



Effet de la fraction volumique de la couche intrinsèque sur les performances d'une cellule solaire p-i-n à base de silicium microcristallin

A. Belfar*, S. Mechraoui, H. Nassima et H. Aït-Kaci

Laboratoire de Physique des Plasmas, Matériaux Conducteurs et leurs Applications (LPPMCA),

Université des Sciences et de la Technologie d'Oran. USTO 'M.B.', BP 1505 El-M'naouer. Oran 31000, Algérie.

*Corresponding author. Tel: +213 41 56 03 51; Fax: +213 41 56 03 51.

E-mail address: a_1974b@yahoo.fr

Résumé — Le présent travail consiste en l'optimisation des paramètres structuraux qui caractérisent une cellule solaire de type p-i-n, à base de silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{-Si:H}$). L'objectif étant la fabrication d'une structure tandem de type p-i-n(a-Si:H)/p-i-n($\mu\text{-Si:H}$), nous avons simulé deux cellules solaires avec deux fractions volumiques différentes, dans la couche intrinsèque ($F_C \sim 93\%$) et ($F_C \sim 79\%$). Le choix de nos paramètres de simulation repose principalement sur les résultats de travaux expérimentaux, obtenus sur des couches fabriquées par la technique (RF-PECVD). Les résultats de la simulation montrent qu'une fraction volumique élevée engendre un courant de court-circuit (J_{SC}) élevé, une efficacité (E_{ff}) et une tension de circuit ouvert (V_{OC}) faibles, comparativement au cas d'une faible fraction volumique. La diminution de V_{OC} quand F_C augmente, est quantitativement attribuée à trois facteurs, à savoir, la largeur des queues de bandes, la densité de défauts élevée et la faible énergie de bande interdite. Les paramètres permettant de meilleures performances de la cellule à fraction volumique élevée étant déterminés, nous avons étudié l'effet du gap de la couche fenêtre de cette cellule sur caractéristique de sortie de la cellule.

Mots Clés — Silicium microcristallin, cellule solaire, fraction volumique, queue de bande, J_{SC} , V_{OC} .

I. INTRODUCTION

Les cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) ont longtemps suscité un intérêt croissant de la part des industriels. Malheureusement, l'une des faiblesses des cellules solaires, basées sur a-Si:H, est le phénomène de dégradation, induit par la lumière (effet Steabler-Woronski) [1]. Ce phénomène conduit à une diminution du rendement initial des cellules. Le passage vers

un autre matériau, présentant de meilleures propriétés optoélectroniques, était donc nécessaire. Le meilleur candidat est le silicium microcristallin hydrogéné ($\mu\text{-Si:H}$), qui est un matériau composite constitué de régions cristallines, de joints de grains colonnaires, et de régions désordonnées (zones amorphes) [2]. Les propriétés et la structure microcristalline dépendent des paramètres de dépôt, tels que le rapport des concentrations en silane et en hydrogène dans la phase gazeuse, la fréquence d'excitation du plasma (13.6 MHz), la température du substrat et la vitesse de dépôt [3]. Un des paramètres les plus importants du procédé de fabrication de la structure finale est le rapport de la concentration en silane à la concentration totale de gaz ($[\text{SiH}_4]/[\text{SiH}_4 + \text{H}_2]$). En augmentant la concentration en silane, la fraction volumique cristalline diminue et des grains de silicium cristallin, plus petits, sont observés au sein de la matrice de silicium amorphe. Pour des cellules solaires, basées sur $\mu\text{-Si:H}$, la composition du matériau choisie est celle correspondant à la zone de transition, entre les phases amorphe et cristalline. La présence de joints de grains et de zones amorphes conduit à une faible mobilité des porteurs [4]. Les paramètres caractéristiques d'une cellule solaire à base de silicium microcristallin $\mu\text{-Si:H}$ dépendent de la microstructure. La tension de circuit-ouvert V_{OC} diminue lorsque la fraction volumique de la couche intrinsèque augmente de 60% jusqu'à plus de 90% [5]. Afin d'améliorer les rendements des cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné et microcristallin, des cellules tandem (micromorph) ont été réalisées. Le rendement photovoltaïque stabilisé le plus élevé (12 %) pour des cellules solaires de type tandem a été obtenu pour une configuration a-Si:H/ $\mu\text{-Si:H}$ [6]. Dans ce travail et dans le but d'optimiser les paramètres d'une cellule solaire p-i-n à base de silicium microcristallin pour une application dans la configuration tandem, nous avons simulé deux cellules solaires avec deux fractions volumiques (F_C) différentes, dans



la couche intrinsèque ($F_C \sim 93\%$) et ($F_C \sim 79\%$). Le choix des paramètres de simulation repose sur les résultats de travaux expérimentaux, obtenus pour des couches fabriquées par la technique (RF-PECVD). Les meilleures performances sont obtenues pour une cellule à faible fraction volumique de la couche intrinsèque ($F_C \sim 79\%$). Nous avons poussé notre étude jusqu'à l'examen de l'effet du gap de la couche fenêtre P, sur les caractéristiques de sortie de cette cellule. Un bon résultat est obtenu pour un gap de 1.45 eV.

II. MODELE DE SIMULATION

Le modèle électro-optique unidimensionnel AMPS-1D (Analysis of Microelectronic and Photonic Structures) développé à l'université de Pennsylvanie [7]. Il résout l'équation de poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous simultanément à l'état d'équilibre et hors équilibre thermodynamique. Dans nos calculs, trois variables, définissent complètement l'état d'une cellule : Le niveau du vide ψ et les quasi-niveaux de fermi E_{FP} et E_{FN} . Une fois ces variables dépendantes sont connues en fonction de x , toutes les autres informations sur le système peuvent être déterminées en fonction de la position dans la cellule. La caractéristique courant-tension, le rendement de conversion (η %) ainsi que la réponse spectrale sont obtenus. D'autres caractéristiques telles que le champ électrique, la distribution des porteurs de charges libres et piégées peuvent être calculées. Le modèle du gap utilisé dans nos calculs comprend les états de queue de bandes et les fonctions de distribution gaussiennes, pour simuler les états des liaisons pendantes profonds.

III. RESULTATS DE SIMULATION ET DISCUSSION

A. Structure des cellules p-i-n à base de silicium microcristallin et choix des paramètres de simulation

Les cellules $\mu\text{-Si:H}$ simulées correspondent à la structure ZnO / P- $\mu\text{-Si:H}$ / I- $\mu\text{-Si:H}$ / N- $\mu\text{-Si:H}$ / Al. Elles ont été déposées par RF-PECVD [8,9]. Les couches dopées P- $\mu\text{-Si:H}$ et N- $\mu\text{-Si:H}$ sont déposées dans les mêmes conditions de dépôts, pour les deux cellules. Les deux couches intrinsèques I- $\mu\text{-Si:H}$ sont déposées avec différentes concentrations en silane:

- (i) Cellule à grande fraction volumique (93%)
 $\text{SiH}_4 : \text{H}_2 = 4 : 200$.
- (ii) Cellule à faible fraction volumique (79%)
 $\text{SiH}_4 : \text{H}_2 = 6 : 200$.

La fraction volumique F_C est définie comme suit [10]:

$$F_C = (I_C + I_{GB}) / (I_C + I_{GB} + \beta I_A)$$

Où I_C , I_{GB} et I_A sont les intensités de la phase cristalline, l'interface de joint de grain et la phase amorphe respectivement. β est un rapport de la phase amorphe à la phase cristalline, généralement supposé égal à 1 [11]. dans la couche intrinsèque ns Nous avons regroupé dans le Tableau 1 les paramètres d'entrée, utilisés pour la simulation des deux cellules p-i-n à base de $\mu\text{-Si:H}$.

B. Analyse de l'effet de la fraction volumique de la couche active sur les caractéristiques de la cellule :

La figure 1(a) représente la caractéristique courant-tension $J(V)$ sous éclairage. On constate que la cellule $\mu\text{-Si:H}$, ayant une couche active avec une fraction volumique élevée, produit un courant de court-circuit ($J_{SC} = 18.86 \text{ mA/cm}^2$) plus important que celui produit par la cellule ayant une couche active avec une fraction volumique faible ($J_{SC} = 16.90 \text{ mA/cm}^2$). Ce résultat se traduit par une meilleure absorption dans le domaine du spectre visible, pour la cellule ayant une fraction volumique élevée $F_C \sim 93\%$ (figure 1(b)). D'un autre côté, la tension de circuit-ouvert est moins importante dans la première cellule ($V_{OC} = 0.47 \text{ V}$) que dans la deuxième cellule ($V_{OC} = 0.56 \text{ V}$).

La diminution de V_{OC} dans la cellule avec une fraction volumique $F_C \sim 93\%$ par rapport à celle dont la fraction volumique est $F_C \sim 73\%$ est quantitativement attribuée à trois facteurs ; la largeur de queues de bandes, la densité de défauts (gaussiens) élevée et un faible gap de mobilité [9].

Pour étudier l'effet de ces différents facteurs, nous avons effectué une analyse de la sensibilité des cellules à base du silicium microcristallin $\mu\text{-Si:H}$. Une valeur relativement élevée de la largeur de queues de bande et de la densité de défauts gaussiens a été adopté pour le cas de la cellule ayant une fraction volumique élevée (Tableau I). La densité de trous piégés près de l'interface P/I augmente (figure 2). Par conséquent un champ électrique faible s'étend dans la couche absorbante (figure 3). Le champ étant faible la collection des paires électrons- trous est réduite.



Le 2^{ème} Séminaire International sur les Energies Nouvelles et Renouvelables

The 2nd International Seminar on New and Renewable Energies

Unité de Recherche Appliquée en Energies Renouvelables,
Ghardaïa – Algérie 15, 16 et 17 Octobre 2012



TABLEAU I
Paramètres d'entrée utilisés pour la simulation des deux cellules p-i-n à base de $\mu\text{-Si:H}$.

Paramètres	P- $\mu\text{-Si:H}$	P/I	I- $\mu\text{-Si:H}$		N- $\mu\text{-Si:H}$
			F _C faible	F _C élevé	
Épaisseur (nm)	30	10	772.8	843.0	15
Gap de mobilité (E_{μ}) (eV)	1.2-1.55	1.40	1.40	1.33	1.80
N_D (N_A) (cm^{-3})	(3×10^{19})	0	0	0	1×10^{19}
Énergie caractéristique (BV)(eV)	0.02	0.04	0.02	0.04	0.05
Énergie caractéristique (BC)(eV)	0.01	0.03	0.01	0.02	0.03
Mobilité des électrons (cm^2/Vs)	100	32	32	120	20
Mobilité des trous (cm^2/Vs)	25	8	8	30	4
Densités des défauts Gaussiens (cm^{-3})	5×10^{16}	3×10^{17}	4×10^{16}	8×10^{16}	9×10^{18}
σ neutres (queues, milieu du gap) (cm^2)	10^{-15}	10^{-15}	4×10^{-17}	4×10^{-17}	1×10^{-16}
σ chargés (queues, milieu du gap)(cm^2)	2×10^{-14}	10^{-14}	4×10^{-15}	4×10^{-15}	1×10^{-15}
Affinité électronique (eV)	4	4	4	4	4
N_C, N_V (cm^{-3})	2×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{20}
Préfacteurs G_{D0}, G_{A0} (cm^{-3})	4×10^{21}	4×10^{21}	4×10^{21}	4×10^{21}	4×10^{21}

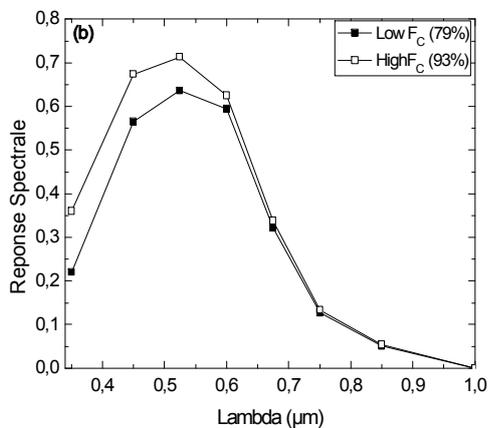
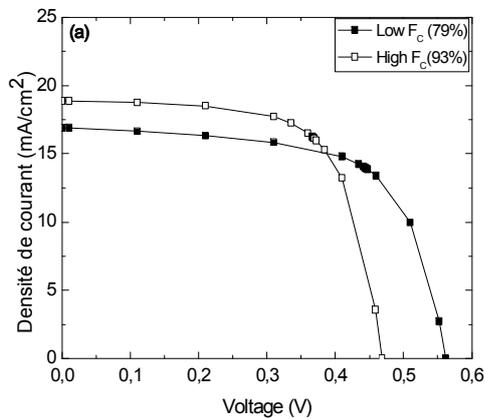


Fig. 1 (a) Caractéristique J(V) sous éclaircissement, (b) réponse spectrale d'une cellule à base de $\mu\text{-Si:H}$, avec deux fractions volumiques différentes de la couche intrinsèque.

Ces deux derniers résultats expliquent la cause de diminution de V_{OC} dans le cas d'une cellule avec une fraction volumique élevé. Les résultats de notre simulation ont déjà été confirmés expérimentalement par certains auteurs [8,9]. Parmi les raisons de la forte densité de trous piégés, dans le cas d'une cellule a fraction volumique élevé, le gap de mobilité réduit ($E_g = 1.33$ eV). La densité des porteurs générés devrait être plus élevée quand le gap de mobilité est réduit a cause des quasi-niveaux de Fermi proches (figure 4). Nous constatons que la densité de trous piégés, dans la couche intrinsèque, de gap 1.33 eV est importante par rapport à celle de la couche avec un gap de 1.4 eV (figure 2).

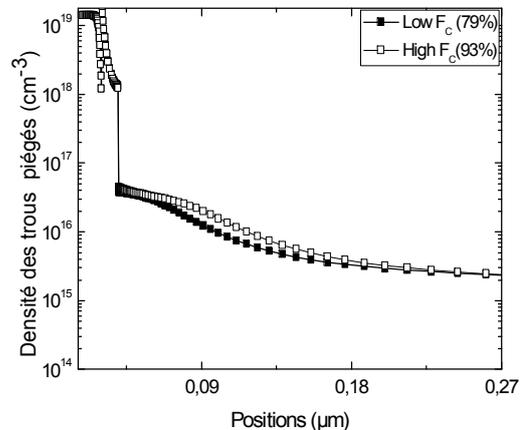


Fig. 2 Densité des trous piégés dans une cellule p-i-n à base de silicium $\mu\text{-Si:H}$.



L'interface P/I est caractérisée par une forte densité de défauts $3.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (Tableau 1), ce qui induit des pièges à trous. Donc champ électrique élevé ce produit à l'interface puis il diminué rapidement dans la couche active (figure 3). Ce résultat explique également la faible valeur de V_{OC} , obtenue pour la cellule ayant un gap $E_g = 1.33 \text{ eV}$.

L'augmentation de V_{OC} dans une cellule microcristalline ayant une couche intrinsèque avec une fraction volumique faible a été observée dans d'autres travaux expérimentaux [13-15].

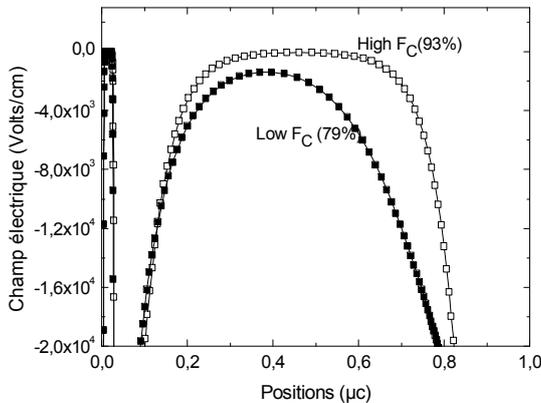


Fig. 3 Profil du champ électrique dans une cellule p-i-n à base de silicium $\mu\text{c-Si:H}$.

D'autres auteurs ont proposé pour V_{OC} l'expression suivante [12] : comme suit :

$$eV_{OC} = (E_{Fe} - E_{Fh})$$

Où e est la charge d'électron, E_{Fe} et E_{Fh} quasi-niveau de fermi des électrons et des trous respectivement.

Cette relation explique qu'un rapprochement entre les deux quasi-niveaux de fermi, comme nous le constatons dans la figure 4 dans le cas de la cellule ayant une fraction volumique élevée (faible gap $E_g = 1.33 \text{ eV}$), conduit à la diminution de la valeur de V_{OC} (Tableau II).

Les résultats de la simulation des deux cellules solaires à fraction volumique élevé et à faible fraction volumique, sont présentés et comparés avec des résultats expérimentaux dans le Tableau 2. Nous constatons, que nos résultats coïncident avec les résultats expérimentaux. Cependant, la cellule $\mu\text{c-Si:H}$, ayant une couche active avec une fraction volumique élevée, produit un courant de court-circuit plus important par rapport à celui produit par la cellule ayant une couche active avec une fraction volumique faible. Par contre l'efficacité de la cellule avec $F_C=93\%$ est faible comparée à celle de la cellule avec $F_C=79\%$. Cela est dû à la diminution de V_{OC} .

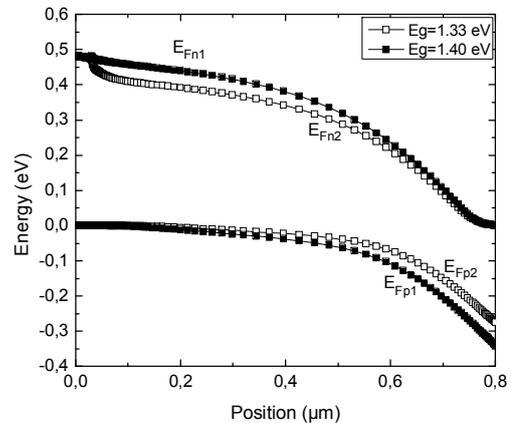


Fig. 4 Diagrammes de bandes sous éclairage d'une cellule p-i-n à base de silicium $\mu\text{c-Si:H}$, avec deux gaps de mobilité différents de la couche I.

TABLEAU II

Comparaison des résultats simulés et expérimentaux de la référence [9].

Épaisseur (nm)	F_C (%)		J_{SC} (mA/cm^2)	V_{OC} (V)	FF	Efficacité (%)
843.0	93	Expt	19.94	0.46	0.63	5.79
		Model	18.86	0.47	0.67	5.95
772.8	79	Expt	16.76	0.54	0.68	6.22
		Model	16.90	0.56	0.65	6.20

C. Influence du gap de la couche P- $\mu\text{c-Si:H}$:

Dans le but de voir l'effet du gap de la couche fenêtre P- $\mu\text{c-Si:H}$, sur les performances de la cellule qui donne une meilleure valeur de V_{OC} , nous avons étudié les paramètres de sortie de la cellule avec différentes valeurs du gap de la couche P. Les valeurs choisies pour E_g sont comprises entre 1.2 eV et 1.55 eV. En gardant l'épaisseur de la couche P constante (30 nm), les résultats de la simulation sont présentés dans la figure 5. Tous les paramètres J_{SC} , Efficacité, FF et V_{OC} augmentent en fonction de valeur du gap. Ces paramètres saturent à partir d'une valeur du gap égale à 1.45 eV.

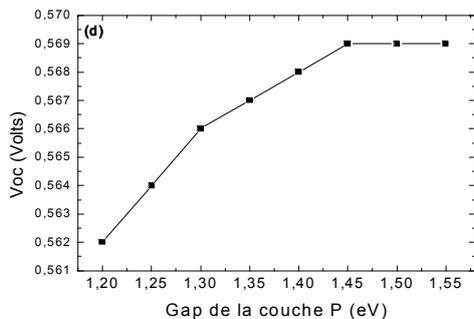
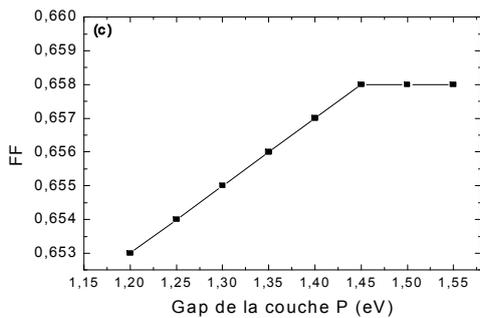
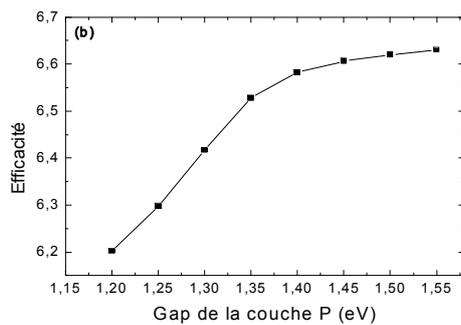
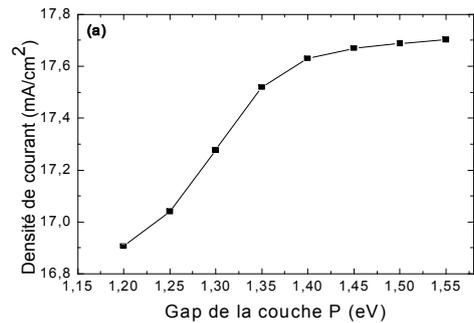


Fig. 5 Variation des caractéristiques d'une cellule p-i-n à base de silicium microcristallin ($F_C = 79\%$), en fonction du gap de la couche P.

Cette allure des courbes est interprétée comme suit :

Dans le cas d'une cellule ayant un gap de 1.45 eV pour la couche P, la courbure de bande E_{sbb} (surface band bending), au niveau du contact TCO/P est moins large, comparée à celle de la cellule avec une couche P à gap réduit (1.2 eV). Cela explique l'augmentation des performances de la cellule dans l'intervalle de 1.2-1.45 eV. Au delà de la valeur de 1.45 eV la discontinuité de bande de valence ΔE_v , à l'interface P/I entre la couche P (fenêtre) et la couche I (absorbante), devient importante. L'augmentation de ΔE_v gêne la collection des trous, ce qui se traduit par la saturation observée sur les différentes courbes de la figure 5.

IV. CONCLUSIONS

Une étude comparative entre deux cellules de types p-i-n à bases de silicium microcristallin avec une valeur différente de la fraction volumique de la couche intrinsèque a été réalisée. Le programme de simulation AMPS-1D a été utilisé pour simuler la caractéristique courant-tension $I(V)$ sous illumination, la réponse spectrale, la densité de trous piégés, le champ électrique ainsi que le diagramme des bandes d'énergies. Les résultats expérimentaux de la cellule fortement cristallisée ont été correctement modélisés en marquant une grande mobilité de porteurs, un faible gap de mobilité et des queues de bande un peu larges. Cette étude comparative nous a montré que les meilleures caractéristiques sont obtenues dans le cas de la cellule microcristalline $\mu\text{-Si:H}$ avec une fraction volumique faible ($F_C = 79\%$). Nous avons étudié la sensibilité de cette cellule à la variation du gap de la couche fenêtre (P- $\mu\text{-Si:H}$). Comme résultat, une cellule, les meilleures performances sont obtenues avec un gap de l'ordre de 1.45 eV. Finalement, nous avons déduit que les paramètres d'une cellule microcristalline dépendent bien de sa microstructure.

ACKNOWLEDGMENT

We acknowledge the use of AMPS-1D program developed by Pr. Fonash's group of Pennsylvania State University.

REFERENCES

- [1] D.L. Staebler and G.R. Wronski, Appl. Phys. Lett. 31 (1977) 292.
- [2] A. Shah, J. Meier, E. Vallat-Sauvian, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, U. Graf, Solar Energy Materials & Solar cells 78 (2003) 469-491.
- [3] H. Kopenner, J. Meier, P. Torres, D. Fischer, A. Shah, Appl. Phys. A 69 (1999) 169.



Le 2^{ème} Séminaire International sur les Energies Nouvelles et Renouvelables

The 2nd International Seminar on New and Renewable Energies

Unité de Recherche Appliquée en Energies Renouvelables,
Ghardaïa – Algérie 15, 16 et 17 Octobre 2012



- [4] Moulin Etienne, “ *Accroissement de l’absorption lumineuse au sein de cellules solaires a couches minces de silicium par addition de nanoparticules et nabostructures métalliques* ”, thèse de doctorat, école doctorale sesames, (2009), p 40
- [5] E.V. Johnson, M. Nath, P. Roca I Cabarrocas, A. Abramov, P. Chatterjee., why does the open-circuit voltage in a micro-crystalline silicon PIN solar cell decrease with increasing crystalline volume fraction., *J. of Non-Crystalline Solids* 354 (2008) 2455-2459.
- [6] Meier J., Keppner H., Dubail S., Droll U., Torres P., Pernet P., Ziegler Y., Selvan J., Cuperus J., Fischer D., Shah A., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 507 (1998) 139-144
- [7] S. Fonash et al., <http://www.cneu.psu.edu/amps/>.
- [8] P. Roca I Cabarrocas, J.B.Chévrier, J. Huc, A. Lioret, J. Y. Parey, J.P.M. Schmitt, *J. Vac. Sci. Technol. A* 9 (1991) 2331
- [9] M. Nath, P. Roca I Cabarrocas, E.V. Johnson, A. Abramov, P. Chatterjee., *Thin Solid Films* 516 (2008), 6974-6978..
- [10] Shiyong Liu, Xiangbo Zeng, Wenbo Peng, Haibo Xiao, Wenjie Yao, Xiaobing Xie, Chao Wang, Zhangu Wang, *J. Non-Cryst. Solids* 357 (2011) 121-125.
- [11] D. Das, *Thin Solid Films* 476 (2005) 237.
- [12] L. Jiang, J. H. Lyou, S. Rane, E. A. Schiff, Q. Wang, Q. Yuan, “ Open-circuit voltage physics in amorphous silicon solar cells”, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* , Vol. 609, 2000, pp. A18.3.1-A.18.3.11.
- [13] P. Chatterje, *J. Appl. Phys.* 76 (1994) 1301.
- [14] T. Merdzhanova, R. Carius, S. Klein, F. Finger, D. Dimova-Malinovska, *Thin Solid Films* 451&452(2004) 285
- [15] C. Droz, E. Vallat-Sauvian, J.Bailat, L. Feiknecht, J.Meier, A. Shah, J. Meier, *Solar Energy Materials & Solar cells* 81 (2004) 61.