

Proposition de sujet de thèse
Financement allocation ministérielle 3 ans, début : sept. 2022

Titre de la thèse:

Développement de cellules solaires à couches minces de type CZTS à faible impact environnemental

Laboratoires :

ICB (Dijon)

Directeur de thèse :

Denis Chaumont : MCF-HDR, ICB, Dijon, France ; (denis.chaumont@u-bourgogne.fr)

Description du projet scientifique :

Aujourd'hui, l'utilisation de l'énergie photovoltaïque à grande échelle nécessite des cellules solaires (CS) constituées de matériaux abondants et non toxiques. En ce sens, les composés kesterites (CuZnSnSSe noté CZTSSe) représentent une voie prometteuse de développement de cellules solaires à couches minces de troisième génération. Cependant jusqu'à présent l'efficacité de conversion de ces dispositifs (12,6% pour CZTSSe) reste inférieure à ses principaux concurrents, CdTe et CIGS, retardant leur développement industriel. Une des principales limitations des performances proviendrait des effets des fluctuations de potentiel induites par une forte concentration de défauts de type désordre entre Cu et Zn (antisites Cu_{Zn} et Zn_{Cu}) dans la structure de la kesterite. Certains groupes de recherche ont remplacé Cu par Ag, Zn par Cd pour supprimer et/ou minimiser les défauts interfaciaux et volumiques et ont observé une amélioration de nombreuses propriétés de la couche absorbante (telle que la taille des grains, les défauts antisites dans le plan Cu-Zn, la séparation des charges à l'interface tampon/absorbeur...) et du rendement du dispositif. Cependant, cette approche oriente toujours les recherches vers l'utilisation d'éléments toxiques et/ou coûteux dans les cellules solaires, ce qui s'écarte des objectifs principaux de l'incorporation de kesterites dans les cellules solaires. Des premiers résultats très encourageants obtenus à l'ICB valident l'approche chimique pour la substitution contrôlée de la phase CZTS et pour la réalisation de la couche tampon.

L'objectif de ce travail de thèse visera à aboutir au pré-développement de cellules solaires économiques et respectant l'environnement, basées sur une cellule à couche mince intégrant un absorbeur kesterite exempt d'effets de fluctuations de potentiel et une couche tampon sans Cd. Au niveau théorique, plusieurs problèmes fondamentaux sont à relever : 1 - Amélioration des propriétés de l'absorbeur CZTS par substitution partielle des atomes de Zn ou de Cu. Identification des substituants par la modélisation (DFT). Réalisations expérimentales et vérifications de l'amélioration des propriétés. Etablissement expérimental des diagrammes de bande et mesures des propriétés électriques et optiques... 2 - Etude des mécanismes limitants aux interfaces absorbeur/tampon et autres d'une CS type CZTS, 3 - Conception d'une couche tampon avec des matériaux non polluants. Au niveau expérimental, la voie « tout chimie » permettra un contrôle optimal des substitutions dans la phase CZTS et un coût de réalisation peu élevé. Au niveau du dispositif final, il s'agira de parvenir à l'optimisation complète de l'architecture de la cellule (architecture inverse, dépôt 3D sur NS TiO_2 ...). Outre l'acquisition de nouvelles connaissances sur ces composés novateurs, la finalité de la thèse sera la réalisation de cellules solaires aux performances optimisées.

L'interdisciplinarité scientifique indispensable à ce travail (chimie, physique des semi-conducteurs, optique, système) est soutenue par des collaborations existantes ou en développement: l'IMEP-LaHC et l'Institut Néel (NPSC) à Grenoble, INSA Lyon, HZB Berlin... Ce programme de travail permettra d'intégrer les réseaux internationaux sur les énergies renouvelables et plus particulièrement de participer au réseau « Kesterite ».