

Modèle de calculs des coefficients d'absorption théorique de la cellule solaire n-CdS/p-CdTe

Oumar A. Niasse^{1*}, Babacar Mbengue¹, By A. BA¹,
Issakha Youm^{1,2} et Abdoulaye M. Ndiaye²

¹ Laboratoire des Semi-conducteurs et d'Energie Solaire, Département de Physique
Faculté des Sciences et Techniques, Université Cheikh Anta Diop, Dakar, Sénégal

² Unité de Formation et de Recherche de Sciences Appliquées
et de Technologie, UGB Saint-Louis, Sénégal.

³ Centre d'Etude et de Recherche sur les Energies Renouvelables (CERER)

(reçu le 20 Janvier 2010 – accepté le 28 Juin 2010)

Abstract - *This paper, theoretical model for determination of absorption coefficient of semiconductor is presented. The different models are based in the dielectric function (ϵ) and the optical constants of semiconductors CdS and CdTe. The model dielectric function, the harmonic oscillator (HOA), the Critical Point Standards (SPC) [2] and Rakshani models are presented to choose the one that gives the best agreement with experimental result. The results obtained from these models are presented in order to review their influence on the spectral response of a solar cell CdS/CdTe.*

Résumé - *Dans cet article, des modèles théoriques de détermination du coefficient d'absorption de semi-conducteur sont proposés à partir de différentes méthodes de calcul. Le modèle de la fonction diélectrique, ainsi que ceux de l'Oscillation Harmonique (HOA), du Point Critique Standards (SPC) [2] et de Rakshani ont été modélisé sur la bande d'énergie de 1.1 - 5.7 eV. Les résultats obtenus à partir de ces modèles sont à la base du calcul du rendement quantique interne d'une cellule solaire CdS/CdTe et comparés avec ceux de mesures de rendement quantique de deux cellules solaires fabriquées au Laas*.*

Mots clés: Cellule solaire - Tellure de cadmium - Coefficient d'absorption - Bande d'énergie.

1. INTRODUCTION

La détermination du coefficient d'absorption des semi-conducteurs pose encore des problèmes dans l'étude des matériaux [3]. A travers cette étude, nous présentons des modèles de détermination du coefficient d'absorption. En considérant les transitions couvrant la largeur de bande de 1.1 à 5,7 eV, des expressions du coefficient d'absorption proposées par divers auteurs dont Adachi *et al.* [1].

Après avoir présenté les modèles de détermination du coefficient d'absorption, nous représentons graphiquement des courbes de réponses spectrales pour voir laquelle interprète le mieux les courbes expérimentales de la cellule solaire CdS/CdTe.

2. PRESENTATION DES DIFFERENTS MODELES

Plusieurs modèles ont été développés pour rendre compte des propriétés optiques du tellure de cadmium. Nous en citerons quelques uns:

* omaraniasse@yahoo.fr _ basba@ucad.sn _ babacarmbengue@yahoo.fr _ basba@ucad.fr

- le modèle développé par Rakhshani [5]
- le modèle du point critique standard (Standard Critical Point: SCP),
- le modèle de l'approximation de l'oscillateur harmonique (HOA),
- le modèle de la fonction diélectrique (MDF).

Ces modèles permettent de calculer les constantes optiques du CdTe et d'établir analytiquement leurs expressions en fonction de l'énergie.

2.1 Modèle de Rakhshani

Dans l'étude du coefficient d'absorption, Rakhshani [5] propose des expressions analytiques du coefficient d'absorption pour des zones d'énergie bien définies correspondant à des transitions précises. Des mesures de transmittance ont été effectuées sur des films constitués de minces couches de CdTe.

Les expressions du coefficient d'absorption sont données dans le cas du CdTe monocristallin et dans le cas d'une couche polycristalline et en considérant les transitions directes et indirectes permises.

Le coefficient d'absorption du tellure de cadmium est ensuite calculé à partir de la somme des différentes expressions données pour chacun des intervalles d'énergie et qui correspondent aux différentes transitions observées dans le semi-conducteur.

Pour le matériau monocristallin, le nombre de transitions est égal à cinq, alors qu'il est de six dans le cas du tellure de cadmium polycristallin. Notons que l'étude a été faite dans la bande d'énergie (1,50 eV - 3,34 eV) pour le monocristal et dans la gamme (1,35 eV - 3,26 eV) pour le polycristal. Les valeurs du coefficient d'absorption ont été calculées en fonction de l'énergie et reportées sur la figure 2.

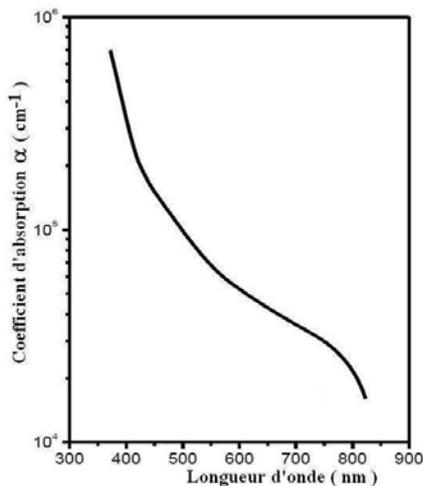


Fig. 1: Coefficient d'absorption du CdTe en fonction de la longueur d'onde (Modèle de Rakhshani)

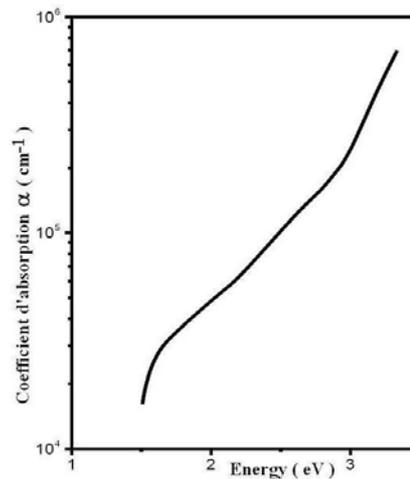


Fig. 2: Coefficient d'absorption du CdTe en fonction de l'énergie (Modèle de Rakhshani)

Interprétation

Les transitions directes entre la bande de valence et la bande de conduction à $E_0 = 1,5$ eV et les interactions spin – orbite ne sont pas clairement révélées sur le spectre de

la figure. En plus, on ne note aucune transition liée aux excitons dans la gamme d'énergie étudiée.

L'observation de la figure montre aussi que les valeurs du coefficient d'absorption ne s'étalent que sur une gamme de longueurs d'onde entre 380 nm et 820 nm, cela ne permet pas d'avoir le profil du coefficient d'absorption pour les énergies supérieures à 3 eV où des effets importants des excitons sont révélés dans le cadre des autres modèles.

En fait, dans le cadre du modèle de Rakhshani, le coefficient d'absorption ne couvre qu'une portion bien limitée de la bande spectrale du tellure de cadmium, ce qui ne permet pas d'avoir des informations plus complètes sur les phénomènes d'absorption dans ce matériau. Ce recouvrement partiel de la bande spectrale du tellure de cadmium fait que ce modèle présente certaines insuffisances liées à la méconnaissance de certaines transitions liées aux électrons et aux excitons.

2.2 Modèle du point critique standard 'Standard Critical Point'

Dans le modèle du point critique standard, la fonction diélectrique $\varepsilon(E)$ est approximativement la résultante de plusieurs termes. Chaque terme est une fonction de l'énergie et représente une contribution dans la densité des états de joint au voisinage du point critique. Ces points critiques sont associés aux transitions électroniques dont les énergies des niveaux de bandes sont: E_0 , $E_0 + \Delta_0$, E_1 , $E_1 + \Delta_1$, E_2 , etc.

L'analyse des données optiques par le développement de l'expression (1) suivante proposée par P. Lautenschlager et al. [10] permet de déterminer analytiquement $\varepsilon(E)$.

$$\varepsilon(D) = \sum_{i=1}^N \left[C_i - A_i \exp(i\phi_i) \times (E - E_{ci} + i\Gamma_i)^n \right] \quad (1)$$

L'amplitude A_i et l'énergie E_{ci} décrivent le point critique, alors que ϕ_i est la phase de l'exciton et Γ_i l'élargissement. L'exposant n varie selon la structure du matériau: $n = -0,5$ sera pris pour une structure à une dimension; $n = 0$ pour une structure à deux dimensions et dans ce cas on utilise le logarithmique, soit $\ln(E - E_{ci} + i\Gamma_i)$; $n = 0,5$ pour une structure à trois dimensions et $n = 1$ se rapporte aux excitons discrets.

Le **Tableau 1** donne les valeurs des paramètres de l'équation (1) qui permettent de recalculer la fonction diélectrique $\varepsilon(E)$ à partir de ce modèle et d'en déduire le coefficient d'absorption $\alpha(E)$ du tellure de cadmium.

Ce coefficient recalculé est représenté sur la figure 3 en fonction de la longueur d'onde et de l'énergie des photons incidents. Son profil ne montre aucune contribution des excitons dans la gamme d'énergie proche du gap du tellure de cadmium. Cependant, les pics notés sur le graphe pour les énergies supérieures à 3,2 eV, correspondraient aux transitions aux gaps E_1 , $E_1 + \Delta_1$ et E_2 du CdTe.

Les autres constantes optiques sont obtenues à partir du modèle du point critique standard et leur comparaison avec les mesures expérimentales s'avère nécessaire pour mesurer la fiabilité des résultats du modèle du point critique standard (SCP). Les valeurs des paramètres de l'équation (1) sont liées à la structure du motif et par

conséquent nous pouvons prévoir une certaine instabilité de ses paramètres par rapport à la température.

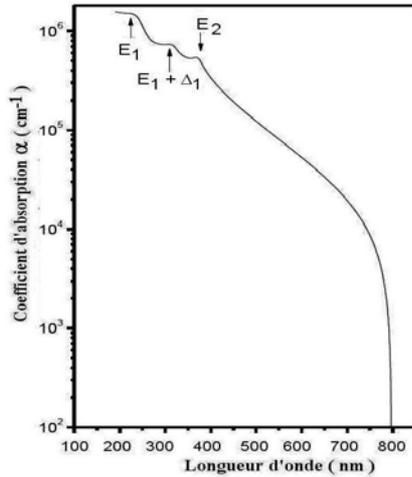


Fig. 3: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle du point critique standard (SCP) en fonction de la longueur d'onde

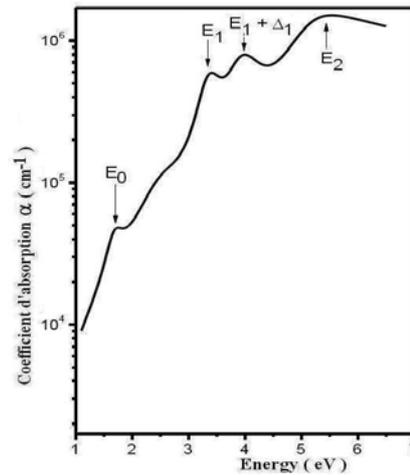


Fig. 4: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle du point critique standard (SCP) en fonction de l'énergie

Les autres constantes optiques sont obtenues à partir du modèle du point critique standard et leur comparaison avec les mesures expérimentales s'avère nécessaire pour mesurer la fiabilité des résultats du modèle du point critique standard (SCP).

Les valeurs des paramètres de l'équation (1) sont liées à la structure du motif et par conséquent nous pouvons prévoir une certaine instabilité de ses paramètres par rapport à la température.

2.3 Modèle de l'approximation de l'oscillateur harmonique (HOA)

Dans la théorie de l'oscillateur harmonique, la fonction diélectrique du matériau est une sommation finie d'oscillateurs de Lorentz qui s'écrit:

$$\varepsilon(E) = 1 + \sum_{i=1}^N A_i \left(\frac{1}{E + E_{ci} + i\Gamma_i} + \frac{1}{E - E_{ci} + i\Gamma_i} \right) \quad (2)$$

L'indice i correspond à chacun des oscillateurs d'amplitude A_i et d'énergie E_{ci} et d'élargissement Γ_i . L'équation (1) est très complexe, quant à son application au modèle HOA et son écriture simplifiée donnée par l'équation (2) a été proposée par M. Erman.

Les propriétés de l'oscillateur harmonique, ainsi que l'effet de causalité de la constante de Kramers-Kronig permettent d'établir les expressions analytiques conduisant aux paramètres optiques du matériau CdTe.

A partir de l'équation (2) et en s'appuyant sur les données du **tableau 1**, nous obtenons, pour ce modèle, la fonction diélectrique $\epsilon(E)$ dont les composantes réelle et imaginaire permettent d'accéder aux constantes optiques du CdTe.

Tableau 1: Paramètres du CdTe pour le calcul de la fonction diélectrique à partir de l'approximation de l'oscillateur harmonique (HOA) à 300 K

| i | E_{ci} (eV) | A_i | Γ_i (eV) |
|-------------------------|---------------|-------|-----------------|
| 1_ (E_0) | 1.68 | 0.12 | 0.18 |
| 2_ ($E_0 + \Delta_0$) | 2.50 | 0.63 | 0.50 |
| 3_ (E_1) | 3.32 | 1.73 | 0.22 |
| 4_ ($E_1 + \Delta_1$) | 3.88 | 2.71 | 0.30 |
| 5_ (E_2) | 5.10 | 6.55 | 0.60 |

Une bonne convergence sur les valeurs de $\epsilon(E)$ est obtenue à partir d'une sommation sur toutes les oscillations harmoniques. Cependant, Il est parfois difficile voire impossible de prendre en compte toutes les oscillations qui ne correspondent pas toujours aux points critiques et les perturbations engendrées par la température, la pression et le champ électrique du milieu et qui ne facilitent pas une prise en compte de tous les oscillateurs.

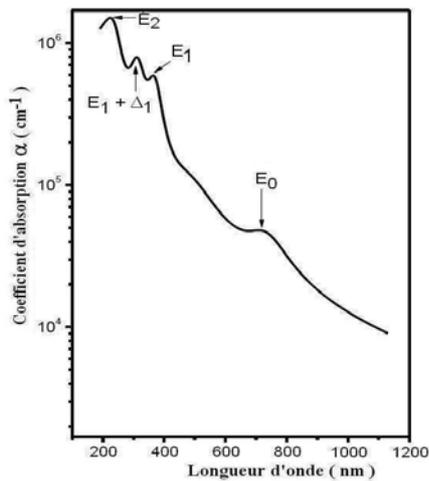


Fig. 5: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle (HOA) en fonction de la longueur d'onde

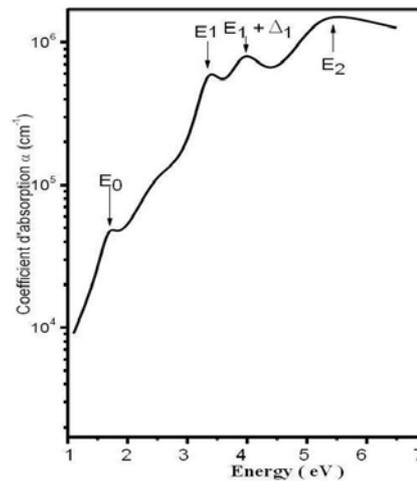


Fig. 6: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle (HOA) en fonction de l'énergie

La figure 5 représente le spectre du coefficient d'absorption du tellure de cadmium calculé à partir du modèle HOA. Comme les modèles précédemment établis, celui de l'approximation de l'oscillateur harmonique (HOA) présente l'avantage de couvrir une part importante de la bande spectrale du CdTe. Ainsi il est possible d'analyser le matériau aussi bien aux faibles énergies, au visible qu'aux grandes énergies permettant ainsi l'observation des pics découlant des transitions des excitons.

2.4 Modèle de la fonction diélectrique

La densité des états de joints permet de déterminer principalement la contribution des bandes intermédiaires pour la partie imaginaire $\epsilon_2(E)$ de la fonction diélectrique.

Les relations de Kramers–Kronig permettent d'en déduire la partie réelle $\epsilon_1(E)$ sur toute la bande spectrale pour chaque photon d'énergie $h\omega$ si $\epsilon_2(E)$ est connue et réciproquement.

Le modèle diélectrique nous permet de cerner l'évolution du coefficient d'absorption du CdTe dans une gamme d'énergie qui couvre l'infrarouge, le visible et l'ultra violet. Cela pourrait contribuer à une meilleure maîtrise des propriétés optiques de ce matériau de sorte que les études en simulation des propriétés photovoltaïques pourraient aider à faire des choix sur les paramètres des photopiles de ce matériau en vue de les rendre plus efficaces.

Les valeurs appréciables du coefficient d'absorption du CdTe dans la zone spectrale visible (10^3 à 10^5 cm^{-1}) donnent à ce semi-conducteur des propriétés de conversion photovoltaïque prometteuses.

L'évolution du coefficient d'absorption déduit du modèle diélectrique recouvre la gamme d'énergies 1,1 à 6,5 eV comme l'indique la figure 7. Pour mieux illustrer l'effet des excitons, le coefficient d'absorption a été représenté dans les deux cas où, d'une part, seule la contribution de la transition fondamentale à E_0 est considérée et d'autre part, la prise en compte de toutes les transitions décrites dans le modèle de la fonction diélectrique.

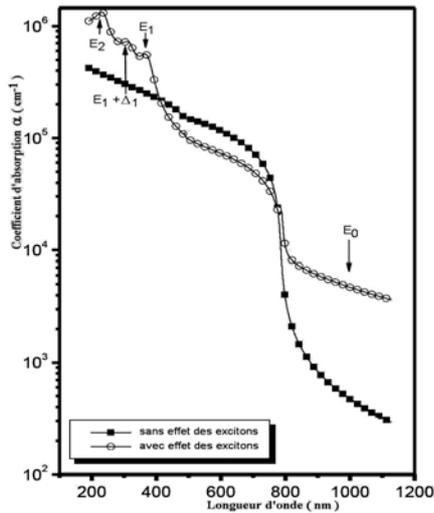


Fig. 7: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle de la fonction diélectrique (MDF) en fonction de la longueur d'onde

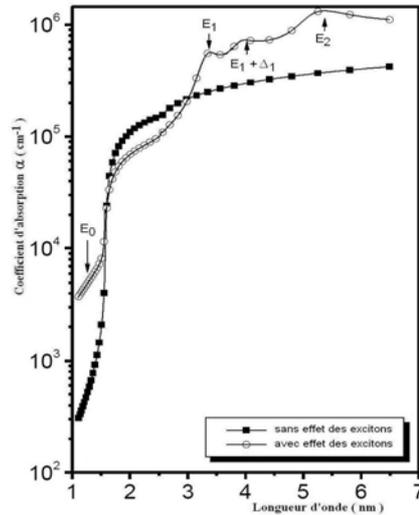


Fig. 8: Coefficient d'absorption du CdTe calculé à partir du modèle de la fonction diélectrique (MDF) en fonction de l'énergie

L'analyse de ce graphe montre que l'apport des excitons aux phénomènes d'absorption dans le matériau CdTe se fait en deux zones principalement.

Aux basses fréquences, pour des énergies inférieures à $E_0 = 1,5$ eV, on observe des valeurs appréciables du coefficient d'absorption ($\alpha \approx 2 \times 10^3$ cm⁻¹). Cette absorption d'énergie en dessous du gap du CdTe, alors que le matériau est supposé transparent dans cette gamme d'énergie, est due aux transitions des excitons au voisinage du seuil d'absorption fondamentale.

Dans la zone des grandes fréquences, on note aussi une augmentation progressive du coefficient d'absorption liée aux transitions des excitons aux énergies E_1 et E_2 et sont matérialisées par les pics à 3,2 eV et à 5 eV.

La détermination du coefficient d'absorption des matériaux utilisés dans la fabrication des dispositifs photovoltaïques s'avère délicate. Dans la plupart des cas, les valeurs empiriques des coefficients d'absorption du CdTe sont proposées pour caractériser les cellules au CdTe.

Les expressions analytiques développées dans chacun des modèles étudiés permettent une détermination du coefficient d'absorption avec une incertitude plus ou moins acceptable.

Le recouvrement quasi-total du coefficient d'absorption de la bande spectrale du matériau CdTe et son parfait accord avec l'expérience montrent l'intérêt de cette étude. Ce résultat est intéressant et constitue ainsi un apport appréciable dans la connaissance du matériau CdTe en particulier et de l'hétérojonction CdS/CdTe en général.

3. ETUDE COMPARATIVE DES COEFFICIENTS D'ABSORPTION

Pour mener à bien l'étude comparative des modèles ainsi présentés, nous nous sommes proposé de représenter sur un même graphe les coefficients d'absorption de ces différents modèles étudiés. La figure 9 montre les coefficients d'absorption du CdTe calculés à partir des différents modèles présentés précédemment.

L'analyse des courbes de cette figure montre que le coefficient d'absorption calculé à partir du modèle du SCP ne présente aucune absorption aux faibles fréquences.

Le modèle de l'approximation de l'oscillateur harmonique HOA présente tout au long de la bande spectrale des écarts qui ne sont pas illustrés dans les résultats des mesures expérimentales.

Par contre le modèle de la fonction diélectrique colle plus à l'expérience avec une absorption non négligeable aux faibles fréquences. Ce modèle reste en parfait accord avec les résultats expérimentaux dans la totalité de la bande spectrale.

En conclusion, nous retenons que les mesures par ellipsométrie des parties réelle ϵ_1 et imaginaire ϵ_2 de la fonction diélectrique du CdTe dans la bande d'énergie 1,1 à 5,6 eV, à la température ambiante et l'observation des spectres déduits des modèles, révèlent la présence des transitions E_0 , E_1 , $E_1 + \Delta_1$ et E_2 .

La comparaison entre les différents modèles théoriques présentés permet de voir que le modèle de la fonction diélectrique explique mieux les résultats expérimentaux comparativement aux autres qui présentent à certains niveaux des décalages notoires.

Ainsi les résultats de ce modèle nous ont permis d'établir les constantes optiques des matériaux et leur évolution dans sa bande spectrale.

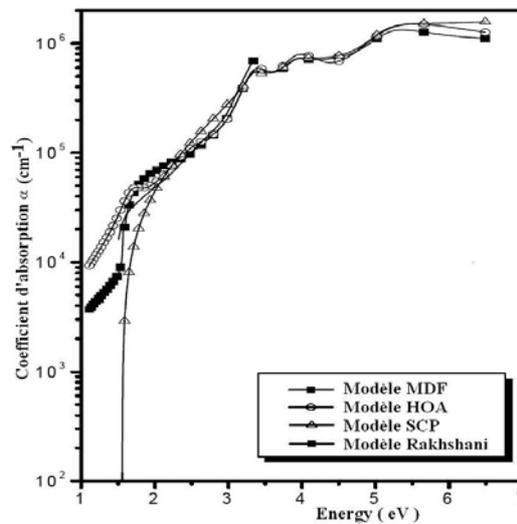


Fig. 9: Coefficients d'absorption du CdTe calculés à partir des différents modèles

L'étude des coefficients d'absorption des différents modèles donne pour chaque cas une certaine crédibilité dans un domaine spectral précis. C'est pourquoi la plupart des études élaborées à partir de certains d'entre eux, pose des hypothèses restrictives quant à leur application (couverture partielle de la bande spectrale).

Le challenge restait de trouver un modèle qui ne présenterait pas ces contraintes. Le modèle de la fonction diélectrique s'est parfaitement illustré dans ce sens et donne de résultats très intéressants quant à la maîtrise des constantes optiques de l'hétérojonction CdS/CdTe.

Le coefficient d'absorption, déduit de ces différents modèles, nous permettra de calculer le rendement quantique interne de la cellule CdS/CdTe en vue de présenter celui qui aurait un meilleur accord avec les mesures expérimentales.

4. ETUDE COMPARATIVE DES RENDEMENTS QUANTIQUES DES DIFFERENTS MODELES

Après avoir représenté le coefficient d'absorption de chacun des modèles, nous déduisons son rendement quantique interne. Les différents rendements quantiques sont ainsi représentés sur un même graphe en l'occurrence ceux des figures 9 et 10, respectivement en fonction de l'énergie et de la longueur d'onde.

L'observation des courbes nous permet de constater qu'elles couvrent le domaine du visible et l'intervalle compris entre 200 nm et 500 nm. Les rendements quantiques des différents modèles ont presque le même profil.

Il est à noter, que seul celui de Rakhshani présente une absorptivité déjà appréciable à partir de 360 nm. Un décalage vers la gauche de son rendement quantique par rapport aux autres est aussi observé confirmant une bonne absorption de l'ordre de 50 % là où

les autres modèles participent à l'ordre de 10 % et ont une allure presque similaire dans une bonne partie de la bande spectrale du CdTe.

La différence est plutôt notée aux grandes longueurs d'onde où on note un rendement quantique nul pour le modèle SCP [6] et aucune information pour le modèle de Rashkhani.

Par contre, le modèle de la méthode de la fonction diélectrique comme celui de l'oscillation harmonique, présente une bonne absorption au-delà de 800 nm.

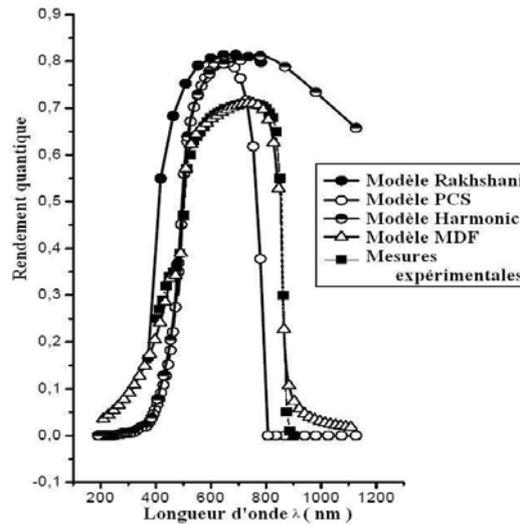


Fig. 10: Rendements quantiques de la base CdTe pour différents modèles étudiés en fonction de la longueur d'onde

En fait, il est à souligner que le modèle HOA contribue pour plus de 65 % en dessous du gap du CdTe comme le montre la figure 6. Ce résultat qui paraît surprenant pourrait provenir du nombre insuffisant d'oscillateurs utilisés dans les calculs du coefficient d'absorption du CdTe [6].

Mais, vu qu'il n'était pas possible réellement de tenir compte de tous les oscillateurs dans l'expression analytique de la fonction diélectrique, le rendement obtenu dans cette zone met en doute la validité de ce modèle aux grandes longueurs d'onde.

Le modèle de la fonction diélectrique présente un meilleur accord avec le rendement quantique issu des mesures expérimentales. Une étude comparative nous permet de voir la fiabilité des différents modèles étudiés ne seraient ce que dans le domaine du visible où la plupart des modèles présentent des allures quasi-identiques.

5. CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons étudié les différentes méthodes de calcul du coefficient d'absorption des composantes de la cellule solaire CdS/CdTe.

Pour chaque méthode, nous avons établi graphiquement la variation de son coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde. Par la suite, nous avons fait l'application au calcul du rendement quantique pour jauger le comportement de chaque

méthode et afin les comparer avec des mesures de rendement quantique effectué sur deux types de cellules solaires CdS/CdTe fabriquées au Laser.

Nous en sommes parvenus à voir que le modèle de la fonction diélectrique présenté les meilleurs accords avec les résultats expérimentaux. Des applications ont été développées pour évaluer l'effet des excitons sur le rendement quantique de la cellule solaire CdS/CdTe [9].

NOMENCLATURE

MDF: 'Model Dielectric Function'
 SCP: 'Standard Critical Point'
 HOA: 'Harmonic Oscillator Approximation'
 CdTe: 'Tellurure de Cadmium'
 CdS: 'Sulfure de Cadmium'

REFERENCES

- [1] S. Adachi, N. Kimura and N. Suzuki, '*Optica Properties of CdTe: Experimental Modelling*', Journal of Applied Physics, Vol. 74, N°5, pp. 3435 – 3441, 1993.
- [2] X. Xu, R.G. Fhere, D.S. Albin, T.A. Gessert, C. Dehart, J.C. Keane, A. Duda, T.J. Coutts, S. Asher, D.H. Levi, H.R. Moutinho, Y. Yan, T. Moriarty, S. Johnston, K. Emery and P. Sheldon, '*High-Efficiency CTO/ZTO/CdS/CdTe Polycrystalline Thin-Film Solar Cells*', NCPV Program Review Meeting, Lakewood, Colorado, 14-17 October 2001.
- [3] M. Gloeckler and J.R. Sites, '*Apparent Quantum Efficiency Effects in CdTe Solar Cells*', Journal of Applied Physics, Vol. 95, N°8, pp. 4438 – 4445, 2004.
- [4] S. Ninomiya and S. Adachi, '*Optical Properties of Cubic and Hexagonal CdS*', Journal of Applied Physics, Vol. 78, N°2, pp. 1183 – 1190, 2004.
- [5] A.E. Rakhshani, '*Heterojunction Properties of Electrodeposited CdTe/CdS Solar Cells*', Journal of Applied Physics, Vol. 90, N°8, pp. 4265 – 4271, 2001.
- [6] A. Ndiaye, Thèse de 3ème Cycle, Université C.A.D., Dakar, Sénégal, 2000.
- [7] P. Hofmann, K. Horn, A.M. Bradshaw, R.L. Johnson, D. Fuchs and M. Cardona, '*Dielectric Function of Cubic and Hexagonal CdS in the Vacuum Ultraviolet Region*', Physical Review B, Condensed Mater, Vol. 47, N°3, pp. 1639 – 1642, 1993.
- [8] A. Kaneta and S. Adachi, '*Photoreflectance Study in the E_1 and $E_1 + \Delta_1$ Transition Regions of CdTe*', Journal of Applied Physics, Vol. 87, N°10, pp. 7360 – 7365, 2000.
- [9] O.A. Niasse, B. Mbengue, B. BA, A. Ndiaye et I. Youm, '*Effets des Excitons sur le Rendement Quantique de la Cellule Solaire CdS/CdTe par le Modèle de la Fonction Diélectrique*', Revue des Energies Renouvelables, Vol. 12, N°3, pp. 501 – 512, 2009.
- [10] P. Lautenschlager, M. Garriga, L. Vina and M. Cardona, '*Temperature Dependence of the Dielectric Function and Interband Critical Points in Silicon*', Physical Review B, Vol. 36, N°3, pp. 4821 – 4837, 1987.