

N° d'ordre : D -

**THESE**

présentée

devant l'Institut National des Sciences Appliquées de Rennes

en vue de l'obtention du

**DOCTORAT**

spécialité : Photonique

par Mme Bienlo Flora Christine ZERBO

Intitulé : Development and characterization of silicon based solar cells with molybdenum trioxide (MoO<sub>3-x</sub>) selective contacts

Directeur de Thèse : DURAND Olivier

Date, heure et lieu de soutenance : 14/01/2025, 14h00, INSA Rennes, Amphi GC

Membres du jury (nom, prénom, titre et établissement de rattachement, fonction)

1. FOURMOND Erwann - Professeur des Universités - INL - INSA Lyon
2. KLEIDER Jean-Paul - Directeur de recherche - CNRS - GeePs - Université Paris Saclay - Centrale Supélec

3. GUEUNIER-FARRET Marie Estelle - Maître de conférences - HDR - IMS - Bordeaux INP
4. HAREL Sylvie - Maître de conférences - HDR - IMN - Nantes Université
5. MODREANU Mircea - Principal Investigator - Tyndall National Institute - University College Cork
6. LE ROUZO Judikael - Professeur des Universités - IM2NP - Aix Marseille Université - Université de Toulon
7. DURAND Olivier - Professeur des Universités - Institut Foton - INSA Rennes
8. ROLLAND Alain - Professeur des Universités - Institut FOTON - Université de Rennes

## RESUME DE LA THESE

**Résumé :** L'objectif de cette thèse est d'élaborer des cellules solaires à hétérojonction alliant un absorbeur de silicium(Si), et des contacts sélectifs à base de trioxyde de molybdène ( $\text{MoO}_{3-x}$ ). L'étude de couches minces de  $\text{MoO}_{3-x}$  montre que le matériau possède un grand gap et un dopage intrinsèque de type n dû à des lacunes d'oxygène. Une étude de recuits du  $\text{MoO}_{3-x}$ , en particulier sous  $\text{N}_2$  et sous  $\text{O}_2$ , permet d'influencer les paramètres cristallins du  $\text{MoO}_{3-x}$ , ainsi que les densités de défauts. Cela permet d'obtenir des alignements de bandes électroniques  $\text{MoO}_{3-x}/(\text{p})\text{Si}$  plus favorables. Au travers de la simulation numérique, nous montrons qu'un contact sélectif d'électrons  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{p})\text{Si}$  requiert un faible travail de sortie du  $\text{MoO}_{3-x}$  et nous montrons que dans le cas des structures  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{n})\text{Si}$  la forte discontinuité de bandes de valence entre les deux matériaux bloque le passage des trous vers le  $\text{MoO}_{3-x}$ . Les dispositifs expérimentaux de type  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{n})\text{Si}$  montrent des résultats caractéristiques de photodétecteurs avec une responsivité de 0.32-0.33 A/W. En revanche les dispositifs  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{p})\text{Si}$  montrent des caractéristiques de cellules solaires, avec des tensions de circuit ouvert  $V_{oc}$  supérieures à 0.5V, pour des rendements de conversion  $\eta=4.7\%$  (limités par une résistance série d'environ  $13 \Omega.\text{cm}^2$ ). Les résultats expérimentaux et la simulation montrent que le  $\text{MoO}_{3-x}$  obtenu ici possède vraisemblablement un travail de sortie autour de 5eV, au lieu des 6.7eV, qui lui sont généralement attribué. Ce faible travail de sortie explique dans notre cas l'obtention de cellules fonctionnelles à contact sélectif d'électrons  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{p})\text{Si}$ , quand dans la littérature, des cellules à contact sélectif de trous  $(\text{n})\text{MoO}_{3-x}/(\text{n})\text{Si}$  sont le plus souvent obtenues.