

## Influence du gap optique et de l'affinité électronique du ZnSe sur les performances des cellules solaires CIGS

### [ Influence of the optical bandgap and the electron affinity of ZnSe on the performance of CIGS solar cells ]

Youssou Gning<sup>1</sup>, Alioune Ngom<sup>1</sup>, Moussa Toure<sup>1</sup>, Mouhamadou Sam<sup>1</sup>, Emmanuel Namena<sup>2</sup>, and Mamadou Lamine Samb<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Département de Physique et Chimie, Université de Thiès, Senegal

<sup>2</sup>Institut de Recherche en Sciences Appliquées et Technologies (IRSAT), Centre National de la Recherche Scientifique et Technologique (CNRST) 03 BP 7047 Ouagadougou 03, Ouagadougou, Burkina Faso

---

Copyright © 2026 ISSR Journals. This is an open access article distributed under the **Creative Commons Attribution License**, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

**ABSTRACT:** This study focuses on optimizing the influence of a zinc selenide (ZnSe) buffer layer on the performance of a CIGS thin-film solar cell, with the aim of proposing an alternative to CdS, a commonly used material that contains toxic cadmium. The choice of ZnSe is motivated by its advantageous optoelectronic properties, including a direct optical band gap of about 2.7 eV, high transparency in the visible and near-infrared ranges, an absorption coefficient on the order of  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  and an electron affinity close to 4.1 eV. In addition, ZnSe can crystallize in zinc-blende or wurtzite phases, with possible structural transitions that may promote a type-II band alignment suitable for the ZnSe/CIGS interface.

The main objective of this work is to analyze the effect of the optical band gap and the electron affinity of ZnSe on the key photovoltaic parameters of the cell, namely the short-circuit current density, the open-circuit voltage, the fill factor, and the conversion efficiency. The study is carried out through numerical simulation by solving the fundamental carrier transport equations.

The results show that the optical band gap of ZnSe has a limited impact on the overall performance, with an optimal efficiency of about 23.16% for values between 2.3 and 2.6 eV. In contrast, the electron affinity appears to be a critical parameter: a range between 4.0 and 4.6 eV promotes optimal band alignment and enables good photovoltaic performance, with efficiencies ranging from 19.38% to 24.93%. These findings confirm the potential of ZnSe as an alternative cadmium-free buffer layer to CdS, opening promising prospects for the development of more environmentally and health-friendly CIGS solar cells.

**KEYWORDS:** CIGS solar cells, Cadmium-free buffer layer, Band alignment, Numerical simulation, Photovoltaic performance, II–VI materials.

**RESUME:** Cette étude porte sur l'optimisation de l'influence d'une couche tampon en sélénure de zinc (ZnSe) sur les performances d'une cellule solaire à couches minces CIGS, dans le but de proposer une alternative au CdS, matériau couramment utilisé mais contenant du cadmium toxique. Le choix du ZnSe est motivé par ses propriétés optoélectroniques avantageuses, notamment un gap optique direct d'environ 2,7 eV, une forte transparence dans le domaine du visible et du proche infrarouge, un coefficient d'absorption de l'ordre de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  et une affinité électronique voisine de 4,1 eV. Par ailleurs, le ZnSe peut cristalliser sous les phases zinc-blende ou wurtzite, avec des transitions structurales susceptibles de favoriser un alignement de bandes de type II approprié à l'interface ZnSe/CIGS.

L'objectif principal de ce travail est d'analyser l'effet du gap optique et de l'affinité électronique du ZnSe sur les paramètres photovoltaïques clés de la cellule, à savoir la densité de courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement de conversion. L'étude est menée par simulation numérique en résolvant les équations fondamentales du transport des porteurs.

Les résultats obtenus montrent que le gap optique du ZnSe influence faiblement les performances globales, avec un rendement optimal d'environ 23,16 % pour des valeurs comprises entre 2,3 et 2,6 eV. En revanche, l'affinité électronique apparaît comme un paramètre déterminant: une plage comprise entre 4,0 et 4,6 eV favorise un alignement optimal des bandes et permet d'atteindre de bonnes

performances photovoltaïques, avec des rendements compris entre 19,38 % et 24,93 %. Ces résultats confirment le potentiel du ZnSe comme couche tampon alternative au CdS, ouvrant des perspectives intéressantes pour le développement de cellules CIGS plus respectueuses de l'environnement et de la santé humaine.

**MOTS-CLEFS:** Cellules solaires CIGS, Couche tampon sans cadmium, Alignement de bandes, Simulation numérique, Performances photovoltaïques, Matériaux II–VI.

## 1 INTRODUCTION

Le séléniure de zinc (ZnSe) est un semi-conducteur II–VI présentant un gap optique direct d'environ 2,7 eV, un coefficient d'absorption de l'ordre de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  et une affinité électronique proche de 4,1 eV [1] – [3]. Il est transparent sur une large plage spectrale allant du visible à l'infrarouge, et peut cristalliser sous les phases zinc-blende ou wurtzite, avec des transitions de phase dépendant des conditions d'élaboration [4] – [6]. Ces propriétés optoélectroniques et structurales sont favorables à un alignement de bandes compatible avec le CIGS, permettant la formation d'une interface ZnSe/CIGS appropriée [7], [8].

Dans les cellules solaires à couches minces CIGS, la couche tampon la plus utilisée reste le CdS. Toutefois, la toxicité du cadmium motive le développement de couches tampons alternatives sans Cd, parmi lesquelles le ZnSe constitue un candidat prometteur en raison de sa non-toxicité et de sa transparence élevée [9]. L'étude du ZnSe comme couche tampon apparaît ainsi comme une piste pertinente pour l'optimisation des cellules CIGS.

L'objectif de ce travail est d'analyser l'influence du gap optique ( $E_g$ ) et de l'affinité électronique ( $\chi$ ) du ZnSe sur les performances photovoltaïques d'une cellule CIGS, à travers les paramètres clés que sont 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 ( $\eta$ ). L'étude est menée par simulation numérique à l'aide du logiciel ATLAS–SILVACO, basé sur la résolution des équations de Poisson, de continuité et de transport des porteurs [9], [10].

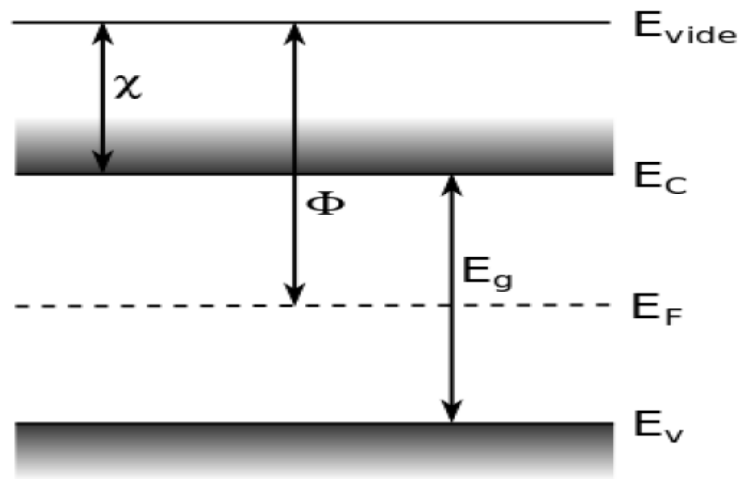
L'article est organisé comme suit: une présentation de la théorie de l'alignement des bandes, suivie du modèle et des paramètres utilisés, de la méthodologie de simulation, puis des résultats et de leur discussion.

## 2 THÉORIE DE L'ALIGNEMENT DE BANDES DE TYPE II

L'alignement des bandes d'énergie entre deux semi-conducteurs décrit la manière dont le sommet de la bande de valence et le fond de la bande de conduction se positionnent lorsque ces matériaux sont mis en contact. Cette notion est essentielle pour comprendre les mécanismes de transfert et de séparation des porteurs de charge à l'interface, en particulier dans les hétérojonctions utilisées en photovoltaïque.

Afin d'analyser cet alignement, un niveau de référence commun, appelé niveau du vide, est généralement adopté pour l'ensemble des matériaux considérés. Dans ce cadre, l'énergie nécessaire pour extraire un électron depuis le niveau de Fermi d'un matériau et l'amener au niveau du vide définit le potentiel de sortie ( $\Phi$ ), également appelé potentiel électrochimique. Cette grandeur dépend de la nature du matériau, de son orientation cristalline et de la densité des porteurs. Toutefois, dans le cas des semi-conducteurs, l'accès direct aux états du niveau de Fermi étant limité, l'utilisation du potentiel de sortie devient peu pratique.

C'est pour cette raison qu'une autre grandeur, l'affinité électronique ( $\chi$ ), est introduite. Elle correspond à l'énergie requise pour promouvoir un électron depuis le minimum de la bande de conduction jusqu'au niveau du vide. Les principaux paramètres énergétiques intervenant dans la description de l'alignement des bandes: à savoir l'énergie du vide  $E_{\text{vide}}$ , les énergies des bandes de conduction  $E_C$  et de valence  $E_V$ , le potentiel de sortie  $\Phi$ , l'affinité électronique  $\chi$  et le gap énergétique  $E_g$ , sont schématiquement présentés à la figure 1 [11].



**Fig. 1.** Paramètres caractéristiques de l'alignement des bandes d'énergie

$E_{vide}$  : Energie du vide (eV).

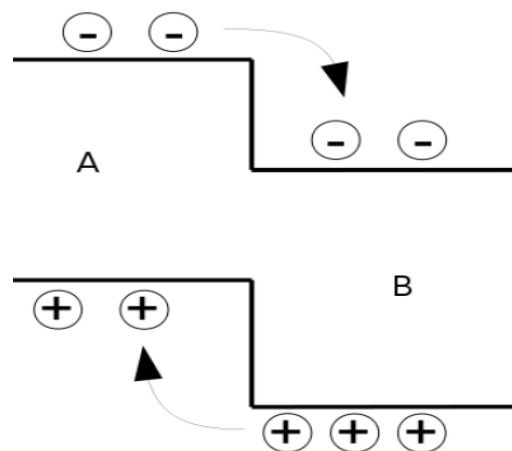
$E_C$  : Energie du niveau d'énergie de la bande de conduction (eV).

$E_V$  : Energie du niveau d'énergie de la bande de valence (eV).

$\Phi$  : potentiel de sortie ou potentiel électrochimique (eV).

$\chi$  : affinité électronique (eV).

Dans le cas d'un alignement de bandes de type II, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction appartiennent à deux semi-conducteurs différents. Ce type de configuration conduit à une hétérojonction dite *staggered*, dans laquelle les électrons et les trous sont spatialement séparés et localisés dans des matériaux distincts. Cette situation favorise la dissociation des paires électron-trou, mais peut également influencer les mécanismes de recombinaison aux interfaces. Un schéma illustrant ce type d'alignement entre deux semi-conducteurs A et B est présenté à la figure 2 [11].



**Fig. 2.** Alignement des bandes de type II entre deux semi-conducteurs A et B

Plusieurs travaux rapportent que l'interface ZnSe/CIGS présente un alignement de bandes de type II. Cette configuration est notamment attribuée aux variations de phase cristalline du ZnSe, pouvant passer des structures zinc-blende à wurtzite, ce qui modifie sensiblement ses paramètres électroniques et, en particulier, son affinité électronique [11], [12]. La détermination expérimentale précise de l'alignement des bandes à une interface semi-conductrice demeure toutefois complexe. Elle repose généralement sur des techniques spectroscopiques avancées telles que la spectroscopie de photoélectrons X (XPS), la spectroscopie des niveaux profonds (DLTS) ou encore les mesures d'admittance [13].

Le diagramme des bandes d'énergie correspondant à l'interface ZnSe/CIGS, illustrant cet alignement de type II, est présenté à la figure 3 [8].

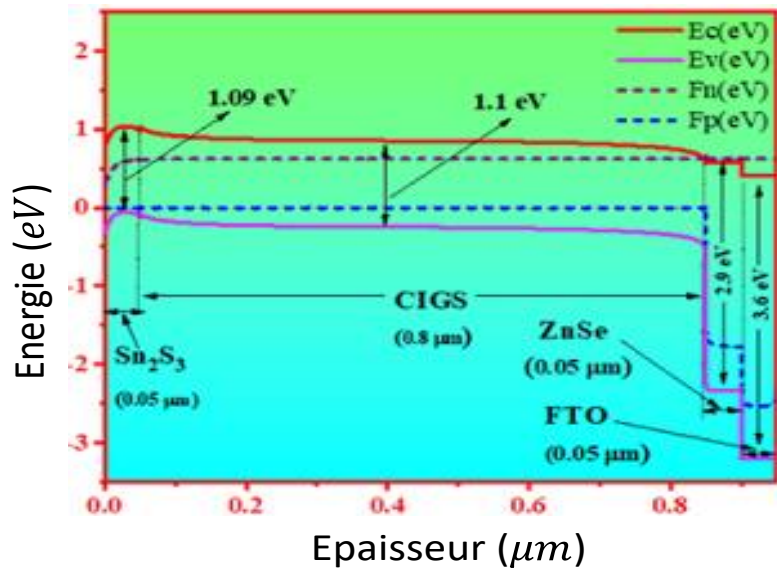


Fig. 3. Diagramme des bandes d'énergie à l'interface ZnSe/CIGS

L'analyse théorique de l'alignement des bandes met ainsi en évidence que la qualité électronique de l'interface ZnSe/CIGS dépend fortement des valeurs du gap optique et de l'affinité électronique des matériaux constitutifs. Ces paramètres conditionnent directement le décalage des bandes de conduction et de valence, influençant les phénomènes de transport et de recombinaison des porteurs, et, par conséquent, les performances photovoltaïques globales de la cellule. Ces considérations justifient pleinement le choix et l'intérêt de l'étude paramétrique menée dans ce travail [11].

### 3 MODÈLE ET PARAMÈTRES ÉLECTRIQUES

#### 3.1 CIRCUIT ÉLECTRIQUE ÉQUIVALENT

Le fonctionnement de la cellule étudiée repose sur une jonction p-n classique, dans laquelle l'absorbeur CIGS est de type p, tandis que la couche tampon ZnSe est de type n. Afin de décrire de manière réaliste le comportement électrique de cette cellule sous illumination, un modèle électrique à deux diodes est adopté. Ce modèle permet de prendre en compte simultanément les mécanismes de diffusion, de recombinaison et de fuite associés aux défauts et aux joints de grains.

Le circuit électrique équivalent correspondant à ce modèle est présenté à la figure 4 [14], [15].

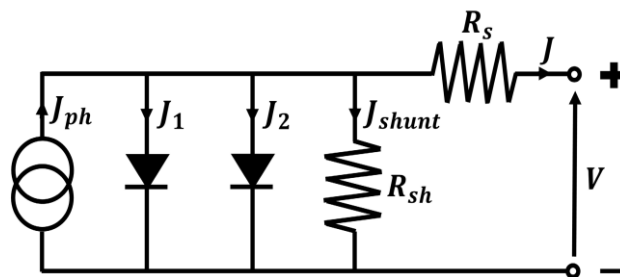


Fig. 4. Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire CIGS

Dans ce schéma:

- $J_{ph}$  : représente la densité de photocourant générée par l'absorption du rayonnement incident;
- $J_1$  : correspond à la densité de courant de diffusion des porteurs majoritaires;
- $J_2$  : désigne la densité de courant liée aux mécanismes de génération-recombinaison dans la zone de charge d'espace;
- $J_{sh}$  : est la densité de courant de fuite associée principalement aux joints de grains et aux défauts structuraux;
- $R_s$  : est la résistance série, traduisant les pertes ohmiques au niveau des contacts et des interfaces;
- $R_{sh}$  : est la résistance shunt (ou parallèle), modélisant les courants de fuite susceptibles de court-circuiter localement la jonction;
- $J$  : représente la densité de courant totale délivrée par la cellule sous illumination.

Sous éclairage, la densité de courant fournie par la cellule est alors exprimée par la relation suivante:

$$J = J_{ph} - J_{o1} \left\{ \exp \left[ \frac{q(V + R_S J)}{n_1 K T} \right] - 1 \right\} - J_{o2} \left\{ \exp \left[ \frac{q(V + R_S J)}{n_2 K T} \right] - 1 \right\} - \frac{V + R_S J}{R_{Sh}} \quad (1)$$

où  $J_{ph}$  est la densité de photocourant ( $A \cdot cm^{-2}$ ),  $J_{o1}$  et  $J_{o2}$  les densités de courant de saturation des deux diodes ( $A \cdot cm^{-2}$ ),  $R_S$  et  $R_{Sh}$  les résistances série et shunt ( $\Omega \cdot cm^2$ ),  $n_1$  et  $n_2$  les facteurs d'idéalité,  $q$  la charge élémentaire (C),  $k$  la constante de Boltzmann ( $J \cdot K^{-1}$ ),  $T$  la température absolue (K),  $V$  la tension aux bornes de la cellule et  $J$  la densité de courant délivrée [14], [15].

### 3.2 PARAMÈTRES ÉLECTRIQUES CARACTÉRISTIQUES

#### 3.2.1 DENSITÉ DE COURANT DE COURT-CIRCUIT ( $J_{CC}$ )

La densité de courant de court-circuit correspond à la densité de courant fournie par la cellule lorsque la tension appliquée est nulle ( $V = 0$ ). Elle résulte principalement du transport des porteurs minoritaires générés par l'absorption des photons incidents. Elle peut être exprimée par la relation suivante:

$$J_{CC} = q \int_0^{\lambda_g} I_0(\lambda) \frac{hc}{\lambda} EQE(\lambda) d\lambda \approx q \int_0^{\lambda_g} I_0(\lambda) \frac{hc}{\lambda} d\lambda \text{ si } EQE \cong 1 \quad (2)$$

où  $J_{SC}$  est la densité de courant de court-circuit ( $A \cdot m^{-2}$ ),  $\lambda_g$  la longueur d'onde correspondant à l'énergie du gap optique (m),  $\lambda$  la longueur d'onde du rayonnement incident (m),  $h$  la constante de Planck (J·s),  $c$  la vitesse de la lumière dans le vide ( $m \cdot s^{-1}$ ),  $EQE$  le rendement quantique externe et  $q$  la charge élémentaire [16] – [18].

#### 3.2.2 TENSION DE CIRCUIT OUVERT ( $V_{CO}$ )

La tension de circuit ouvert est la tension maximale aux bornes de la cellule lorsque la densité de courant délivrée est nulle ( $J = 0$ ). Elle dépend essentiellement du rapport entre la densité de courant de court-circuit et la densité de courant de saturation, et s'exprime par:

$$V_{CO} = \frac{nKT}{q} \cdot \ln \left( \frac{J_{CC}}{J_0} + 1 \right) \quad (3)$$

où  $V_{OC}$  est la tension de circuit ouvert (V),  $n$  le facteur d'idéalité,  $k$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température absolue,  $q$  la charge élémentaire,  $J_{SC}$  la densité de courant de court-circuit ( $A \cdot cm^{-2}$ ) et  $J_0$  la densité de courant de saturation ( $A \cdot cm^{-2}$ ) [18], [19].

#### 3.2.3 FACTEUR DE FORME (FF)

Le facteur de forme, également appelé facteur de remplissage, traduit la qualité électrique de la cellule et correspond au rapport entre la puissance maximale réellement délivrée et la puissance maximale idéale. Il est défini par:

$$FF = \frac{J_m \times V_m}{J_{SC} \times V_{OC}} \quad (4)$$

où  $FF$  est le facteur de forme (%),  $J_m$  la densité de courant au point de puissance maximale ( $A \cdot cm^{-2}$ ),  $V_m$  la tension correspondante (V),  $J_{CC}$  la densité de courant de court-circuit et  $V_{CO}$  la tension de circuit ouvert [19], [20].

#### 3.2.4 RENDEMENT DE CONVERSION ( $\eta$ )

Le rendement de conversion énergétique permet d'évaluer l'efficacité globale de la cellule solaire. Il correspond au rapport entre la puissance électrique maximale extraite et la puissance lumineuse incidente, et s'exprime par:

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{J_{CC} V_{OC}}{P_{in}} \cdot FF \quad (5)$$

Où  $P_m$  est la puissance maximale délivrée (W),  $P_{in}$  la puissance incidente (W),  $FF$  le facteur de forme (%) et  $\eta$  le rendement de conversion (%) [19], [20].

## 4 MATÉRIAUX ET MÉTHODE

### 4.1 MATÉRIAUX

La cellule solaire étudiée est constituée d'un empilement multicouche comprenant un substrat en verre sodo-calcique (SLG), une couche de molybdène (Mo), une couche absorbante de sélénure de cuivre, d'indium et de gallium (CIGS), une couche tampon de sélénure de zinc (ZnSe), une couche fenêtre d'oxyde de zinc (ZnO) et des contacts métalliques en aluminium [8], [21].

### 4.2 STRUCTURE DE LA CELLULE

Dans le cadre de cette étude, une cellule CIGS de type substrate est considérée. Sa structure complète est de la forme:

SLG/Mo/CIGS/ZnSe/ZnO/Al

Où:

- Le **SLG** joue le rôle de substrat et de support mécanique;
- Le **Mo** constitue le contact arrière et assure la fonction d'anode;
- Le **CIGS** est la couche absorbante principale et forme la base de la jonction p-n;
- Le **znse** agit couche tampon et joue le rôle d'émetteur;
- Le **zno** sert de couche fenêtre et constitue la face avant de la cellule;
- L'**Al** est utilisé contact avant et joue le rôle de cathode.

Le schéma correspondant à cette architecture est représenté à la figure 5.

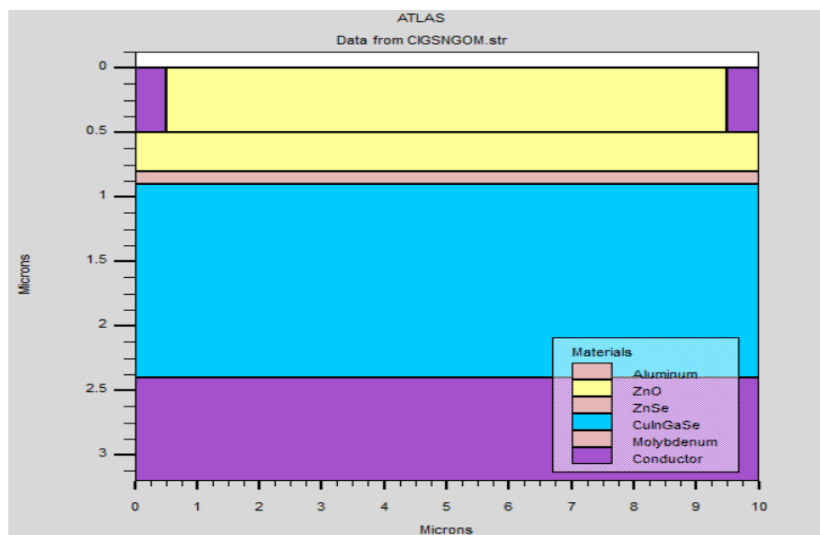


Fig. 5. Schéma de la structure de la cellule simulée

### 4.3 MÉTHODE

La présente étude est menée par simulation numérique, afin d'analyser l'influence du gap optique ( $E_g$ ) et de l'affinité électronique ( $\chi$ ) de la couche tampon ZnSe sur les paramètres photovoltaïques caractéristiques de la cellule CIGS, à savoir 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 ( $\eta$ ).

Les simulations sont réalisées à l'aide du logiciel ATLAS-SILVACO, dont le principe repose sur la résolution auto-cohérente des équations fondamentales du transport des porteurs dans les semi-conducteurs, incluant l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport par dérive-diffusion [18], [20]. Les mécanismes de recombinaison volumique sont décrits par le modèle de Shockley-Read-Hall (SRH), tandis que les défauts sont représentés par une distribution gaussienne en énergie, conformément aux approches généralement adoptées pour la modélisation des cellules CIGS.

#### 4.3.1 EQUATION DE POISSON

L'équation de Poisson relie le potentiel électrostatique à la densité volumique de charge d'espace au sein du dispositif. Elle s'écrit sous la forme:

$$\Delta V + \frac{\rho}{\varepsilon} = 0 \quad (6)$$

Où  $V$  est le potentiel électrique,  $\rho = q(p - n - N_A + N_D)$  la densité volumique de charge d'espace ( $C. cm^{-3}$ ),  $\varepsilon$  la permittivité diélectrique relative et  $q$  la charge électrique élémentaire [22], [23].

#### 4.3.2 EQUATIONS DE CONTINUITÉ

Les équations de continuité décrivent l'évolution temporelle des concentrations des porteurs en fonction des densités de courant ainsi que des taux de génération et de recombinaison. Elles sont données par:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = + \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (7)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (8)$$

Où  $n$  et  $p$  représentent respectivement les concentrations des électrons et des trous,  $\vec{J}_n$  et  $\vec{J}_p$  les densités de courant électronique et trou,  $G_n$  et  $G_p$  les taux de génération,  $R_n$  et  $R_p$  les taux de recombinaison et  $q$  est la charge électrique élémentaire [22], [23].

En régime stationnaire, les dérivées temporelles s'annulent ( $\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial p}{\partial t} = 0$ ) s'annulent et les équations de continuité se réduisent alors à:

$$0 = + \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (9)$$

$$0 = - \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (10)$$

#### 4.3.3 EQUATIONS DE TRANSPORT

Le transport des porteurs est décrit par le modèle de dérive-diffusion. Les densités de courant électronique et trou sont exprimées respectivement par:

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \nabla n \quad (11)$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E} + qD_p \nabla p \quad (12)$$

Où  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous,  $D_n$  et  $D_p$  leurs coefficients de diffusion respectifs,  $\vec{E}$  le champ électrique interne au dispositif [22].

#### 4.3.4 RECOMBINAISON VOLUMIQUE (SRH)

Le taux de recombinaison volumique associé à un niveau de piège  $i$ , selon le modèle de Shockley–Read–Hall, est donné par:

$$R_{SRH,i} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_n(p + n_i \exp^{\frac{E_i - E_t}{kT}}) + \tau_p(n + n_i \exp^{\frac{E_t - E_i}{kT}})} \quad (13)$$

Où  $E_i$  est le niveau d'énergie de Fermi,  $E_t$  est le niveau énergétique du piège,  $n_i$  la concentration intrinsèque,  $n$  et  $p$  la concentration des électrons et des trous,  $k$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température absolue,  $\tau_n = \frac{1}{\sigma_n v_{th} N_t}$  et  $\tau_p = \frac{1}{\sigma_p v_{th} N_t}$  sont les durées de vie respectives des électrons et des trous,  $\sigma_n$  et  $\sigma_p$  sont les sections efficaces de capture,  $v_{th}$  la vitesse thermique et  $N_t$  la densité de piège [24], [25].

#### 4.3.5 RECOMBINAISON SURFACIQUE

La recombinaison induite par les défauts présents aux interfaces, aux surfaces et aux contacts est également modélisée par une expression de type SRH. Le taux de recombinaison surfacique s'écrit:

$$R_{\text{surf}} = \frac{pn - n_i^2}{\tau_p^{\text{eff}}(n + n_i \exp \frac{E_i - E_t}{KT}) + \tau_n^{\text{eff}}(p + n_i \exp \frac{E_t - E_i}{KT})} \quad (14)$$

Les durées de vie effectives des électrons et des trous sont définies par:

$$\frac{1}{\tau_n^{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_n^i} + \frac{d_i}{A_i} S_n \quad (15)$$

$$\frac{1}{\tau_p^{\text{eff}}} = \frac{1}{\tau_p^i} + \frac{d_i}{A_i} S_p \quad (16)$$

où  $\tau_n^i$  et  $\tau_p^i$  sont les durées de vie volumique  $A_i$  l'épaisseur de l'interface et  $d_i$  sa longueur caractéristique,  $S_n$  et  $S_p$  les vitesses de recombinaison de surface des électrons et des trous [24], [25].

#### 4.3.6 MODÈLE DE DÉFAUTS

La description des défauts électroniques dans les différentes couches de la cellule est réalisée à l'aide d'un modèle de distribution gaussienne en énergie, couramment utilisé pour représenter les états de défauts localisés dans les semi-conducteurs désordonnés et polycristallins tels que le CIGS. Ce modèle permet de tenir compte à la fois de la densité, de la largeur énergétique et de la position des niveaux de défauts dans le gap.

Les distributions gaussiennes des défauts accepteurs et donneurs sont définies respectivement par les relations suivantes:

$$g_{GA}(E) = N_{GA} \exp \left[ - \left( \frac{E_{GA} - E}{W_{GA}} \right)^2 \right] \quad (17)$$

$$g_{GD}(E) = N_{GD} \exp \left[ - \left( \frac{E - E_{GD}}{W_{GD}} \right)^2 \right] \quad (18)$$

Où  $g_{GA}(E)$  et  $g_{GD}(E)$  représentent respectivement les distributions gaussiennes en énergie des défauts accepteurs et donneurs,  $N_{GA}$  et  $N_{GD}$  les densités effectives correspondantes,  $W_{GA}$  et  $W_{GD}$  les largeurs énergétiques (écarts-types) des distributions,  $E_{GA}$  et  $E_{GD}$  les énergies des pics des défauts et  $E$  l'énergie considérée. Ce formalisme est conforme aux modèles implémentés dans ATLAS et largement rapportés dans la littérature [24], [25].

#### 4.4 PARAMÈTRES DE SIMULATION

Les simulations numériques sont réalisées à partir de paramètres physiques représentatifs des matériaux constituant la cellule ainsi que des défauts associés. Ces paramètres, extraits de travaux antérieurs et validés expérimentalement ou numériquement, sont synthétisés dans les tableaux 1 et 2, respectivement pour les propriétés des matériaux et celles des défauts. Les valeurs utilisées sont principalement issues des références [3], [8] et [19].

**Tableau 1. Propriétés des matériaux**

Matériaux	CIGS	ZnO	ZnSe
Gap optique $E_g$ à 300(eV)	1.32	3.3	2.3 – 3.0
Épaisseur $d(\mu\text{m})$	1.5	0.8	0.1
Affinité électronique $\chi$ (eV)	4.8	4.1	4.0 – 4.8
Permittivité diélectrique relative $\epsilon_r$	13.6	9	10
Densité d'état effective des électrons $N_{c300}(\text{cm}^{-3})$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$
Densité d'état effective des trous $N_{v300}(\text{cm}^{-3})$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$
Mobilité des électrons $\mu_n(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	100	100	100
Mobilité des trous $\mu_p(\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1})$	25	25	25
Durée de vie des électrons $\tau_n(\text{s})$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$
Durée de vie des trous $\tau_p(\text{s})$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$
Concentration des accepteurs $N_A(\text{cm}^{-3})$	$6 \cdot 10^{16}$	-	-
Concentration des donneurs $N_D(\text{cm}^{-3})$	-	$1 \cdot 10^{18}$	$8 \cdot 10^{16}$



Les paramètres relatifs aux défauts électroniques, introduits sous forme de distributions gaussiennes dans chaque couche, sont présentés dans le tableau 2.

Tableau 2. Propriétés des défauts

Matériaux	CIGS	ZnO	ZnSe
Concentration de défauts gaussiens ( $\text{cm}^{-3}$ )	$N_{DG} = 1.10^{14}$	$N_{DG} = 1.10^{15}$	$N_{AG} = 1.10^{15}$
Ecart standard $W_{GA}$ et $W_{GD}$ (eV)	0.1	0.1	0.1
Energie du pic $E_{GA}$ et $E_{GD}$ (eV)	0.6	1.65	1.35
Section droite de capture pour les électrons $\sigma_n(\text{cm}^2)$	$1.10^{-17}$	$1.10^{-17}$	$1.10^{-17}$
Section droite de capture pour les trous $\sigma_p(\text{cm}^2)$	$1.10^{-15}$	$1.10^{-15}$	$1.10^{-15}$

Dans le cadre de cette étude paramétrique, l'**affinité électronique du ZnSe** est volontairement variée dans l'intervalle **4,0–4,8 eV**, tandis que son **gap optique** est modifié entre **2,3 et 3,0 eV**, afin d'évaluer leur influence sur les performances photovoltaïques de la cellule. L'ensemble des autres paramètres est maintenu constant afin d'isoler l'effet propre de ces deux grandeurs. Les résultats issus de ces variations seront présentés, analysés et discutés dans la section suivante.

## 5 RÉSULTATS ET DISCUSSION

### 5.1 EFFET DU GAP OPTIQUE DE LA COUCHE TAMPON ZNSE

#### 5.1.1 IMPACT SUR LA CARACTÉRISTIQUE COURANT TENSION (J – V)

La figure 6 présente les caractéristiques courant-tension (J-V) de la cellule CIGS pour différentes valeurs du gap optiques de la couches tampon ZnSe.

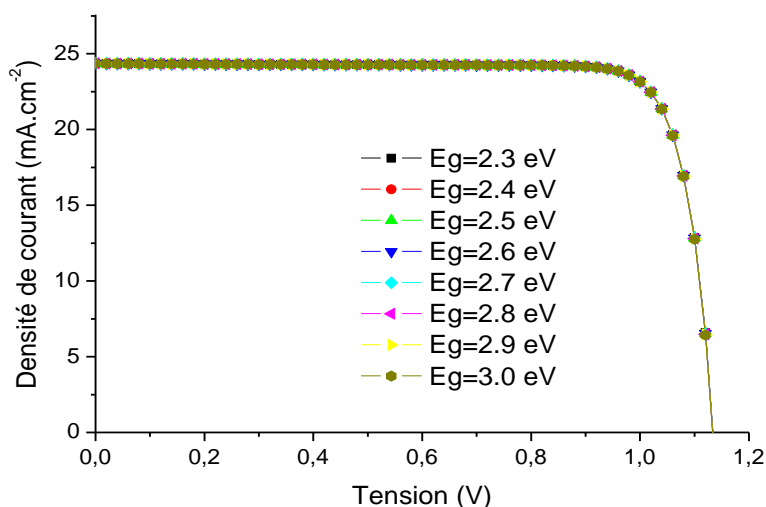
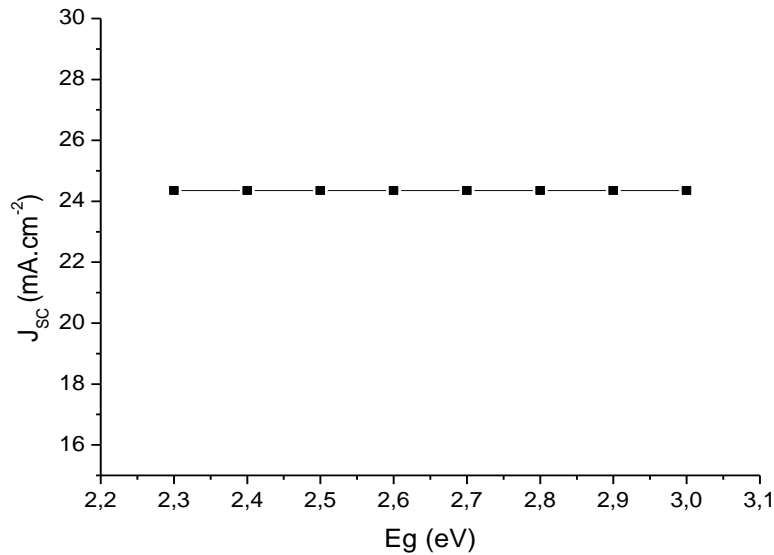


Fig. 6. Caractéristique J-V pour différentes valeurs du gap optique du ZnSe

Il ressort de la figure 6 que les courbes J-V associées aux différentes valeurs du gap optique du ZnSe sont pratiquement superposées. Elles interceptent l'axe des courants à une densité de courant de court-circuit d'environ **24,35 mA.cm<sup>-2</sup>** et l'axe des tensions à une tension de circuit ouvert voisine de **1,13 V**. Ces résultats indiquent que la variation du gap optique du ZnSe, dans l'intervalle considéré, n'affecte que faiblement la forme globale de la caractéristique J-V, suggérant un impact limité sur les paramètres électriques fondamentaux de la cellule. Afin d'approfondir cette observation, l'influence du gap optique sur  $J_{CC}$  et  $V_{CO}$  est analysée séparément dans les sous-sections suivantes.

#### 5.1.2 INFLUENCE SUR LA DENSITÉ DE COURANT DE COURT-CIRCUIT

La variation de la densité de courant de court-circuit en fonction du gap optique de la couche tampon ZnSe est illustrée à la **figure 7**.

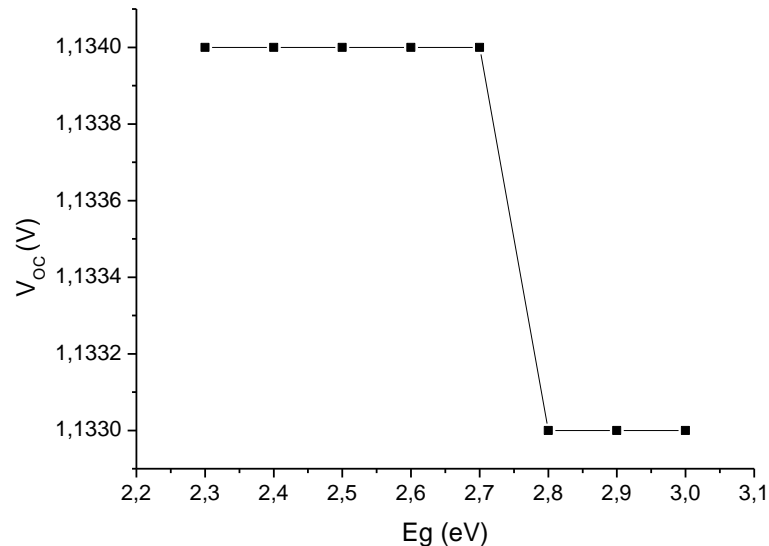


**Fig. 7.** Densité de courant de court circuit en fonction du gap optique du ZnSe

La figure 7 montre que  $J_{sc}$  demeure **constante et égale à  $24,35 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$**  lorsque le gap optique du ZnSe augmente de **2,3 à 3,0 eV**. Cette stabilité s'explique par le caractère largement transparent de la couche tampon ZnSe dans cette plage de gap, ce qui limite son influence sur l'absorption des photons dans la couche absorbante CIGS. De plus, un alignement favorable des bandes à l'interface ZnSe/CIGS permet de maintenir une collecte efficace des porteurs photogénérés, conduisant à une saturation du photocourant [11].

### 5.1.3 SUR LA TENSION DE CIRCUIT OUVERT

Le profil de la tension de circuit ouvert en fonction du gap optique du ZnSe est présenté à la figure 8.



**Fig. 8.** Tension de circuit ouvert en fonction du gap optique du ZnSe

Comme l'indique la figure 8, la tension de circuit ouvert reste globalement quasi constante, avec une valeur moyenne d'environ 1,13 V lorsque le gap optique varie de 2,3 à 3,0 eV. Une très légère variation est toutefois observée autour de 2,7–2,8 eV, traduisant une faible modification de la densité de courant de saturation. Cette évolution marginale peut être attribuée à l'apparition ou à l'activation de défauts énergétiques à l'interface ou dans la couche tampon, susceptibles d'induire des pertes supplémentaires par recombinaison non radiative [3]. Néanmoins, l'amplitude de cette variation reste faible, confirmant le rôle secondaire du gap optique du ZnSe sur  $V_{co}$  dans la plage étudiée.

#### 5.1.4 SUR LE FACTEUR DE FORME

La dépendance du facteur de forme en fonction du gap optique de la couche tampon ZnSe est représenté à la figure 9.

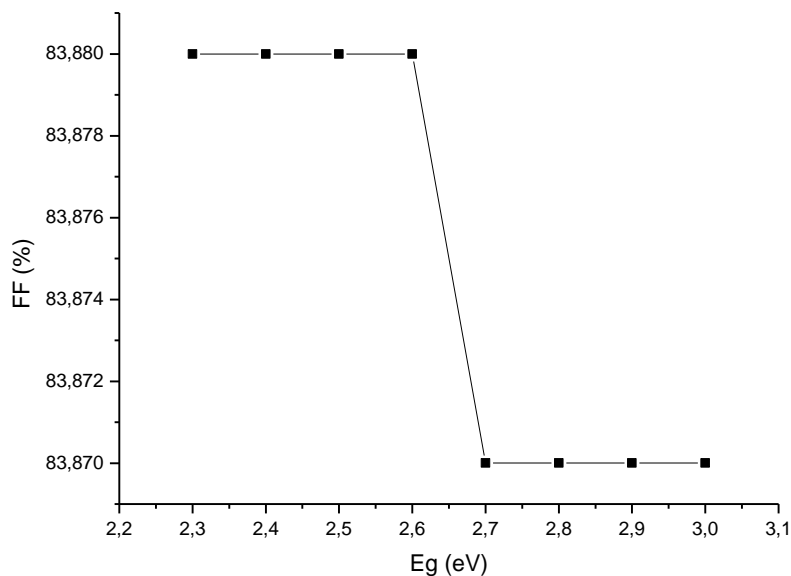


Fig. 9. Evolution du facteur de forme en fonction du gap optique de couche tampon ZnSe

Il apparaît que le facteur de forme demeure pratiquement constant sur l'ensemble de l'intervalle de gap considéré. Des valeurs proches de **83,9 %** sont obtenues lorsque le gap optique varie de **2,3 à 3,0 eV**, avec seulement une variation marginale inférieure à **0,1 %**. Cette stabilité du FF est cohérente avec la faible variation observée pour  $J_{sc}$  et  $V_{oc}$ , et reflète un alignement des bandes globalement optimal à l'interface ZnSe/CIGS, limitant les pertes résistives et recombinaisons [3], [20].

#### 5.1.5 INFLUENCE SUR LE RENDEMENT DE CONVERSION ( $\eta$ )

Le profil du rendement de conversion en fonction du gap optique du ZnSe est présenté à la **figure 10**.

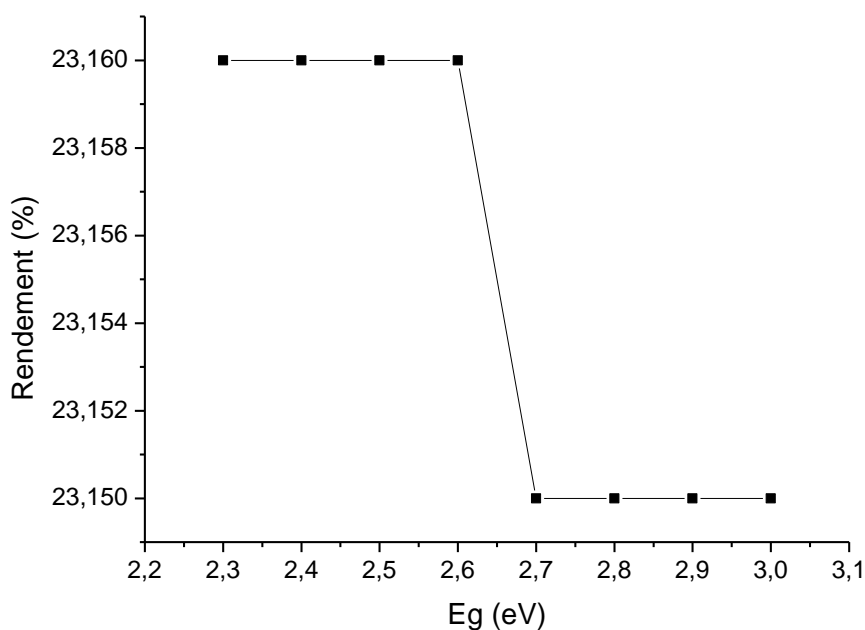


Fig. 10. Profil du rendement en fonction du gap optique du ZnSe

La figure 10 montre que le rendement de conversion reste **quasi constant**, avec des valeurs comprises entre **23,15 % et 23,26 %**, lorsque le gap optique du ZnSe varie de **2,3 à 3,0 eV**. Le rendement maximal, de l'ordre de **23,2–23,3 %**, est obtenu pour des valeurs de gap comprises entre **2,3 et 2,6 eV**. Cette performance élevée est cohérente avec la stabilité du facteur de forme et de la tension de circuit ouvert dans cette plage, et peut être attribuée à une absorption efficace dans la couche CIGS ainsi qu'à un transport et une collecte optimisés des porteurs.

La très légère dégradation du rendement observée lorsque le gap optique est élargi au-delà de **2,6–2,7 eV** peut être liée à une modification subtile de la qualité électronique de l'interface ZnSe/CIGS, susceptible d'accroître les pertes par recombinaison [8], [11].

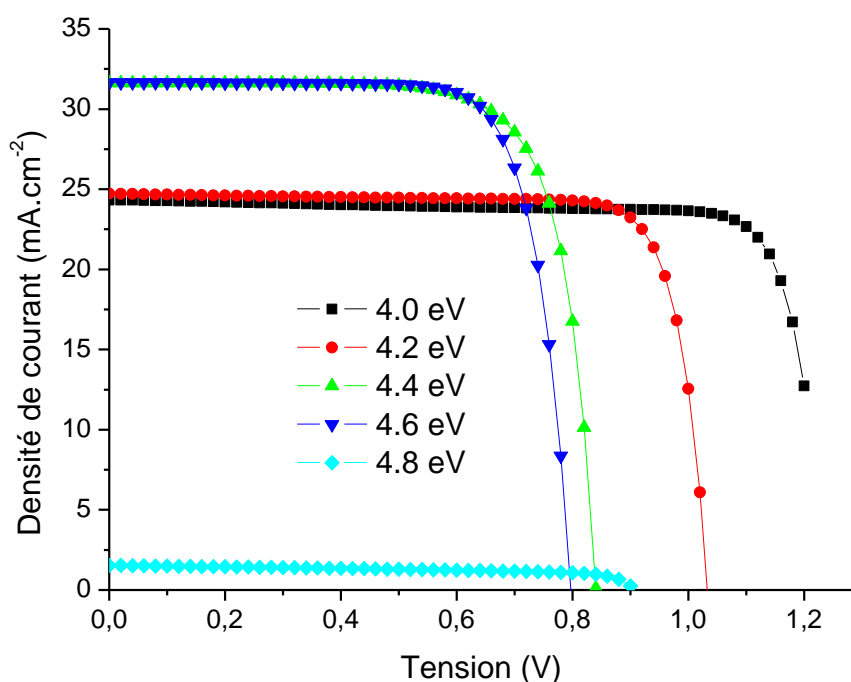
### 5.1.6 SYNTHÈSE

Dans l'intervalle étudié, le **gap optique du ZnSe exerce une influence limitée** sur les performances photovoltaïques de la cellule CIGS. La densité de courant de court-circuit  $J_{sc}$  reste strictement constante, tandis que la tension de circuit ouvert  $V_{oc}$ , le facteur de forme (FF) et le rendement ( $\eta$ ) ne présentent que des variations marginales. Le meilleur compromis en termes de rendement est obtenu pour des valeurs de gap optique du ZnSe comprises entre **2,3 et 2,6 eV**, confirmant que, dans cette plage, l'alignement des bandes et les propriétés optoélectroniques de la couche tampon sont favorables au fonctionnement optimal de la cellule.

## 5.2 EFFET DE L'AFFINITÉ ÉLECTRONIQUE DE LA COUCHE TAMPON ZnSe

### 5.2.1 IMPACTE SUR LA CARACTÉRISTIQUE J – V

La **figure 11** présente l'évolution des caractéristiques courant–tension (J–V) de la cellule CIGS pour différentes valeurs de l'affinité électronique ( $\chi$ ) de la couche tampon ZnSe.



**Fig. 11.** Caractéristique J-V pour différentes valeurs de l'affinité électronique du ZnSe

L'analyse de la figure 11 montre que la densité de courant délivrée par la cellule augmente sensiblement, passant d'environ **24,33 mA·cm<sup>-2</sup>** à **31,66 mA·cm<sup>-2</sup>** lorsque l'affinité électronique du ZnSe croît de **4,0 à 4,6 eV**. En revanche, une augmentation supplémentaire de  $\chi$  de **4,6 à 4,8 eV** entraîne une chute brutale de la densité de courant, qui décroît jusqu'à **1,53 mA·cm<sup>-2</sup>**. Parallèlement, la tension aux bornes de la cellule diminue fortement dans cette dernière plage de variation. Ces résultats mettent clairement en évidence que l'affinité électronique du ZnSe exerce une influence marquée sur la forme de la caractéristique J–V, et par conséquent sur les performances électriques de la cellule. Afin de préciser ces effets, l'impact de  $\chi$  sur  $J_{sc}$  et  $V_{co}$  est analysé séparément ci-après.

### 5.2.2 INFLUENCE SUR LA DENSITÉ DE COURANT DE COURT – CIRCUIT

La variation de la densité de courant de court-circuit en fonction de l'affinité électronique du ZnSe est illustrée à la **figure 12**.

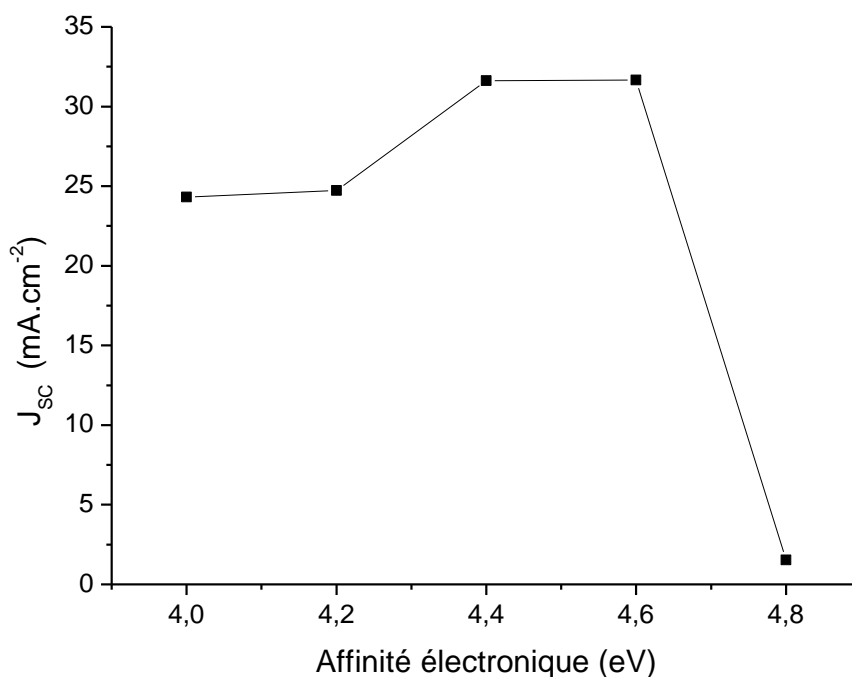


Fig. 12. Profil de la densité de courant de court – circuit en fonction de l'affinité électronique du ZnSe

La figure 12 indique que  $J_{sc}$  augmente progressivement de **24,32 à 31,66 mA.cm<sup>-2</sup>** lorsque  $\chi$  varie de **4,0 à 4,6 eV**, traduisant une amélioration de la collecte des porteurs photogénérés. Cette évolution peut être attribuée à un **alignement favorable des bandes de conduction** à l'interface ZnSe/CIGS, qui facilite le transfert des électrons, améliore la séparation des porteurs et limite les pertes par recombinaison.

En revanche, lorsque l'affinité électronique dépasse **4,6 eV**, une diminution drastique de  $J_{sc}$  est observée, avec une valeur chutant jusqu'à **1,53 mA.cm<sup>-2</sup>** à **4,8 eV**. Cette dégradation peut être associée à la formation d'un **désalignement défavorable des bandes**, conduisant à l'apparition d'une barrière énergétique excessive à l'interface. Un tel déséquilibre réduit la transmission des porteurs vers la couche absorbante CIGS et limite l'absorption effective du rayonnement, ce qui se traduit par une baisse significative de la génération de porteurs. Ces résultats suggèrent que la plage d'affinité électronique la plus favorable à un alignement optimal des bandes se situe approximativement entre **4,2 et 4,6 eV** [3], [11].

### 5.2.3 IMPACT SUR LA TENSION DE CIRCUIT OUVERT.

L'évolution de la tension de circuit ouvert en fonction de l'affinité électronique du ZnSe est présentée à la **figure 13**.

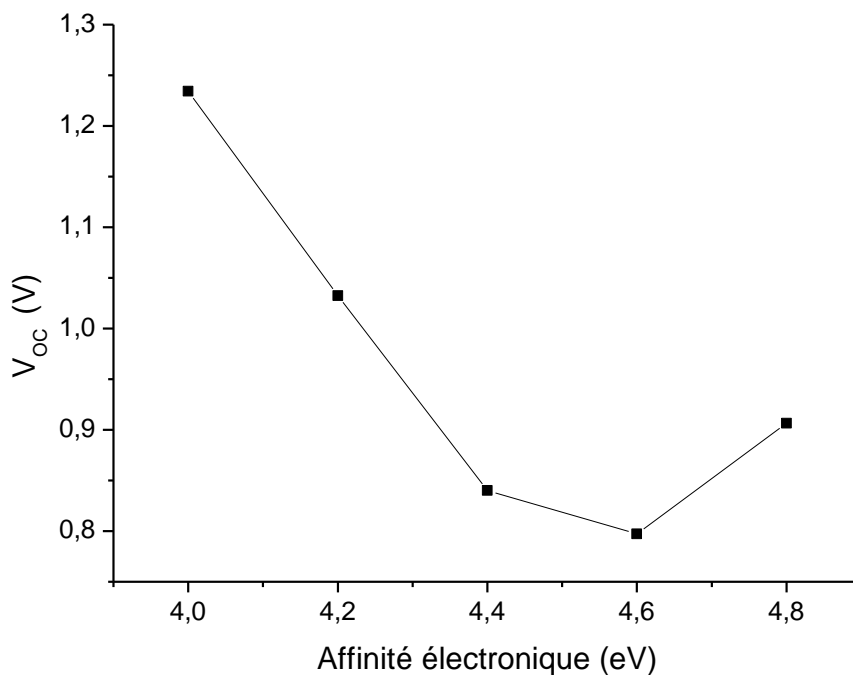


Fig. 13. Profil de la tension de circuit ouvert en fonction de l'affinité électronique du ZnSe

Il ressort de la figure 13 que la tension de circuit ouvert diminue fortement, passant d'environ **1,23 V** à **0,80 V**, lorsque  $\chi$  augmente de **4,0 à 4,6 eV**. Cette diminution est principalement liée à une augmentation de la densité de courant de saturation, induite par des pertes accrues par recombinaison à l'interface ZnSe/CIGS. Une légère remontée de  $V_{co}$ , jusqu'à environ **0,90 V**, est ensuite observée lorsque  $\chi$  varie de **4,6 à 4,8 eV**, traduisant une modification du transport des porteurs et des mécanismes de recombinaison. Néanmoins, ces valeurs restent nettement inférieures à celles obtenues dans la plage de faible affinité électronique, indiquant que l'intervalle **4,0–4,6 eV** demeure le plus favorable à un bon alignement des bandes [8], [26], [27].

#### 5.2.4 IMPACT SUR LE FACTEUR DE FORME

La dépendance du facteur de forme vis-à-vis de l'affinité électronique du ZnSe est illustrée à la **figure 14**.

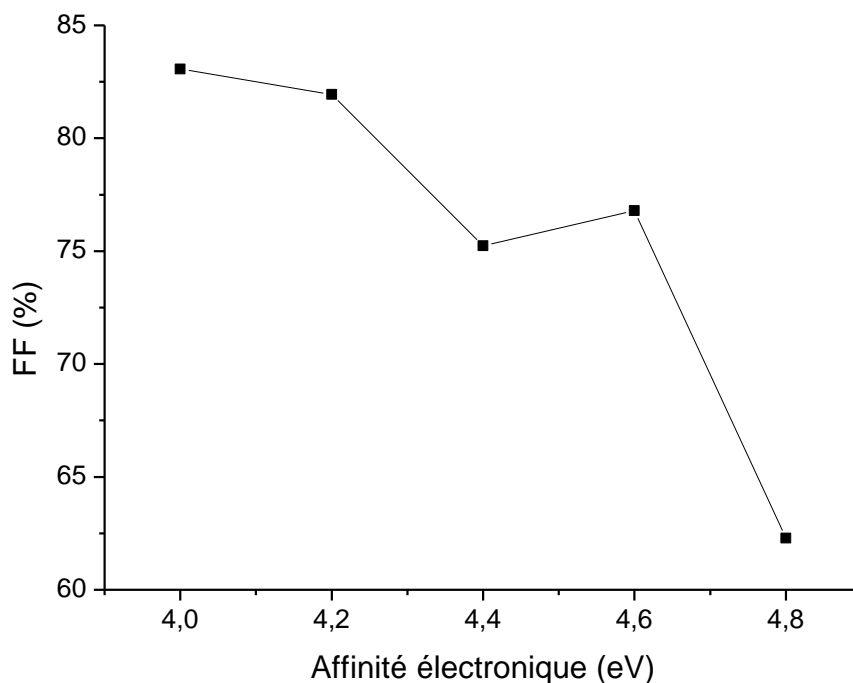
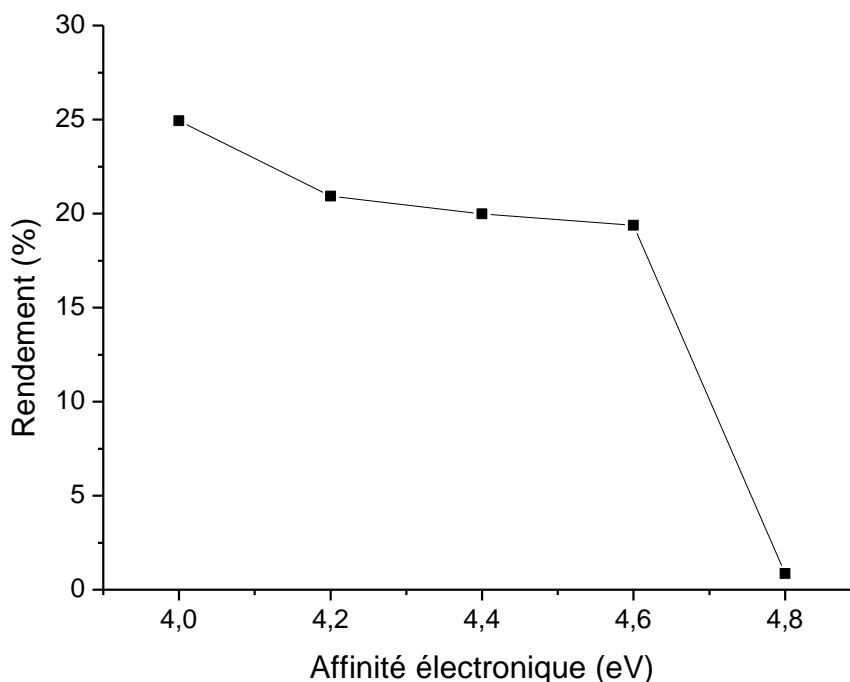


Fig. 14. Profil du facteur de forme en fonction de l'affinité électronique du ZnSe

La figure 14 montre que le facteur de forme décroît de **83,06 %** à **75,23 %** lorsque  $\chi$  augmente de **4,0 à 4,4 eV**, puis présente une légère augmentation jusqu'à **76,79 %** pour  $\chi = 4,6 \text{ eV}$ . En revanche, une dégradation prononcée est observée lorsque l'affinité électronique dépasse **4,6 eV**, le facteur de forme chutant jusqu'à **62,28 %** à **4,8 eV**. Cette évolution reflète une augmentation des pertes résistives et recombinaatoires associées à un désalignement marqué des bandes d'énergie à l'interface, confirmant que la plage **4,0–4,6 eV** est la plus propice à un fonctionnement efficace de la cellule [8], [21].

### 5.2.5 INFLUENCE SUR LE RENDEMENT DE CONVERSION ( $\eta$ )

Le profil du rendement de conversion en fonction de l'affinité électronique du ZnSe est présenté à la **figure 15**.



**Fig. 15.** Profil du rendement en fonction de l'affinité électronique de la couche tampon ZnSe

Comme le montre la figure 15, le rendement diminue progressivement de **24,93 %** à **19,38 %** lorsque  $\chi$  augmente de **4,0 à 4,6 eV**, puis s'effondre de manière significative pour atteindre **0,86 %** lorsque  $\chi$  varie de **4,6 à 4,8 eV**. Cette évolution est cohérente avec les tendances observées pour le facteur de forme et la tension de circuit ouvert. Elle confirme que les meilleures performances photovoltaïques sont obtenues pour une affinité électronique du ZnSe comprise entre **4,0 et 4,6 eV**, intervalle dans lequel l'alignement des bandes favorise un transport efficace des porteurs et limite les pertes par recombinaison.

### 5.2.6 SYNTHÈSE

L'ensemble des résultats montre que **l'affinité électronique du ZnSe exerce un impact majeur** sur les performances de la cellule CIGS. Une augmentation excessive de  $\chi$  conduit à un désalignement défavorable des bandes, entraînant une forte dégradation de  $J_{CC}$ ,  $V_{CO}$ , du facteur de forme et du rendement. À l'inverse, une affinité électronique comprise entre **4,0 et 4,6 eV** favorise un alignement optimal des bandes à l'interface ZnSe/CIGS et permet d'atteindre les meilleures performances photovoltaïques, en accord avec les résultats rapportés dans la littérature [3], [8], [28].

## 6 CONCLUSION

Dans ce travail, une étude numérique a été menée afin d'analyser l'influence du gap optique et de l'affinité électronique de la couche tampon ZnSe sur les performances photovoltaïques d'une cellule CIGS, à travers les paramètres clés que sont 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 ( $\eta$ ).

Les résultats obtenus montrent que la variation du gap optique du ZnSe exerce une influence relativement faible sur les performances globales de la cellule. Un rendement optimal d'environ 23,16 % est atteint lorsque le gap optique est compris entre 2,3 et 2,6 eV, plage dans laquelle l'absorption dans la couche CIGS et l'alignement des bandes demeurent favorables au transport et à la collecte des porteurs.

En revanche, l'affinité électronique du ZnSe apparaît comme un paramètre déterminant. Les simulations mettent en évidence que de bonnes performances photovoltaïques, avec des rendements compris entre 19,38 % et 24,93 %, sont obtenues lorsque l'affinité électronique se situe dans l'intervalle 4,0–4,6 eV. Dans cette plage, l'alignement des bandes à l'interface ZnSe/CIGS est optimal, ce qui limite les pertes par recombinaison et favorise un transfert efficace des porteurs. À l'inverse, une augmentation excessive de l'affinité électronique conduit à un désalignement défavorable des bandes et à une dégradation marquée des performances.

L'ensemble de ces résultats souligne le potentiel du ZnSe comme couche tampon alternative au CdS dans les cellules solaires CIGS. Le caractère non toxique du ZnSe, associé à des performances comparables, voire supérieures dans certaines conditions, en fait une option prometteuse pour le développement de cellules CIGS plus respectueuses de l'environnement. Ces conclusions ouvrent la voie à des travaux futurs intégrant des études expérimentales et une optimisation conjointe des propriétés optoélectroniques et des défauts d'interface.

## LISTE DES ABRÉVIATIONS

- **Al**: aluminium
- **ATLAS–SILVACO**: logiciel TCAD de simulation (module ATLAS de la suite SILVACO)
- **CdS**: sulfure de cadmium
- **CIGS**: séléniure de cuivre–indium–gallium ( $Cu(In, Ga)Se_2$ )
- **DLTS**: spectroscopie transitoire des niveaux profonds (*Deep Level Transient Spectroscopy*)
- $E_C$ : énergie du minimum de la bande de conduction
- $E_g$ : gap optique (énergie de bande interdite)
- **EQE**: rendement quantique externe (*External Quantum Efficiency*)
- $E_{vide}$ : niveau (énergie) du vide
- $E_V$ : énergie du maximum de la bande de valence
- **FF**: facteur de forme (facteur de remplissage)
- $J_{cc}$ : densité de courant de court-circuit
- **J–V**: caractéristique courant–tension
- $J_{ph}$ : densité de photocourant
- $J_{01}, J_{02}$ : densités de courant de saturation (diode 1 et diode 2)
- **Mo**: molybdène
- $n_1, n_2$ : facteurs d'idéalité (diode 1 et diode 2)
- $\eta$ : rendement de conversion
- $\Phi$ : potentiel de sortie (fonction travail / potentiel électrochimique)
- **Rs**: résistance série
- **Rsh**: résistance shunt (parallèle)
- **SLG**: verre sodo-calcique (*Soda-Lime Glass*)
- **SRH**: recombinaison de Shockley–Read–Hall
- **TCAD**: *Technology Computer-Aided Design* (simulation des dispositifs)
- $V_{co}$ : tension de circuit ouvert
- **XPS**: spectroscopie de photoélectrons X (*X-ray Photoelectron Spectroscopy*)
- **ZnO**: oxyde de zinc
- **ZnSe**: séléniure de zinc
- $\chi$ : affinité électronique

## REFERENCES

- [1] T. Gupta and R. P. Chauhan, «Optical, dielectric and photocatalytic properties of ZnO, ZnSe, and ZnO/ZnSe photocatalyst,» *Optical Materials*, vol. 142, p. 114045, Aug. 2023, doi: 10.1016/j.optmat.2023.114045.
- [2] C.-H. Su, «Energy bandgap of ZnSe bulk crystal between 300 K and 1000 K,» *Materials Letters*, vol. 398, p. 138955, Nov. 2025, doi: 10.1016/j.matlet.2025.138955.
- [3] A. Bakour, M. Al-Hattab, O. Bajjou, and K. Rahmani, «Efficiency enhancement of novel ITO/ZnSe/CNTs thin film solar cell,» *Chemical Physics Impact*, vol. 9, p. 100672, Dec. 2024, doi: 10.1016/j.chphi.2024.100672.
- [4] M. Slyotov, T. Mazur, V. Prokopiv, O. Slyotov, and M. Mazur, «Sources of optical radiation based on ZnTe/ZnSe/ZnS heterostructures,» *Materials Today: Proceedings*, vol. 62, pp. 5763–5766, Jan. 2022, doi: 10.1016/j.matpr.2022.03.476.
- [5] M. Chen *et al.*, «Wavelength dependence of nonlinear optical susceptibility of ZnSe nanocrystalline film,» *Optical Materials*, vol. 134, p. 113114, Dec. 2022, doi: 10.1016/j.optmat.2022.113114.



- [6] L. A. Miya, L. F. Koao, S. V. Motloung, D. D. Hile, H. C. Swart, and T. E. Motaung, «Structure and optical properties of Er<sup>3+</sup> doped ZnSe nanoparticles,» *Optical Materials*, vol. 157, p. 116339, Nov. 2024, doi: 10.1016/j.optmat.2024.116339.
- [7] J. E. Castellanos Águila, P. Palacios, J. C. Conesa, J. Arriaga, and P. Wahnón, «Theoretical band alignment in an intermediate band chalcopyrite based material,» *Applied Surface Science*, vol. 424, pp. 132–136, Dec. 2017, doi: 10.1016/j.apsusc.2016.12.237.
- [8] Md. F. Rahman *et al.*, «A qualitative Design and optimization of CIGS-based Solar Cells with SnS<sub>3</sub> Back Surface Field: A plan for achieving 21.83 % efficiency,» *Heliyon*, vol. 9, no. 12, p. e22866, Dec. 2023, doi: 10.1016/j.heliyon.2023.e22866.
- [9] L. Hafaifa, M. Maache, Z. Allam, and A. Zebeir, «Simulation and performance analysis of CdTe thin film solar cell using different Cd-free zinc chalcogenide-based buffer layers,» *Results in Optics*, vol. 14, p. 100596, Feb. 2024, doi: 10.1016/j.rio.2023.100596.
- [10] «Semiconductors,» pp. 524–564, Jan. 2025, doi: 10.1016/B978-0-44-313219-3.00072-1.
- [11] L. Gérard, «Structures de semiconducteurs II-VI à alignement de bandes de type II pour le photovoltaïque,» Theses, Université de Grenoble, 2013. Accessed: Nov. 28, 2025. [Online]. Available: <https://theses.hal.science/tel-00941180>.
- [12] Z. Zheng, X. Zu, Y. Zhang, and W. Zhou, «Rational design of type-II nano-heterojunctions for nanoscale optoelectronics,» *Materials Today Physics*, vol. 15, p. 100262, Dec. 2020, doi: 10.1016/j.mtphys.2020.100262.
- [13] A. Urbaniak, A. Czudek, A. Eslam, R. Wuerz, and M. Igalson, «Consequences of grain boundary barriers on electrical characteristics of CIGS solar cells,» *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 253, p. 112252, May 2023, doi: 10.1016/j.solmat.2023.112252.
- [14] M. Calasan, S. Vujosevic, M. Alruwaili, and M. A. Ibrahim, «Optimization of four-diode equivalent circuit models for solar cells: Analytical formulation and performance enhancement,» *Alexandria Engineering Journal*, vol. 127, pp. 411–430, Aug. 2025, doi: 10.1016/j.aej.2025.05.047.
- [15] R. Devarapalli, B. V. Rao, and A. Al-Durra, «Optimal parameter assessment of Solar Photovoltaic module equivalent circuit using a novel enhanced hybrid GWO-SCA algorithm,» *Energy Reports*, vol. 8, pp. 12282–12301, Nov. 2022, doi: 10.1016/j.egy.2022.09.069.
- [16] K. Panchal *et al.*, «Conformity of multi-step diffusion optimization towards high efficiency industrial mono-PERC Si-solar cells,» *Next Materials*, vol. 9, p. 101249, Oct. 2025, doi: 10.1016/j.nxmte.2025.101249.
- [17] M. Al-Dhaifallah, «Analytical solutions using special trans functions theory for current–voltage expressions of perovskite solar cells and their approximate equivalent circuits,» *Ain Shams Engineering Journal*, vol. 14, no. 12, p. 102225, Dec. 2023, doi: 10.1016/j.asej.2023.102225.
- [18] P. E. Pepa, D. Afungchui, O. Holtomo, and J. Ebobenow, «Parameters critically affecting the open circuit voltage of an organic solar cell,» *Heliyon*, vol. 11, no. 4, p. e42684, Feb. 2025, doi: 10.1016/j.heliyon.2025.e42684.
- [19] S. Sikder, Md. K. Hasan, H. Mamur, and M. R. A. Bhuiyan, «Optimizing layer configuration and material selection to enhance CIGS solar cell performance through computational simulation,» *Hybrid Advances*, vol. 10, p. 100460, Sep. 2025, doi: 10.1016/j.hybadv.2025.100460.
- [20] Md. S. Uddin, R. Hosen, S. Sikder, H. Mamur, and M. R. A. Bhuiyan, «Photovoltaic performance enhancement of Al/ZnO: Al/i-ZnO/CdS/CIGS/Pt solar cell using SCAPS-1D software,» *Next Energy*, vol. 2, p. 100080, Jan. 2024, doi: 10.1016/j.nxener.2023.100080.
- [21] A. Labadi, S. Tobbeche, O. Saidani, M. Bouladame, and F. Brahimi, «Efficiency improvement of CIGS solar cells with ZnSe buffer layer and SnS BSF layer,» *Micro and Nanostructures*, vol. 206, p. 208257, Oct. 2025, doi: 10.1016/j.micrna.2025.208257.
- [22] A. Kowsar *et al.*, «An overview of solar cell simulation tools,» *Solar Energy Advances*, vol. 5, p. 100077, Jan. 2025, doi: 10.1016/j.seja.2024.100077.
- [23] Z. Wei, N. Al-Nuaimi, and S. Gemming, «Optimization of InGaN-based solar cells by numerical simulation: Enhanced efficiency and performance analysis,» *Next Materials*, vol. 6, p. 100325, Jan. 2025, doi: 10.1016/j.nxmte.2024.100325.
- [24] S. Dabbabi, T. B. Nasr, and N. Kamoun-Turki, «Parameters optimization of CIGS solar cell using 2D physical modeling,» *Results in Physics*, vol. 7, pp. 4020–4024, Jan. 2017, doi: 10.1016/j.rinp.2017.06.057.
- [25] M. Elbar and S. Tobbeche, «Numerical Simulation of CGS/CIGS Single and Tandem Thin-film Solar Cells using the Silvaco-Atlas Software,» *Energy Procedia*, vol. 74, pp. 1220–1227, Aug. 2015, doi: 10.1016/j.egypro.2015.07.766.
- [26] R. Charghandeh and A. Abbasi, «Effect of In (O, S) buffer layer on the band alignment and the performance of CZT (S, Se) thin film solar cells,» *Materials Today Communications*, vol. 37, p. 107299, Dec. 2023, doi: 10.1016/j.mtcomm.2023.107299.
- [27] B. Maharana, R. Jha, and S. Chatterjee, «Metal oxides as buffer layers for CZTS based solar cells: A numerical analysis by SCAPS-1D software,» *Optical Materials*, vol. 131, p. 112734, Sep. 2022, doi: 10.1016/j.optmat.2022.112734.
- [28] H. Kafashan and A. Bahrami, «CIGS solar cells using ZrS<sub>2</sub> as buffer layer: Numerical simulation,» *Optik*, vol. 298, p. 171594, Mar. 2024, doi: 10.1016/j.ijleo.2023.171594.