



Réf :/UAMOB/FSE/DEP.../2026

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES EN VUE DE L'OBTENTION DU DIPLÔME MASTER

Domaine : Sciences de la Matière

Filière : Physique

Spécialité : Physique Énergétique et Énergies Renouvelables

Présenté par

DOURKAM Djoumana

Thème

***ETUDE ET OPTIMISATION D'UNE
CELLULE SOLAIRE À BASE DE CZTSSe***

Soutenue publiquement le : 21 / 06 / 2026

Devant le jury composé de :

Mr MERRICHE A.Errzak
Mme BACHI Halima
Mme BOUDAUD Chahrazad
Mr ZITOUNE Hachemi
Mme BOUGUERRA Karima

Président
Promotrice
co- promotrice
Examineur
Examineur

Univ. Bouira
Univ. Bouira
Univ. Tlemcen
Univ. Bouira
Univ. Bouira

Année Universitaire : 2025/2026

Dédicaces

À vous qui avez toujours crû en moi ,
aucun mot ne peut exprimer ma gratitude et mon amour.

A vous papa et mama je dédie ce travail

Remerciement

Avant tout, je remercie Dieu le Tout-Puissant de m'avoir donné la force, la patience et le courage d'accomplir ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mes encadrantes, **Mme BACHI Halima** et **Mme BOUDAUD Chahrazad**, pour leur confiance, leur grande disponibilité, leurs précieux conseils et leur rigueur scientifique qui m'ont guidé tout au long de la réalisation de ce mémoire.

Mes remerciements s'adressent également aux membres du jury qui ont honoré ce travail en acceptant de l'évaluer, ainsi qu'à l'ensemble des enseignants et du personnel du département de physique pour la qualité de leur formation et leur bienveillance.

Je saisis cette occasion pour saluer chaleureusement toute l'équipe du laboratoire de recherche de notre faculté pour leur accueil, leur soutien technique et les excellentes conditions de travail qu'ils m'ont offertes.

Sur un plan plus personnel, les mots me manquent pour exprimer ma reconnaissance infinie envers ma chère famille, et en particulier mes parents, pour leur amour inconditionnel, leurs sacrifices et leur soutien indéfectible.

Que mes amis, camarades de promotion et collègues trouvent ici l'expression de ma sincère amitié pour leur présence et leurs encouragements constants.

Enfin, je tiens à remercier du fond du cœur toutes les personnes qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de ce projet de fin d'études.

Table des matières

Introduction	1
Chapitre	3
1 Généralités sur l'énergie solaire et les cellules photovoltaïques	3
1.1 Énergie solaire	3
1.1.1 Spectre solaire	4
1.1.2 L'air masse	4
1.2 Semi-conducteurs pour les applications photovoltaïques	5
1.2.1 La Jonction p-n	6
1.3 Cellules photovoltaïques	7
1.3.1 Description de la structure d'une cellule solaire	7
1.3.2 Processus de conversion énergétique au sein d'une cellule photovoltaïque	8
1.4 Grandeurs électriques caractéristiques d'une cellule photovoltaïque	10
1.5 Technologies et générations des cellules photovoltaïques	13
1.5.1 Première génération : silicium cristallin	13
1.5.2 Deuxième génération : technologies à couches minces	13
1.5.3 Troisième génération : technologies photovoltaïques émergentes . .	14
Chapitre 2	17
2 Cellules solaires à base de CZTSSe	17
2.1 Propriétés optoélectroniques du CZTSSe	17
2.1.1 Propriétés cristallines	18
2.1.2 Bande interdite E_g	19
2.1.3 Coefficient d'absorption	20
2.1.4 Dopage	21
2.2 Structure des cellules solaires $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$	22
2.2.1 Substrat	23

2.2.2	Contact arrière	23
2.2.3	Absorbeur	23
2.2.4	Couche tampon	24
2.2.5	Fenêtre optique	24
2.3	État de l'art des performances des cellules solaires à base de CZTSSe . .	25
2.4	Principaux défis limitant les performances des cellules CZTSSe	26
2.4.1	Déficit de tension en circuit ouvert et phénomène de queue de bandes	26
2.4.2	Impact des défauts intrinsèques et des phases secondaires sur les performances	27
Chapitre 3		29
3	Simulation numérique par SCAPS et discussion des résultats	29
3.1	Logiciel de simulation SCAPS-1D	29
3.1.1	Équation de poisson	30
3.1.2	Équations de continuité	31
3.1.3	Équations de transport	31
3.2	Architecture de la cellule solaire CZTSSe simulée	32
3.3	Paramètres des différents matériaux de la cellule solaire CZTSSe simulée	33
3.4	Optimisation des paramètres de la cellule solaire CZTSSe	34
3.4.1	Optimisation du dopage de la couche absorbante CZTSSe	35
3.4.2	Optimisation de l'épaisseur de la couche absorbante CZTSSe	36
3.4.3	Optimisation du dopage de la couche tampon CdS	37
3.4.4	Optimisation de l'épaisseur de la couche tampon CdS	38
3.4.5	Conclusion	39
Conclusion Générale		40
Bibliographie		42

Introduction

Face à l'augmentation continue de la demande énergétique mondiale et à l'épuisement progressif des ressources fossiles, le développement des énergies renouvelables constitue aujourd'hui une priorité majeure. Parmi celles-ci, l'énergie solaire occupe une place importante en raison de son abondance, de sa disponibilité et de son faible impact environnemental [1]. Les cellules photovoltaïques permettent de convertir le rayonnement solaire en énergie électrique. Le développement considérable de cette technologie est principalement attribué aux progrès réalisés dans les matériaux semi-conducteurs et à l'optimisation des techniques de fabrication.

Les cellules solaires à couches minces, dans le champ des technologies photovoltaïques, suscitent un intérêt croissant en raison de leur potentiel de réduction des coûts de production et de leur efficacité prometteuse [2, 3]. Parmi les matériaux absorbants étudiés, le composé CZTSSe ($\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$) apparaît comme un candidat particulièrement attractif. En effet, ce matériau se distingue par l'abondance et la faible toxicité des éléments chimiques qui le composent, ainsi que par ses propriétés optoélectroniques favorables à l'absorption du spectre solaire. Grâce à sa bande interdite ajustable et à son coefficient d'absorption élevé, le CZTSSe représente une alternative prometteuse aux matériaux conventionnels tels que le CIGS et le CdTe.

Cependant, malgré les progrès réalisés [4], les performances des cellules photovoltaïques élaborées à partir du matériau **CZTSSe** restent limitées par plusieurs défis technologiques et physiques, notamment le déficit de tension en circuit ouvert, la présence de défauts intrinsèques,

les phénomènes de queue de bandes ainsi que la formation de phases secondaires susceptibles d'affecter les propriétés électroniques du matériau et de réduire les performances globales du dispositif photovoltaïque [5]. Dans ce contexte, l'optimisation des paramètres de la cellule devient une étape essentielle afin d'améliorer son rendement et ses caractéristiques électriques.

Ce mémoire est consacré à l'étude et à l'optimisation d'une cellule solaire à base de CZTSSe à travers une approche de simulation numérique utilisant le logiciel SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator). L'objectif principal est d'analyser l'influence de différents paramètres physiques et technologiques sur les performances photovoltaïques de la cellule, notamment la densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η), dans le but de proposer une structure optimisée offrant de meilleures performances.

Pour atteindre cet objectif, ce mémoire est organisé en trois chapitres. Le premier chapitre présente des généralités sur l'énergie solaire et les cellules photovoltaïques. Il aborde les notions fondamentales liées au rayonnement solaire, notamment le spectre solaire et la masse d'air, ainsi que les bases des semi-conducteurs utilisés dans les applications photovoltaïques, en particulier la jonction p-n. Ce chapitre décrit également la structure et le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, les principaux paramètres électriques caractérisant leurs performances, tels que J_{sc} , V_{oc} , FF et le rendement (η), ainsi qu'un aperçu des différentes technologies et générations de cellules solaires, allant du silicium cristallin aux technologies photovoltaïques émergentes.

Le deuxième chapitre est consacré aux cellules solaires à base de CZTSSe. Dans ce chapitre, nous présentons les propriétés optoélectroniques de ce matériau, notamment ses propriétés cristallines, sa bande interdite, son coefficient d'absorption et les mécanismes de dopage. Une attention particulière est également portée à la structure de la cellule solaire à base de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$, en détaillant le rôle des différentes couches constituant le dispositif telles que le substrat, le contact arrière, la couche absorbante, la couche tampon et la fenêtre optique. Ce chapitre aborde également un état de l'art des performances des cellules solaires CZTSSe ainsi que les principaux défis limitant leur efficacité, en particulier le déficit de tension en circuit ouvert, le phénomène de queue de bandes, les défauts intrinsèques et l'influence des phases secondaires.

Enfin, le troisième chapitre est consacré à la présentation et à l'analyse des résultats obtenus par simulation numérique à l'aide du logiciel SCAPS-1D. Différents paramètres influençant les performances de la cellule solaire seront étudiés afin d'évaluer leur impact sur les caractéristiques électriques et de déterminer les conditions optimales permettant d'améliorer le rendement du dispositif photovoltaïque.

Chapitre 1

Généralités sur l'énergie solaire et les cellules photovoltaïques

Face à la demande croissante en énergie et aux préoccupations environnementales, l'exploitation de l'énergie solaire par conversion photovoltaïque suscite un intérêt grandissant. Cette technologie repose sur l'effet photovoltaïque, qui permet la conversion directe de l'énergie lumineuse en énergie électrique au sein de matériaux semi-conducteurs. Ce chapitre présente les principes fondamentaux de la conversion photovoltaïque, le fonctionnement des cellules solaires ainsi qu'un aperçu des principales technologies photovoltaïques développées à ce jour.

1.1 Énergie solaire

L'énergie solaire est l'énergie émise par le soleil sous forme de rayonnement électromagnétique et reçue à la surface de la Terre sous forme de lumière et de chaleur. Elle constitue l'une des principales sources d'énergie renouvelable en raison de son abondance, de sa disponibilité et de son faible impact environnemental. Cette énergie peut être exploitée à l'aide de différentes technologies telles que les systèmes photovoltaïques pour la production d'électricité et les systèmes solaires thermiques pour la production de la chaleur. L'énergie solaire joue aujourd'hui un rôle important dans la transition énergétique grâce à son caractère propre et inépuisable [6].

L'étude de l'énergie solaire nécessite la compréhension du rayonnement solaire reçu par la Terre, notamment sa répartition spectrale ainsi que l'influence de l'atmosphère terrestre sur ce rayonnement. Dans ce contexte, les notions de spectre solaire et de masse d'air (Air Mass, AM) sont particulièrement importantes.

1.1.1 Spectre solaire

Chaque année, la Terre reçoit près de 120 000 TW d'énergie solaire, soit une quantité environ 104 fois supérieure à la demande énergétique mondiale actuelle. Les photons qui atteignent la surface terrestre sous forme de rayonnement solaire sont répartis sur différentes longueurs d'onde et leur distribution dépend de plusieurs paramètres, tels que la latitude, l'heure de la journée et les conditions atmosphériques. Cette répartition, appelée spectre solaire, est illustrée à la Figure (1.1.1)

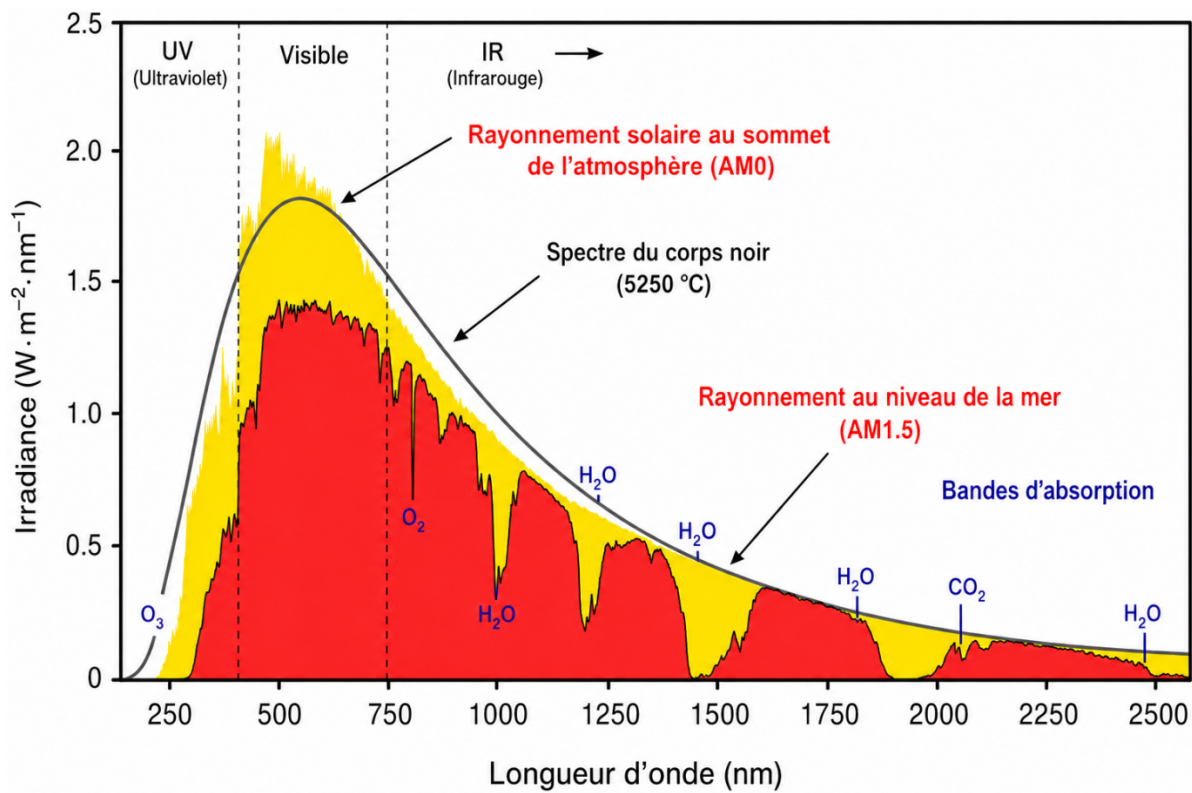


FIGURE 1.1.1 – Spectre du rayonnement solaire exprimé en irradiance spectrale pour les conditions AM0 et AM1.5 [7].

Le spectre solaire représente la puissance incidente du rayonnement solaire par unité de surface et par unité de longueur d'onde ($Wm^{-2}.nm^{-1}$), également appelée **irradiance spectrale**, pour une largeur de bande de $1\text{ nm}(\delta\lambda)$ [7].

1.1.2 L'air masse

L'intensité du rayonnement solaire arrivant perpendiculairement à l'atmosphère terrestre est définie par la constante solaire, dont la valeur est d'environ $1,4kW/m^2$ dans l'espace. Lors de sa traversée vers la surface terrestre, cette intensité est réduite à envi-

ron $1kW/m^2$ en raison des phénomènes d'absorption et de réflexion atmosphériques, un concept modélisé par la notion de **masse d'air** (AM). L'indice AM0 caractérise ainsi le rayonnement hors atmosphère, tandis que l'indice AM1 correspond à un soleil au zénith frappant directement la surface. A un angle d'élévation de $48,2^\circ$, on utilise l'appellation AM1.5, représentant une intensité plus faible due à une couche atmosphérique plus épaisse à traverser. De manière générale, cet indice AM se calcule par la relation $AM \approx 1/\sin(A)$, où A désigne l'angle formé entre les rayons incidents et l'horizontale terrestre [8].

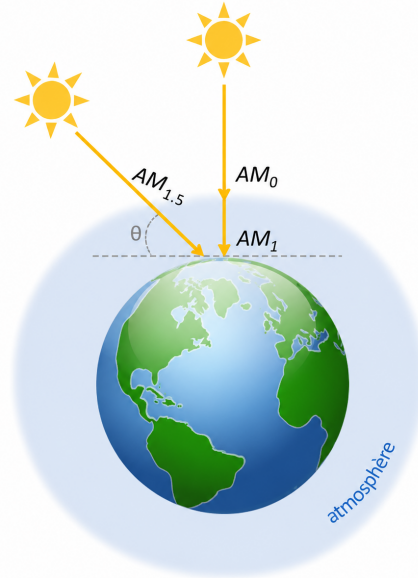


FIGURE 1.1.2 – Définition du nombre d'air masse (AM) [9].

1.2 Semi-conducteurs pour les applications photovoltaïques

Les semi-conducteurs constituent une classe de matériaux caractérisés par une conductivité électrique située entre celle des matériaux conducteurs et celle des matériaux isolants. Leurs propriétés électroniques peuvent être modifiées par l'introduction contrôlée d'impuretés, appelée dopage. Selon la nature des impuretés introduites, on distingue les dopants donneurs, qui fournissent des électrons libres et conduisent à un semi-conducteur de type n, et les dopants accepteurs, qui créent des trous majoritaires et conduisent à un semi-conducteur de type p. Les semi-conducteurs ainsi dopés sont qualifiés d'extrinsèques [10, 11].

Dans un semi-conducteur parfait et à température non nulle, des électrons peuvent

passer de la bande de valence vers la bande de conduction en laissant des trous dans la bande de valence. Les concentrations des électrons et des trous sont alors égales à la concentration intrinsèque n_i . Le matériau est dit dans ce cas intrinsèque :

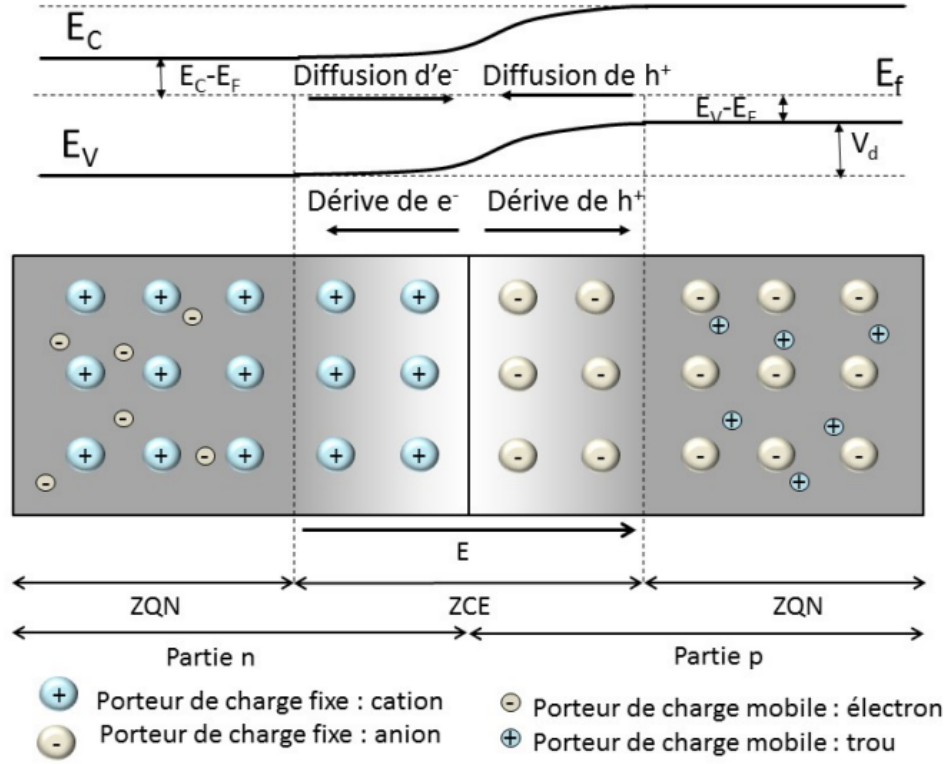
$$pn = n_i^2 \quad (1.1)$$

La structure des bandes d'énergie d'un semi-conducteur est un paramètre essentiel dans les phénomènes d'absorption et d'émission de lumière. L'écart énergétique entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence est appelé bande interdite ou gap énergétique E_g . Lorsque ces deux extrema correspondent à la même valeur du vecteur d'onde k , le semi-conducteur possède un gap direct. Les transitions électroniques entre les deux bandes peuvent alors s'effectuer avec émission ou absorption directe d'un photon d'énergie voisin de E_g . Plus cette énergie est élevée, plus la longueur d'onde associée est courte. A l'inverse, dans un semi-conducteur à gap indirect, les extrema des bandes de conduction et de valence ne sont pas situés au même vecteur d'onde. Les transitions électroniques ne peuvent donc pas se produire uniquement par échange de photons et nécessitent également l'intervention d'un photon pour compenser la variation de quantité de mouvement [10].

1.2.1 La Jonction p-n

La jonction **p-n** est au cœur du fonctionnement des cellules photovoltaïques. Elle est obtenue par la mise en contact de deux semi-conducteurs dopés différemment : un matériau de type **n**, dans lequel les électrons sont les porteurs majoritaires, et un matériau de type **p**, où les trous sont majoritaires. Lorsque ces deux régions sont mises en contact, les électrons diffusent vers la région **p** tandis que les trous diffusent vers la région **n** sous l'effet du gradient de concentration.

Cette diffusion entraîne l'apparition, au voisinage de l'interface, d'une région dépourvue de porteurs mobiles appelée Zone de Charge d'Espace (**ZCE**) ou zone de déplétion. La présence de charges fixes dans cette région crée un champ électrique interne et une différence de potentiel V , qui s'opposent au phénomène de diffusion en établissant un courant de dérive. Dans une cellule photovoltaïque, des contacts métalliques sont ajoutés afin de collecter les charges photogénérées par l'absorption des photons. En dehors de la **ZCE**, les régions restent électriquement neutres et sont appelées Zones Quasi-Neutres (**ZQN**), où le transport des porteurs se fait principalement par diffusion. Pour être collectés efficacement, les porteurs générés doivent atteindre la **ZCE** avant leur recombinaison, ce qui dépend notamment de leur longueur de diffusion et de leur durée de vie [12].

FIGURE 1.2.1 – Schéma d'une jonction **p-n** [12].

1.3 Cellules photovoltaïques

1.3.1 Description de la structure d'une cellule solaire

Bien que différentes architectures de cellules photovoltaïques aient été développées au fil du temps, elles reposent toutes sur un ensemble d'éléments fondamentaux assurant la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique. Les premières cellules solaires au silicium cristallin, réalisées dans les années 1950, étaient constituées essentiellement d'une jonction diffusée et de contacts ohmiques. Avec l'évolution des technologies et la recherche d'un meilleur rendement, leur structure s'est progressivement enrichie afin de réduire les pertes optiques et électriques. La cellule photovoltaïque moderne repose ainsi sur une jonction **P-N**, formée de l'émetteur et de la base, qui constitue le cœur du dispositif en assurant la génération et la séparation des porteurs de charge. Elle intègre également une couche antireflet destinée à minimiser les pertes par réflexion, des contacts métalliques permettant la collecte du courant électrique, ainsi qu'une couche de protection transparente garantissant sa durabilité. La figure (1.3.1) présente la structure générale d'une cellule photovoltaïque à contacts sur les deux faces et les principaux constituants qui la composent [8, 13, 14].

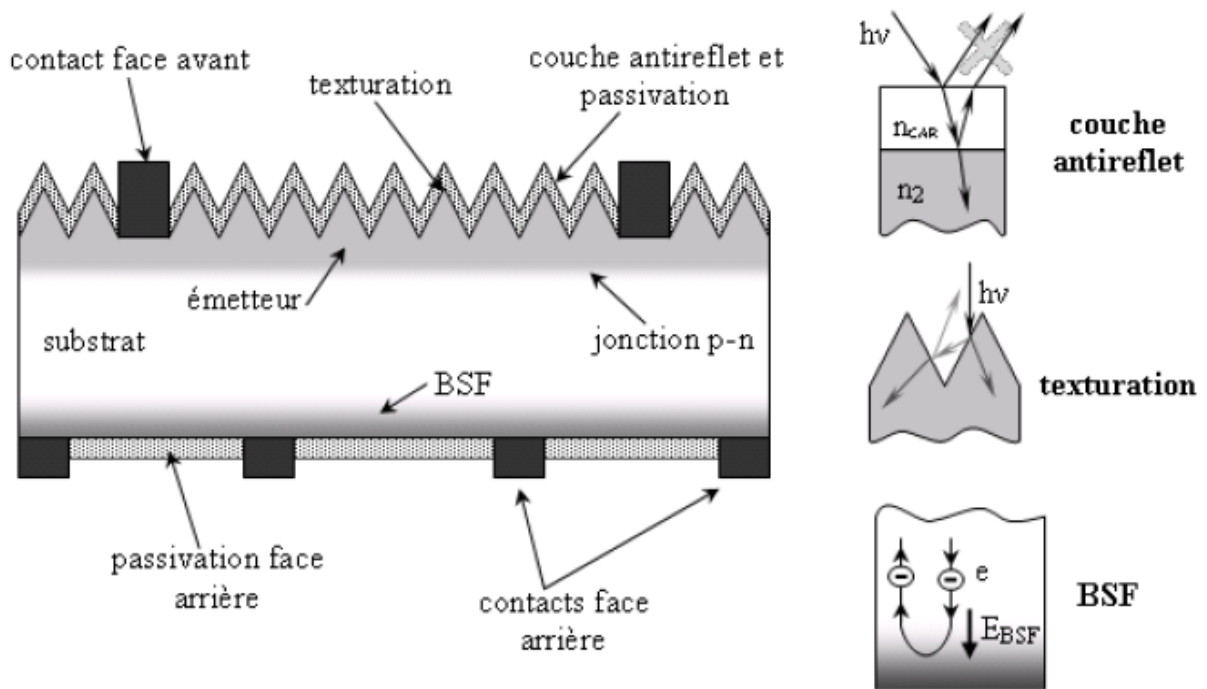


FIGURE 1.3.1 – Compositions d'une cellule photovoltaïque [13].

1.3.2 Processus de conversion énergétique au sein d'une cellule photovoltaïque

1.3.2.1 Effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque est le phénomène qui associe l'absorption du rayonnement solaire à la génération d'un champ électrique interne, créant ainsi une barrière de potentiel au sein d'une jonction. Ce champ permet la séparation des porteurs de charge générés avant leur recombinaison. Ce phénomène a été observé pour la première fois par le physicien français **Alexandre Edmond Becquerel** en 1839, lorsqu'il mit en évidence que certains matériaux produisent une faible quantité d'électricité lorsqu'ils sont exposés à la lumière. Albert Einstein expliqua ensuite l'effet photovoltaïque en 1912, ce qui lui valut le prix Nobel de physique en 1921. Cependant, ce n'est qu'à partir des années 1950 que son application pratique a réellement commencé. En 1954, D. M. Chapin, C. S. Fuller et G. L. Pearson développèrent la première cellule solaire en silicium, avec un rendement d'environ 6 %, dans les laboratoires Bell. Depuis cette date, la recherche s'est intensifiée afin d'améliorer les performances des cellules photovoltaïques en optimisant les matériaux et les méthodes de fabrication [15].

Le processus de conversion d'énergie s'appuie sur trois mécanismes fondamentaux : l'absorption, la conversion et la collecte. [16].

- Le matériau du dispositif absorbe les photons dont l'énergie est supérieure à la bande interdite (gap).
- L'absorption des photons entraîne la conversion de leur énergie en charges électriques libres, correspondant à la génération de paires électron-trou au sein du matériau semi-conducteur
- La collecte des porteurs de charge et leur extraction vers le circuit électrique externe du dispositif.

1.3.2.2 Principe de fonctionnement

La cellule solaire est un composant semi-conducteur capable de convertir directement l'énergie du rayonnement solaire en énergie électrique grâce à l'effet photovoltaïque. Lorsque les photons incidents possèdent une énergie supérieure à la bande interdite du matériau $h\nu > E_g$, ils génèrent des paires électron-trou au sein de la structure. Le champ électrique interne de la jonction p-n assure ensuite la séparation et la collecte de ces porteurs de charge, ce qui permet l'apparition d'une tension et d'un courant aux bornes de la cellule. Le principe de fonctionnement de ce dispositif est représenté sur la figure (1.3.1). Les photons incidents créent des porteurs libres dans chacune des régions (1), (2) et (3) dont le comportement diffère suivant le lieu de leur création. Les photo-porteurs minoritaires diffusent dans les zones électriquement neutres P et N. Ceux qui atteignent la région de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces photo-porteurs contribuent donc au courant de diffusion, en créant un photo-courant de diffusion. Dans la zone de charge d'espace (**ZCE**), les paires électron-trou, créées par les photons, sont dissociées par le champ électrique : l'électron est propulsé vers la région de type **N** et le trou vers la région de type **P**. Ces porteurs donnent naissance à un photo-courant de génération [15].

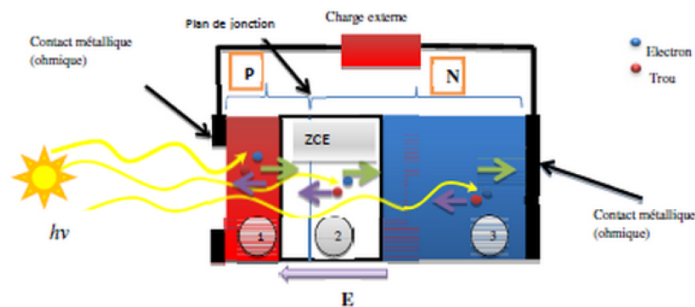


FIGURE 1.3.2 – Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.

1.4 Grandeurs électriques caractéristiques d'une cellule photovoltaïque

L'évaluation des performances d'une cellule photovoltaïque s'effectue principalement à partir de ses caractéristiques courant-tension (**J-V**). Sans illumination, une cellule **PV** se comporte de manière analogue à une diode classique, suivant la caractéristique représentée en pointillé sur la Figure (1.4.1a). La densité de courant traversant une diode idéale dans l'obscurité, J_{obs} , est donnée par :

$$J_{obs} = J_0 \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) \quad (1.2)$$

Où J_0 est la densité de courant de saturation dans l'obscurité, V la tension appliquée aux bornes de la diode, k_B la constante de Boltzmann et T la température absolue.

Lorsque la cellule est soumise à un éclairage, les porteurs photo-générés produisent un photo-courant qui se superpose au courant de diode, provoquant ainsi une translation de la courbe **J-V** suivant l'axe des densités de courant (Fig : 1.4.1b) [17]. Les principaux paramètres électriques de la cellule, tels que 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, sont déterminés à partir de cette caractéristique.

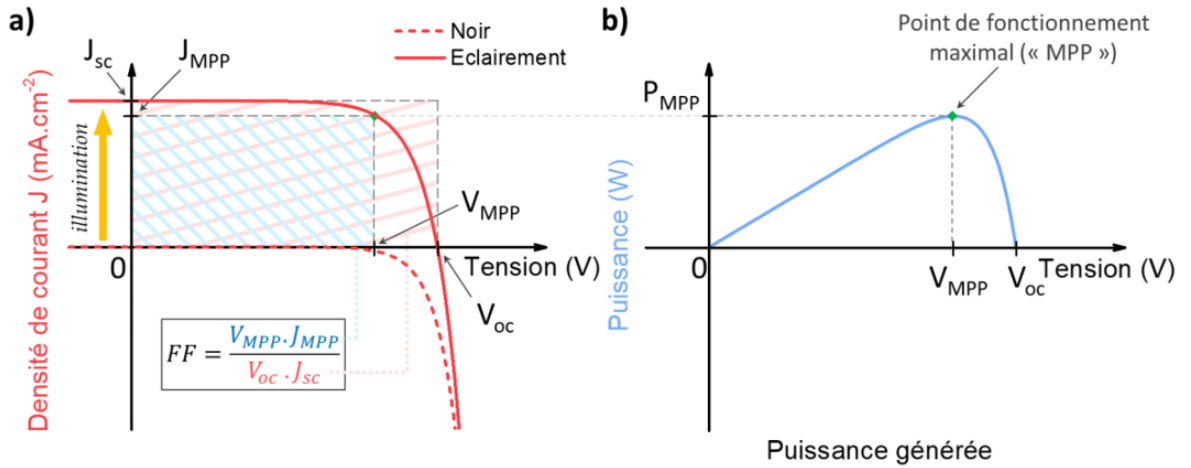


FIGURE 1.4.1 – (a) Caractéristique $J-V$ obtenue dans l'obscurité (courbe en pointillé) et sous éclairage (trait plein) ; et (b) courbe ($P-V$) correspondante sous éclairage [17].

Densité de courant de court-circuit (J_{cc})

La densité de courant de court-circuit correspond au courant maximal fourni par la cellule lorsque la tension à ses bornes est nulle ($V = 0V$). Ce courant résulte de la génération et de la collecte des porteurs de charge créés par l'absorption des photons incidents. La valeur de (J_{cc}) dépend principalement de l'intensité lumineuse reçue, de la qualité cristalline du matériau semi-conducteur, de la durée de vie des porteurs minoritaires ainsi que de la vitesse de recombinaison à la surface.

Tension de circuit ouvert (V_{oc})

La tension de circuit ouvert correspond à la tension maximale délivrée par une cellule solaire lorsque le courant de sortie est nul ($J = 0$). La tension de circuit ouvert est un paramètre important puisqu'elle caractérise la capacité de la cellule à générer une différence de potentiel sous éclairage.

Pour une cellule solaire idéale, la tension de circuit ouvert peut être exprimée par :

$$V_{co} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{J_{cc}}{J_0} + 1\right) \quad (1.3)$$

Où k est la constante de Boltzmann, T la température absolue, q la charge élémentaire de l'électron, J_{cc} la densité de courant de court-circuit et J_0 la densité de courant de saturation de la diode.

Cette relation montre que V_{co} dépend principalement du courant photogénéré et du courant de saturation de la diode. Une augmentation de J_{cc} ou une diminution de J_0 conduit généralement à une augmentation de la tension de circuit ouvert.

Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme (**Fill Factor**, FF) est un paramètre qui mesure la qualité électrique d'une cellule solaire. Il représente le rapport entre la puissance électrique maximale réellement fournie par la cellule et le produit de la tension de circuit ouvert par le courant de court-circuit. Il est défini par :

$$FF = \frac{V_m J_m}{V_{co} J_{co}} \quad (1.4)$$

Où V_m et J_m correspondent respectivement à la tension et à la densité de courant au point de puissance maximale.

Rendement de conversion de puissance (η)

Le rendement de conversion de puissance représente la capacité d'une cellule solaire à convertir l'énergie lumineuse incidente en énergie électrique utilisable. Il est défini comme le rapport entre la puissance électrique maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse reçue :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{V_{co} J_{cc} FF}{P_{in}} \quad (1.5)$$

Où P_{max} est la puissance maximale produite par la cellule et P_{in} la puissance lumineuse incidente [18].

Une cellule solaire en fonctionnement peut être schématisée par une diode, une résistance en série (R_s) et une résistance en parallèle (R_{sh}) comme sur la Figure (1.4.2). Le FF est influencé par les valeurs de R_s et R_{sh} [19].

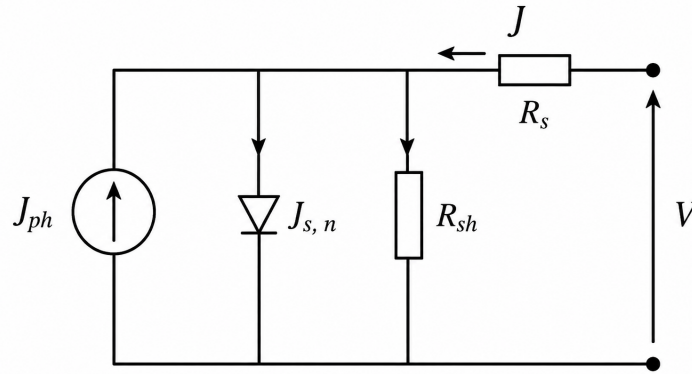


FIGURE 1.4.2 – Schéma électrique équivalent d'une cellule solaire en fonctionnement [19].

La résistance série R_s représente les pertes ohmiques associées à la circulation du courant dans les différentes couches de la cellule, les contacts métalliques et les interconnexions. Une valeur élevée de R_s entraîne une diminution du facteur de forme ainsi que de la puissance maximale délivrée par la cellule. À l'inverse, la résistance de shunt R_{sh} modélise les courants de fuite résultant de défauts de fabrication ou de chemins conducteurs parasites. Une faible valeur de R_{sh} provoque une diminution du courant utile et dégrade les performances globales de la cellule.

L'équation caractéristique d'une cellule solaire non idéale peut alors s'écrire sous la forme :

$$J = J_{ph} - J_0 \exp\left(\frac{q(V + JR_s)}{n k T}\right) - \left(\frac{V + JR_s}{R_{sh}}\right) \quad (1.6)$$

Où J_{ph} est la densité de photocourant, J_0 la densité de courant de saturation de la diode, q la charge élémentaire de l'électron et n le facteur d'idéalité de la diode [18].

1.5 Technologies et générations des cellules photovoltaïques

Le développement des technologies photovoltaïques a conduit à l'émergence de plusieurs générations de cellules solaires, classées selon les matériaux utilisés, les procédés de fabrication ainsi que leurs performances. Cette classification permet de distinguer les technologies photovoltaïques commerciales des technologies émergentes en cours de développement.

1.5.1 Première génération : silicium cristallin

Les cellules photovoltaïques de première génération sont principalement basées sur le silicium cristallin, sous forme monocristalline (**c-Si**) ou multicristalline (**mc-Si**). Cette technologie domine largement le marché photovoltaïque mondial grâce à sa maturité industrielle, sa fiabilité et sa stabilité à long terme. En 2015, les cellules au silicium cristallin représentaient près de 90% du marché photovoltaïque mondial. Les rendements élevés obtenus ainsi que la disponibilité du silicium expliquent leur succès commercial. Toutefois, leur fabrication nécessite des procédés relativement complexes et énergivores liés à la production des wafers cristallins. La figure (1.5.1) présente l'architecture générale d'une cellule photovoltaïque au silicium cristallin, composée d'une surface texturée recouverte d'une couche antireflet, d'une jonction **P-N** et de contacts électriques destinés à recueillir les charges générées par la lumière [20, 21].

1.5.2 Deuxième génération : technologies à couches minces

Les cellules solaires de deuxième génération sont des dispositifs à couches minces basés sur des semi-conducteurs composés tels que le **CdTe**, le **CIGS**, le **CZTS** ainsi que les matériaux **III-V** (**GaAs**, **InP**, **GaP**). Elles se distinguent par leur faible épaisseur, leur bonne efficacité et leur consommation réduite de matériau. Représentant environ 10% du marché photovoltaïque mondial, elles connaissent une croissance continue et sont particulièrement utilisées dans les cellules multijonctions destinées aux applications spatiales [21].

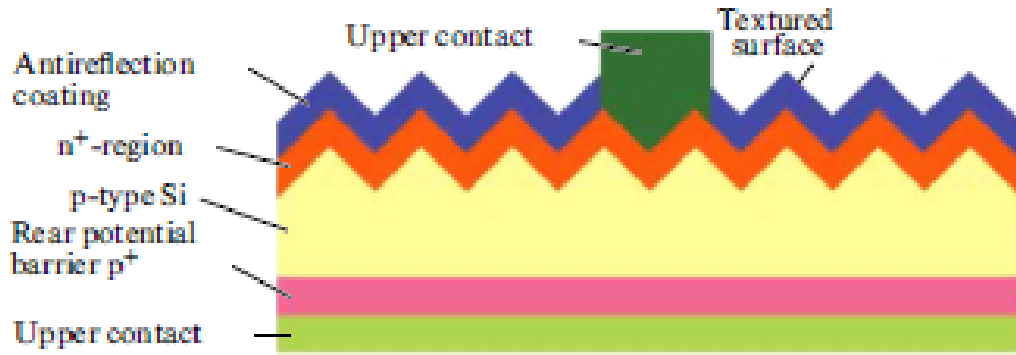


FIGURE 1.5.1 – Schéma de principe d'une cellule solaire au silicium cristallin présentant une architecture moderne avec barrière de champ arrière (Back Surface Field, BSF) [21].

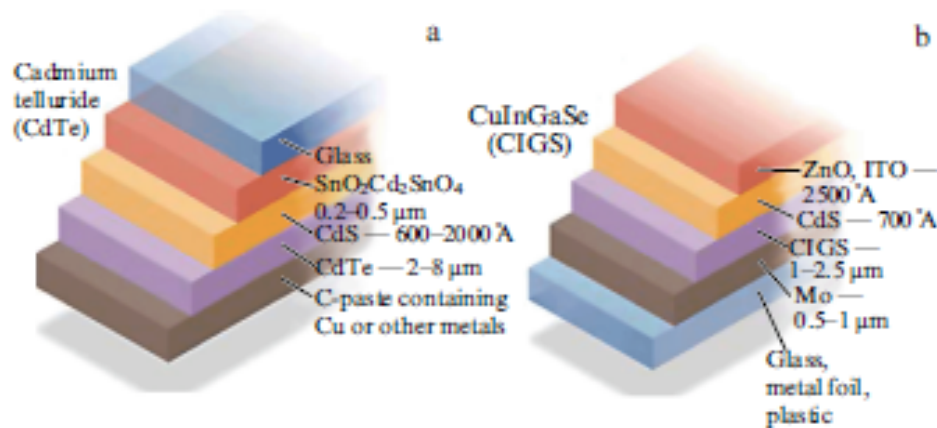


FIGURE 1.5.2 – Architectures typiques des cellules solaires à couches minces de type diode utilisant le **CdTe** (a) et le **CIGS** (b) [21].

1.5.3 Troisième génération : technologies photovoltaïques émergentes

La troisième génération regroupe les technologies photovoltaïques émergentes développées pour dépasser les limitations théoriques et technologiques des cellules conventionnelles. Ces dispositifs exploitent de nouveaux matériaux, des structures nanométriques ou des architectures innovantes permettant d'améliorer l'absorption du rayonnement solaire et le rendement de conversion énergétique. Malgré leurs performances prometteuses, la plupart de ces technologies restent principalement au stade de la recherche et du développement.

1.5.3.1 Cellules DSSC

Les cellules solaires sensibilisées par colorant (**Dye-Sensitized Solar Cells, DSSC**) constituent une technologie photovoltaïque de troisième génération qui a suscité un grand intérêt en raison de son faible coût potentiel, de sa simplicité de fabrication et de ses performances prometteuses. Leur principe repose sur la sensibilisation d'un semi-conducteur à large bande interdite, généralement le **TiO₂** ou le **ZnO**, par un colorant capable d'absorber la lumière visible et d'injecter des électrons dans le semi-conducteur. Les premières recherches sur ce concept remontent aux années 1960, mais une avancée majeure a été réalisée en 1991 par O'Regan et Grätzel grâce à l'utilisation d'une électrode nanocristalline de **TiO₂** sensibilisée par un colorant à base de ruthénium, permettant d'atteindre un rendement d'environ 11%. Bien que les **DSSC** utilisant des électrolytes liquides aient démontré des rendements supérieurs à 10%, leur développement reste limité par des problèmes d'étanchéité et de stabilité à long terme. Afin de surmonter ces difficultés, de nombreuses études ont porté sur le remplacement des électrolytes liquides par des matériaux solides ou quasi-solides, notamment des électrolytes gélifiés et des nanocomposites organiques-inorganiques. Ces améliorations visent à accroître la stabilité et les performances des **DSSC** tout en favorisant leur industrialisation [22].

1.5.3.2 Cellules à pérovskites

Issues des cellules solaires sensibilisées par colorant, les cellules solaires à pérovskite ont suscité un intérêt considérable grâce à leur structure à l'état solide et à l'amélioration rapide de leurs performances photovoltaïques. Leur rendement de conversion a progressé de manière remarquable pour atteindre 22,7%. Les matériaux les plus couramment employés sont les pérovskites hybrides organiques-inorganiques à base de **CH₃NH₃PbI₃**, dont la forte mobilité des porteurs de charge constitue un atout majeur. Associée à une durée de vie élevée des porteurs, cette propriété permet une collecte efficace des charges photogénérées avant leur recombinaison. En outre, ces cellules présentent l'avantage d'être fabriquées à basse température à l'aide de techniques de dépôt simples, telles que le spin-coating, le dépôt par pulvérisation ou l'évaporation thermique, ce qui contribue à réduire les coûts de production. Malgré ce potentiel considérable, les problèmes de stabilité et certaines préoccupations environnementales liées à la présence du plomb demeurent des défis majeurs pour leur industrialisation [23].

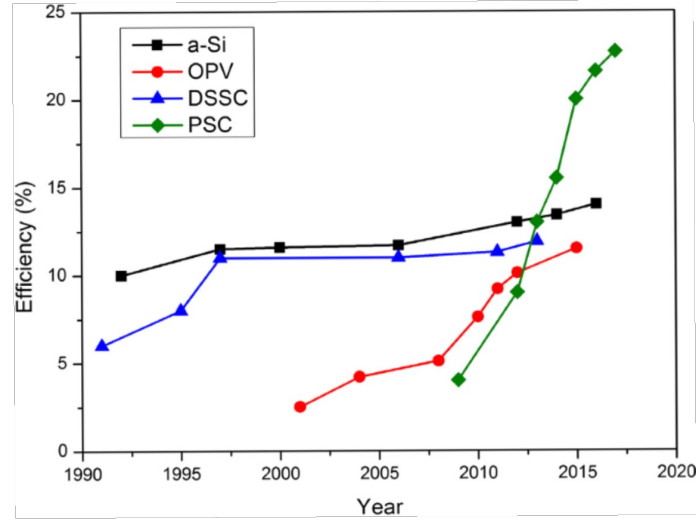


FIGURE 1.5.3 – Comparaison de l'évolution du rendement des cellules solaires à pérovskite avec celle des autres technologies photovoltaïques à couches minces [23].

1.5.3.3 Cellules tandem

Les cellules tandem reposent sur l'association de plusieurs matériaux photovoltaïques possédant des bandes interdites différentes afin d'exploiter plus efficacement le spectre solaire. Chaque sous-cellule absorbe une partie spécifique du rayonnement incident, ce qui permet de réduire les pertes énergétiques et d'augmenter le rendement global de conversion. Cette approche représente actuellement l'une des stratégies les plus prometteuses pour le développement de cellules photovoltaïques à très haut rendement.

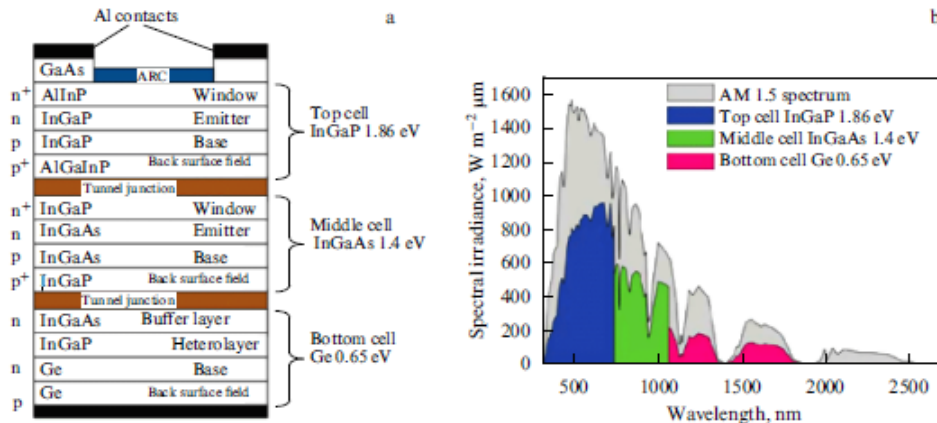


FIGURE 1.5.4 – (a) Structure d'une cellule solaire multijonction typique comportant trois couches photovoltaïques. (b) Illustration schématique des différentes parties du spectre solaire absorbées par chacune des couches de la cellule [21].

Chapitre 2

Cellules solaires à base de $CZTSSe$

Ce chapitre est consacré à l'étude des cellules solaires à base de **CZTSSe** ($Cu_2ZnSn(S,Se)_4$), considérées comme une alternative prometteuse aux technologies photovoltaïques conventionnelles grâce à l'abondance et à la faible toxicité de leurs éléments constitutifs. Dans un premier temps, les principales propriétés structurales, optiques et électroniques du matériau absorbeur **CZTSSe** sont présentées. Ensuite, l'architecture de base de la cellule solaire **CZTSSe** ainsi que le rôle des différentes couches constituant le dispositif sont décrits. Une synthèse de l'état de l'art des performances rapportées dans la littérature est ensuite présentée afin de mettre en évidence l'évolution des rendements obtenus au cours des dernières années. Enfin, les principaux défis limitant les performances des cellules **CZTSSe**, tels que le déficit de tension en circuit ouvert, les défauts intrinsèques et la formation de phases secondaires, sont examinés afin de mieux comprendre les facteurs responsables de l'écart entre les performances expérimentales actuelles et les limites théoriques de cette technologie.

2.1 Propriétés optoélectroniques du CZTSSe

La conception théorique et la synthèse expérimentale des composés quaternaires de la famille $I_2-II-IV-VI_4$ remontent aux années 1950. En 1958, Goodman et ses collaborateurs ont montré qu'il était possible de concevoir de nouveaux semi-conducteurs par substitution croisée d'atomes dans des structures cristallines existantes, tout en conservant le nombre total d'électrons de valence et la neutralité électrique du composé. Au cours des dernières décennies, de nombreuses études théoriques ont été menées afin de mieux comprendre les mécanismes de formation et les propriétés physiques de ces matériaux. Les composés de type $I_2-II-IV-VI_4$, tels que le $(Cu_2ZnSn(S_xSe_{1-x})_4)$ (**CZTSSe**), peuvent être obtenus à partir de semi-conducteurs binaires II-VI par substitutions successives des cations, dans le respect de la règle de l'octet. Ainsi, le composé **CuInS₂** (**CIS**), de

structure chalcopyrite, est dérivé du **ZnS** par remplacement des atomes de zinc par des atomes de cuivre et d'indium. À son tour, le matériau CZTS est obtenu en substituant l'atome d'indium par un atome de zinc et un atome d'étain, conduisant à une structure quaternaire de type $I_2-II-IV-VI_4$. Enfin, le remplacement partiel ou total du soufre par le sélénium permet d'obtenir les composés **CZTSSe** ou **CZTSe**, comme illustré sur la figure (2.1.1) [24, 25].

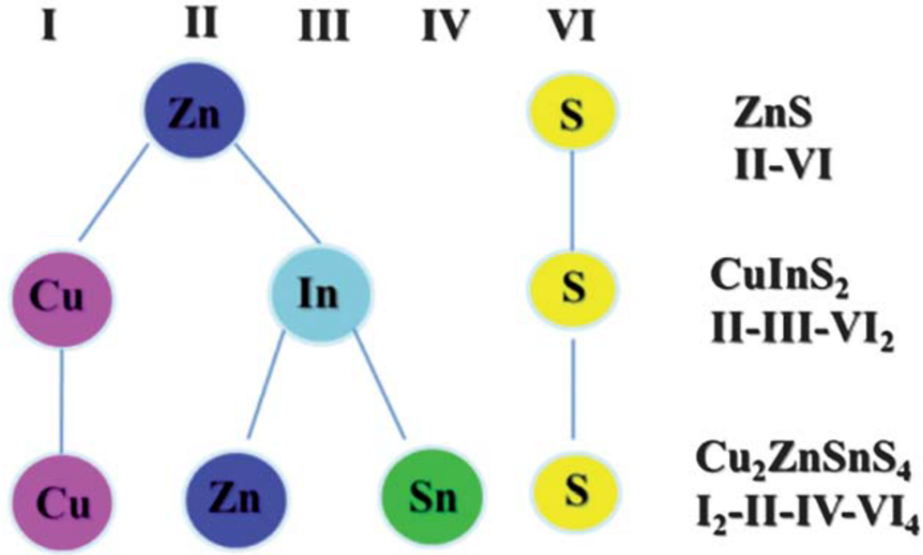


FIGURE 2.1.1 – Illustration schématique du processus de substitution cationique conduisant à la formation du composé $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$ (CZTS) [26].

2.1.1 Propriétés cristallines

Les composés de la famille $(\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4)$ (**CZTSSe**) cristallisent principalement sous les structures kesterite et stannite. Ces deux phases présentent une organisation cristalline très proche, caractérisée par des cations occupant des sites tétraédriques. La différence essentielle réside dans la répartition des atomes de cuivre et de zinc au sein du réseau cristallin, notamment le long de l'axe cristallographique **c**. Ces structures dérivent de la structure de type zinc-blende et possèdent une symétrie tétragonale centrée avec huit atomes par maille élémentaire. D'un point de vue thermodynamique, la phase kesterite est généralement considérée comme la plus stable en raison de sa plus faible énergie de formation, ce qui explique sa prédominance dans les matériaux de la famille **CZTSSe** [27].

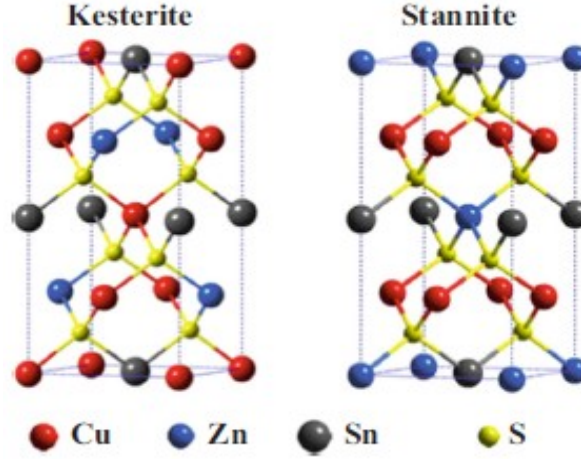


FIGURE 2.1.2 – Structures cristallines de type kesterite et stannite de la famille des composés $(\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4)$ (CZTSSe) [27].

2.1.2 Bande interdite E_g

Les matériaux kesterites **CZTS** et **CZTSe** sont des semi-conducteurs à bande interdite directe. Les calculs théoriques de structure de bandes montrent que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont localisés au point Γ de la zone de Brillouin, ce qui confirme la nature directe de leur bande interdite. Comme l'illustre la figure 2.3, les structures de bandes électroniques des composés **CZTS** et **CZTSe** présentent des largeurs de bande interdite respectives d'environ $1,5\text{eV}$ et $1,0\text{eV}$ pour des compositions parfaitement stœchiométriques.

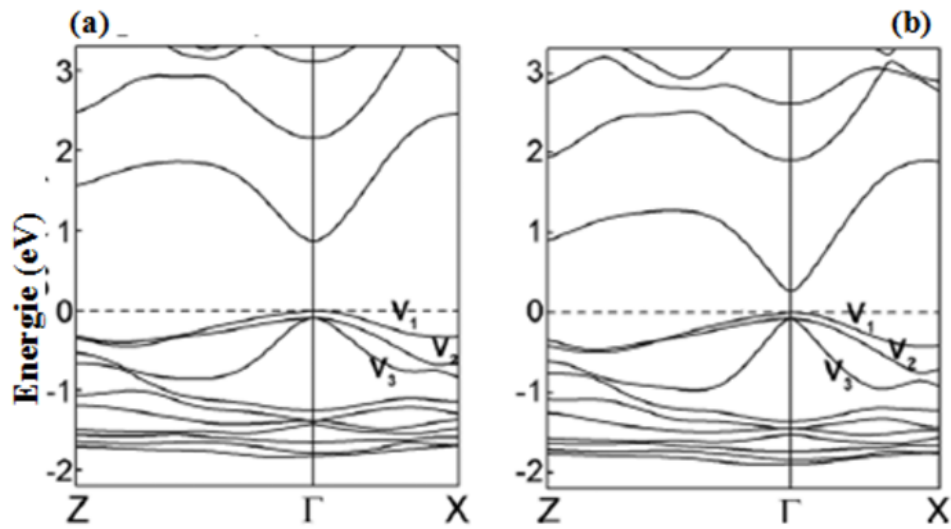


FIGURE 2.1.3 – Densités d'état électroniques (a) CZTS; (b) CZTSe.

Ainsi, pour le matériau **CZTSSe**, une bande interdite ajustable comprise entre 1,0 et 1,5 eV est attendue. Les résultats de la Figure (2.1.4) montrent une relation presque linéaire entre la bande interdite et le rapport **S/Se** dans le **CZTSSe**, ainsi qu'une faible influence des différentes structures cristallines sur la valeur de la bande interdite (inférieure à 0,1 eV). L'évolution de la bande interdite du **CZTSSe** peut être décrite par la relation suivante :

$$E_g(x) = (1 - x) E_g(\text{CZTS}) + x E_g(\text{CZTSe}) - b x (1 - x) \quad (2.1)$$

où x représente la fraction de sélénium dans l'alliage $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}_{1-x}\text{Se}_x)_4$ et b est un paramètre de courbure généralement égal à 0,07 [25, 28].

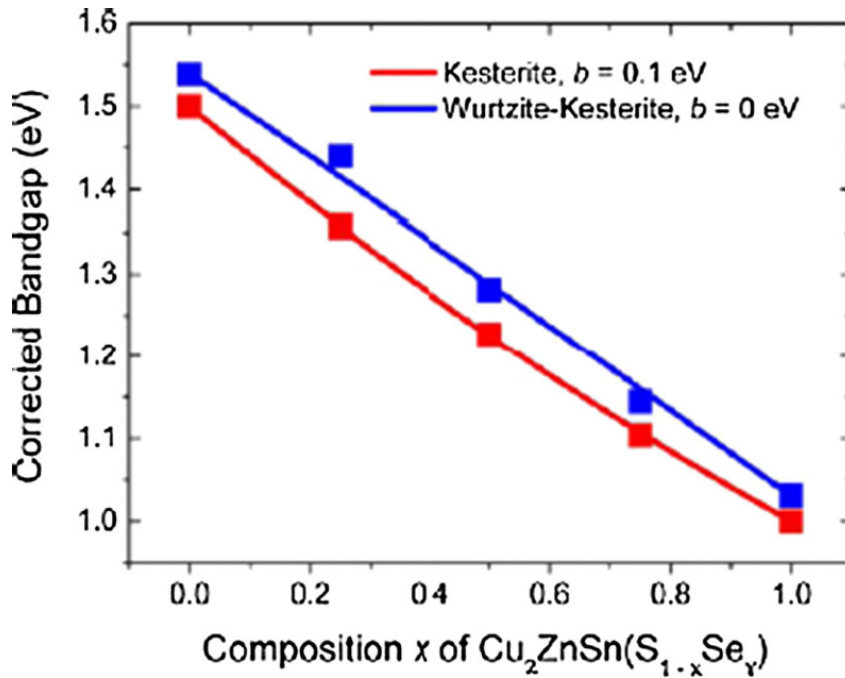


FIGURE 2.1.4 – Variation de la bande interdite du CZTSSe en fonction de la teneur en sélénium x pour différentes structures cristallines [28].

2.1.3 Coefficient d'absorption

Le matériau **CZTSSe** possède un coefficient d'absorption optique supérieur à 10^4 cm^{-1} pour les longueurs d'onde correspondant à des énergies supérieures à sa bande interdite, déterminée par spectroscopie d'absorption. Cette propriété lui permet d'absorber efficacement le rayonnement lumineux avec une couche absorbeur de faible épaisseur, généralement comprise entre 1 et 2 μm [29]. Le coefficient d'absorption en fonction de l'énergie du photon est représenté sur la figure (2.1.5).

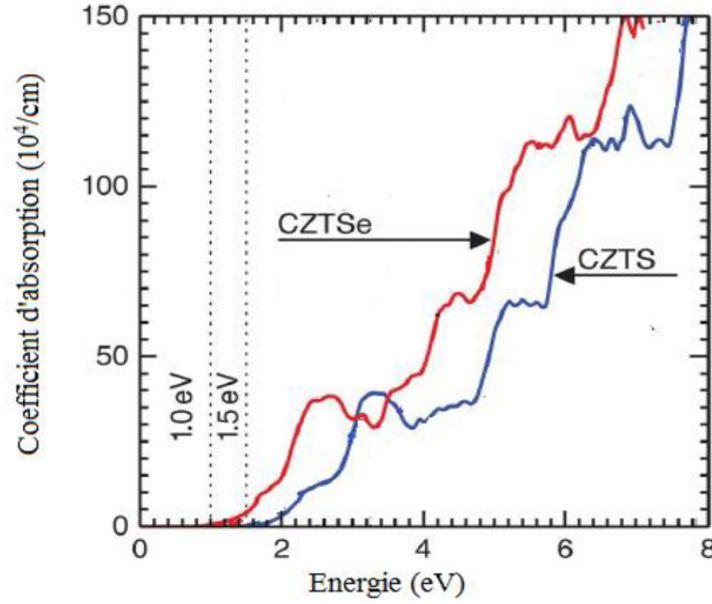


FIGURE 2.1.5 – Coefficient d’absorption en fonction de l’énergie du photon de CZTS et de CZTSe [25].

2.1.4 Dopage

Les matériaux **CZTS** et **CZTSSe** présentent naturellement une conductivité de type **p** en raison des défauts intrinsèques générés lors de leur synthèse et de leur croissance sous forme de couches minces. Les études théoriques indiquent que la formation de défauts accepteurs est énergétiquement plus favorable que celle des défauts donneurs, ce qui conduit à un comportement intrinsèquement de type **p**. Ce phénomène est principalement associé aux défauts antisites **Cu_{zn}**, considérés comme l’une des principales sources de dopage dans ces matériaux. Par conséquent, les conditions de croissance pauvres en cuivre et riches en zinc sont généralement privilégiées pour l’élaboration de cellules solaires **CZTS/CZTSSe** à haut rendement. La Figure (2.1.6) [27] illustre l’influence de la composition chimique de l’absorbeur **CZTS** sur la densité de dopage, exprimée en fonction des rapports $[\text{Cu}]/([\text{Zn}]+[\text{Sn}])$ et $[\text{Zn}]/[\text{Sn}]$.

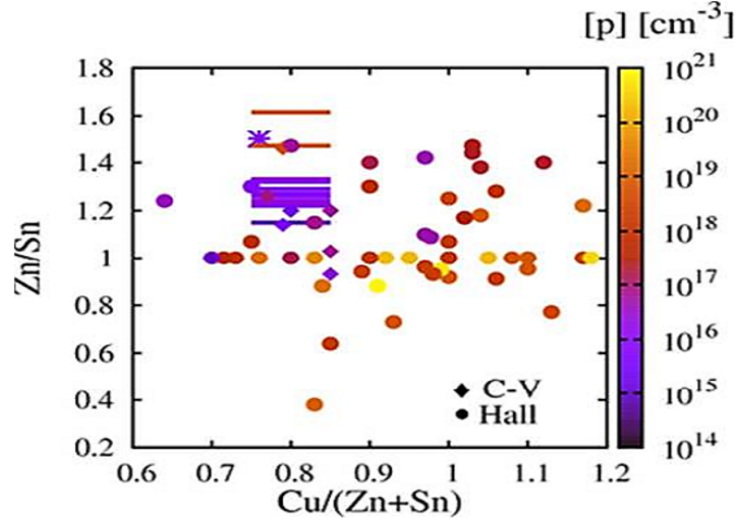


FIGURE 2.1.6 – Valeurs expérimentales du taux de dopage en fonction des ratios $[\text{Cu}]/([\text{Zn}]+[\text{Sn}])$ et $[\text{Zn}]/[\text{Sn}]$ mesurées par effet Hall et C(V) dans les absorbeurs CZTS.

D'après la Figure (2.1.6), la densité de dopage varie en fonction de la composition de l'absorbeur **CZTS**. Les compositions correspondant aux meilleures cellules reportées dans la littérature se situent généralement dans le domaine pauvre en cuivre et riche en zinc, avec des rapports $[\text{Cu}]/([\text{Zn}]+[\text{Sn}])$ compris entre 0,8 et 0,9 et $[\text{Zn}]/[\text{Sn}]$ compris entre 1,1 et 1,2. Dans cette région, la densité de dopage est de l'ordre de 10^{15} à 10^{16} cm^{-3} , valeurs généralement associées aux dispositifs les plus performants [28, 29].

2.2 Structure des cellules solaires $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$

La structure des cellules solaires à base de **CZTSSe** repose sur un empilement multicouche de type **verre/Mo/CZTSSe/CdS/iZnO/ ZnO :Al**, tel qu'illustré à la figure (2.2.1)

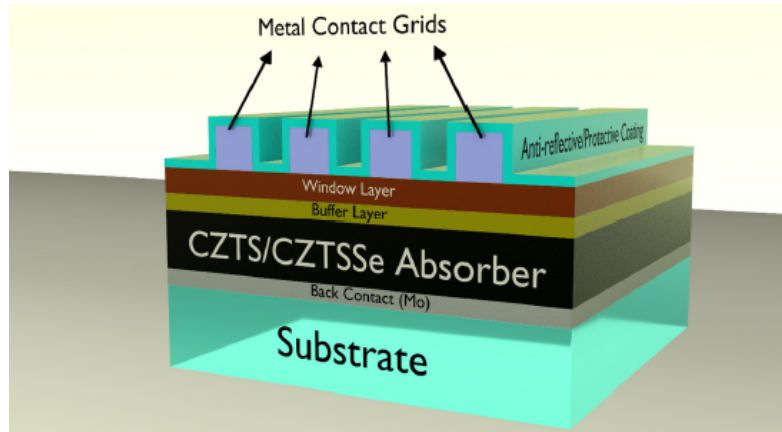


FIGURE 2.2.1 – Structure de base d'une cellule CZTSSe [30].

Dans ce type de structure, les couches constituant l'empilement sont :

- un substrat généralement de verre sodo-calcique
- une couche de molybdène (Mo) utilisée comme contact arrière
- l'absorbeur **CZTSSe** qui est un semi-conducteur de type **p**
- une fine couche à base de sulfure de cadmium **CdS**, **In₂S₃**, **Zn (O,S)** de type **n** appelée couramment la **couche tampon**
- la couche fenêtre comme contact avant constituée de **ZnO** intrinsèque et **ZnO :Al**
- la couche antireflet pour réduire les pertes optiques par réflexion [29].

2.2.1 Substrat

Le substrat assure le maintien mécanique de l'ensemble des couches constituant la cellule solaire. Il doit présenter des propriétés chimiques, thermiques et mécaniques compatibles avec les procédés de fabrication et le fonctionnement du dispositif. Le verre **sodo-calcique** est largement utilisé grâce à sa bonne stabilité thermique, sa rigidité, son état de surface lisse et son coefficient de dilatation proche de celui du **CZTSSe**. En outre, il constitue une source de sodium (Na), dont la diffusion vers la couche absorbeur peut améliorer les performances photovoltaïques de la cellule [25].

2.2.2 Contact arrière

La fonction principale du contact arrière est d'établir un contact ohmique optimal avec la couche absorbante afin de favoriser une extraction efficace des trous. Il est donc essentiel de choisir un matériau possédant une fonction de travail, une bande interdite et une constante de réseau adaptées [28]. Dans les cellules solaires **CZTSSe**, le molybdène est généralement utilisé comme contact arrière en raison de son succès dans la technologie **CIGS**. Lors de la sélénisation, il réagit avec le sélénium pour former une couche de **MoSe₂**, qui peut favoriser la formation d'un contact ohmique à l'interface avec l'absorbeur. Cette propriété facilite la collecte des charges et contribue à l'amélioration des performances photovoltaïques [24].

2.2.3 Absorbeur

La couche absorbante constitue l'élément principal de la cellule photovoltaïque, puisqu'elle est responsable de l'absorption des photons incidents et de la génération des paires électron-trou. Dans le cas présent, il s'agit de **CZTS/Se** ayant une conductivité de type **p** et un gap direct de largeur qui varie de 1 eV (**CZTSe**) à 1.5 eV (**CZTS**). Les méthodes

de dépôt du **CZTS/Se** sont variées, les plus communes étant la pulvérisation cathodique et l'évaporation thermique. En revanche, la technique de dépôt à base d'hydrazine a démontré un potentiel croissant en permettant d'atteindre des rendements record [25].

2.2.4 Couche tampon

La couche tampon, également appelée couche émettrice, possède une épaisseur nettement inférieure à celle de la couche absorbante, généralement comprise entre 40 et 50 *nm*. Son rôle principal est d'assurer la formation de la jonction **p-n** et de favoriser la séparation des charges photogénérées. La recombinaison à l'interface entre les couches absorbeurs et tampon est reconnue comme l'une des principales sources de pertes dans les cellules solaires à base de **CZTS**. Cela est dû à la durée de vie relativement longue des porteurs de charge dans l'absorbeur **CZTS**, qui peut atteindre plusieurs nanosecondes. La vitesse de recombinaison à cette interface a été estimée à environ 10^5 cm/s . Le **CdS** est le matériau tampon le plus utilisé grâce à sa large bande interdite et à sa capacité à passiver les défauts inter-faciaux. Toutefois, afin d'améliorer les performances et de réduire l'utilisation du cadmium, d'autres matériaux tels que **ZnS**, **ZnO**, **In₂S₃**, **TiO₂** et **CeO₂** ont également été proposés comme alternatives prometteuses [31].

TABLE 2.1 – Différents matériaux susceptibles d'être utilisés comme couche tampon en fonction de leur énergie de bande interdite [32].

Matériau	Énergie de gap (eV)	Affinité électronique (eV)
ZnO	3.3	4.6
ZnS	3.5	4.5
ZnSe	2.9	4.1
In ₂ S ₃	2.8	4.7
CdS	2.4	4.2
Cd _{0.4} Zn _{0.6} S	2.98	4.2
ZnMgO	3.32–3.65	4.53–4.21

2.2.5 Fenêtre optique

La couche fenêtre est située à l'avant de la cellule solaire et constitue l'interface entre le rayonnement incident et les couches actives du dispositif. Son rôle principal est de transmettre le maximum de lumière vers la couche absorbeur tout en assurant le transport des électrons vers le contact avant. Pour remplir ces fonctions, elle doit présenter à la fois une grande transparence optique et une bonne conductivité électrique.

Dans les cellules solaires à base de **CZTSSe**, la couche fenêtre est généralement réalisée à partir d'un oxyde transparent conducteur (OTC), le plus souvent du ZnO. Elle est généralement constituée d'une fine couche de **ZnO** intrinsèque servant à limiter les courants de fuite et à améliorer la qualité de l'interface, suivie d'une couche de **ZnO** dopé à l'aluminium (AZO) assurant la conduction électrique. Grâce à sa large bande interdite, cette structure laisse traverser la majeure partie du spectre solaire tout en garantissant une collecte efficace des porteurs de charge. Les couches **ZnO** et **AZO** sont généralement déposées par pulvérisation cathodique, une technique largement utilisée pour la fabrication des cellules photovoltaïques à couches minces [33].

2.3 État de l'art des performances des cellules solaires à base de CZTSSe

Les performances d'une cellule solaire sont généralement caractérisées par la tension en circuit ouvert (VOC), la densité de courant de court-circuit (JSC), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque η . Parmi ces paramètres, le rendement constitue l'indicateur le plus représentatif puisqu'il reflète l'efficacité globale du dispositif à convertir l'énergie solaire incidente en énergie électrique. L'analyse de l'évolution du rendement des cellules **CZTSSe** permet ainsi d'évaluer les progrès réalisés dans le développement de cette technologie photovoltaïque.

Depuis l'apparition des premières cellules solaires **CZTSSe** au début des années 2000, leurs performances ont connu une progression importante. Le rendement est passé de 2,67 % en 2001 à 6,7 % en 2009, puis à 10,1 % en 2011 grâce à l'amélioration des procédés de synthèse et de dépôt. Les avancées réalisées par la suite dans l'ingénierie des interfaces, la maîtrise des défauts et l'optimisation de la qualité cristalline ont permis d'atteindre des rendements supérieurs à 12%, puis un rendement record de 13,6% en 2022. À ce jour, le rendement certifié le plus élevé rapporté pour les cellules **CZTSSe** est de 14,9%. Malgré ces progrès significatifs, les performances de cette technologie demeurent inférieures à celles des cellules à couches minces plus matures, telles que les cellules **CIGS** et **CdTe**. Néanmoins, l'abondance des éléments constitutifs du **CZTSSe**, leur faible toxicité et les améliorations continues observées au cours des dernières années confirment le potentiel de cette filière pour les applications photovoltaïques à faible coût [30,34].

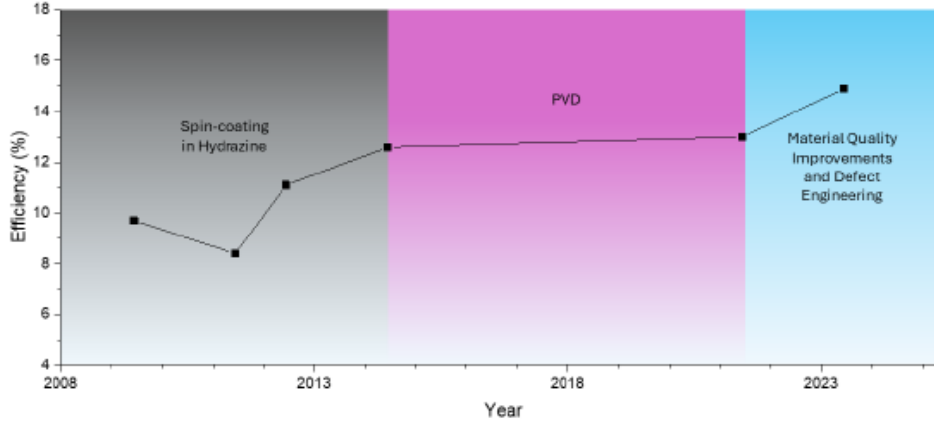


FIGURE 2.3.1 – Évolution du rendement record des cellules solaires CZTS/CZTSSe au cours des années [30].

La figure (2.3.1) présente l'évolution du rendement de conversion photovoltaïque des cellules solaires à base de **CZTS/CZTSSe** au cours des dernières années. L'amélioration progressive des performances observée met en évidence les progrès accomplis dans la qualité des matériaux, l'ingénierie des interfaces et la maîtrise des mécanismes de recombinaison. Cette évolution confirme le fort potentiel du **CZTSSe** et les perspectives d'amélioration encore envisageables, bien que les performances obtenues demeurent inférieures à celles des technologies photovoltaïques les plus matures, telles que les cellules **CIGS** et **CdTe** [30].

2.4 Principaux défis limitant les performances des cellules CZTSSe

2.4.1 Déficit de tension en circuit ouvert et phénomène de queue de bandes

Malgré les progrès réalisés dans le développement des cellules solaires à base de **CZTSSe**, le déficit de tension en circuit ouvert (V_{oc}) demeure l'un des principaux facteurs limitant leur rendement. Les valeurs obtenues expérimentalement restent nettement inférieures à celles prédites par la limite théorique de Shockley–Queisser, en raison principalement des recombinaisons non radiatives associées aux défauts présents dans la couche absorbante, aux défauts d'interface et aux inhomogénéités de composition.

Parmi les mécanismes responsables de ce déficit, le phénomène de queue de bandes (band tailing) joue un rôle majeur. Celui-ci résulte du désordre structural et compositionnel du matériau, qui engendre la formation d'états électroniques localisés à proximité des

bandes de valence et de conduction. Ces états favorisent les recombinaisons non radiatives et réduisent ainsi la tension en circuit ouvert.

Le désordre cationique **Cu/Zn** constitue l'une des principales origines du phénomène de queue de bandes. En raison de la similitude des rayons ioniques du cuivre et du zinc, des défauts antisites tels que Cu_{Zn} et Zn_{Cu} se forment facilement et provoquent des fluctuations du potentiel électrostatique dans le matériau. Ces défauts, ainsi que certains complexes impliquant l'étain, créent des centres de recombinaison qui réduisent la durée de vie des porteurs minoritaires et limitent l'efficacité de collecte des charges, ce qui se traduit par une diminution de V_{oc} et du rendement global des cellules **CZTSSe**.

2.4.2 Impact des défauts intrinsèques et des phases secondaires sur les performances

Outre le déficit de V_{oc} et le phénomène de queue de bandes, les performances des cellules solaires **CZTSSe** sont également fortement limitées par la présence de défauts intrinsèques et de phases secondaires. En raison de la faible fenêtre de stabilité thermodynamique de la phase kesterite, divers défauts cristallins ainsi que des composés parasites peuvent se former durant l'élaboration de la couche absorbante.

Les défauts intrinsèques, tels que les antisites, les lacunes et les défauts complexes, introduisent des niveaux énergétiques dans la bande interdite qui agissent comme centres de recombinaison non radiative. Parallèlement, les phases secondaires localisées dans le volume de l'absorbeur ou aux interfaces perturbent le transport des porteurs de charge, créent des chemins de fuite électriques ou forment des barrières énergétiques défavorables à leur extraction.

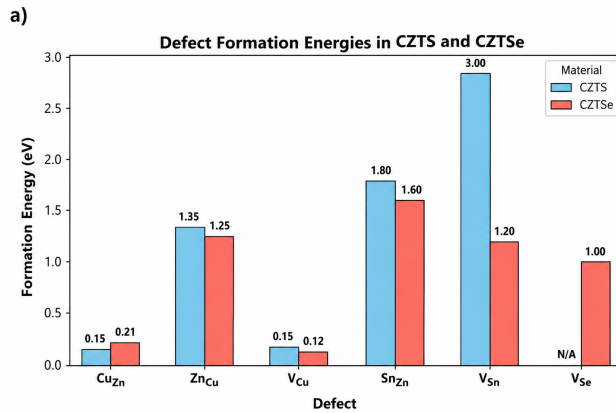


FIGURE 2.4.1 – Énergies de formation des principaux défauts intrinsèques dans CZTS et CZTSe sous conditions pauvres en Cu et riches en Zn.

b)

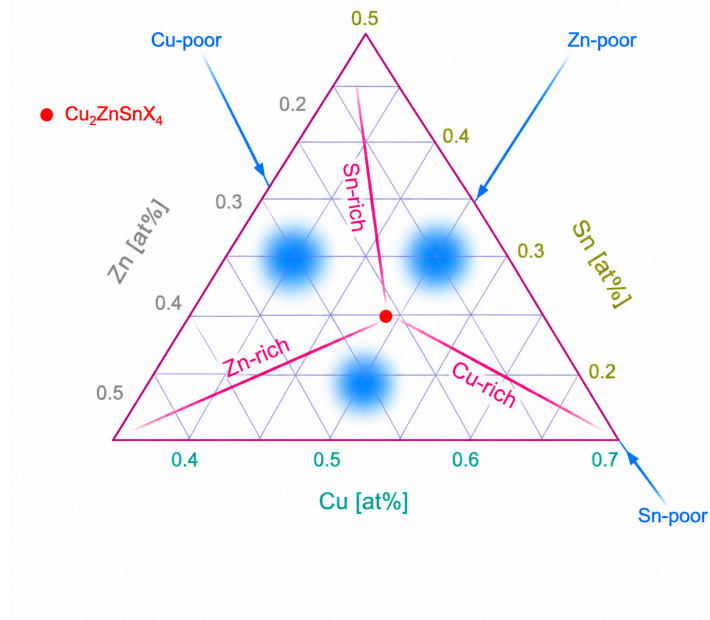


FIGURE 2.4.2 – Diagramme de phase Cu–Zn–Sn–(S,Se) illustrant la fenêtre de stabilité de la kesterite et les domaines de formation des phases secondaires dans les matériaux CZTSSe.

L'ensemble de ces phénomènes entraîne une diminution de la mobilité et de la durée de vie des porteurs minoritaires, conduisant à une baisse simultanée de FF, ce qui réduit significativement le rendement de conversion photovoltaïque [4].

Chapitre 3

Simulation numérique par SCAPS et discussion des résultats

Ce chapitre est consacré à la modélisation et à l'optimisation de la cellule solaire CZTSSe à l'aide du logiciel **SCAPS-1D**. Dans un premier temps, les principes de fonctionnement du logiciel ainsi que les équations fondamentales utilisées pour la simulation sont présentés. Ensuite, l'architecture de la cellule solaire étudiée et les paramètres physiques des différentes couches constituant la structure sont décrits. Enfin, une étude paramétrique est réalisée afin d'évaluer l'influence des principaux paramètres de la cellule, notamment le dopage et l'épaisseur des couches absorbeur et tampon, dans le but d'identifier les conditions optimales permettant d'améliorer les performances photovoltaïques du dispositif.

3.1 Logiciel de simulation SCAPS-1D

Toute réalisation expérimentale nécessite une étude théorique préalable afin d'optimiser les paramètres géométriques, électriques, physiques et optiques des différentes couches constituant la cellule solaire. Pour cela, plusieurs logiciels de simulation peuvent être utilisés, tels que **AMPS**, **PC-1D** et **SCAPS-1D**, permettant de prédire les performances du dispositif avant sa réalisation expérimentale.

Parmi ces outils, **SCAPS-1D** est l'un des logiciels les plus largement utilisés pour l'étude et l'optimisation des cellules solaires à couches minces. Il permet d'analyser l'évolution des principaux paramètres photovoltaïques, notamment la densité de courant de court-circuit (J_{cc}), la tension en circuit ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF) ainsi que le rendement de conversion (η), en fonction des propriétés intrinsèques des matériaux constituant le dispositif. **SCAPS-1D** est un programme numérique de simulation unidi-

mensionnelle développé à l'Université de Gand (Belgique). Les résultats obtenus à l'aide de ce logiciel présentent un excellent accord avec les données expérimentales rapportées dans la littérature, ce qui explique son utilisation croissante dans le domaine de la recherche photovoltaïque. La Figure (3.1.1) présente l'organigramme du processus de simulation sous **SCAPS-1D**.

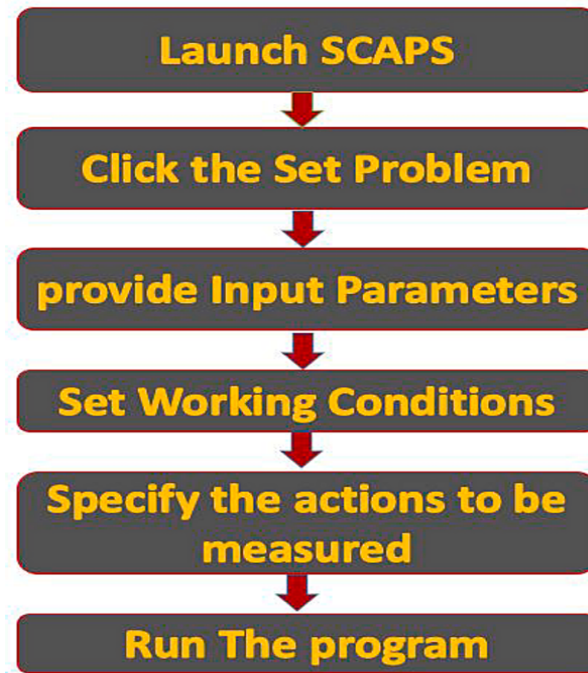


FIGURE 3.1.1 – Organigramme du processus de simulation sous SCAPS-1D [3]

Ce logiciel permet de modéliser des structures comportant jusqu'à sept couches distinctes et offre la possibilité de définir l'ensemble des paramètres physiques et électriques du dispositif étudié, notamment les propriétés des couches, des interfaces et des contacts. Son fonctionnement repose sur la résolution numérique des équations fondamentales décrivant le comportement des semi-conducteurs en une dimension, à savoir l'équation de Poisson, les équations de continuité des électrons et des trous, ainsi que les équations de dérive-diffusion régissant le transport des porteurs de charge. La résolution simultanée de ces équations permet de déterminer avec précision les caractéristiques électriques et photovoltaïques des cellules solaires simulées [35–37].

3.1.1 Équation de poisson

Dans le cas unidimensionnel et en absence du champ magnétique, la distribution du potentiel électrostatique au sein du semi-conducteur est décrite par l'équation de Poisson, qui s'exprime par la relation suivante [38, 39] :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{q}{\varepsilon} [p(x) - n(x) + N_D - N_A + p_p - p_n] = 0 \quad (3.1)$$

Où Ψ est le potentiel électrostatique, q la charge élémentaire de l'électron (1.602×10^{-19} C), ε la permittivité diélectrique du matériau, $p(x)$ et $n(x)$ sont respectivement la concentration des trous et des électrons, N_D et N_A sont respectivement concentration des donneurs et des accepteurs ionisés, p_p et p_n les concentrations des charges piégées associées aux défauts du matériau.

L'équation de Poisson joue un rôle fondamental dans la modélisation des cellules solaires, puisqu'elle décrit la variation spatiale du potentiel électrostatique sous l'effet des charges électriques distribuées dans le matériau semi-conducteur, incluant les électrons, les trous ainsi que les impuretés dopantes ionisées. Cette équation est résolue de manière couplée avec les équations de continuité des porteurs de charge, lesquelles traduisent les mécanismes de transport, de génération et de recombinaison des électrons et des trous. Dans le logiciel **SCAPS**, la résolution auto-cohérente de ces équations permet de simuler le fonctionnement interne des dispositifs photovoltaïques et d'analyser leurs performances électriques [40].

3.1.2 Équations de continuité

Les équations générales de continuité des électrons et des trous sont données par [38, 39] :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (3.3)$$

Où n et p sont les concentrations des électrons et des trous, $\vec{J}_n$ et $\vec{J}_p$ sont les densités de courant d'électrons et de trous, G_n et G_p sont les taux de génération des électrons et des trous et R_n et R_p sont les taux de recombinaison des électrons et des trous [41].

3.1.3 Équations de transport

Le transport des porteurs de charge dans un semi-conducteur s'effectue par deux mécanismes principaux. Le premier est la dérive, résultant de l'action du champ électrique, qui engendre un courant de conduction proportionnel à l'intensité de ce champ. Le second est la diffusion, provoquée par le déplacement des porteurs depuis les régions de forte

concentration vers celles de faible concentration. Ainsi, la densité totale de courant des électrons et des trous est la somme des contributions de dérive et de diffusion, et s'exprime par [38, 39] :

$$\begin{aligned}\vec{J}_n &= nq\mu_n\vec{E} + qD_n\nabla n \\ \vec{J}_p &= pq\mu_p\vec{E} - qD_p\nabla p\end{aligned}\quad (3.4)$$

Où $\vec{E}$ est le champ électrique, μ_n et μ_p les mobilités respectivement des électrons et des trous et D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous et ils sont donnés par :

$$D_{n,p} = \frac{k_B T}{q} \mu_{n,p} \quad (3.5)$$

Où k_B est la constante de Boltzmann et T la température. Cette relation établit le lien entre la mobilité et le coefficient de diffusion des porteurs de charge

3.2 Architecture de la cellule solaire CZTSSe simulée

La figure (3.2.1) présente l'architecture de la cellule solaire simulée, composée d'un contact arrière en Mo, d'une couche absorbante **CZTSSe**, d'une couche tampon **CdS**, d'une couche fenêtre **ZnO** et d'une couche conductrice transparente en **Al:ZnO**.

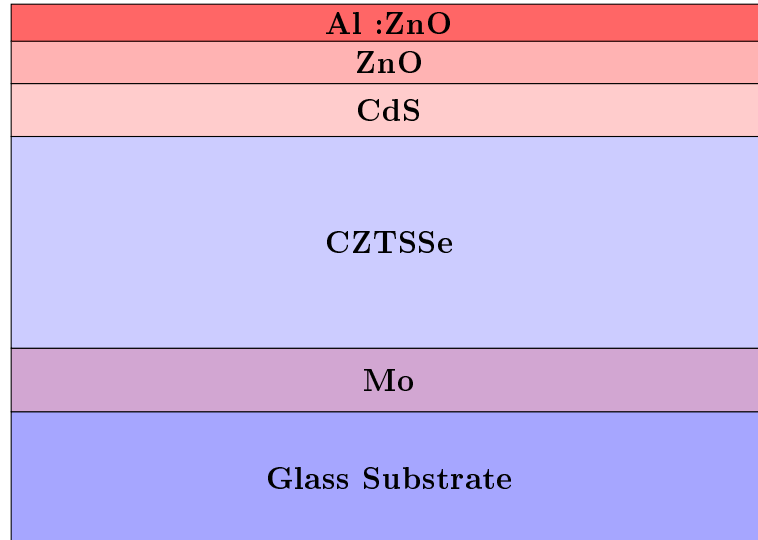


FIGURE 3.2.1 – Structure schématique de la cellule solaire CZTSSe.

- La couche absorbante **CZTSSe** constitue l'élément actif principal de la cellule. Grâce à son coefficient d'absorption élevé et à sa bande interdite ajustable, elle assure l'absorption du rayonnement solaire et la génération des paires électron-trou.

- La couche tampon **CdS** forme avec le **CZTSSe** une hétérojonction favorable à la séparation des porteurs photogénérés et à leur transport vers les contacts.
- La couche **ZnO** agit comme couche fenêtre en raison de sa large bande interdite, permettant une transmission efficace de la lumière incidente vers l'absorbeur tout en limitant les pertes par absorption parasite.
- La couche **AZO** joue le rôle d'oxyde conducteur transparent (TCO) et assure la collecte des électrons ainsi que leur transfert vers le circuit extérieur.
- À l'arrière de la cellule, le molybdène (**Mo**) constitue le contact métallique arrière.

3.3 Paramètres des différents matériaux de la cellule solaire CZTSSe simulée

Les propriétés physiques, électriques et optiques des différentes couches ont été définies à partir de données expérimentales et théoriques rapportées dans la littérature [32,42,43]. Les paramètres d'entrée retenus pour la simulation sont présentés dans le tableau (3.1)

Paramètres	Al :ZnO	ZnO	CdS	CZTSSe
Épaisseur W (μm)	0.2	0.05	0.05	2.5
Band gap (eV)	3.3	3.3	2.42	1.3
Affinité électronique (eV)	4.6	4.6	4.2	4.2
Rapport diélectrique $\varepsilon/\varepsilon_0$	9	9	10	13.6
Mobilité des électrons μ_n (cm^2/Vs)	100	100	350	100
Mobilité des trous μ_p (cm^2/Vs)	25	25	50	25
Vitesse thermique de l'électron (cm/s)	10^7	10^7	10^7	10^7
Vitesse thermique du trou (cm/s)	10^7	10^7	10^7	10^7
Densité des donneurs N_D (cm^{-3})	10^{18}	10^{17}	10^{17}	0
Densité des accepteurs N_A (cm^{-3})	0	0	0	10^{15}
Densité d'états de BC N_C (cm^{-3})	1.0×10^{18}	1.0×10^{18}	1.0×10^{18}	2.2×10^{18}
Densité d'états de BV N_V (cm^{-3})	1.0×10^{19}	1.0×10^{19}	1.0×10^{19}	1.8×10^{19}
Coefficient d'absorption (cm^{-1})	/	/	/	10^4

TABLE 3.1 – Paramètres des couches de la cellule solaire CZTSSe

Le tableau 3.1 présente les principaux paramètres physiques et électriques des différentes couches constituant la cellule solaire étudiée, utilisés dans les simulations numériques sous le logiciel **SCAPS**. Ces paramètres, notamment l'épaisseur, la bande interdite, l'affinité électronique, les mobilités des porteurs et les concentrations de dopage, influencent directement le comportement électrique et les performances photovoltaïques du dispositif.

La simulation de la structure de base étudiée dans ce travail a permis d'obtenir les paramètres électriques présentés dans la figure (3.3.1).

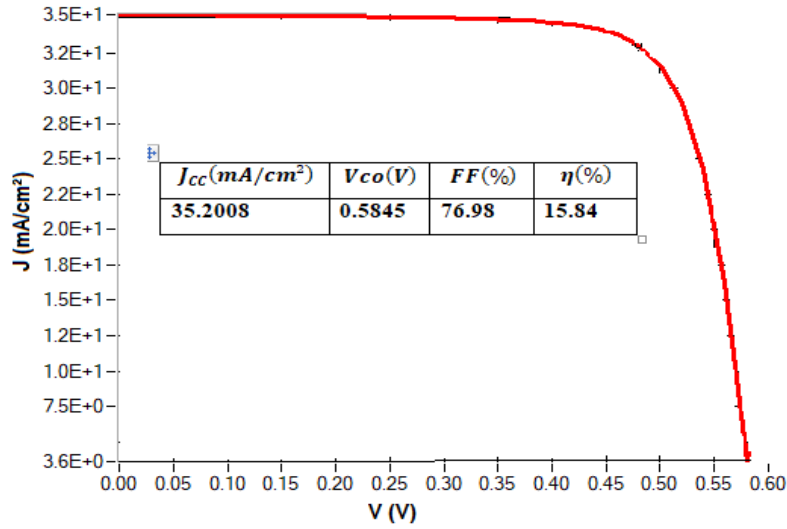


FIGURE 3.3.1 – Caractéristique $J(V)$ de la structure de base simulée.

3.4 Optimisation des paramètres de la cellule solaire CZTSSe

L'objectif est d'évaluer l'influence des principaux paramètres de la structure, notamment le dopage et l'épaisseur de la couche absorbante **CZTSSe** ainsi que le dopage et l'épaisseur de la couche tampon **CdS**, afin de déterminer les conditions permettant d'obtenir les meilleures performances photovoltaïques. Les différents paramètres ont été optimisés successivement. À chaque étape, la valeur optimale obtenue a été utilisée comme nouvelle valeur de référence pour la suite de l'étude, afin de construire progressivement la structure finale optimisée.

3.4.1 Optimisation du dopage de la couche absorbante CZTSSe

Dans cette première partie, l'effet du dopage de la couche absorbante sur les performances de la cellule solaire a été réalisé en faisant varier uniquement la concentration des accepteurs de la couche **CZTSSe** entre 10^{14} et $10^{18}/\text{cm}^{-3}$. L'ensemble des paramètres des différentes couches a été maintenu constant.

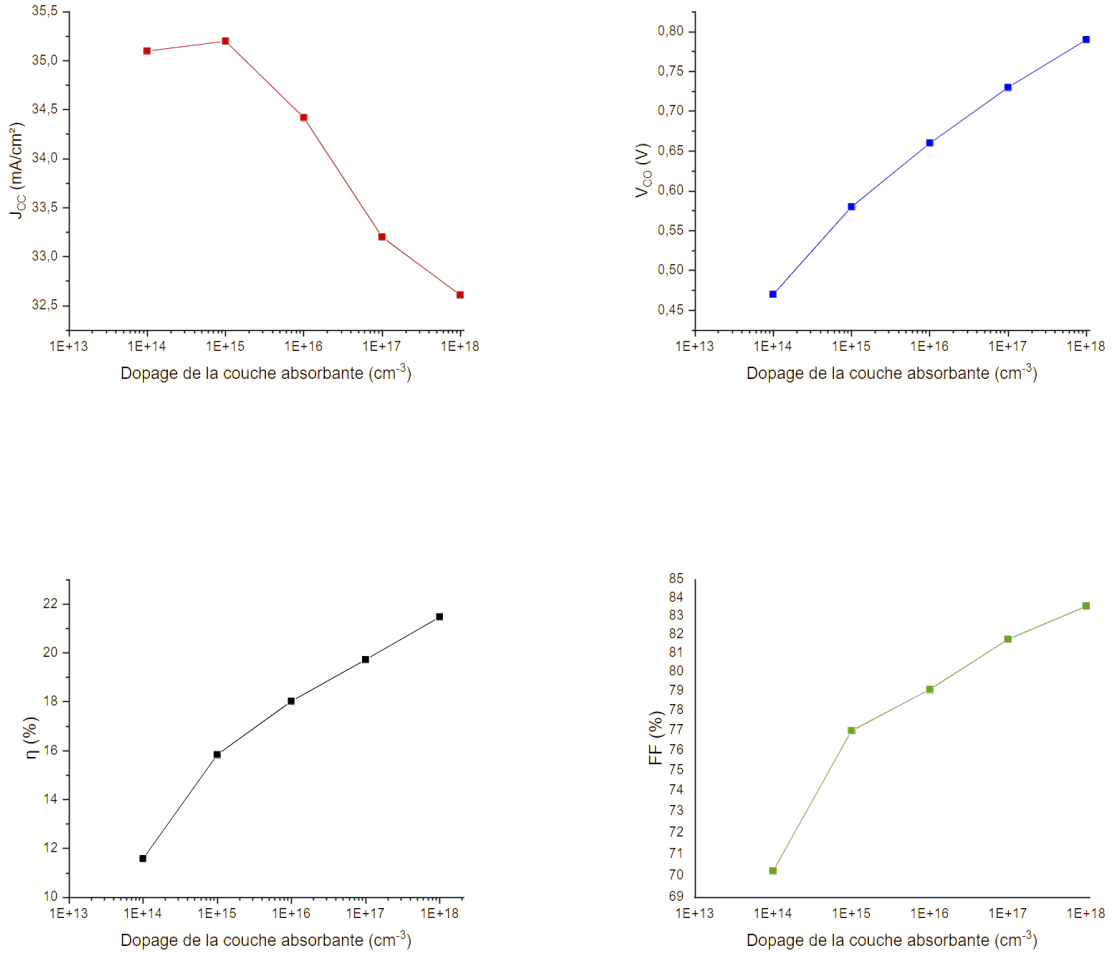


FIGURE 3.4.1 – Variation de J_{cc} , V_{co} , FF et η de la cellule solaire étudiée en fonction du dopage de la couche CZTSSe.

Les résultats de la figure (3.4.1) montrent bien qu'il y a une amélioration progressive dans la tension en circuit ouvert, le facteur de forme et l'efficacité de conversion. Cette amélioration est due au renforcement du champ électrique interne et à une meilleure séparation des porteurs de charge. Dans la plage étudiée, les meilleures performances sont obtenues pour une concentration de 10^{18} cm^{-3} . Au-delà de cette valeur, des difficultés de convergence numérique apparaissent dans **SCAPS-1D**, ce qui limite l'analyse à cette plage de dopage.

3.4.2 Optimisation de l'épaisseur de la couche absorbante CZTSSe

A fin d'évaluer l'influence de l'épaisseur de la couche **CZTSSe** sur les performances de la cellule solaire en faisant varier son épaisseur dans une plage comprise entre 0.5% et 3.5 μm . L'augmentation de l'épaisseur de la couche **CZTSSe** permet d'accroître l'absorption des photons incidents et, par conséquent, la génération des paires électron-trou. Il en résulte une augmentation de J_{cc} de V_{co} et du rendement de conversion. En revanche, la légère diminution du facteur de forme peut être associée à une augmentation des phénomènes de recombinaison et des résistances internes lorsque l'épaisseur devient plus importante figure (3.4.2).

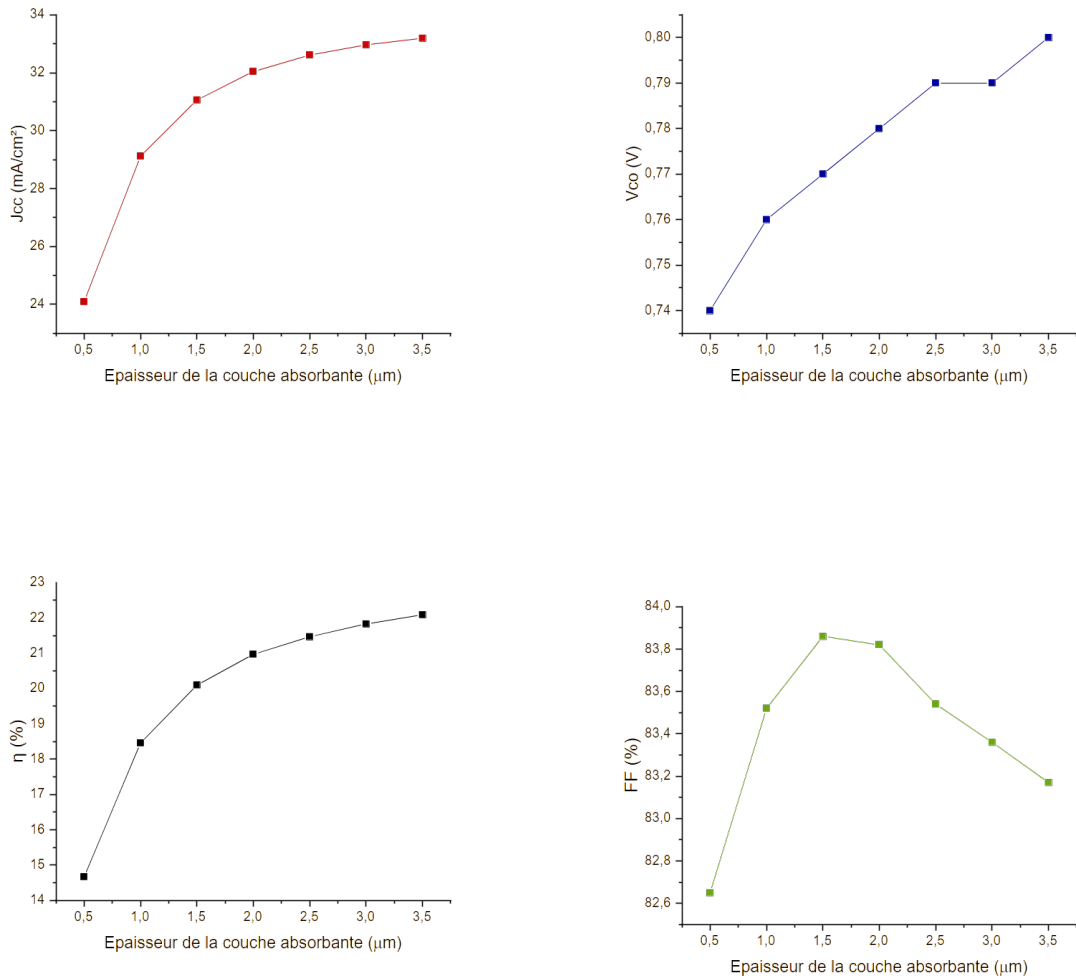


FIGURE 3.4.2 – Variation de J_{cc} , V_{co} , FF et η de la cellule solaire étudiée en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante CZTSSe.

3.4.3 Optimisation du dopage de la couche tampon CdS

Pour étudier l'impacte du dopage de la couche tampon **CdS** sur les performances de la cellule solaire, la concentration des donneurs a été variée entre 10^{17} et 10^{19} cm^{-3} , tandis que les autres paramètres ont été maintenus constants. Les résultats de la figure (3.4.3) montrent que l'augmentation du dopage du CdS entraîne une légère augmentation de la densité de courant de court-circuit, alors que la tension en circuit ouvert reste pratiquement constante sur toute la plage étudiée. Le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η) augmentent progressivement jusqu'à atteindre une valeur maximale pour un dopage de l'ordre de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, puis diminuent pour des concentrations plus élevées. Cette évolution indique l'existence d'un dopage optimal de la couche tampon, pour lequel le transport et la collecte des porteurs sont favorisés. La diminution du facteur de forme et du rendement résulte de l'augmentation des pertes par recombinaison à fort dopage. Ainsi, la concentration $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ apparaît comme la valeur optimale de dopage de la couche tampon dans les conditions de cette étude.

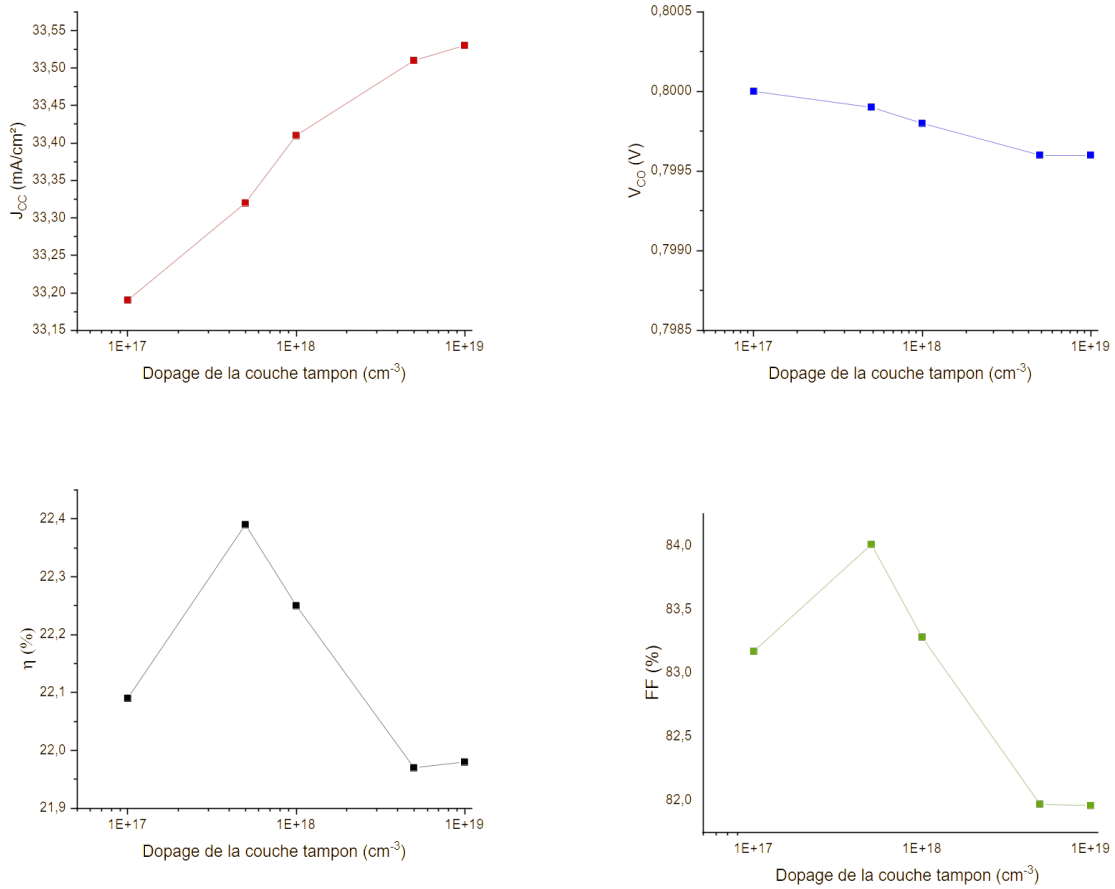


FIGURE 3.4.3 – Variation de J_{cc} , V_{co} , FF et η de la cellule solaire étudiée en fonction du dopage de la couche tampon CdS.

3.4.4 Optimisation de l'épaisseur de la couche tampon CdS

Dans cette dernière partie d'optimisation, l'influence de l'épaisseur de la couche tampon **CdS** sur les performances de la cellule solaire a été étudiée, la variation de l'épaisseur a été faite dans une plage comprise entre 20 et 100 *nm*. Les résultats montrent que la densité de courant de court-circuit J_{cc} augmente légèrement avec l'épaisseur du **CdS** avant d'atteindre une valeur pratiquement constante pour des épaisseurs supérieures à 80 *nm*. La tension en circuit ouvert V_{co} reste quasiment inchangée sur l'ensemble de la plage étudiée. Le facteur de forme (FF) présente une légère augmentation entre 20 et 40 *nm*, suivie d'une faible diminution puis d'une stabilisation aux fortes épaisseurs. Quant au rendement de conversion (η), il augmente progressivement avant d'atteindre un plateau pour des épaisseurs comprises entre 80 et 100 *nm*, figure (3.4.4).

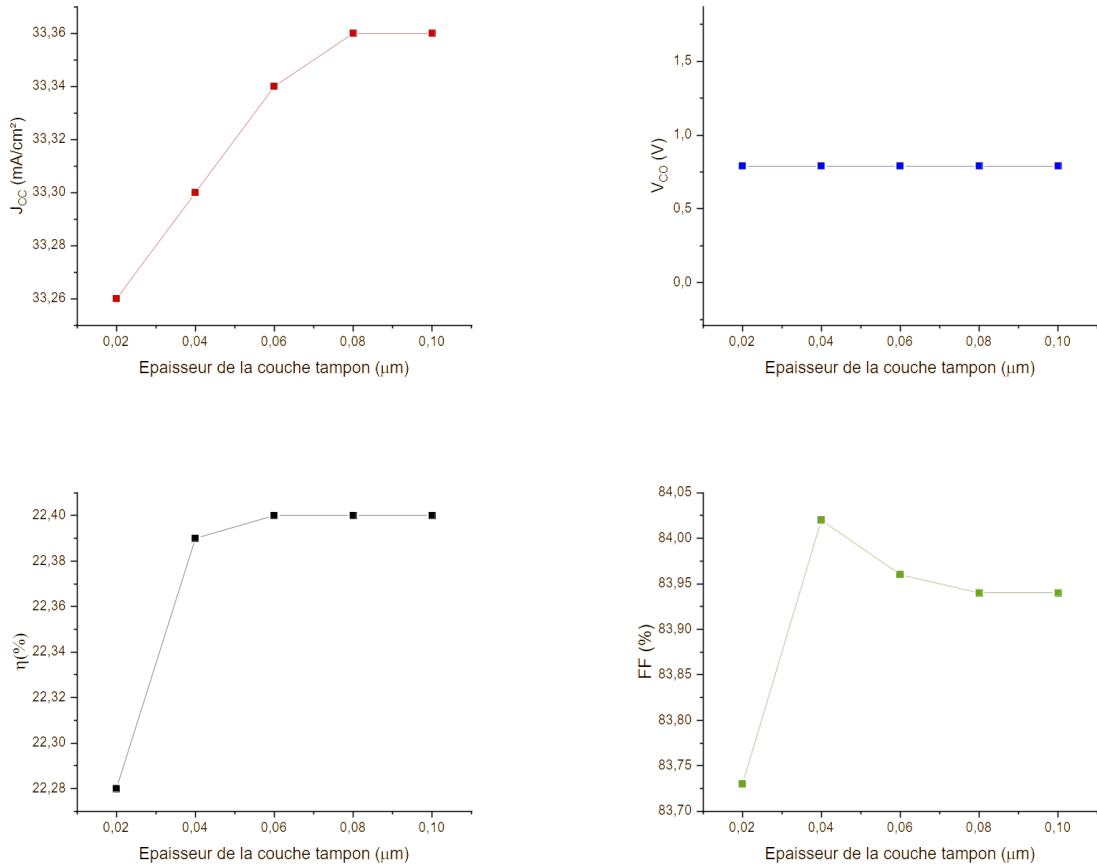


FIGURE 3.4.4 – Variation de J_{cc} , V_{co} , FF et η de la cellule solaire étudiée en fonction de l'épaisseur de la couche tampon CdS.

Les résultats obtenus montrent bien que l'épaisseur de la couche tampon exerce une influence relativement limitée sur les performances globales de la cellule dans la plage

considérée. Au-delà d'une certaine épaisseur, la jonction est correctement formée et les performances deviennent peu sensibles à une augmentation supplémentaire de l'épaisseur du **CdS**. La stabilisation de J_{cc} et du rendement (η) à partir de 80 nm indique que cette épaisseur est suffisante pour assurer le bon fonctionnement de la couche tampon.

3.4.5 Conclusion

L'étude d'optimisation réalisée a permis d'identifier les valeurs optimales du dopage et de l'épaisseur des couches **CZTSSe** et **CdS** pour la structure considérée. Les résultats montrent que les performances de la cellule sont particulièrement sensibles aux paramètres de la couche absorbante, tandis que l'influence des paramètres de la couche tampon sont limitée dans les plages étudiées. Les valeurs optimales obtenues ainsi que la caractéristique $J(V)$ de la structure optimisée de la cellule solaire **CZTSSe** sont présentés dans la figure (3.4.5)

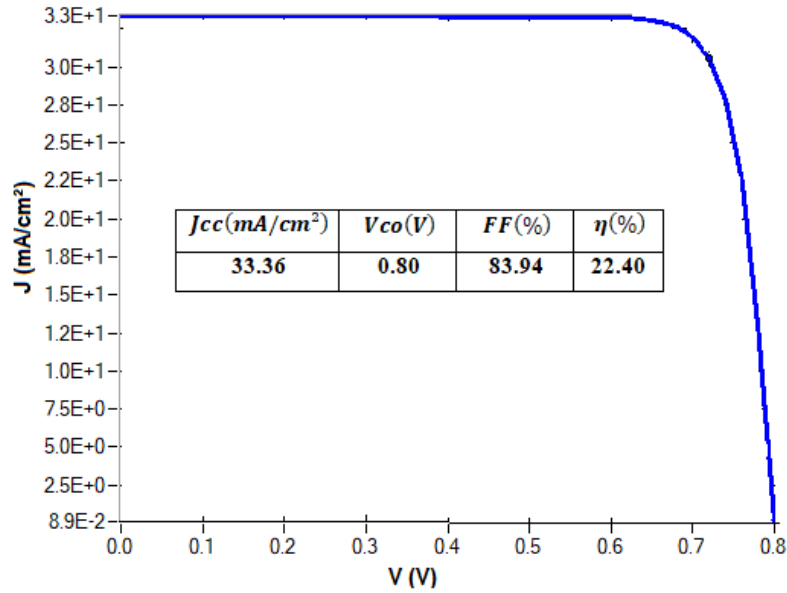


FIGURE 3.4.5 – Caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire optimisée.

Conclusion Générale

Le photovoltaïque constitue aujourd’hui une technologie mature et propre, favorisant la transition du système énergétique vers la neutralité carbone et contribuant à limiter le réchauffement climatique. Les technologies photovoltaïques à couches minces, caractérisées par une épaisseur réduite et une consommation moindre de matériaux, ainsi que par leur compatibilité avec des substrats flexibles et transparents, présentent un potentiel particulier pour les applications photovoltaïques à simple jonction et les structures tandem. Ce travail s’intéresse à l’étude numérique d’une cellule solaire à couches minces à base de **CZTSSe** ($\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S,Se})_4$), un matériau absorbeur composé d’éléments abondants, peu coûteux et respectueux de l’environnement.

Le premier chapitre présente les notions générales de l’énergie solaire et des cellules photovoltaïques ; le principe de fonctionnement des cellules solaires ainsi que les paramètres électriques caractérisant leurs performances sont exposés. Ensuite, un état de l’art des différentes générations photovoltaïques a été présenté mettant en évidence l’intérêt des technologies photovoltaïques à couches minces dans le développement de systèmes de conversion d’énergie performants.

Le deuxième chapitre porte sur l’étude du matériau **CZTSSe**. Les propriétés structurales, optiques et électriques du matériau sont présentées, suivi d’une description de la structure de base des cellules solaires qui l’utilisent comme couche absorbeur. Les progrès réalisés au cours des dernières années ainsi que les défis qui limitent encore l’amélioration de leur rendement, notamment les défauts intrinsèques, les phases secondaires et les pertes de tension en circuit ouvert sont présentés par la suite.

Dans le troisième chapitre, une simulation numérique a été réalisée en utilisant le logiciel **SCAPS-1D** afin d’optimiser les performances d’une cellule solaire à base de **CZTSSe**. Après la définition de la structure étudiée et des paramètres de simulation, l’influence de plusieurs paramètres, notamment le dopage et l’épaisseur de la couche absorbeur **CZTSSe** ainsi que le dopage et l’épaisseur de la couche tampon **CdS** sont

réalisés. Les résultats obtenus ont permis d'identifier les conditions les plus favorables au fonctionnement de la cellule et de mettre en évidence l'importance de l'optimisation des paramètres de structure pour améliorer les performances photovoltaïques.

Bibliographie

- [1] J. Nelson. *The Physics of Solar Cells*. Imperial College Press, 2003.
- [2] Martin A. Green. *Solar Cells : Operating Principles, Technology and System Applications*. Prentice-Hall, 2022.
- [3] M. A. Green, E. D. Dunlop, J. Hohl-Ebinger, M. Yoshita, N. Kopidakis, and X. Hao. Solar cell efficiency tables (version 66). *Progress in Photovoltaics : Research and Applications*, 33(4) :387–401, 2025.
- [4] Y. S. Ocaik and F. Bayansal. Advancing earth-abundant cztsse solar cells : Recent progress in efficiency and defect engineering. *Nanomaterials*, 15(21) :1617, 2025.
- [5] Antonio Luque and Steven Hegedus. *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering*. Wiley, 2nd edition, 2011.
- [6] B. Viswanathan. *Energy Sources : Fundamentals of Chemical Conversion Processes and Applications*. Newnes, 2016.
- [7] Leonardo G. Paterno. Nanomaterials : Solar energy conversion. In *Nanoscience and its Applications*, chapter 1, pages 1–30. Elsevier, Oxford, 2017.
- [8] M. Benaïcha. *Contribution à l'étude des propriétés physiques et électriques des composés semi-conducteurs III-V : Application à l'effet photovoltaïque*. Doctoral dissertation, Université de Batna 2 - Mostafa Ben Boulaïd.
- [9] M. T. Dang. *Elaboration de cellules solaires photovoltaïques à base de polymères conjugués : études des systèmes réticulables*. Doctoral dissertation, Bordeaux 1, 2009.
- [10] O. Bonnaud. *Physique des solides, des semiconducteurs et dispositifs*, volume 1. Université de Rennes, 2003.
- [11] Donald A. Neamen. *Semiconductor Physics and Devices : Basic Principles*. McGraw-Hill, 2003.
- [12] R. Fillon. *Etude des propriétés électroniques de couches minces de CZTSSe*. Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes, 2016.

- [13] T. Desrues. *Développement de cellules photovoltaïques à hétérojonctions silicium et contacts en face arrière*. Doctoral dissertation, INSA Lyon, 2009.
- [14] N. Oleksiy. *Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2005.
- [15] A. Mahfoud. *Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement*. Doctoral dissertation, 2018.
- [16] E. Giudicelli. *Evaluation d'une filière technologique de cellules photovoltaïques multi-jonctions à base de matériaux antimoniures (III-V)-Sb pour applications aux très fortes concentrations solaires*. Doctoral dissertation, Université Montpellier, 2016.
- [17] T. Lemerancier. *Développement de cellules solaires pérovskites semi-transparentes de type PIN dans la perspective d'une application tandem*. Doctoral dissertation, Université Savoie Mont Blanc, 2020.
- [18] M. Arif. *Investigation of new approaches for the realization of InGaN based solar cells*. Doctoral dissertation, Université de Lorraine, 2016.
- [19] M. Richet. *Cellules photovoltaïques organiques sur substrat flexible avec électrode supérieure transparente*. Doctoral dissertation, Université de Bordeaux, 2019.
- [20] E. Placzek-Popko. Top pv market solar cells 2016. *Opto-Electronics Review*, 25(2) :55–64, 2017.
- [21] V. A. Milichko, A. S. Shalin, I. S. Mukhin, A. E. Kovrov, A. A. Krasilin, A. V. Vinogradov, others, and C. R. Simovski. Solar photovoltaics : current state and trends. *Physics–Uspekhi*, 59(8) :727–772, 2016.
- [22] T. M. Razykov, C. S. Ferekides, D. Morel, E. Stefanakos, H. S. Ullal, and H. M. Upadhyaya. Solar photovoltaic electricity : Current status and future prospects. *Solar Energy*, 85(8) :1580–1608, 2011.
- [23] S. Sundaram, K. Shanks, and H. Upadhyaya. Thin film photovoltaics. In *A Comprehensive Guide to Solar Energy Systems*, pages 361–370. Academic Press, 2018.
- [24] Giovanni Altamura. *Développement de cellules solaires à base de films minces CZTSSe*. Doctoral dissertation, Université de Grenoble, 2014.
- [25] S. Kerour. *Cellules solaires en couches minces à base du $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ et des matériaux non polluants : Étude et optimisation*. Doctoral dissertation, 2022.
- [26] H. Zhou, W. C. Hsu, H. S. Duan, B. Bob, W. Yang, T. B. Song, and Y. Yang. Czts nanocrystals : a promising approach for next generation thin film photovoltaics. *Energy & Environmental Science*, 6(10) :2822–2838, 2013.

- [27] M. S. Kumar, S. P. Madhusudanan, and S. K. Batabyal. Substitution of zn in earth-abundant $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S}, \text{Se})_4$ based thin film solar cells – a status review. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 185 :287–299, 2018.
- [28] Z. Shi, D. Attygalle, and A. H. Jayatissa. Kesterite-based next generation high performance thin film solar cell : Current progress and future prospects. *Journal of Materials Science : Materials in Electronics*, 28(2) :2290–2306, 2017.
- [29] S. Temgoua. *Optimisation et compréhension des dispositifs à base de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{Sx}, \text{Se}1-x)_4$ pour applications photovoltaïques en couches minces*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2016.
- [30] S. M. Sivasankar, C. D. O. Amorim, and A. F. D. Cunha. Progress in thin-film photovoltaics : A review of key strategies to enhance the efficiency of cigs, cdte, and cztsse solar cells. *Journal of Composites Science*, 9(3) :143, 2025.
- [31] S. MANSOURI. *Etude et simulation des propriétés électriques et optiques des cellules solaires à base de K esterites*. Doctoral dissertation, Facult  des sciences et technologie, 2025.
- [32] R. Paul, S. Shukla, T. R. Lenka, F. A. Talukdar, V. Goyal, N. E. I. Boukortt, and P. S. Menon. Recent progress in czts (cuznsn sulfide) thin-film solar cells : A review. *Journal of Materials Science : Materials in Electronics*, 35(3) :226, 2024.
- [33] Alphousseyni Sagna, Kamal Djessas, Cheikh Sene, Belaqziz Mohamed, et al. Growth, structure and optoelectronic characterizations of high quality $\text{cu}_2\text{znsns}_4$ thin films obtained by close spaced vapor transport. *Superlattices and Microstructures*, 85 :918–924, September 2015.
- [34] B. Duan, J. Shi, D. Li, Y. Luo, H. Wu, and Q. Meng. Underlying mechanism of the efficiency loss in cztsse solar cells : Disorder and deep defects. *Science China Materials*, 63(12) :2371–2396, 2020.
- [35] A. Ait Abdelkadir, E. Oublal, M. Sahal, and A. Gibaud. Numerical simulation and optimization of n-al-zno/n-cds/p-cztse/p-nio (htl)/mo solar cell system using scaps-1d. *Results in Optics*, 8 :100257, 2022.
- [36] S. H. Cheragee and M. J. Alam. Device modelling and numerical analysis of high-efficiency double absorbers solar cells with diverse transport layer materials. *Results in Optics*, 15 :100647, 2024.
- [37] A. Benami. Effect of czts parameters on photovoltaic solar cell from numerical simulation. *Journal of Energy and Power Engineering*, 13(1) :32–36, 2019.
- [38] Simon M. Sze and Kwok K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley, 3rd edition, 2006.

- [39] Robert F. Pierret. *Semiconductor Device Fundamentals*. Addison-Wesley, 1996.
- [40] Marc Burgelman, Pierre Nollet, and Stefaan Degrove. Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films*, 361–362 :527–532, 2000.
- [41] Chahrazad Boudaoud. *Cellules solaires Tandem à base d’InGaN, pour haut rendement : Modélisation et Simulation des performances*. Doctoral dissertation, Université Abou Bekr Belkaid - Tlemcen, Tlemcen, Algérie, 2021.
- [42] M. Minbashi, M. K. Omrani, N. Memarian, and D. H. Kim. Comparison of theoretical and experimental results for band-gap-graded cztsse solar cell. *Current Applied Physics*, 17(10) :1238–1243, 2017.
- [43] D. K. Dwivedi. Modeling of cztsse solar photovoltaic cell for window layer optimization. *Optik*, 222 :165407, 2020.

Résumé

Avec l'augmentation de la demande mondiale en énergie et la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre, le développement de technologies photovoltaïques performantes, économiques et respectueuses de l'environnement constitue un enjeu majeur. Parmi les matériaux absorbeurs destinés aux cellules solaires à couches minces, $Cu_2ZnSn(S, Se)_4$ (**CZTSSe**) suscite un intérêt croissant grâce à sa composition à base d'éléments abondants, non toxiques et à faible coût, ainsi qu'à ses propriétés optoélectroniques favorables à la conversion de l'énergie solaire. Ce mémoire porte sur l'étude par simulation numérique d'une cellule solaire à couche mince à base de **CZTSSe** en utilisant le logiciel SCAPS-1D. L'objectif principal est l'optimisation des performances de la cellule photovoltaïque, notamment la densité du courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert, et le rendement. Pour ce faire, nous avons étudié l'influence du dopage et de l'épaisseur des couches **CZTSSe** et **CdS** sur les performances de la cellule photovoltaïque. Les résultats obtenus montrent que les performances de la cellule sont fortement influencées par les caractéristiques de la couche absorbante. L'optimisation des paramètres étudiés a permis d'améliorer le rendement de conversion de 15,84% à 22,40%.

Mots-clés : Cellule solaire à couches minces, **CZTSSe**, **SCAPS-1D**, simulation numérique, optimisation.