

# COMPREHENSION DES PHENOMENES ELECTRIQUES PERMETTANT L'OPTIMISATION DE LA COUCHE ACTIVE DES CELLULES SOLAIRES CZTS.

Wafaa HENNI<sup>1</sup>, Wassila Leila RAHAL\*<sup>1,2</sup>, Djaaffar RACHED<sup>3</sup>, Habib MADANI YSSAAD<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes et de l'Informatique, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.

<sup>2</sup>Laboratoire d'Analyse et d'Application des Rayonnements. U.S.T.O.M.B. Oran.

<sup>3</sup>Laboratoire de Physique des plasmas, Matériaux Conducteurs et leurs Applications. U.S.T.O.M.B. Oran.

<sup>4</sup>Laboratoire RTFM, département de Génie Mécanique, ENPO Maurice Audin, Oran.

\*leila.rahal@univ-mosta.dz

**Résumé** - Dans ce travail, une optimisation par simulation numérique de la couche active des cellules solaires à couches minces CZTS a été effectuée. L'effet de tous les paramètres électriques et géométriques de l'absorbeur sur la performance de la structure n-ZnO/n-CdS/p-CZTS/p-MoS<sub>2</sub> a été étudié. En utilisant le logiciel SCAPS, nous avons pu trouver que le gap optimal de la couche active doit être égal à 1.4eV, qu'il n'est pas nécessaire de dépasser une épaisseur de 1.4µm, et que la densité de dopage est optimale à 5.10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>. Nous avons par la suite essayé de comprendre comment la variation de ces 3 paramètres influe les phénomènes de transport et de collecte des porteurs photogénérés, en traçant et interprétant le champ électrique généré au niveau des différentes jonctions, le taux de recombinaisons ainsi que le rendement quantique de la cellule. A l'issue de ce travail d'optimisation, nous avons pu atteindre un rendement de conversion de 17.4%.

**Mots-clés** : Cellule solaire, CZTS, optimisation, absorbeur, SCAPS-1D

**Abstract** - In this work, an optimization by numerical simulation of the active layer of CZTS thin film solar cells was realized. The effect of all the electrical and geometric parameters of the absorber layer on the performance of the n-ZnO / n-CdS / p-CZTS / p-MoS<sub>2</sub> structure was studied. Using SCAPS-1D software, we have found that the optimal gap of the active layer must be equal to 1.4eV, that it is not necessary to exceed a thickness of 1.4µm, and that the doping density is optimal at 5.10<sup>15</sup> cm<sup>-3</sup>. We then tried to understand how the variation of these 3 parameters influences the transport and collection of photogenerated carriers, by tracing and interpreting the generated electric field at the level of the different junctions, the recombination rate as well as the quantum efficiency of the cell. At the end of this optimization work, we were able to achieve a conversion efficiency of 17.4%.

**Keywords**: Solar cell, CZTS, optimization, absorber, SCAPS-1D.

## 1. Introduction

Les cellules solaires CZTS (Copper Zinc Tin Sulfide) utilisent un absorbeur fait de cuivre, de zinc, d'étain, de soufre et de sélénium, de formule Cu<sub>2</sub>ZnSn(S,Se)<sub>4</sub>. Il n'y a donc ni élément rare ni élément toxique. L'ajout d'un autre semi-conducteur dopé n est bien sûr nécessaire pour former une hétérojonction.

Ce type de cellules solaires, toujours pas commercialisées, connaît un intérêt croissant, du fait que les derniers rendements de conversion obtenus atteignent 12.6% [1-4], alors que le

rendement théorique pouvant être obtenu est estimé à 30%[5][6].

Dans ce qui suit nous allons étudier l'influence des paramètres géométriques, électriques et optiques de la couche active des cellules solaires à hétérojonction (n-ZnO/n-CdS/p-CZTS /p-MoS<sub>2</sub>). Nous allons optimiser la densité de dopage, l'énergie de gap et l'épaisseur de cette couche, et surtout essayer de comprendre quels sont les phénomènes qui rentrent en jeu dans l'amélioration ou la détérioration des performances de la cellule étudiée.

## 2. Présentation de la cellule étudiée

Pour effectuer un travail de simulation, il est nécessaire de bien définir la structure à simuler. Une cellule solaire est constituée d'un ensemble de couches minces semi-conductrices. Dans notre étude, nous utilisons une cellule à base de CZTS ayant la structure (n-ZnO/n-CdS/p-CZTS/p-MoS<sub>2</sub>) où le MoS<sub>2</sub> joue le rôle de contact arrière, le CZTS la couche absorbante, le CdS la couche tampon et le ZnO la couche fenêtre. La figure 1 montre la structure schématique de la cellule solaire étudiée.

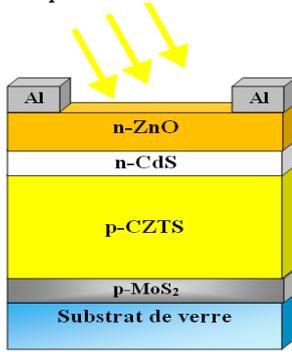


Figure 1. Structure de la cellule solaire étudiée

Les paramètres des matériaux utilisés pour l'élaboration de la cellule solaire simulée sont listés dans le tableau 1 [7][8].

Tableau 1. Paramètres de la cellule étudiée.

Paramètres	CZTS	CdS	ZnO	MoS <sub>2</sub>
Epaisseur (μm)	1.5	0.005	0.08	0.1
Eg (eV)	1.5	2.4	3.3	1.7
χ(eV)	4.5	4.5	4.6	4.2
ε	10	10	9	13,6
N <sub>c</sub> (cm <sup>-3</sup> )	2.2.10 <sup>18</sup>	2.2.10 <sup>18</sup>	2.2.10 <sup>18</sup>	2.2.10 <sup>18</sup>
N <sub>v</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.8.10 <sup>19</sup>	1.8.10 <sup>19</sup>	1.8.10 <sup>19</sup>	1.8.10 <sup>19</sup>
V <sub>th</sub> (cm/s)	1.10 <sup>7</sup>	1.10 <sup>7</sup>	1.10 <sup>7</sup>	1.10 <sup>7</sup>
μ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> /Vs)	100	100	100	100
μ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> /Vs)	25	25	25	25
N <sub>D</sub> (cm <sup>-3</sup> )	0	1.10 <sup>18</sup>	1.10 <sup>18</sup>	0
N <sub>A</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.10 <sup>15</sup>	0	0	1.10 <sup>16</sup>
N <sub>t</sub> (cm <sup>-3</sup> )	5.10 <sup>14</sup>	1.10 <sup>17</sup>	1.10 <sup>17</sup>	1.10 <sup>14</sup>

## 3. Optimisation de la couche absorbante CZTS

### 3.1. Effet de la densité de dopage N<sub>A</sub> de l'absorbeur sur la performance de la cellule

L'effet de dopage de la couche absorbante CZTS sur la performance de la cellule a été étudié en variant la densité de dopage N<sub>A</sub> de 1.10<sup>15</sup> à 1.10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup> [9], tandis que les autres paramètres ont été maintenus constants. La figure 2 montre les différents effets de la variation de la densité de dopage sur les paramètres de performance de la cellule qui sont : la densité de courant de court-circuit (J<sub>sc</sub>), la tension de circuit-ouvert (V<sub>oc</sub>), le facteur de forme (FF) et le rendement (η).

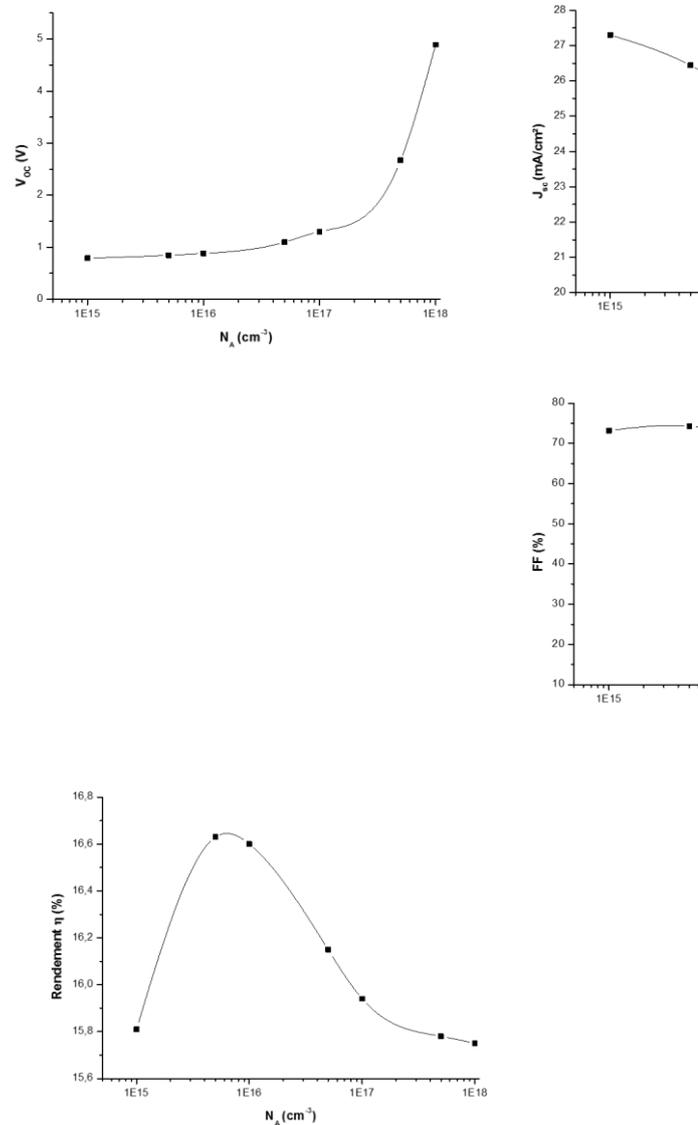
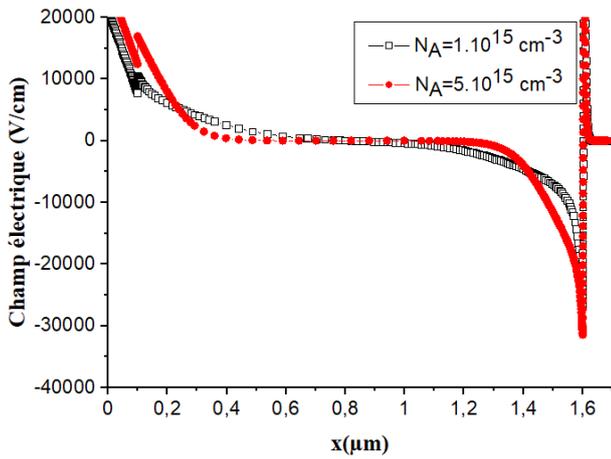
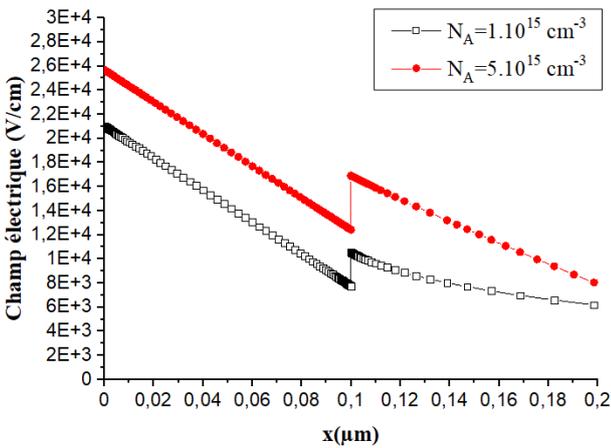


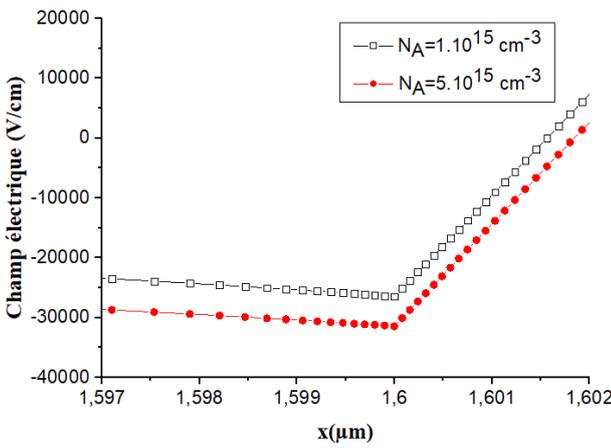
Figure 2. Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité de dopage de l'absorbeur.



(a)



(b)



(c)

Figure 3. Influence de  $N_A$  sur le champ électrique : (a) au niveau de toute la cellule (b) A l'interface  $MoS_2/CZTS$ , (c) A l'interface  $CZTS/CdS$

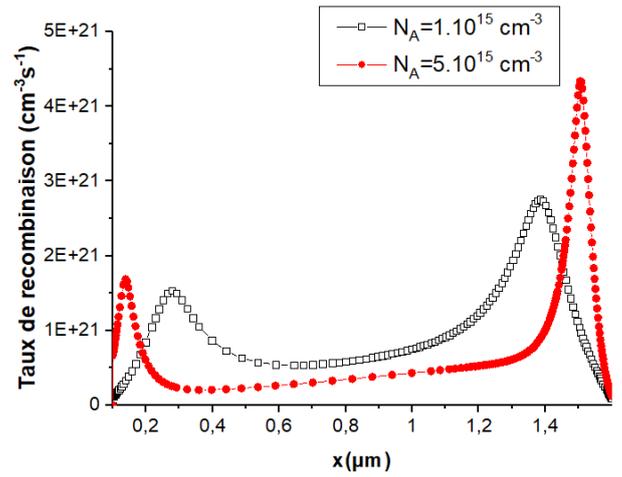
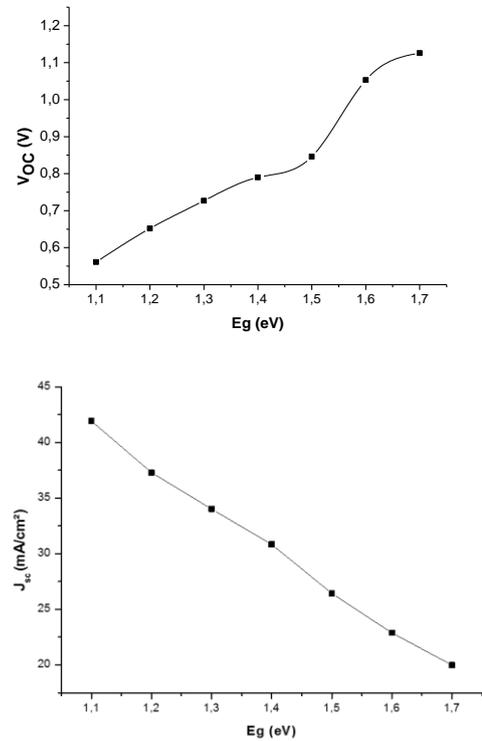


Figure 4. Influence de densité de dopage sur le taux de recombinaison.

### 3.2. Effet de variation de l'Energie de gap de l'absorbeur sur la performance de cellule

Nous avons également évalué dans cette étude l'impact de différentes énergies de gap de la couche absorbante CZTS sur la performance de la cellule. L'énergie de gap a été variée de 1.1 eV à 1.7 eV par pas de 0.1 eV [9]. Nous avons tracé sur la figure 5 la variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'énergie de gap de l'absorbeur.



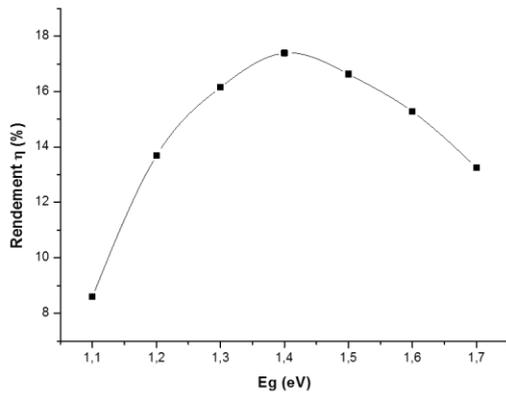
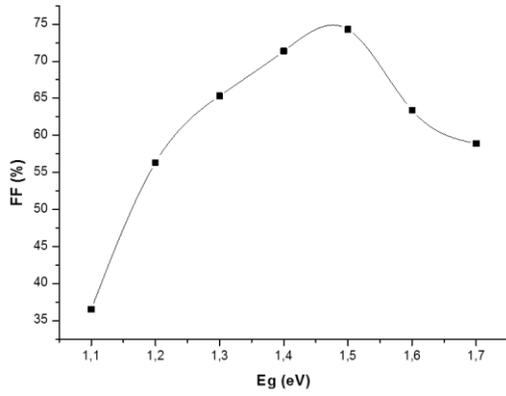


Figure 5. Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'énergie de gap de l'absorbeur.

Nous pouvons remarquer que la tension  $V_{OC}$  croît substantiellement avec l'augmentation du gap alors que le courant  $J_{SC}$  décroît de façon linéaire. L'augmentation du  $V_{OC}$  revient à l'accroissement du champ électrique généré au niveau de la jonction CdS/CZTS dû à l'élargissement du gap (Fig.6). Cette augmentation du champ électrique est favorable à la collecte des porteurs photogénérés, ce qui se traduit par la diminution du taux de recombinaison. En effet, nous avons tracé sur la figure 7 le taux de recombinaison dans la structure étudiée pour deux valeurs du gap (1.1 eV et 1.7 eV) et nous pouvons constater que ce taux diminue au niveau de toute la cellule lorsque le gap augmente.

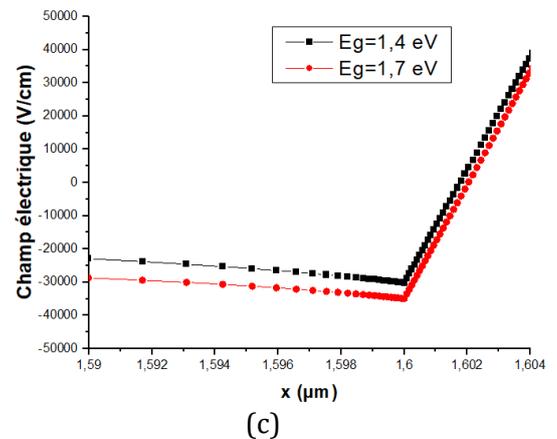
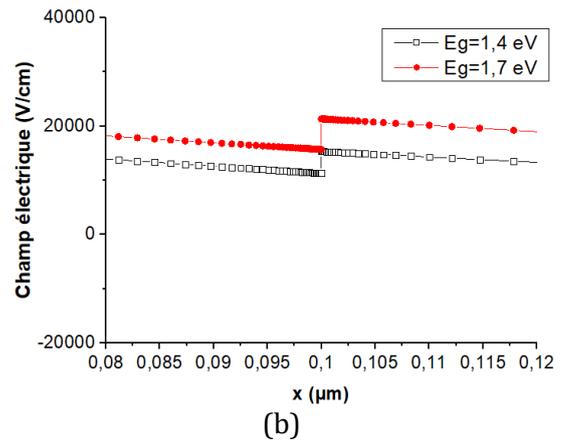
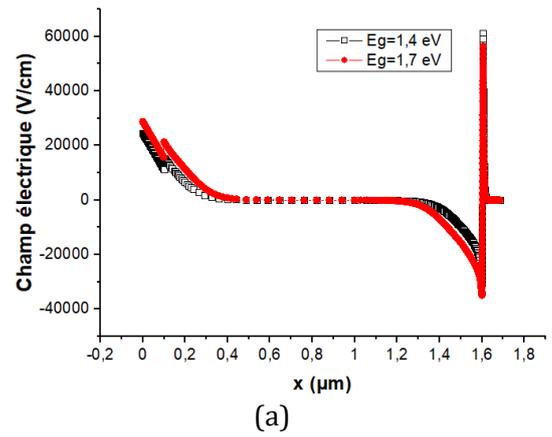


Figure 6. Influence de la variation de l'énergie de gap sur le champ électrique : (a) au niveau de toute la cellule (b) A l'interface  $MoS_2/CZTS$ , (c) A l'interface  $CZTS/CdS$ .

Le FF quant à lui augmente jusqu'à un gap de 1.5 eV puis diminue au-delà de cette valeur, entraînant ainsi une allure similaire du rendement avec une valeur optimale de 17.39% pour une énergie de gap  $E_g = 1.4 eV$ . Cela est dû au fait que les absorbeurs à gap large n'absorbent pas les

photons à grandes longueurs d'onde, ce qui implique une faible quantité de paires électrons-trous photogénérés, donc une faible quantité de porteurs libres, ce qui réduit les valeurs du  $J_{SC}$ . La décroissance du rendement après 1.4 eV est due à la diminution du  $J_{SC}$  et FF.

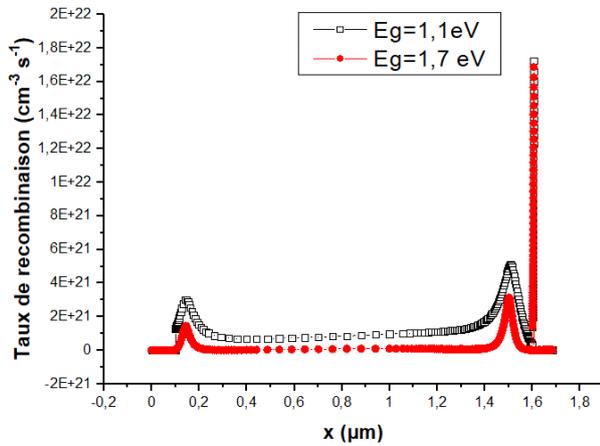


Figure 7. L'influence de variation d'énergie de gap sur le taux de recombinaison.

### 3.3. Effet de l'épaisseur de l'absorbeur sur les paramètres de performance de la cellule

L'épaisseur de la couche CZTS a été variée de 0.1  $\mu\text{m}$  à 5  $\mu\text{m}$  tandis que le gap et la densité de dopage de la même couche restent fixés à leurs valeurs optimales.

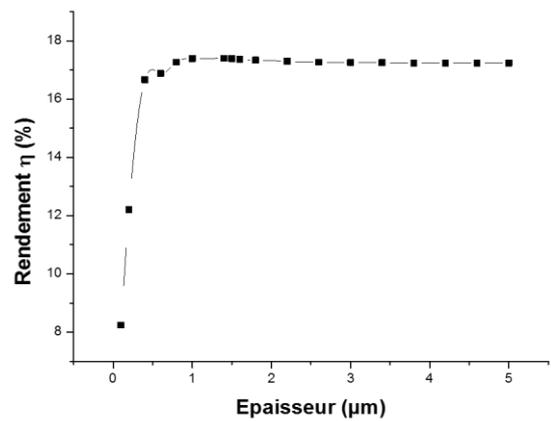
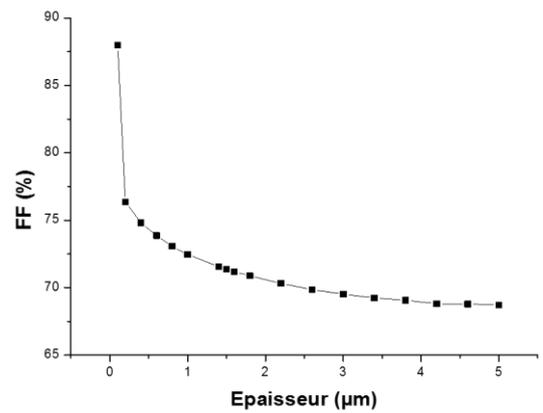
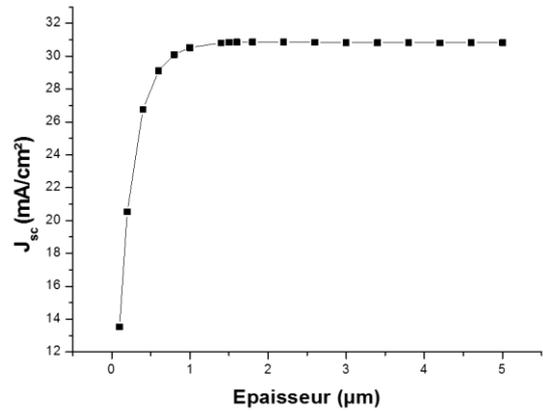
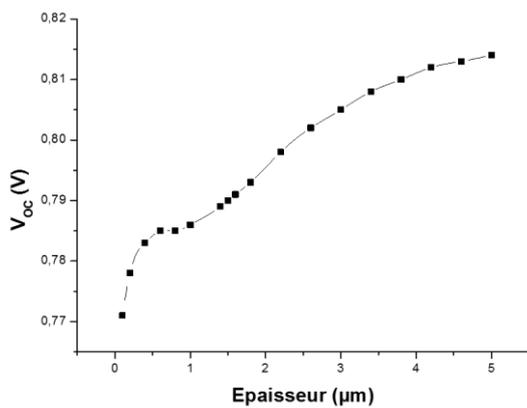


Figure 8. Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de l'absorbeur.

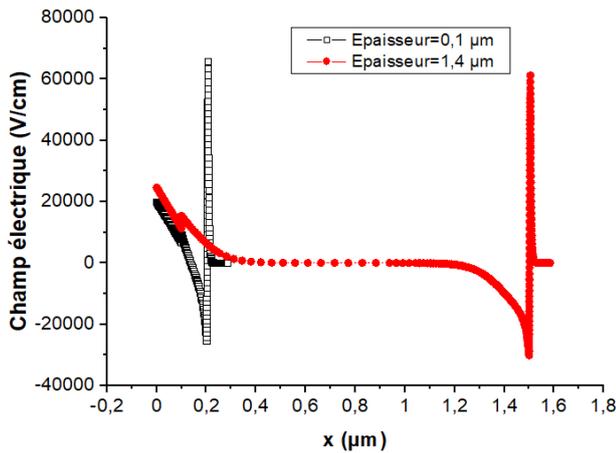


Figure 9. Influence de l'épaisseur de CZTS sur le champ électrique au niveau de toute la cellule.

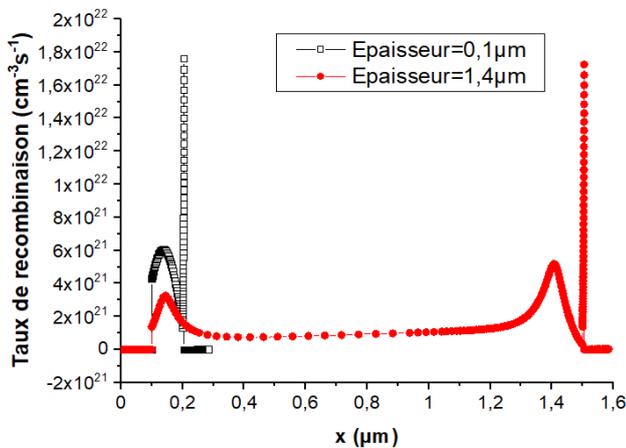


Figure 10. Influence de l'épaisseur du CZTS sur le taux de recombinaison.

Nous pouvons constater sur la figure 8, que la tension en circuit-ouvert augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche active, Alors que le courant de court-circuit augmente dans l'intervalle [0 - 1 μm] puis se stabilise au-delà de 1 μm d'épaisseur. Le rendement suit la même tendance que le courant de court-circuit.

Lorsque l'épaisseur de l'absorbeur augmente, les porteurs photogénérés doivent parcourir des distances plus grandes que leurs longueurs de diffusion, et seront plus susceptibles de se recombiner que d'être collectés. Ceci implique la diminution du rendement énergétique qui passe de 17,4 % pour une épaisseur de 1,4 μm à 17,24% pour une épaisseur de 5 μm. Nous remarquons aussi que le FF décroît car des épaisseurs plus larges introduisent des composants résistifs qui peuvent affecter le facteur de forme (FF), et par conséquent le rendement [10].

Nous pouvons constater clairement, à partir de la figure 11, que lorsque l'épaisseur augmente, le rendement quantique est amélioré et atteint son maximum pour 1,4 μm d'épaisseur.

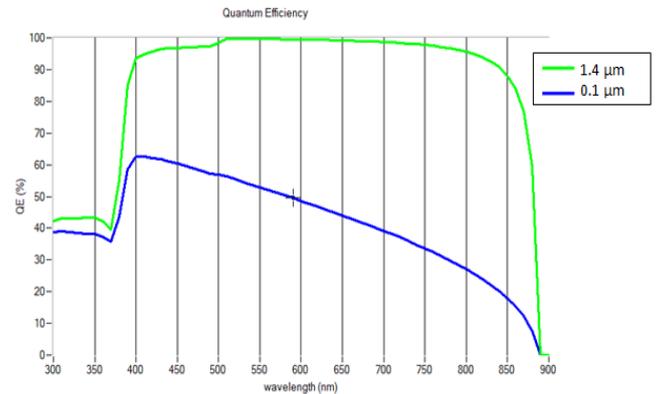


Figure 11. Rendement quantique pour deux épaisseurs de l'absorbeur CZTS (Bleu pour 0,1 μm et Vert pour 1,4 μm)

Il n'est donc pas nécessaire de produire des cellules solaires CZTS avec une épaisseur de l'absorbeur supérieure à 1,4 μm, car le rendement ne sera pas amélioré au-delà de cette valeur.

#### 4. Conclusions

Dans le travail de simulation réalisé, nous nous sommes intéressés aux cellules solaires à base de chalcogénures de type CZTS. Nous avons étudié l'impact de l'absorbeur CZTS par le logiciel SCAPS, sur la performance de la cellule ZnO/CdS/CZTS étudiée. A cet effet, nous avons simulé les paramètres de sortie de la cellule solaire en essayant de trouver les paramètres optimaux. Nous avons dans ce but étudié l'effet de l'énergie du gap, de la densité de dopage et de l'épaisseur de l'absorbeur sur la caractéristique I-V de la cellule. Cette étude nous a permis d'obtenir un rendement de 17,4% pour une énergie de gap de 1,4 eV, une épaisseur de 1,4 μm, et une densité de dopage de  $5 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ .

#### Remerciements

Nous remercions sincèrement le Professeur Marc Burgelman de l'université de Gent-Belgique de nous avoir fourni le logiciel SCAPS-1D.

## Références

- [1] M.P. Suryawanshi, G.L. Agawane, S.M. Bhosale, S.W. Shin, P.S. Patil, J.H. Kim, A.V. Moholkar, CZTS based thin film solar cells: a status review. *Mater. Technol.* 28, Vol. (1-2) (2013)98-109.
- [2]W. Wang, M.T. Winkler, O. Gunawan, T. Gokmen, T.K Todorov, Y. Zhu, DB. Mitzi, Device characteristics of CZTSSe thin-film solar cells with 12.6% efficiency. *Adv. Energy Mater*, Vol. 4(7), 1301465 (2014).
- [3] T. K. Ito Nakazawa,Electrical and Optical Properties of Stannite-Type Quaternary Semiconductor Thin Films, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 27, Part 1, No. 11 (1988)2094 - 2097.
- [4] K. Hironori, S. Kotoe, W. Tsukasa, S. Hiroyuki, K. Tomomi, M. Shinsuke, Development of thin film solar cell based on Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> thin films. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, Vol. 65(1-4) (2001)141-148.
- [5] J.H. Nkuissi Tchognia« Performances des cellules solaires à base de Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> (CZTS):une analyse par simulations numériques via le simulateur SCAPS»*Afrique Science*, Vol.11, N°4 (2015).
- [6]M.D. Wanda, S. Ouédraogo, F. Tchofo, F. Zougmoré, J.M.B. Ndjaka, Numerical investigations and analysis of Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> based solar cells by SCAPS-1D. *Int. J. Photoenergy*, Vol. 2016, 2152018 (2016)
- [7] M. Burgelmann, P. Nollet and S. Degrave, *Thin Solid Films*, Vol. 361-362,527-32. (2000)
- [8] S. Alphousseyni, Etude et élaboration par Close-Spaced Vapor Transport (CSVT), d'absorbteurs Cu<sub>2</sub>ZnSnS<sub>4</sub> en couches minces polycristallines destinées à la réalisation de photopiles à faible coût. *Matériaux*. Thèse de doctorat, Université de Perpignan, 2016.
- [9]R. Mahbub, Md. Saidul Islam, F. Anwar, S. Sarwar Satter, S. Mahmud Ullah. Simulation of CZTS thin film solar cell for different buffer layers for high efficiency performance.*South Asian Journal of Engineering and Technology* Vol 2, No.52(2016)1-10.
- [10] F. Belarbi, W.L. Rahal, D. Rached, S. benghabrit, M. Adnane, A comparative study of different buffer layers for CZTS solar cell using Scaps-1D simulation program, *Optik*, Vol. 216, 164743 (2020).