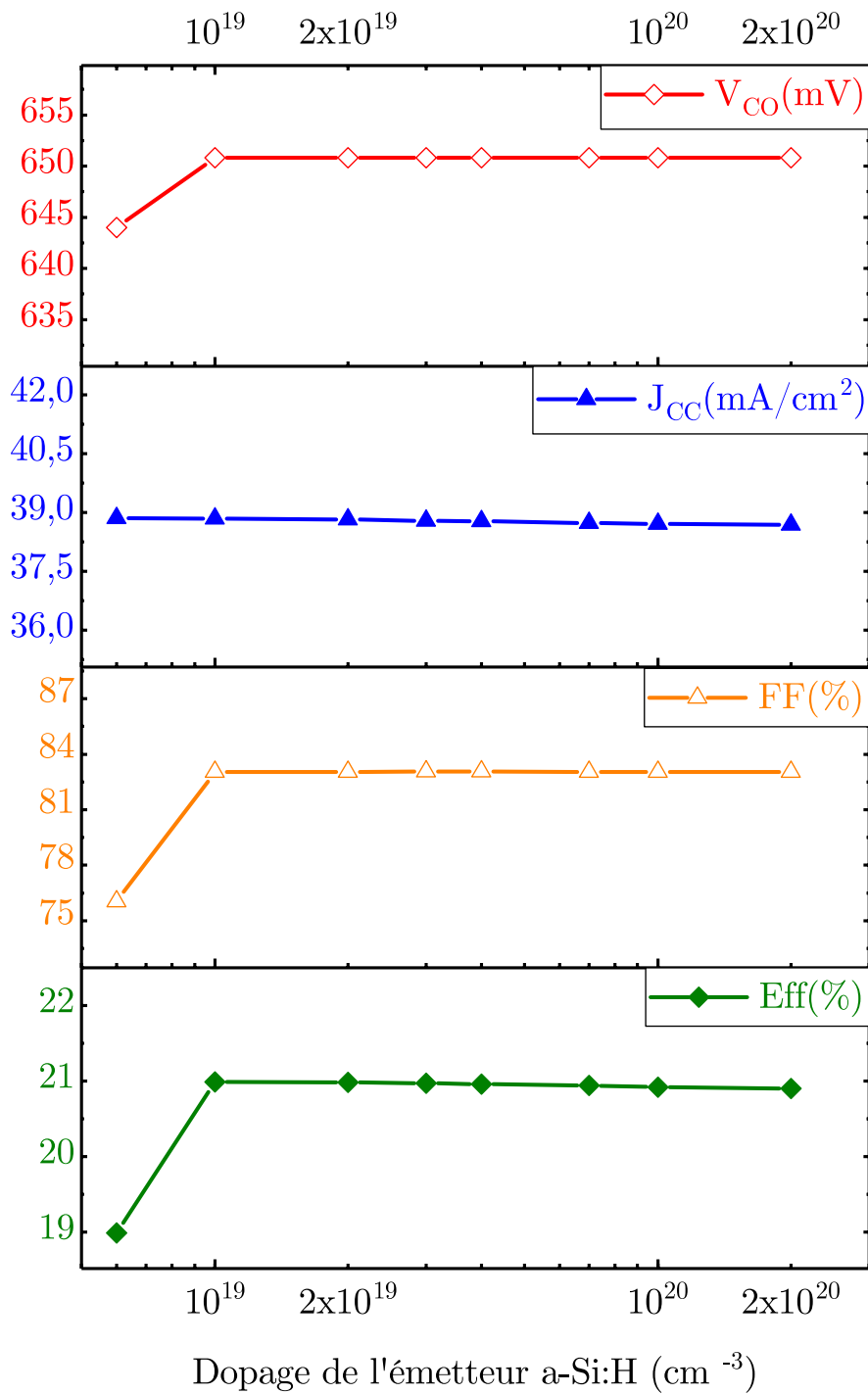


FIGURE 4.7 – Influence de la variation du dopage de l'émetteur sur les caractéristiques électriques de la cellule a-Si:H(p)/c-Si(n)

court moyen court. Deuxièmement, les semi-conducteurs amorphes possèdent des états de queue de bande en raison des distorsions de liaison, et ces états de queue rendent difficile de déplacer le niveau de Fermi près des bords de bande et d'obtenir des densités de porteur élevées (voir partie 2.1.2.4). Enfin, l'activité électronique des dopants introduits dans la couche

a-Si :H, qui est considérablement inférieure à 100%, joue en défaveur de la conductivité. Les deux premiers paramètres étant constants durant la simulation, le niveau de dopage reste le seul facteur qui va influencer la conductivité de l'émetteur. Von Roedem et al [58] ont estimé que les efficacités de dopage du phosphore et du bore dans l'a-Si : H étaient de l'ordre de 10% d'après les études de photoémission, tandis que Bishop et Carlos [59] l'ont estimé à environ 1% pour le bore et 20% pour le phosphore.

La valeur de l'efficacité de dopage varie d'une étude à l'autre, cependant, presque tous s'accordent à dire que l'efficacité du dopage est inférieure à 30% pour tous les types de dopants dans a-Si : H. En effet, comme il a été mentionné dans la partie 2.1.2.2 le taux d'atomes dopants qui sont introduits dans la couche a-Si :H ne contribuent pas tous activement au dopage du matériau, car le réseau amorphe peut facilement accueillir des atomes coordonnés 3 ou 5 fois (contrairement au c-Si qui oblige ses atomes dopants à adopter la même coordination que le silicium). Dans notre cas, le a-Si :H est dopé au bore, qui est un atome trivalent, et donc quand il est coordonné 3 fois aucun trou ne sera créé dans la bande de valence. De ce fait, le nombre de trous décroît fortement dans cette couche, et puisque la conductivité est proportionnelle au nombre de trous et leur mobilité (équation 2.2), il est alors nécessaire que la couche a-Si :H soit fortement dopée pour créer une jonction pn appropriée et augmenter la conductivité. Le dopage du a-Si :H peut augmenter la conductivité jusqu'à une valeur de $10^{-2}\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ [57].

Or, au-delà d'une certaine concentration de dopants, l'efficacité de dopage diminue et la quantité de défauts dans le gap augmente, ce qui a pour effet de diminuer le gap optique et d'augmenter l'absorption des photons. Comme on l'a expliqué auparavant, la très faible longueur de diffusion dans les couches a-Si :H empêche les porteurs photogénérés de participer au photocourant. De plus, il semblerait néfaste pour la passivation des substrats cristallins d'avoir une couche trop dopée en Bore déposée sur la couche de passivation d'a-Si :H intrinsèque [60].

Quand il s'agit de décider du niveau de dopage de l'émetteur a-Si :H, il faut trouver un optimum de dopage qui maximise la conductivité tout en gardant une faible absorption optique et de bonnes propriétés de passivation une fois ces couches intégrées en cellule. En effet, la faible concentration de dopage dans l'émetteur peut éviter l'apparition d'une couche morte et est bénéfique pour le transport et la collecte des porteurs photogénérés. Mais pour augmenter la tension en circuit ouvert de la cellule solaire et réduire la résistance série, les concentrations de dopage de la couche a-Si : H doivent être augmentées de manière appropriée.

4.2.4 Influence de la densité de défauts à l'interface c-Si(n)/a-Si :H(p)

Les simulations faites précédemment sont les cas idéaux pour les cellules solaires ; la densité de défauts à l'interface a été négligée. Mais dans la production réelle, l'impact des défauts d'interface ne peut être ignoré. La recombinaison des porteurs au niveau de l'interface a-Si :H/c-Si est l'un des facteurs les plus importants pour déterminer la tension en circuit ouvert de la cellule et, par conséquent, ses performances de conversion. En effet, la plupart des effets photovoltaïques ont lieu dans l'interface a-Si :H/c-Si, celle-ci est très sensible à la densité de défauts. Effectivement, au niveau de l'interface de contact, les défauts se multiplient à cause des liaisons pendantes en surface du silicium cristallin ainsi que des défauts en surface du a-Si :H qui sont dus au désordre de son réseau. La figure 4.8 montre l'influence de la densité des états d'interface (D_{it}) sur les caractéristiques des cellules solaires. La densité des états de défauts d'interface varie de 10^9 à 10^{14} , les autres paramètres de la couche qui a été introduite sur le logiciel pour simuler les défauts de surface sont décrits dans la partie 4.2.1.3.

Comme cela a également été montré dans des études de simulation antérieures [61, 62, 63], la densité de défaut d'interface a un effet négatif sur les performances de la cellule. Sur la figure 4.8, nous pouvons voir que lorsque $D_{it} < 10^{10} cm^{-2}$, les performances de la cellule solaire sont presque exemptes de l'influence des états de défaut d'interface; mais lorsque $D_{it} > 10^{10} cm^{-2}$, les performances de la cellule diminuent considérablement à l'exception du courant de court-circuit. De tels résultats sont bien cohérents avec ceux obtenus par les références [64, 65], ce qui prouve ici que la simulation est assez fiable. Dans la condition $D_{it} = 10^{13} cm^{-2}$, la tension en circuit ouvert et l'efficacité de conversion de la cellule solaire sont réduites à 501,5 mV et 15,49%, respectivement. Cela est principalement dû à l'augmentation de la recombinaison qui s'est produite dans la ZCE, qui a été causée par la densité de défauts d'interface. Ainsi, le courant de saturation inverse de la cellule solaire augmente. Ce dernier est une mesure de la "fuite" des porteurs de charge à travers la jonction pn à cause de la recombinaison. Selon le modèle de diode idéal des cellules solaires (voir partie diode), la relation entre la tension en circuit ouvert et le courant de saturation inverse J_0 est la suivante :

$$V_{co} = \frac{k_0 T}{q} \left[\ln \left(\frac{J_{cc}}{J_0} \right) + 1 \right] \quad (4.9)$$

Une expression similaire existe entre le facteur de forme FF et J_0 lorsque la résistance

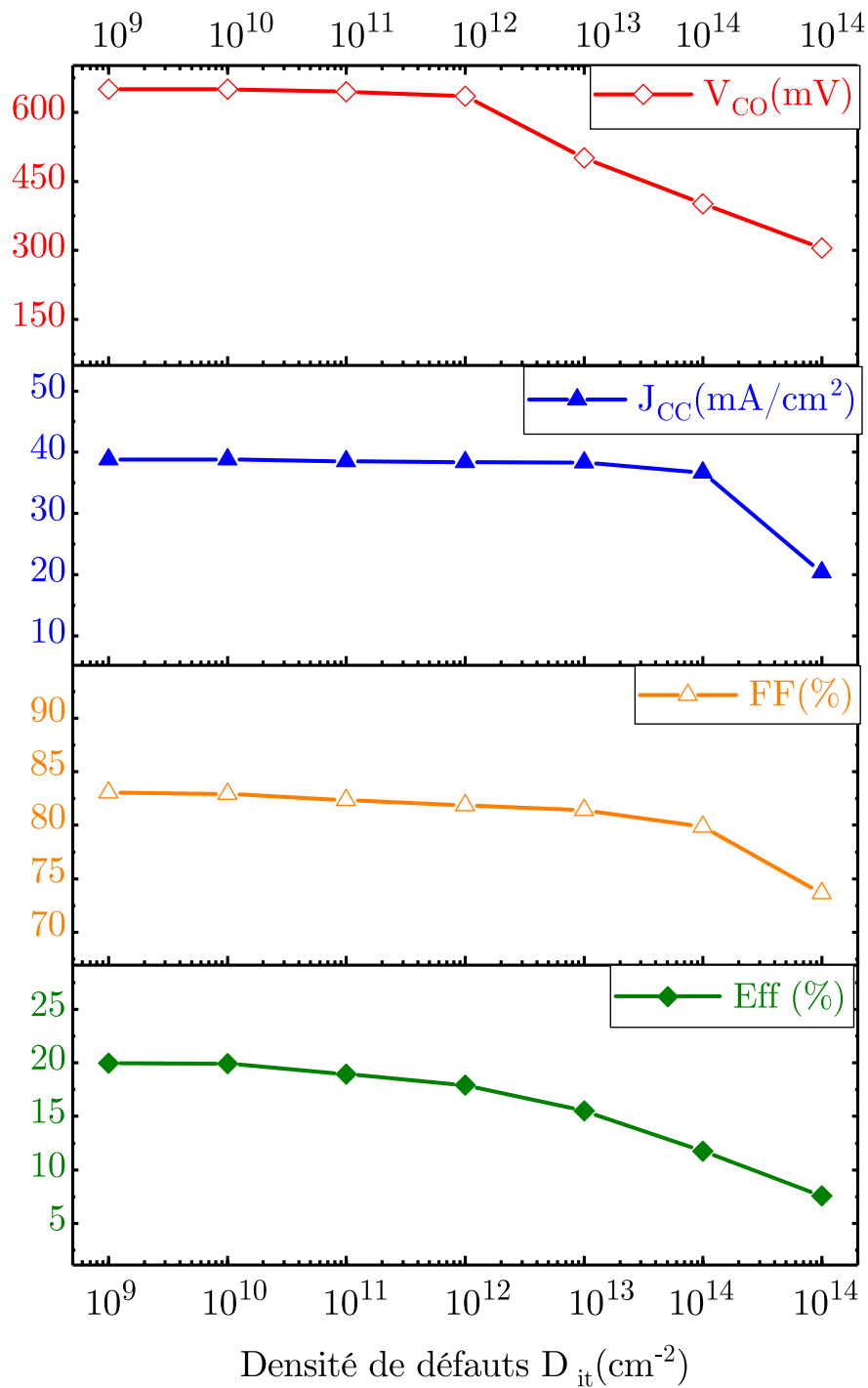


FIGURE 4.8 – Influence de la variation de la densité de défauts d'interface sur les caractéristiques électriques de la cellule a-Si:H(p)/c-Si(n)

série peut être ignoré [66] et est donnée par l'équation 4.10.

$$FF \cong \left\{ 1 - \frac{1}{\ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0}\right)} \right\} \left\{ 1 - \frac{\ln\left[\ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0}\right)\right]}{\ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0}\right)} \right\} \quad (4.10)$$

Par conséquent, l'augmentation de J_0 entraînera inévitablement la diminution de V_{co} et FF, ce qui réduit l'efficacité des cellules solaires.

Malgré la diminution des performances de la cellule au-delà d'une densité de défauts supérieure à 10^{10} cm^{-2} , on est contraint à fixer cette dernière à une valeur de 10^{11} cm^{-2} qui correspond à une efficacité de 18,94% (contre une efficacité de 21,45% quand la densité de défauts est ignorée) pour corroborer avec la production réelle. En effet, des études expérimentales [64, 65] ont démontré qu'une telle densité de défauts peut être obtenue en effectuant un bon nettoyage chimique du substrat c-Si.

4.3 Simulation d'une cellule HIT

4.3.1 Etat de l'art des cellules HIT

Depuis que la première cellule HET a prouvé son efficacité [18], de nombreux groupes de recherche du monde entier se sont intéressés au développement technologique des cellules solaires à hétérojonction a-Si:H/c-Si en tant qu'alternative aux cellules solaires traditionnelles dont l'émetteur est obtenu par diffusion. Quelques années après, Sanyo a commencé à travailler sur la croissance des jonctions à basse température sur du c-Si et a développé un nouveau type de cellules solaires à hétérojonction appelé ACJ-HIT (Artificially Constructed Junction- Heterojunction with Intrinsic Thin layer), maintenant raccourcie en «HIT» pour *Heterojunction with Intrinsic Thin layer*, avec un rendement de conversion de 18,1% [67] qui a par la suite été continuellement amélioré pour donner un rendement exceptionnel de 22% dans des cellules solaires de 100 cm² [68]. De plus, Sanyo a également atteint une efficacité de 19,5% dans la production de masse [69]. La structure de cette cellule est représentée sur la figure 4.9, elle est fabriquée avec un substrat en silicium de type N d'une épaisseur d'environ 250 μm, une couche émettrice (dopée), deux couches intrinsèques de passivation et la couche BSF dopée. Ces dernières sont toutes des couches minces a-Si:H déposées par la technique PECVD à environ 200 C. Un revêtement antireflet TCO et des électrodes métalliques sont ensuite déposés pour former la cellule.

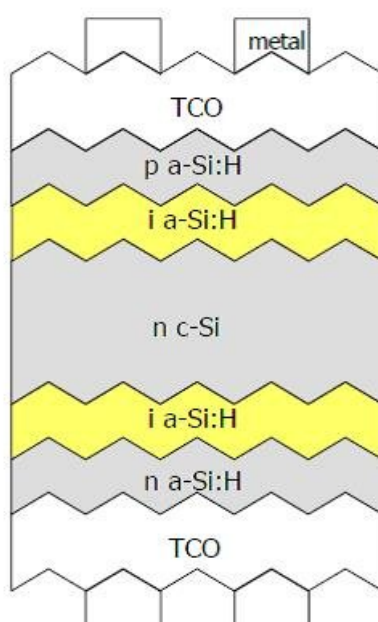


FIGURE 4.9 – Schéma de la structure de la cellule HIT proposée par SANYO

La principale innovation réalisée par cette entreprise réside dans l'insertion d'une

couche de a-Si :H intrinsèque (aussi appelée couche tampon) c'est-à-dire non dopée qui permet une excellente passivation des défauts de surface, responsables du faible rendement des cellules à hétérojonction antérieures [18]. Une faible vitesse de surface de recombinaison de 15 cm / s a été démontrée pour la passivation par a-Si :H intrinsèque par [70]. Plus important encore, la couche a-Si :H intrinsèque peut être insérée entre le c-Si et une couche dopée sans restriction significative du transport des porteurs de charge. En plus des avantages des cellules HET sans couche intrinsèque listés dans la partie 2.2, les cellules HIT permettent d'avoir une faible vitesse de recombinaison surfacique grâce à la passivation.

Après environ deux décennies de progrès réguliers, en 2017, les meilleures cellules solaires HIT ont enregistré un rendement record de 26,7% [14] sur une surface de cellule de 180 cm² par l'entreprise chinoise Kaneka.

En plus, si on améliore la conductivité des couches d'a-Si :H en augmentant le dopage, la densité de défaut est aussi augmentée. En accord avec ces contraintes, il semble donc nécessaire de créer un empilement de couches pour pouvoir combiner les deux mécanismes de passivation et assurer une V_{co} élevée ainsi qu'un haut FF.

4.3.2 Influence de l'addition d'une couche intrinsèque a-Si :H

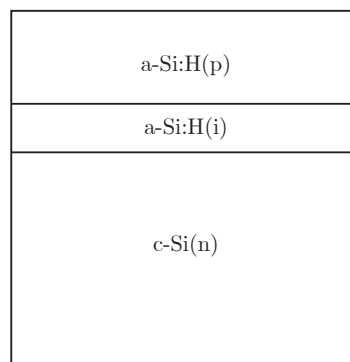


FIGURE 4.10 – Schéma de la structure a-Si :H(p)/a-Si :H(i)/c-Si(n) de la cellule HIT à simuler

Comme il a été expliqué dans la partie 4.2.4, la densité de défauts à l'interface a-Si : H/c-Si est un paramètre très critique quant au rendement de la cellule, car la recombinaison d'interface est souvent le facteur qui va limiter la valeur de la tension en circuit ouvert que la cellule solaire peut atteindre. Il existe une corrélation expérimentalement prouvée entre le dopage de l'émetteur et la densité de défauts en ce que la densité de défauts augmente avec l'augmentation du dopage de l'émetteur [71]. D'autre part, un niveau de dopage d'émetteur élevé est également souhaitable car la tension en circuit ouvert peut être augmentée. Par

conséquent, une couche intrinsèque a-Si :H(i) est nécessaire pour passiver les défauts de surface. Une explication raisonnable de l'avantage de cette couche est que la densité d'états dans le a-Si :H intrinsèque est plus faible que dans le a-Si :H dopé, nous pouvons donc nous attendre à avoir moins de défauts d'interface lorsque le a-Si :H(i) est introduit entre les deux couches c-Si et a-Si :H.

Cette simulation a été réalisée dans le but d'étudier l'influence de la couche intrinsèque a-Si :H(i) ainsi que l'influence de la variation de son épaisseur sur la cellule a-Si :H(p)/c-Si(n). Étant donné que le but de cette couche est de passiver les défauts d'interface, il est donc nécessaire de prendre en considération cette densité de défauts qui a préalablement été fixée à 10^{11}cm^{-2} selon la partie 4.2.4. L'épaisseur de la couche a-Si :H(p) et son dopage sont maintenus à 5nm et $2 \cdot 10^{19} \text{cm}^{-3}$ respectivement. La variation de la tension en circuit ouvert V_{CO} , la densité de court-circuit J_{CC} , le facteur de forme FF et l'efficacité η en fonction de l'épaisseur de la couche intrinsèque a-Si :H(i) sont représentés sur la figure 4.11.

On peut voir sur la figure 4.11 que l'insertion d'une couche intrinsèque mince peut améliorer l'efficacité de la cellule. Avec seulement une couche d'épaisseur de 1 nm, l'efficacité de la cellule a atteint une valeur de 19,78%. Alors que pour la même densité de défauts d'interface, l'efficacité de la cellule était de 18,94%. Il est donc évident de conclure que l'insertion de la couche intrinsèque a-Si :H(i) présente un avantage important pour les cellules à hétérojonctions.

Comme on l'a vu précédemment la longueur de diffusion des porteurs libres est courte dans la couche a-Si :H, la dérive des porteurs par champ électrique est plus efficace que par diffusion. L'insertion d'une couche mince a-Si :H(i) peut augmenter la largeur de la zone de déplétion dans les deux couches a-Si :H et augmenter ainsi la contribution du courant de dérive [72]. Mais cette couche doit être la plus fine possible à cause de sa très mauvaise conductivité.

Cependant, avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche intrinsèque, le facteur de forme et le courant de court-circuit de la cellule diminuent. Lorsque l'épaisseur de la couche intrinsèque dépasse 10 nm, le rendement de conversion de la cellule solaire avec une couche intrinsèque est encore plus faible que la structure sans. Car lorsque l'épaisseur de la couche a-Si :H(i) augmente, les rayonnements qui ont une faible longueur d'onde sont principalement absorbés par la couche de silicium amorphe, où la mobilité du porteur est beaucoup plus faible par rapport au silicium cristallin. Les porteurs de charges photo-générés par ces longueurs d'onde ne peuvent pas être collectés efficacement, ce qui détériore la génération de charges à courte longueur d'onde et le courant de court-circuit. De plus, quand l'épais-

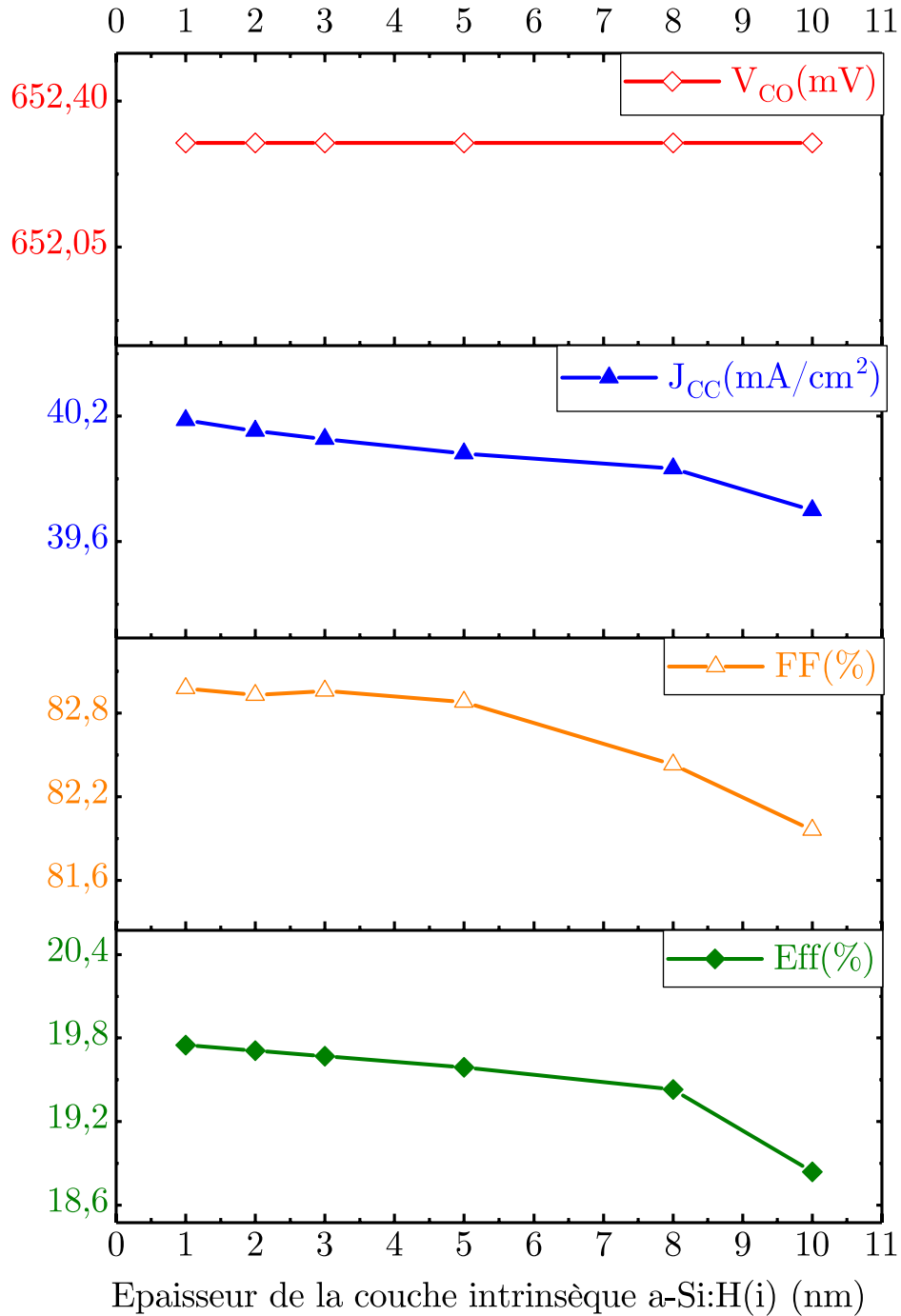


FIGURE 4.11 – Influence de la variation de l'épaisseur de la couche a-Si :H(i) sur les caractéristiques électriques de la cellule a-Si :H(p)/a-Si :H(i)/c-Si(n)

seur de a-Si :H(i) augmente, la résistance série augmente, et la résistance série est un facteur important du facteur de forme, provoquant la diminution du facteur de forme. Par conséquent, l'introduction de la couche intrinsèque doit être utilisée pour réduire l'influence de la densité des états d'interface et passer l'hétérojonction a-Si :H(p)/c-Si(n). Compte tenu

des processus de production, l'épaisseur de la couche tampon intrinsèque est fixée à 3 nm, le rendement de la cellule avec cette couche est de 19,67% soit 0,73% de plus que sans couche.

Conclusion

Durant ce travail, une étude théorique sur le fonctionnement des cellules à hétérojonction en silicium ainsi que les propriétés des matériaux les constituant a été effectuée. Par la suite, le gap optique du silicium amorphe hydrogéné a été calculé par la méthode de Tauc, ce dernier correspond aux valeurs trouvées en littérature et confirme la forte absorption des faibles longueurs d'onde par ce matériau.

Afin d'approfondir la compréhension des cellules à hétérojonction en silicium, on a étudié l'effet des paramètres critiques du silicium amorphe hydrogéné dopé p. L'influence de ces paramètres sur la densité de courant de court-circuit (J_{cc}), la tension de circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque (η) de la cellule est obtenue par simulation de la courbe I(V) grâce au logiciel AFORS-HET. Les résultats de simulation montrent que les paramètres optimaux en terme d'épaisseur et de dopage de l'émetteur sont respectivement de 5 nm et 2.10^{19}cm^{-3} . Les valeurs ont été choisies en prenant en considération les limites technologiques rencontrées lors du procédé de fabrication.

Pour étudier son caractère de passivation, une couche de silicium amorphe hydrogéné non dopée a été introduite entre le silicium cristallin et le silicium amorphe hydrogéné dopé. La densité de défaut à cette interface a été fixée à 10^{11}cm^{-2} pour des raisons de limites technologiques. Pour une épaisseur optimale de 3 nm, le rendement de la cellule avec cette couche de passivation a augmenté de 0,73%. Ce qui confirme son efficacité.

En effet, le potentiel de ce matériau n'a été découvert que récemment, suite à quoi, les publications et les études à son égard se sont vus multipliées. Longuement inexploité à cause de son réseau désordonné et ses innombrables défauts, il a fallu attendre jusqu'en 1975, pour que Spear et Le Comber [32] rapportent que le silicium amorphe hydrogéné pouvait être dopé par l'ajout de bore ou de phosphore. Cette découverte lui a non seulement permis de prendre son essor mais a aussi permis un tournant majeur à tous les matériaux amorphes, qui ont été jusqu'ici négligés.

Ses qualités ont fait de lui un candidat idéal dans le domaine photovoltaïque de par ses propriétés de passivation, d'absorption et de procédé de dépôt peu onéreux, mais aussi

parce qu'il permet de réduire l'épaisseur des substrats en silicium cristallin dont le coût est très élevé. Néanmoins, d'après les résultats obtenus, nous avons conclu que le choix des paramètres de l'émetteur en silicium amorphe hydrogéné doit être rigoureusement étudié. Une variation dans ses paramètres, qui paraît à priori insignifiante, conduit à la création d'une couche morte et à la résiliation de sa fonction en tant qu'émetteur.

Bibliographie

- [1] International Energy Agency IEA. *Electricity final consumption*. 2017 edition, 2017.
- [2] Shahriar SHAFIEE et Erkan TOPA. “When Will fossil fuel reserves be diminished ?” In : *Energy Policy* 37.1 (2009), p. 181-189.
- [3] Nuclear Energy Agency NEA. *URANIUM 2018: RESOURCES, PRODUCTION AND DEMAND*. 2018 edition, 2018.
- [4] OBSERV’ER. “Baromètre du Solaire Photovoltaïque”. In : *Systèmes Solaires* 160 (2004), p. 69-83.
- [5] L. BOBIN, E. HUFFER et H. NIFENECKER. *L’énergie de demain : techniques - environnement - économie*. EDP Sciences, 2005.
- [6] Renewable Energy Policy Network for the 21ST CENTURY REN21. *Annual Reporting on Renewables : Ten years of excellence*. Renewables - Global status report, 2019.
- [7] R. MITALAS et K. R. SILLS. “On the photon diffusion time scale for the sun”. In : *The Astrophysical Journal* 401.2 (1992), p. 759-760.
- [8] Edmond BECQUEREL. “Mémoire sur les effets électriques produits sous l’influence des rayons solaires”. In : *Annalen der Physik und Chemie* 54 (1841), p. 35-42.
- [9] Darryl CHAPIN, Calvin C. FULLER et Gerald PEARSON. “A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power”. In : *Journal of Applied Physics* 25 (1954), p. 676.
- [10] Agence de l’environnement et de la maîtrise de l’énergie ADEME. *Un mix électrique 100% renouvelable ? Analyses et optimisations*. ADEME, 2015.
- [11] Max Born EMIL WOLF. *Principles of Optics, 7th Edition*. Cambridge University Press, 1999.
- [12] M. A. GREEN. *Solar cells : operating principles, technology, and system applications*. Kensington, NSW Univ. of New South Wales, 1982.

- [13] F LASNIER. *Photovoltaic Engineering Handbook, 1st Edition*. Routledge CRC Press, 1990.
- [14] National Center for PHOTOVOLTAICS NREL. *Best research-cell efficiencies*. NREL, 2020.
- [15] A. W. BLAKERS et al. "24% efficient PERL structure silicon solar cells". In : *IEEE Conference on Photovoltaic Specialists* 59 (1990), p. 333-335.
- [16] Aihua Wang JIANHUA ZHAO et M. A. GREEN. "24.5% Efficiency silicon PERT cells on MCZ substrates and 24.7% efficiency PERL cells on FZ substrates". In : *Solar Energy Materials and Solar Cells* 66 (2001), p. 27-36.
- [17] Bouknight JL SCHWARTZ RJ et Worley MS. "The effects of surface potential on surface recombinaison and the performance of silicon solar cells". In : *Proceedings of the IEEE International Electron Devices Meeting* (1978), p. 74-77.
- [18] K. Niemann W. FUHS et J. STUKE. "Heterojunctions of amorphous silicon and silicon single crystals". In : *AIP Conference Proceedings* 20 (1974), p. 345.
- [19] Y. HAMAKAWA et al. "New types of high efficiency solar cells based on a-Si". In : *Applied Physics Letters* 43.7 (1983), p. 644.
- [20] H. MATHIEU. *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 2ème édition*. Masson, 1990.
- [21] A. AUGUSTO et al. "Analysis of the recombination mechanisms of a silicon solar cell with low bandgap-voltage offset". In : *Journal of Applied Physics* 121.20 (2017), p. 205704.
- [22] Sheng S. LI. *Semiconductor Physical Electronics*. Springer, 1993.
- [23] Y. VARSHNI. "Temperature dependence of the energy gap in semiconductors". In : *Physica* 34.1 (1967), p. 149-154.
- [24] S Finkbeiner V ALEX et J WEBER. "Temperature dependence of the indirect energy gap in crystalline silicon". In : *Journal of Applied Physics* 79 (1996), p. 6943.
- [25] M. Severi et S. Solmi G. D. MASETTI. "Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon". In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 30.7 (1983), p. 764-769.
- [26] R. A. STREET. "Doping and the Fermi Energy in Amorphous Silicon". In : *Physical Review Letters* 49 (1982), p. 1187-1190.
- [27] J. H. Alexander H. F. Sterling R. C. CHITTICK. "The preparation and properties of amorphous silicon". In : *Journal of The Electrochemical Society* 116 (1969), p. 77-81.

- [28] R. A. STREET. "Hydrogenated amorphous silicon". In : *Cambridge Solid State Science Series* (1991).
- [29] S.M. SZE et Kwok K. NG. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley Sons, 1981.
- [30] Conde JP. ALPUIM P Chu V. "Doping of amorphous and microcrystalline silicon films deposited at low substrate temperatures by hot-wire chemical vapour deposition". In : *Journal of Vacuum Science and Technology* 19.5 (2001), p. 2328-2334.
- [31] K. FUKUTANI et al. "Band gap tuning of aSi:H from 1.55 eV to 2.10 eV by intentionally promoting structural relaxation". In : *Journal of Non-Crystalline Solids* 227–230.1 (1988), p. 63-67.
- [32] W. SPEAR et P. LECOMBER. "Substitutional Doping of Amorphous Silicon". In : *Solid State Communications* 17.9 (1975), p. 1193-1196.
- [33] R. A. STREET. "Sweep-out measurements of band-tail carriers in a-Si: H". In : *Philosophical Magazine B* 60.2 (1988), p. 213-236.
- [34] W. E. Carlos S. G. GREENBAUM et P. C. TAYLOR. "Local bonding arrangements of boron in doped hydrogenated amorphous silicon". In : *Journal of Applied Physics* 56.6 (1984), p. 1874-1877.
- [35] M. Hicks S. Kumar C. R. WRONSKI S. Lee. "Internal photoemission of holes and the mobility gap of hydrogenated amorphous silicon". In : *Physical Review Letters* 63.13 (1989), p. 1420.
- [36] Jan TAUC. "Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si". In : *Materials Research Bulletin* 3.1 (1967), p. 37-46.
- [37] Lars KORTE, Wilfried van SARK et Francesco ROCA. *Physics and Technology of Amorphous-Crystalline Heterostructure Silicon Solar Cells*. Springer, 2011.
- [38] Sakata et AL. "20.7% highest efficiency large area (100.5 cm²) HITTM cell". In : *Proceedings 28th IEEE Photovoltaic Specialist conference* (2000), p. 7-12.
- [39] Taguchi M et AL. "HIT cells—high-efficiency crystalline Si cells with novel structure". In : *Progress in Photovoltaics* 8.5 (2000), p. 503-513.
- [40] Desrues T. "Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière". Thèse de doct. 2009.
- [41] Hegedus S LUQUE A. *Handbook of photovoltaic science and engineering*. Wiley, 2003.
- [42] Goetzberger ADOLF et Knobloch JOACHIM. *Crystalline Silicon Solar Cells, Optical-Losses*. John Wiley Sons, 1994.

- [43] L.E.Bausa J. SOLE et D.JAQUE. *An Introduction to the Optical Spectroscopy of Inorganic Solids*. John Wiley Sons Ltd, 2005.
- [44] I. P. Herman S. KIM J. E. Spanier. "Optical transmission, photoluminescence and raman scattering of porous SiC prepared from p-type 6H-SiC". In : *Journal of Applied Physics* 39 (2000), p. 5875.
- [45] Jan TAUC. *Amorphous and Liquid semiconductors*. Springer, 1974.
- [46] R. Varache et AL. "Investigation of selective junctions using a newly developed tunnel current model for solar cell applications". In : *Solar Energy Materials and Solar Cells* 141 (2015), p. 14-23.
- [47] T. F. Schulze et AL. "Interplay of amorphous silicon disorder and hydrogen content with interface defects in amorphous/crystalline silicon heterojunctions". In : *Applied Physics Letter* 96 (2010), p. 252102.
- [48] Selberherr S. "Analysis and simulation of semiconductor devices". In : *Springer* (1984).
- [49] M. J. KERRET et A. CUEVAS. "General parameterization of auger recombination in crystalline silicon". In : *Journal of Applied Physics* (2002), p. 2473-2480.
- [50] D. DIOUF. "Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structure interdigitée en face arrière". Thèse de doct. 2010.
- [51] Lin HONGSHENG et Ma LEI. "Analysis of the Design for a-Si/c-Si Heterojunction Structure Solar Cells". In : *Research and Progress of SSE* 23 (2003), p. 470.
- [52] NZONZOLO, Lilonga-Boyenga D. et Sissoko G. "Illumination Level Effects on Macroscopic Parameters of a Bifacial Solar Cell". In : *Energy and Power Engineering* 06 (2014), p. 25-36.
- [53] NZONZOLO, Lilonga-Boyenga D. et Sissoko G. "Illumination Level Effects on Macroscopic Parameters of a Bifacial Solar Cell". In : *Energy and Power Engineering* 06 (2014), p. 25-36.
- [54] R. W. ROSTRON. "Short-circuit current in silicon solar cells—Dependence on cell parameters". In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 19.9 (1972), p. 1024-1028.
- [55] Brian DALE et F. P. SMITH. "Spectral Response of Solar Cells". In : *Journal of Applied Physics* 32 (7 1961), p. 1377-1381.
- [56] H. C. NORBERTO et M. A. ARTURO. "Simulation of hetero-junction silicon solar cells with AMPS-1D". In : *Solar Energy Materials and Solar Cells* 94 (2010), p. 62-67.

- [57] R. A. STREET. *Technology and Applications of Amorphous Silicon*. Springer, 2000.
- [58] Von Roedern B. et al. "Photo-emission studies on "in situ" prepared hydrogenated amorphous silicon films". In : *Philosophical Magazine B* 40 (1979), p. 433.
- [59] Bishop S. G. et Carlos W. E. "Studies of hydrogenated amorphous silicon". In : *Solar Energy Research Insirirure Report. SERISTR* 21 (2393), p. 1984.
- [60] Stefaan De WOLF et Michio KONDO. "Boron-doped a-Si :H/c-Si interface passivation : Degradation mechanism". In : *Applied Physics Letters* 91 (2007), p. 112109.
- [61] Froitzheim A. et al. "Interface recombination in heterojunctions of amorphous and crystalline silicon". In : *Journal of Non-Crystalline Solids* (2002), p. 663-667.
- [62] Stangl R. et al. "Amorphous/crystalline silicon heterojunction solar cells, a simulation study". In : *Proceedings of the 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference* (2001), p. 1383.
- [63] Froitzheim A. et al. "Interface recombination in amorphous/crystalline silicon solar cells, a simulation study". In : *Proceedings of the 29th IEEE Photovoltaic Specialists Conference* (2003), p. 1238-1241.
- [64] Jan KEGEL et al. "IPA-free Texturization of n-type Si Wafers: Correlation of Optical, Electronic and Morphological Surface Properties". In : *Energy Procedia* (2013), p. 833-842.
- [65] S. OLIBET et al. "Properties of interfaces in amorphous/crystalline silicon heterojunctions". In : *physica status solidi (a)* 207 (2010), p. 651-656.
- [66] Hu ZHI-HUA et al. "Preparation and characterization of the stable nc-Si/a-Si:H films". In : *Acta Physica Sinica* (2003), p. 217.
- [67] Tanaka et AL. "Development of New a-Si/c-Si Heterojunction Solar Cells: ACJ-HIT (Artificially Constructed Junction-Heterojunction with Intrinsic Thin-Layer)". In : *Japanese Journal of Applied Physics* (1992), p. 3518-3522.
- [68] Taguchi et AL. "An approach for the higher efficiency in the HIT cells". In : *Proceedings of 31st IEEE Photovoltaic Specialists Conference* (2005), p. 866-871.
- [69] Tanaka et AL. "Development of hit solar cells with more than 21% conversion efficiency and commercialization of highest performance hit modules". In : *Proceedings of 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion* (2003), p. 955-958.

- [70] Wang et AL. “High-throughput approaches to optimization of crystal silicon surface passivation and heterojunction solar cells”. In : *Proceedings of the 31st IEEE Photovoltaic Specialists Conference* (2005), p. 1233-1236.
- [71] Stutzmann M., Biegelsen D. et Street R. “Detailed investigation of doping in hydrogenated amorphous silicon and germanium”. In : *Physical Review B* 35 (1987), p. 5666-5701.
- [72] L. ZHAO et al. “Design optimization of bifacial HIT solar cells on p-type silicon substrates by simulation”. In : *Solar Energy Materials and Solar Cells* 92 (2008), p. 673-681.