

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العلمي والبحث العالي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البلدية
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Mention Électronique
Spécialité Micro-électroniques

présenté par

Elarifi Abderrahim Mohamed

&

Aiche Walid

Simulation et optimisation d'une cellule solaire à base des matériaux pérovskite hybride ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$)

Proposé par : Pr Aissat Abdelkader

Année Universitaire 2019-2020

Sommaire

Remerciements.....	
Sommaire	
Liste de figures.....	I
Liste de Tableaux.....	III
Listes des symboles et abréviations.....	IV
Introduction générale	1
Chapitre I : généralités sur le photovoltaïque et présentation des cellules solaires à base de pérovskites mixte.....	3
Introduction.....	3
1.1 Le gisement solaire	3
1.1.1 Historique du photovoltaïque	4
1.1.2 Principe de la convention photovoltaïque.....	4
1.2 Cellules photovoltaïques	5
1.2.1 Définition d'une cellule photovoltaïque	5
1.2.2 Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques	5
1.2.3 Paramètres et caractéristiques électriques d'une cellule solaire	6
a. Caractéristiques courant-tension et schéma équivalent.....	7
b. Paramètres d'une cellule photovoltaïque	8
1.3 Les filières technologiques du photovoltaïque	9
1.3.1 La filière Silicium	9
1.3.2 Cellules couches minces	10
1.3.3 Les cellules III-V multi-jonctions	11
1.3.4 Les cellules nanocristallines à colorant (ou cellules de Grätzel)	11
1.3.5 Les cellules photovoltaïques organiques	11
1.4 Les cellules solaires à base de matériaux pérovskites	12
1.4.1 Propriétés structurales des pérovskites hybrides.....	12
1.4.2 Propriétés électriques	13
1.4.3 Propriétés optiques.....	13
1.4.4 Extraction de la charge.....	15

1.5	Présentation des matériaux	15
1.5.1	Oxyde Conducteur Transparent (TCO)	15
1.5.2	Oxyde de Zinc (ZnO)	16
1.5.3	Spiro-OMeTAD	16
1.6	Influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement PV	16
1.6.1	Influence de la température.....	16
1.6.2	Influence du rayonnement.....	16
1.7	Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque.....	16
1.7.1	Avantages.....	16
1.7.2	Inconvénients	17
1.8	Conclusion	18
Chapitre II : Résultats et discussions		19
Introduction.....		20
2.1	Structure de la cellule	20
2.2	Effet de l'épaisseur de TCO	22
2.3	L'influence d'épaisseur de la couche ZnO	24
2.4	L'influence d'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$	28
2.5	L'influence de la température de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$	32
2.6	L'influence de dopage (Nd) la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$)	36
2.7	L'influence des défauts (N_i) la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$)	37
2.8	Conclusion	39
2.9	Conclusion générale.....	40
Références		41
Annexe.....		45

Liste des figures

Figure 1.1 Définition du nombre d'air masse (AM) et spectre d'émission du rayonnement solaire homologué par la Société Américaine de Tests et Matériaux (ASTM G173-03)	4
Figure 1.2 Schéma illustrant la conversion photovoltaïque	5
Figure 1.3 Principe simplifié d'une jonction p-n et application de cette jonction pour la séparation de charges	6
Figure 1.4 Illustrations de la génération de charges au sein d'une cellule photovoltaïque à jonction p-n sous illumination et de création de la photo courant	6
Figure 1.5 Représentation conventionnelle des courbes $I=f(V)$ et $P=f(V)$	7
Figure 1.6 Caractéristiques courant/tension d'une cellule PV obscurité (a), sous éclairement(b)	7
Figure 1.7 Schéma équivalent d'une cellule solaire	8
Figure 1.8 Schéma équivalent d'une cellule solaire organique	8
Figure 1.9 Structure cristalline de la pérovskite	13
Figure 1.10 Spectres d'absorption de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$	10
Figure 1.11 Diagramme d'alignement des bandes de l'ETL et de l'HTL utilisé dans les cellules solaires à base de pérovskite	15
Figure 2.1 Structure 3D de cellule solaire a bas de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$).....	20
Figure 2.2 Schéma de diagramme de bande d'énergie	21
Figure 2.3 La variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche TCO	22
Figure 2.4 La variation de la densité de courant $J(V)$ pour différente épaisseur de la couche TCO	22
Figure 2.5 Caractéristiques puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche TCO.....	23
Figure 2.6 La variation de Courant de court-circuit J_{cc} et tension circuit ouvert V_{co} en fonction d'épaisseurs de la couche TCO	24
Figure 2.7 La variation du facteur de forme (FF) Le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la couche TCO	24
Figure 2.8 La variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche ZnO	25

Figure 2.9 La variation de la densité de courant $I(V)$ en fonction d'épaisseur pour la couche de ZnO	25
Figure 2.10 la caractéristiques puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche ZnO	26
Figure 2.11 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et tension circuit ouvert V_{co} en fonction d'épaisseur de la couche ZnO	27
Figure 2.12 La variation de facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur pour la couche de ZnO	27
Figure 2.13 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et le rendement η en fonction d'épaisseur pour la couche de ZnO, $T=300K$ et $d_{TCO}=0.1\mu m$	28
Figure 2.14 La variation de l'effet de rendement quantique externe (EQE) en fonction de l'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$, $T=300K$ et $d_{TCO}=0.1\mu m$, $d_{ZnO}=0.5\mu m$	29
Figure 2.15 La variation de la densité de courant $J(V)$ en fonction d'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$, $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$	29
Figure 2.16 La caractéristique puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$, $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$	30
Figure 2.17 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de l'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$, $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$	31
Figure 2.18 La variation de La facteur de forme FF et le rendement η pour différentes épaisseurs de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$, $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$	31
Figure 2.19 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et le rendement η en fonction d'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$	32
Figure 2.20 La variation de l'effet de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la température	32
Figure 2.21 La variation de la densité de courant $J(V)$ en fonction de la variation de température	33
Figure 2.22 La caractéristique puissance tension pour différentes températures de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$	33
Figure 2.23 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de la variation de température	34
Figure 2.24 La variation de facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction du la variation de température	35
Figure 2.25 La variation de la tension de circuit ouvert V_{co} et le rendement η en fonction de la température	35

Figure 2.26 La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension circuit ouvert V_{co} en fonction de la variation de dopage (Nd)	36
Figure 2.27 La variation du facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction du la variation de dopage (Nd)	37
Figure 2.28 La variation du courant de court-circuit J_{cc} la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de la densité des défauts	38
Figure 2.29 La variation du facteur de forme FF et le rendement η en fonction de la densité des défauts	38
Figure 3.1 Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS	43
Figure 3.2 Définition du point de fonctionnement	44
Figure 3.3 Choix de l'illumination	45
Figure 3.4 Panneau de définition de la structure	46
Figure 3.5 Panneaux de définition des propriétés des couches	46
Figure 3.6 Ajouter/supprimer "défets"	47
Figure 3.7 Panneaux de définition des propriétés par défaut	47

Liste des tableaux

Tableau 1.1 Propriétés de différente avance halide pérovskites	14
Tableau 2.1 Montre les paramètres utilisés pour la simulation de cellule solaire en pérovskite mixte ($CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$)	21
Tableau 2.2 La table des résultats	23
Tableau 2.3 La table des résultats	26
Tableau 2.4 La table des résultats	30
Tableau 2.5 La table des résultats	34
Tableau 2.6 La table des résultats	36
Tableau 2.7 La table des résultats	37

Liste des Symboles et Abréviations :

PCE	: Power conversion efficiency
AM	: masse d'air
F(λ)	: l'irradiation spectrale
K	: constante de Boltzmann
R_s	: Rayon du soleil
E_g	: la bande interdite
I_{cc}	: courant de court circuit
V_{co}	: La tension de crcuit ouvert
η	: Le rendement
P_{max}	: La puissance maximale
FF	: Le facteur de forme
E_F	: le niveau de fermi
n,p	: Les densités des porteurs
α	: Le coefficient d'absorption
G_{opt}	: Le taux de génération
R_{n,p}	: Taux de recombinaison
E	: le champ électrique
J_n	: densité de courant des électrons
J_p	: densité de courant des trous
μ_n, μ_p	: mobilités des électrons et des trous
λ	: la longueur d'onde
h	: la constante de Planck
C	: la vitesse de la lumière dans le vide
N_A	: la concentration des accepteurs
N_d	: la concentration des donneurs
N_t	: la densité des défauts

REMERCIEMENTS

Louange à notre Seigneur "Allah" qui nous a dotés de la merveilleuse faculté de raisonnement. Louange à notre Créateur qui nous a incités à acquérir le savoir. C'est à lui que nous adressons toute notre gratitude en premier lieu.

Je tiens à remercier mon promoteur, Mr Aissat abdelkader, professeur au département d'Electronique de l'Université de Saad dahleb blida 1, qui m'a chaleureusement accueilli dans son laboratoire, et a accepté de diriger ce mémoire, et qui était toujours disponible, dont les encouragements et les conseils judicieux m'ont été de très grande utilité.

Nous tenons à remercier vivement Mr.Laidouci Abdelmoumene (Doctorant en physique) , pour son aide son soutien , et de sa sympathie .Mes remerciements s'adressent également à Monsieur le président du jury, Mr Said nacer, professeur au département d'Electronique de l'Université de Saad dahleb blida 1, d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire. Je remercie chaleureusement ma chère mère, et chers frère et sœurs pour leurs sacrifices, aides, soutien et encouragement sans oublier tous ceux qui, de près ou de loin, auraient contribué au bon déroulement de ce mémoire.Finalement, j'adresse mes sincères remerciements à toutes les personnes avec qui j'ai eu la chance de travailler ou que j'ai eu l'honneur de côtoyer avant et pendant la préparation de ce mémoire et à tous mes professeurs de l'Université de Saad dahleb blida 1.

المخلص: تعد الخلايا الكهروضوئية أفضل طريقة لاستخدام الطاقة الشمسية عن طريق امتصاص إشعاع الفوتونات. الهدف من هذا البحث هو محاكاة خلايا البيروفسكايت الشمسية وإيجاد السماكة المثلى لجميع الطبقات وتأثير درجة الحرارة وتأثير المنشطات (Nd) وتأثير عيوب (Nt) للطبقة الماصة. نقوم هنا بتشغيل محاكاة لخلايا بيروفسكايت الشمسية على برنامج محاكاة SCAPS-1D. باستخدام هيكل الخلية تشابهاً مع الخلايا الشمسية غير العضوية الأخرى مثل CIGS, CdTe, Cu(In, Ga)Se₂. طبقة الامتصاص المستخدمة هنا هي CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃ لما لها من دور كبير كمتص عالي الكفاءة. حيث يتم تحقيق جهد دائرة مفتوحة عالية 1.313 فولت. ونسبة كفاءة أكثر من 22%. تم تحقيق النتيجة المثلى وتوضح ذلك في خصائص J-V والكفاءة الكمية (QE).

الكلمات المفتاحية: خلايا البيروفسكايت الشمسية. السماكة. الكفاءة الكمية. Scaps-1D, CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃.

Abstract: The photovoltaic cells are the best way to use solar energy by absorbing the photons radiation. The aim of this paper work is to simulate perovskite solar cell and finding the optimum thickness of all layers and the effect of temperature, the doping effect (Nd) and the effect of defects (Nt) of the absorber layer. Here we run a simulation of perovskite solar cells on SCAPS-1D simulator software. The cell structure employs similarity with other inorganic solar cells such like CIGS, CdTe and Cu(In,Ga)Se₂. The absorber layer is CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃ used here for its great attention as highly efficient absorber. A high open circuit voltage of 1.313 V achieved here and the efficiency is more than 22%., optimum result has been achieved and demonstrates that in I-V characteristics and quantum efficiency (QE).

Keywords: Perovskite solar cell, Scaps-1D, CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃, Thickness, Quantum efficiency.

Résumé: Les cellules photovoltaïques sont le meilleur moyen d'utiliser l'énergie solaire en absorbant le rayonnement photonique. Le but de ce travail de papier est de simuler une cellule solaire en pérovskite et de trouver l'épaisseur optimale de toutes les couches et l'effet de la température, l'effet dopant (Nd) et l'effet des défauts (Nt) de la couche absorbante. Ici, nous exécutons une simulation de cellules solaires pérovskite sur le logiciel de simulation SCAPS-1D. La structure cellulaire utilise la similitude avec d'autres cellules solaires inorganiques telles que CIGS, CdTe et Cu (In, Ga) Se₂. La couche absorbante est CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃ utilisé ici pour sa grande attention en tant qu'absorbant très efficace. Une tension de circuit ouvert élevée de 1,313 V obtenue ici et le rendement est supérieur à 22%. En faisant varier l'épaisseur des différentes couches, un résultat optimal a été obtenu et le démontre dans les caractéristiques I-V et l'efficacité quantique (QE).

Mots clés: cellule solaire pérovskite, Scaps-1D, CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl₃, épaisseur, efficacité quantique.

Chapitre 1

Généralités sur le photovoltaïque et
présentation des cellules solaires à base de
pérovskites mixte

Introduction générale

Le Soleil, source énergétique quasi illimitée, est à l'origine d'un nombre impressionnant d'effets biologiques qui participent directement ou indirectement à la vie animale et végétale : il procure la chaleur, permet la photosynthèse, la vision, conditionne les rythmes biologiques, etc.

L'originalité de l'énergie photovoltaïque telle qu'on l'entend ici est de transformer directement la lumière solaire en électricité. Et quand on sait que l'apport énergétique solaire total sur la planète est de plusieurs milliers de fois supérieur à notre consommation globale d'énergie, on comprend tout l'intérêt d'une telle démarche. Renouvelable, cette énergie respecte notre environnement en réduisant les émissions des gaz à effet de serre.

Les prix ne cessent de baisser grâce à l'accroissement des volumes de production car le marché est fortement stimulé par le rachat du courant par les compagnies d'électricité, et il croît chaque année au niveau mondial. Peu de secteurs économiques peuvent afficher de tels résultats

De nombreuses cellules photovoltaïques ont vu le jour pour exploiter au mieux la lumière du Soleil au travers de panneaux solaires. Afin de produire de l'électricité, Ces cellules solaires constituées d'un matériau semi-conducteur qui converti l'énergie du rayonnement solaire en électricité.

Silicium, terres rares ou plastiques sont employés, mais chaque technologie a des atouts et des faiblesses dans ce domaine prometteur.

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ devient un bon collecteur de lumière grâce à ses caractéristiques remarquables telles que bande interdite idéale, absorption large spectre, bon mécanisme de transporteur, facilité de fabrication sur le substrat souple et la bande accordable espace et longue longueur de diffusion. Caractéristiques précitées de pérovskite au plomb-halogénure sont encourageants utiliser dans la fabrication de la cellule solaire pérovskite et devenir un bon matériau concurrentiel au silicium traditionnel matériau. Au début, l'PCE maximum de Ces cellules solaires à base de pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ représentent 3,8%.

En temps voulu, par les nouvelles méthodes de fabrication et la sélection appropriée de l'architecture le PCE de pérovskite cellule solaire a atteint 22,7%. Plomb méthyl ammonium les matériaux de pérovskite aux halogénures sont abondants sur la terre et ce sont des solutions traitables menant à la rentable technique de fabrication. Une compréhension claire de la relation sous-jacente entre les caractéristiques matérielles et la une architecture de périphérique est nécessaire pour améliorer les performances de l'appareil [1].

Afin d'améliorer les performances d'une cellule solaire photovoltaïque, il est nécessaire de l'optimiser par simulation. L'optimisation par simulation, vu qu'elle suive un modèle mathématique du système réel, elle a l'avantage d'être facile, ne coutant pas chère et nous pouvons prédire les paramètres optimaux qui contribuent à la fabrication d'une cellule ayant les meilleures performances.

L'objectif de ce présent mémoire est de faire une modélisation de l'effet des épaisseurs, température, dopage (N_d) de l'absorbeur et la densité de défaut de l'absorbeur sur les caractéristiques électriques d'une cellule solaire à base de Pérovskite en vue d'optimiser par simulation en utilisant le logiciel SCAPS 1D. pour simuler les caractéristiques

physiques (densité de courant de court-circuit, tension de circuit ouvert V_{oc} , Facteur de forme FF, Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η)).

Ce mémoire est organisé comme suit :

Le premier chapitre présente des généralités et équations fondamentales sur le photovoltaïque et présentation des cellules solaires à base de pérovskites hybrides.

Dans le deuxième chapitre nous présentons discutons les résultats obtenus.

Ce travail se termine par une conclusion générale des résultats obtenus au cours de simulation et perspectives.

Introduction :

Depuis quelques années, les énergies renouvelables sont devenues un enjeu inévitable pour la survie de l'humanité en raison de leurs présences permanentes et de leurs sources inépuisables. L'énergie solaire est jusqu'à aujourd'hui l'énergie renouvelable la plus utilisée sous ses distincts types : photovoltaïque et thermique.

L'énergie photovoltaïque est la plus importante des énergies renouvelables, elle a le privilège d'être non polluante, flexible et fiable. Elle indique l'énergie récupérée et transformée directement en électricité à partir de la lumière (onde électromagnétique) du soleil par des panneaux photovoltaïques. Elle découle de la transformation directe dans un semi-conducteur (le silicium, le CdTe, l'AsGa, le CIS, etc.) d'un photon en paire électron-trou.

Ce premier chapitre est consacré aux généralités sur la conversion photovoltaïque, en introduisant les concepts de base ainsi que le principe de fonctionnement de la cellule solaire.

1.1 Le gisement solaire :

Inversement aux autres énergies renouvelables, l'énergie solaire ne souffre pas de problème de gisement et est disponible partout sur notre planète. Le soleil est une étoile de 696 000 km de rayon et de masse $1,99.10^{30}$ kg. Sa température intérieure, d'environ 15 millions de kelvins, lui permet à chaque seconde de transformer 700 millions de tonnes d'hydrogène, par réaction de fusion atomique, ce qui correspond à une énergie égale à 386 milliards de milliards de mégawatts [2]. Sous forme de rayonnement électromagnétique, une partie de cette énergie atteint la surface de la terre. Hors atmosphère, l'énergie moyenne reçue par la Terre est d'environ 5,5 kWh/m² par jour. En traversant l'atmosphère, le rayonnement solaire subit une atténuation et une modification de son spectre. Ainsi la couche d'ozone absorbe la majeure partie du rayonnement ultra-violet, tandis que la vapeur d'eau absorbe le rayonnement infrarouge. Le rayonnement solaire au sol dépend donc de l'épaisseur de l'atmosphère traversée par les rayons lumineux et n'est donc pas homogène sur toute la surface de la Terre. Pour tenir compte de ces différences, on introduit un coefficient x appelé masse atmosphérique ou nombre d'air masse (AMx) dont l'expression est :

$$x \approx \frac{1}{\sin \theta} \quad (1.1)$$

θ représente l'élévation du soleil sur l'horizon (90° au zénith) comme le montre la Figure 1-1. Ainsi lorsque le Soleil est au zénith, on dit que l'on a les conditions AM1 car les rayons lumineux traversent une épaisseur d'atmosphère unité (7,8 km).

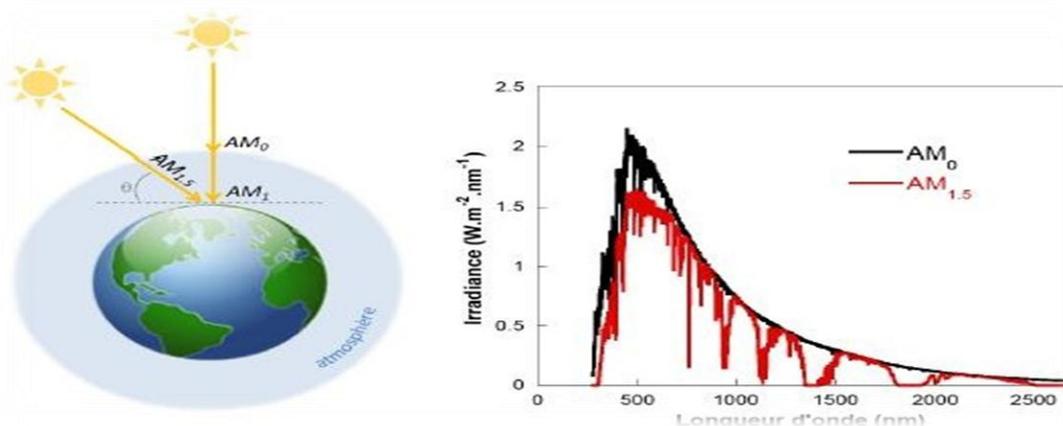


Figure 0.1 : Définition du nombre d'air masse (AM) et spectre d'émission du rayonnement solaire homologué par la Société Américaine de Tests et Matériaux (ASTM G173-03) [2]

Avec un soleil à 30° sur l'horizon, on obtient les conditions AM2. Hors atmosphère à haute altitude, on définit les conditions AM₀. En réalité, le nombre d'air masse recouvre deux aspects. D'une part, il caractérise la puissance transportée par le rayonnement solaire (1353 W.N^{-2} pour AM₀, 833 W.N^{-2} pour AM1, 5) ; d'autre part, il sert à définir un spectre de référence pour calibrer les cellules étalons destinées à déterminer les performances des dispositifs photovoltaïques. Ainsi les conditions standards de qualification des cellules correspondent à un spectre AM1,5, une puissance incidente de 1000 W.N^{-2} et une température de 25°C et c'est pour de telles conditions que doivent être fournies les performances et spécifications d'un dispositif photovoltaïque donné. Ce spectre (Figure 1.1) a été homologué par la Société Américaine de Tests et Matériaux (ASTM G173-03).

1.1.1 Historique du photovoltaïque :

L'histoire du PV débute en 1839 lorsque le physicien français Antoine César Becquerel découvre le principe photovoltaïque (C'est son petit-fils, Antoine Henri Becquerel qui découvrira la radioactivité). L'effet photovoltaïque en tant que tel a été découvert en 1887 par le physicien allemand Heinrich Rudolf Hertz. C'est Albert Einstein qui, le premier, a pu expliquer le principe photovoltaïque, avec à la clef, le prix Nobel de physique en 1921.

En 1955, des chercheurs américains (Chapin, Fuller, Pearson et Prince) travaillant pour les laboratoires Bell Téléphone (devenus aujourd'hui Alcatel-Lucent Bell Labs) développent une cellule photovoltaïque à haut rendement de 6 %. Les Américains lancent en 1959 le satellite Vanguard qui est alimenté par des piles photovoltaïques ayant un rendement de 9% [3]. La première maison avec une installation photovoltaïque voit le jour en 1973 à l'université de Delaware aux Etats-Unis d'Amérique. C'est en 1983 que la première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt 4000 kilomètres en Australie.

Aujourd'hui, l'énergie photovoltaïque est à la disposition des entreprises et des particuliers et les panneaux photovoltaïques ont des rendements de l'ordre de 20% [3].

1.1.2 Principe de la convention photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque qui se définit par la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique de type continu directement utilisable, à lieu lorsqu'un photon de lumière d'énergie suffisante heurte un atome sur la partie négative de la cellule, le photon va exciter un électron et l'arracher de sa structure moléculaire, créant ainsi un électron libre sur cette partie, cet électron participe à la conduction électrique. Mais seulement les photons ayant une énergie supérieure à l'énergie de la bande interdite vont créer une paire électron trou.

1.2 Cellules photovoltaïques :

1.2.1 Définition d'une cellule photovoltaïque :

Une cellule photovoltaïque est un composant optoélectronique qui transforme le photon reçu en une tension électrique continue, et cela se fait à partir d'un processus nommé l'effet photo-électrique. Elle est généralement faite de matériaux semi-conducteurs. Ces cellules réunies forment le module ou le panneau photovoltaïque.

1.2.2 Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques :

Principalement développé pour l'aérospatial, la technologie des cellules photovoltaïques à base de silicium permet, entre autres, de garantir le fonctionnement des satellites artificiels situés en orbite autour de la terre, en convertissant l'énergie lumineuse du soleil en énergie électrique (Figure 1.2).

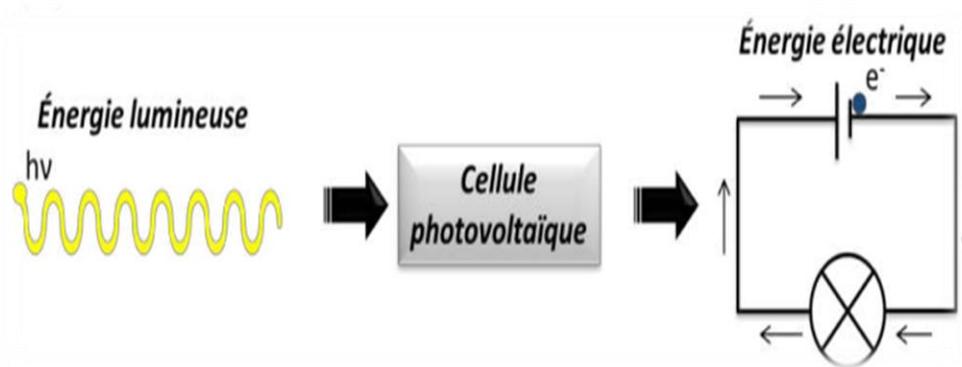


Figure 0.2 : Schéma illustrant la conversion photovoltaïque

Cette technologie exploite les propriétés de matériaux dits semi-conducteurs tels que le silicium, qui est le plus couramment utilisé. Un semi-conducteur est un matériel intermédiaire entre un conducteur électrique et un isolant. Tout comme un matériau isolant, il possède une bande interdite (ou gap énergétique), entre sa bande de valence et sa bande de conduction. Certains matériaux semi-conducteurs possèdent un gap suffisamment faible permettant à un électron de passer de la bande de valence vers la bande de conduction du matériau, quand celui-ci est placé sous illumination solaire. Des charges négatives (électrons) et des charges positives (trous) sont alors simultanément créées au sein de celui-ci. S'il existe un champ électrique dans le système permettant de séparer les paires électron-trou, les deux types de porteurs de charge, nommés p et n, peuvent être collectés sur deux électrodes distinctes, donnant ainsi naissance à un courant. Ceci constitue l'effet photovoltaïque.

De manière à obtenir cette séparation de charges, les couches actives dans les cellules photovoltaïques classiques comportent deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type n et dopée de type p. Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériel n diffusent dans le matériel p, conduisant à une jonction (dite p-n). La zone initialement dopée n devient chargée positivement, et la zone initialement dopée p chargée négativement. Il se crée donc entre elles un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone n et les trous vers la zone p ce qui permet de réaliser la séparation de charges (Figure 1.3).

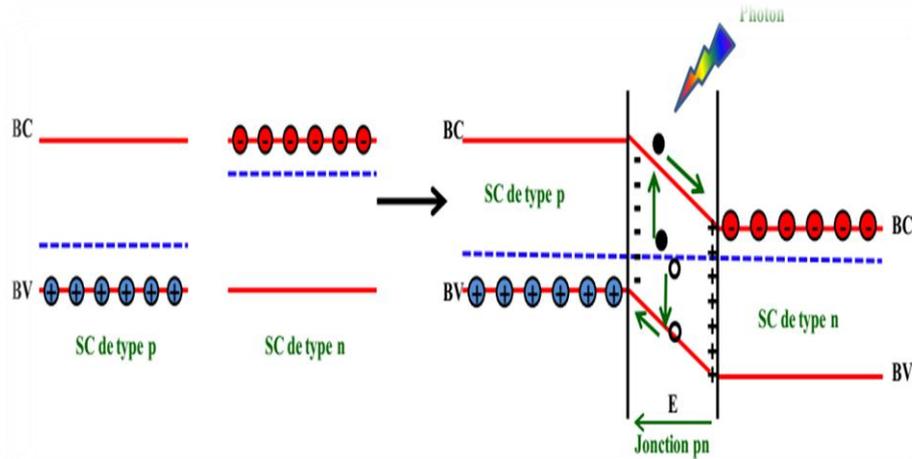


Figure 0.3 : Principe simplifié d'une jonction p-n et application de cette jonction pour la séparation de charges [4].

En ajoutant des contacts métalliques sur les zones n et p, une diode est obtenue. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite communiquent leur énergie aux atomes, chacun fait passer un électron de la bande de valence dans la bande de conduction et laisse un trou capable de se mouvoir dans la bande de valence, engendrant ainsi une paire électron-trou. Si une charge est placée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n rejoignent les trous de la zone p via la connexion extérieure, donnant naissance à une différence de potentiel et générant ainsi un courant (Figure 1.4).

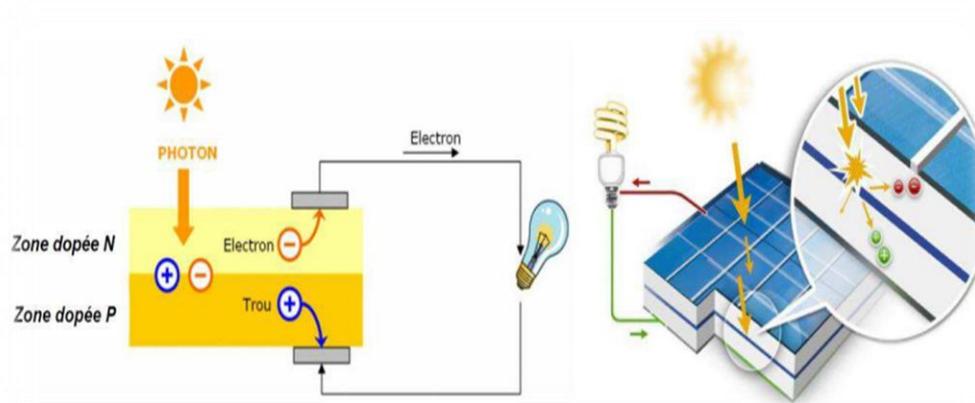


Figure 0.4 : Illustrations de la génération de charges au sein d'une cellule photovoltaïque à jonction p-n sous illumination et de création de la photo courant [4].

1.2.3 Paramètres et caractéristiques électriques d'une cellule solaire :

Les paramètres d'une cellule photovoltaïque sont déterminés à partir de la courbe caractéristique courant-tension ($I=f(V)$) qui décrit le fonctionnement de la cellule (Figure 1.5).

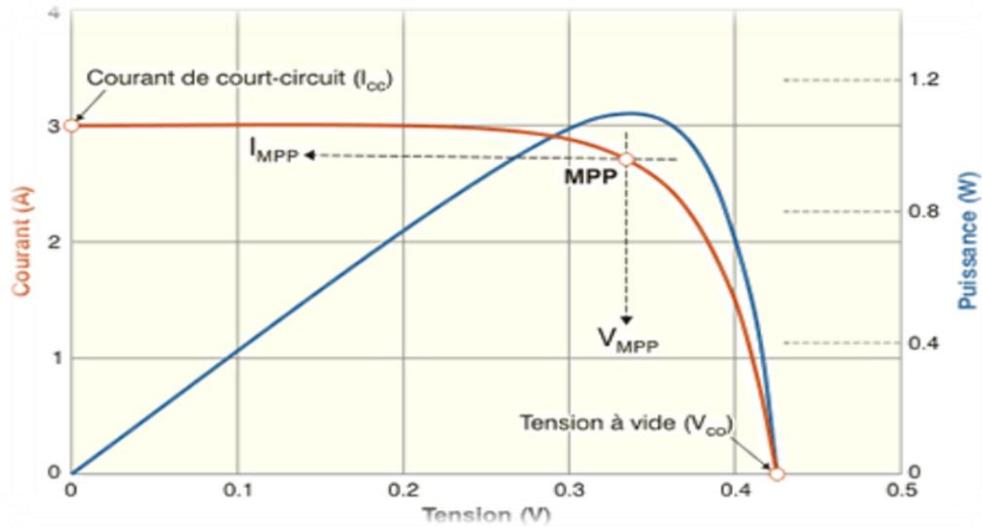


Figure 0.5 : Représentation conventionnelle des courbes $I=f(V)$ et $P=f(V)$ [5].

Les trois grandeurs physiques qui définissent cette courbe sont :

V_{co} : Tension en circuit ouvert, cette valeur représente la tension générée par une cellule éclairée non raccordée.

I_{cc} : Courant court-circuit, cette valeur représente le courant généré par une cellule éclairée raccordée à elle-même.

Son point de puissance maximal : MPP (en anglais : *maximal power point*) obtenu pour une tension et un courant optimal : V_{opt} , I_{opt} [5].

a. Caractéristiques courant-tension et schéma équivalent :

Le tracé de la variation de courant en fonction de la tension d'une cellule ($I=f(V)$) dans l'obscurité et sous illumination (Figure 1.6) permet d'accéder à un bon nombre de paramètres physiques caractéristiques du composant.

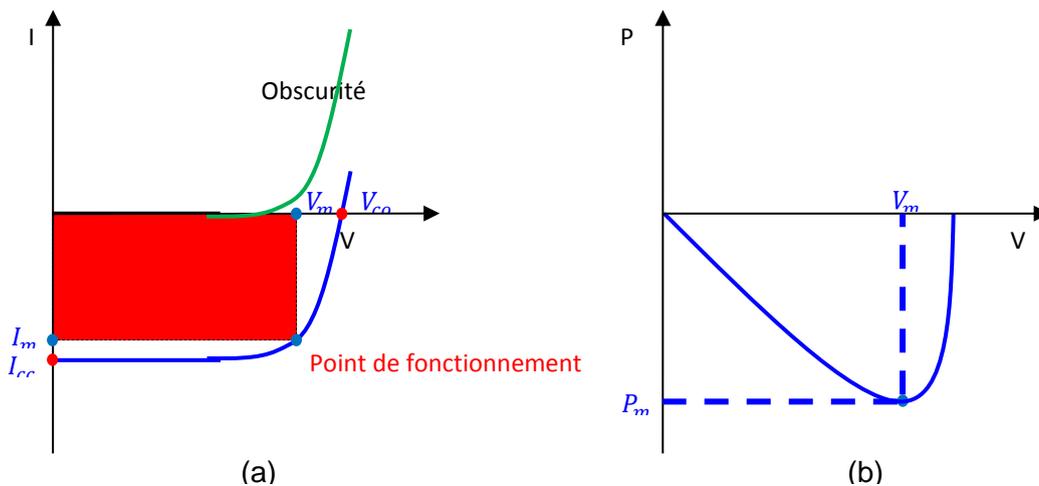


Figure 0.6 : Caractéristiques courant/tension d'une cellule PV obscurité (a), sous éclairement(b)

On peut voir clairement dans cette figure que dans l'obscurité le caractéristique courant/tension passe par l'origine tandis que la courbe sous illumination est décalée par rapport à la première d'une valeur I_{cc} qui traduit la génération constante du courant par la lumière. Si l'on considère le cas simple d'une cellule idéale à jonction donneur/accepteur soumise à un flux lumineux, celle-ci fonctionne comme un générateur de courant. Sa caractéristique est comparable à celle d'une cellule photovoltaïque en silicium. Son schéma équivalent est représenté par une diode idéale montée en parallèle avec une source de courant (Figure 1.7). Les résistances séries R_s et shunt R_{sh} modélisent les pertes engendrées par la résistivité des couches et la présence de courants de fuite [4].

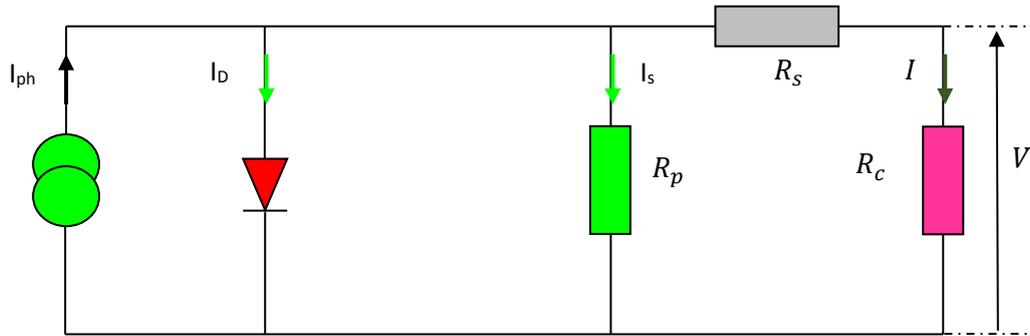


Figure 0.7 : schéma équivalent d'une cellule solaire [4]

Pour une cellule PV il est nécessaire d'introduire : D2 une deuxième diode ; C une capacité supplémentaire qui prend en compte les phénomènes de charge et décharge ainsi que d'autres effets qui dépendent du temps ; R_{sh2} une deuxième résistance shunt qui rend compte de la recombinaison des charges au voisinage des électrodes. Cette résistance est prise en compte seulement si $R_s < R_{sh}$ et $R_s < R_{sh2}$; avec R_s résistance série liée à la résistivité volumique et à l'impédance (Figure 1.8).

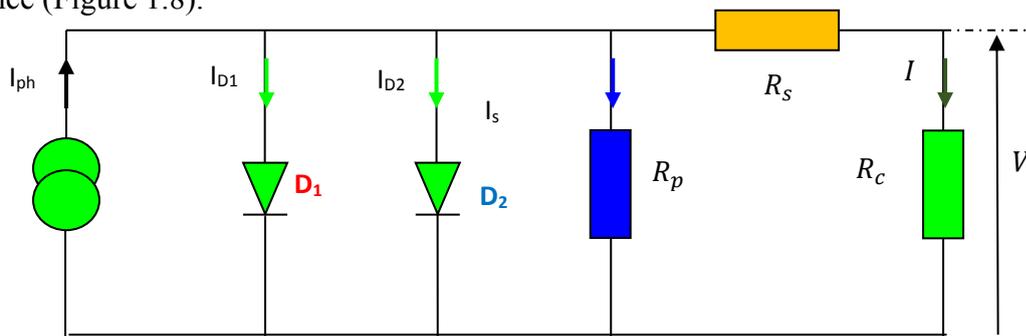


Figure 0.8 : schéma équivalent d'une cellule solaire organique [4]

b. Paramètres d'une cellule photovoltaïque :

Ces paramètres sont définis par :

- **Courant de court-circuit I_{cc}** : le courant de court-circuit est la valeur maximale du courant lorsque sa tension est égale à zéro ($V=0$). Il augmente généralement avec l'intensité d'illumination et dépend de : la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement incident, de la mobilité des porteurs et de la température.
- **Tension à circuit-ouvert V_{co}** : la tension à circuit-ouvert est obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul. Elle dépend du type de la cellule solaire, des matériaux de la couche active et de l'éclairement de la cellule.

La tension de circuit ouvert est donnée par :

$$V_{co} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad (1.2)$$

K : la constante de Boltzmann

T : la température absolue du corps.

q : charge de l'électron

I_{ph} : photo-courant

I_s : courant de saturation de la diode

- **Puissance maximale P_m** : le point de fonctionnement est imposé par la résistance de charge et non par la cellule elle-même. Un choix judicieux de la résistance de charge permettra donc d'obtenir la puissance maximale :

$$P_m = I_m \cdot V_m \quad (1.3)$$

- **Facteur de forme FF** : il détermine la qualité électrique de la cellule, il est déterminé par l'équation suivante :

$$FF = \frac{P_m}{V_{co} I_{cc}} \quad (1.4)$$

- **Le rendement η** : il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivré par la cellule P_m et la puissance lumineuse incidente P_{in} :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot I_{cc} \cdot V_{co}}{P_{in}} \quad (1.5)$$

- **Le rendement quantique externe :**

$$EQE(\lambda) = \frac{n_e(\lambda)}{n_{ph}(\lambda)} = \frac{J_{sc} \cdot hc}{q \cdot P_i \cdot \lambda} \quad (1.6)$$

1.3 Les filières technologiques du photovoltaïque :

Les progrès dans le domaine de l'énergie photovoltaïque se font à travers plusieurs technologies et sont incessants depuis 1970. Il est à montrer que les rendements de conversion exposés dans ce paragraphe constituent les records affirmés (janvier 2008) [2].

1.3.1 La filière Silicium :

La filière silicium représente actuellement 99% du marché des modules photovoltaïques. Il est l'un des éléments les plus abondants sur terre, parfaitement stable et non toxique. On trouve plusieurs technologies pour le photovoltaïque siliciums détaillés ci- après ; d'une part les cellules à base de silicium massif (monocristallin, polycristallin, rubans) dites de « première génération » et qui constituent à l'heure actuelle l'essentiel des modules photovoltaïques commercialisés et d'autre part la technologie à base de silicium en couche mince.

- **Silicium monocristallin :**

La technologie monocristalline est coûteuse, car elle nécessite des lingots de silicium. Son rendement est le plus élevé (26,3 % en laboratoire [6]) ce qui a l'avantage d'augmenter la puissance pour une taille de module identique

- **Silicium polycristallin :**

Il offre un rendement intéressant de 21,3 % en laboratoire [6], pour des coûts moins élevés que le silicium monocristallin. Cette technologie donne une combinaison de propriétés, telles qu'une passivation de surface facile et une stabilité à haute température qui font d'elle l'option favorable pour les applications PV. Ce type de cellules représente 90 % de la part du marché du fait de la fiabilité et la durabilité des modules, et de leurs rendements intéressants, actuellement les plus élevés parmi les différentes technologies présentes sur le marché, 24.4 % et 19.9 % pour le silicium monocristallin et polycristallin respectivement. Néanmoins, les coûts de fabrication restent actuellement élevés, du fait de la quantité importante de silicium nécessaire (plaquettes épaisses, pertes lors de la découpe...) et du coût de production et de purification élevé du silicium. Des technologies promettant des coûts plus bas, une facilité de fabrication, une meilleure conversion de l'énergie peuvent être des alternatives intéressantes au silicium [6].

- **Silicium en ruban auto-supporté :**

Les techniques de production de silicium cristallin en rubans autosupportés ont été très séduisantes sur le plan technologique. La plus connue est basée sur l'effet de capillarité entre deux lèvres de carbone. Ces rubans ont connu de nombreux développements au niveau de la recherche et, pour certains d'entre eux, jusqu'à la conception de chaînes de production préindustrielles. Cependant, la vitesse de croissance linéaire extrêmement lente (quelques cm/min)

pousse les industriels à abandonner progressivement cette technologie. Les meilleurs rendements obtenus sont néanmoins de l'ordre de 15 % [7].

- **Silicium en couches minces nanocristallin et amorphe :**

Depuis les années 1970, des recherches intensives ont été entreprises pour utiliser du silicium non cristallisé, c'est-à-dire à l'état amorphe. Ce sont les cellules des calculatrices ou des montres dites « solaires ». Le silicium amorphe présente plusieurs avantages, en particulier son fonctionnement possible en intérieur sous faible éclairage contrairement au silicium cristallin, son fort coefficient d'absorption, sa faible consommation énergétique durant le cycle de production et son aptitude à être déposé sur des grandes surfaces (de l'ordre de 1 m²). Cependant, les cellules photovoltaïques à base de silicium amorphe présentent de faibles rendements (inférieurs à 10 % au niveau industriel) et une diminution assez rapide de leurs performances au cours du temps [8]. L'avenir des couches de silicium amorphe passera probablement, par un mariage avec le silicium cristallin. En effet, les hétérostructures à base de silicium amorphe/silicium cristallin (structure HIT de Sanyo [9]) présentent des rendements de laboratoire de plus de 21 % et de 16 % en production industrielle.

1.3.2 Cellules couches minces :

- **Cellule à base de tellure de cadmium :**

La cellule solaire couche mince à base de CdS montre l'avantage d'avoir une très grande stabilité dans le temps et un coût acceptable, pour un rendement de l'ordre de 22.1 % [10]. Bien que la toxicité du cadmium puisse être un problème à sa réalisation, elle est maintenant la filière couches minces majoritaire sur le plan de la production de modules.

- **Cellule à base de sélénure de cuivre indium :**

C'est la technologie en couche mince la plus adéquate avec un rendement record égal à 22.6 % en laboratoire [10]. Cette technologie est en pleine phase d'industrialisation, et le coût des modules devrait continuer à décroître.

1.3.3 Les cellules III-V multi-jonctions :

La filière des dispositifs multi-jonctions, dite de « troisième génération » permet d'accéder aux rendements records dans le domaine de l'énergie photovoltaïque, mais se cantonne pour le moment aux applications spatiales. Cette technologie repose sur l'utilisation de plusieurs cellules de bandes interdites différentes, chacune optimisée pour une partie différente du spectre solaire. Les rendements les plus élevés ont été obtenus avec des structures basées sur des empilements de composés III-V en épitaxie. Ces dispositifs, parfois appelés « tandems » fonctionnent déjà, et permettent d'atteindre un rendement plus de 32 % avec le système triple-jonction GaInP/GaAs/Ge sous un spectre standard [4]. Grâce à des systèmes de concentrateurs de lumière, permettant de décupler la puissance solaire reçue par la cellule, des rendements de plus de 40 % ont même été obtenus avec cette technologie ce qui constitue un record absolu en termes de conversion photovoltaïque [11]

1.3.4 Les cellules nanocristallines à colorant (ou cellules de Grätzel) :

Inspirée par la photosynthèse, l'équipe de Michael Grätzel a développé au début des années 1990 des cellules solaires fonctionnant selon un principe différent de celui décrit dans les paragraphes précédents [12]. Ces cellules sont composées d'un électrolyte, d'un colorant et d'un oxyde semi-conducteur inorganique. Le meilleur rendement certifié est de 10,4% pour une cellule de 1 cm² et est à mettre au profit de la société Sharp [4]. Des tests de stabilité ont augmenté que la durée de vie des cellules est de 20 ans en fonctionnement. Cependant, à cause de fuites possibles de l'électrolyte liquide, celui-ci est remplacé par des électrolytes solides pour que les résultats chutent alors à 6,7% [12].

1.3.5 Les cellules photovoltaïques organiques :

Si l'effet photovoltaïque a été observé dans les matériaux organiques depuis plus de 30 ans, les premières cellules présentaient des rendements de conversion en énergie ϵ très faibles, de l'ordre de 10-5 %. Dès 1978, Merritt prévoyait que les valeurs de ϵ pourraient dépasser les 1% [13], mais ce n'est qu'en 1986 que ce rendement a été atteint avec les travaux de Tang (PCE = 0,95 %) [14]. Pendant les années qui suivirent, cette valeur a parfois été reproduite avec des matériaux différents mais elle n'a jamais été améliorée. Ce n'est que depuis le début du XXI^e siècle que le rendement a recommencé à croître, atteignant 2,5 % avec les travaux publiés par Shaheen [15], 3,6 % avec ceux de Peumans [16] sous éclairage AM1,5 avec une puissance lumineuse de 100 mW.cm⁻² et enfin 4,2 % avec une double hétérostructure de C60 et de phthalocyanine de cuivre [17]. Aujourd'hui, le record au niveau industriel est détenu par la firme Konarka avec un rendement qui dépasse les 5 % [4]. L'équipe de Heeger a même obtenu un rendement de 6,7 % avec des cellules de type « tandem ». Cette valeur reste encore très faible si on la compare aux rendements obtenus par les autres technologies. Cependant, plusieurs raisons justifient les efforts consentis pour développer la filière organique, et qui résident dans les avantages que présentent ces matériaux. En effet, ils peuvent être mis en forme facilement, par voie sèche ou voie humide (tournette, jet d'encre, ...) avec des techniques issues de l'industrie de la microélectronique. De plus, les quantités de matériaux utilisées sont relativement faibles, les films ayant des épaisseurs de 100 nm. L'ingénierie moléculaire permet en outre d'adapter les valeurs de la bande interdite et des niveaux d'énergie. Enfin, cette technologie permettrait d'accéder à des modules photovoltaïques flexibles et/ou de grandes surfaces.

1.4 Les cellules solaires à base de matériaux pérovskites :

Une cellule photovoltaïque conventionnelle est constituée de plusieurs couches superposées dans lesquelles le silicium joue le rôle de capteur et d'émetteur. Dans une cellule à silicium-pérovskite, on superpose deux sous-cellules. La sous-cellule supérieure à pérovskite semi-transparente absorbe les photons de fréquences relativement élevées tout en laissant passer les rayonnements de plus faible énergie tandis que, dans la cellule inférieure, le silicium absorbe les photons résiduels et récupère l'énergie de ces photons. Le couplage des deux cellules a considérablement amélioré leur rendement [18]

1.4.1 Propriétés structurales des pérovskites hybrides :

Le terme « pérovskite » désigne à l'origine le minéral CaTiO₃ (titanate de calcium) qui a été décrit pour la première fois en 1839 par le minéralogiste allemand Gustav Rose et dont le nom est dédié au minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Petrovski. Il désigne depuis la structure cristalline correspondante de formule générale ABC₃. À la fin du XIX^e siècle, de nouvelles pérovskites ont été synthétisées de formule ABX₃ avec X un halogénure, Cl⁻, Br⁻ ou I⁻, A étant le Cs⁺ et B le Pb²⁺. Leur structure cristalline n'a été résolue qu'en 1957 par Christian Moller [19]. Il avait alors observé que ces matériaux étaient photoconducteurs et donc se comportaient comme des semi-conducteurs. En 1978, D. Weber [20] a montré qu'il est possible de remplacer l'ion césium par un gros cation organique comme le méthylammonium pour obtenir des pérovskites hybrides (PH) organiques- inorganiques tridimensionnelles (3D). La structure des pérovskites hybrides utilisées dans les cellules solaires est présentée en figure 1.9. Le cation, Cs⁺ ou une

petite molécule organique [classiquement le méthylammonium (MA), mais aussi le formamidinium (FA) ou l'acide 5-aminovalérique (5-AVA)] occupe le centre d'un cube dont les sommets sont occupés par le Pb(II) ou le Sn(II). Ces actions sont eux-mêmes au centre d'un octaèdre (BX₆) composé d'ions halogénures, I⁻, Cl⁻ ou Br⁻. La structure pérovskite de plus haute symétrie est de type cubique et appartient au groupe d'espace. On la retrouve pour la pérovskite MAPbBr₃ à température ambiante et MAPbI₃ à une température supérieure à 327 K [21] [22]. En dessous de cette température, cette dernière possède une structure tétragonale

Appartenant au groupe d'espace I4/mcm et présentée en figure 1.9. Elle résulte d'une légère rotation des octaèdres PbX₆ le long de l'axe, les octaèdres restant liés entre eux par leurs sommets. MAPbBr₃ présente une transition en une phase tétragonale à 236 K [23].

MAPbBr₃ a été décrit comme plus stable à température ambiante que MAPbI₃ du fait de sa structure cubique (donc moins déformée) et sa plus grande compacité résultant de la plus petite taille de l'anion Br⁻ comparé à I⁻ [24].

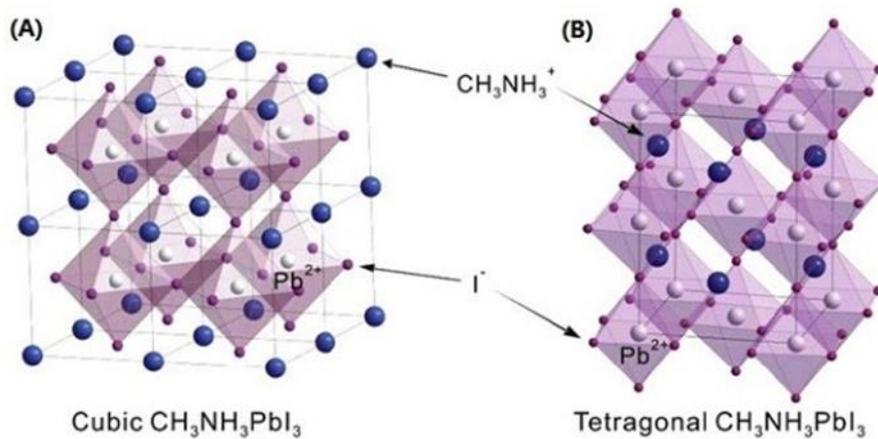


Figure 1.9. Structure cristalline de la pérovskite [37]

1.4.2 Propriétés électriques :

La pérovskite CH₃NH₃PbI₃ possède des propriétés optiques et électriques intéressantes pour le photovoltaïque et qui ont activement été étudiées durant les vingt dernières années pour d'autres applications [27, 28, 29, 30]. Ses propriétés optoélectroniques font de ce matériau un excellent absorbeur. Contrairement aux oxydes métalliques, les propriétés de transport de charge de la pérovskite hybride halogénée sont rarement variées par dopage extrinsèque, mais leurs propriétés intrinsèques peuvent être facilement modulées en changeant la composition du matériau [26]. Les propriétés électroniques des pérovskites sont régies par la liaison B-X de la composante inorganique alors que la nature cation A ne contribue pas directement à la modification de ces propriétés [30, 31]. Cependant, des simulations ont démontré que la taille du cation pouvant altérer le degré de distorsion, elle peut affecter de manière indirecte les propriétés électroniques du matériau [27].

1.4.3 Propriétés optiques :

Les pérovskites hybrides sont caractérisées par un gap direct et un coefficient d'absorption élevé [57]. Le coefficient d'absorption de la pérovskite iodée MAPbI₃ est estimé à $1.5 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$ à 550 nm, valeur similaire à celle des matériaux habituellement utilisés dans le photovoltaïque (GaAs, CdTe et CIGS) pour lesquels le coefficient d'absorption est compris entre 10^4 et 10^5 cm^{-1} [28]. La pérovskite MAPbI₃ est caractérisée par un gap compris entre 1.50 et 1.55 eV [28], bien placé dans le cadre d'applications photovoltaïques [27, 33, 29]. Le gap du matériau évolue avec sa composition, celui-ci décroît avec l'électronégativité des anions [32, 34] ainsi qu'avec la différence d'électronégativité entre le cation métallique et l'anion. L'ajout de l'halogène Br permet par exemple d'élever la

bande conduction (BC) et d'abaisser la bande de valence (BV). Le gap pour $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ est alors estimé à 2.2 eV [32, 27, 38]. Une structure de pérovskite mixte composée d'iode et de brome ou de brome et de chlore possède un gap qui peut varier de manière continue en ajustant le rapport des deux halogènes permettant ainsi une absorption sur tout le spectre solaire [32, 34-35]. Néanmoins, dans le cas de la pérovskite mixte I-Cl, il est moins évident de moduler le gap du fait de la difficulté à incorporer le chlore Cl dans l'octaèdre formé par PbI_6 [32].

Composition	E_g (eV)	Structure a température ambiante	Longueur de diffusion	CBM (eV)	VBM (eV)
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	1.5–1.61	Tétragonale	$L_{D,e} > 0.1 \mu\text{m}$ $L_{D,h} > 0.1 \mu\text{m}$	-3.93	-5.3
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$	2.32	Cubique	...	-3.36	-5.58
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$	3.1	Cubique
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$	1.55–1.64	Tétragonale	$L_{D,e} 1.9 \mu\text{m}$ $L_{D,h} 1.2 \mu\text{m}$	-3.75	-5.43
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Br}_x$	1.5–2.32	Tétragonal/cubique, rotation $x \sim 0.2$
$\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$	1.47	Tétragonale	$L_{D,e} 0.2 \mu\text{m}$ $L_{D,h} 0.8 \mu\text{m}$	-4.2	-5.7
$\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbBr}_3$	2.23	Cubique

Tableau 1.1. Propriétés de différente avance halogénure pérovskites. [39]

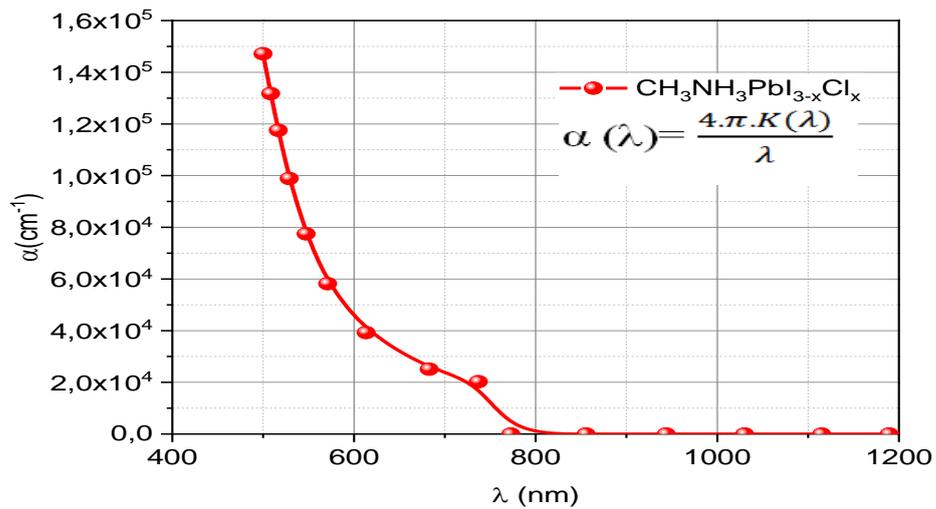


Figure. 1.10: Spectres d'absorption de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ [40]

1.4.4 Extraction de la charge :

Pour extraire efficacement les charges des cellules solaires à base de pérovskite, il est nécessaire de sélectionner les bandes de l'ETL et de l'HTL avec des alignements de bande de conduction et de valence favorables avec ceux de la couche de pérovskite. De plus, un transfert de charge équilibré au niveau des interfaces est également important pour améliorer les performances des cellules photovoltaïques [41].

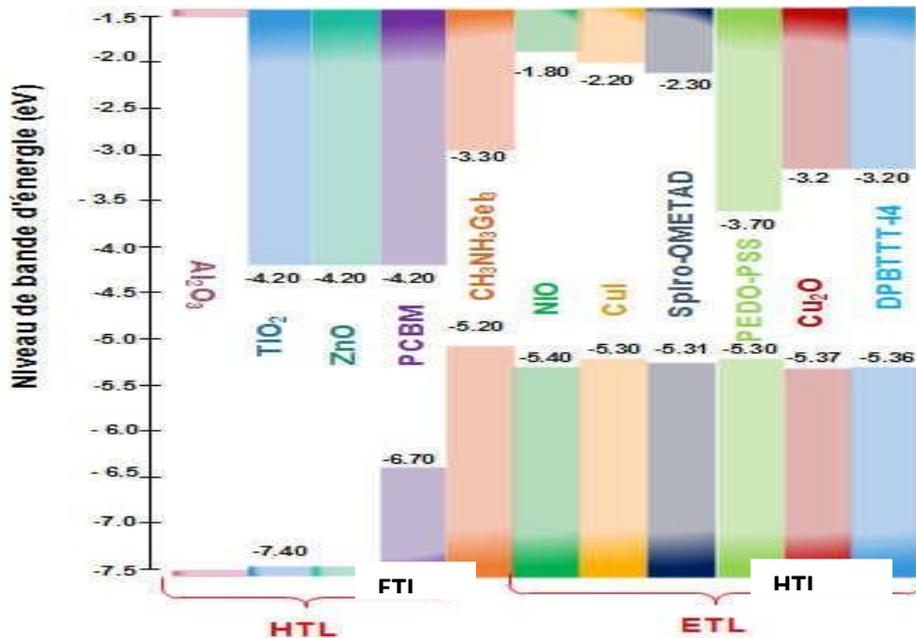


Figure.1.11: Diagramme d'alignement des bandes de l'ETL et de l'HTL utilisé dans les cellules solaires à base de pérovskite[41]

1.5 Présentation des matériaux :

1.5.1 Oxyde Conducteur Transparent (TCO) :

Un excellent TCO est défini par une forte conductivité électrique combinée avec une faible absorption dans le visible. En général, ces deux caractéristiques sont liées à l'épaisseur de la couche déposée. Par exemple, elles dépendent de la taille des grains, qui, usuellement croît avec l'épaisseur du film. Les TCO les plus connus sont les oxydes d'indium, de cadmium, d'étain, de zinc et de gallium [42]. Couramment, les oxydes sont dopés par un métal. Cependant ce dopant métallique n'est actif que lorsqu'il se substitue au métal primaire. La bande de conduction est alors, fortement perturbée par chaque atome dopant, la diffusion des électrons de conduction est alors accrue, et la mobilité et en conséquence la conduction chute. C'est pourquoi certains oxydes sont dopés avec du fluor, qui, lorsqu'il se substitue à l'oxygène, engendre une perturbation de la bande de valence, ce qui minimise la diffusion des électrons de conduction [42].

1.5.2 Oxyde de Zinc (ZnO) :

Pendant de nombreuses années, les principales applications de l'oxyde de zinc se sont situées dans les domaines d'énergie solaire, l'industrie chimique et pharmaceutique. Actuellement de nouvelles voies de recherches en optoélectronique suscitent un très vif intérêt pour ce matériau car ses propriétés sont multiples : grande conductivité thermique, grande capacité calorifique, constante diélectrique moyenne, haute résistivité, faible absorption d'eau. Il est important de noter que sous sa forme pigmentaire, il diffuse et absorbe fortement les rayonnements ultraviolets [43].

1.5.3 Spiro-OMeTAD :

Le matériau de transport de trous (HTM) est une étape importante dans l'histoire de cellules solaires à pérovskite (PSC). Le bon choix des HTM est un facteur clé pour une extraction de charge et stabilité dans les cellules solaires. Spiro-OMeTAD est prouvée HTM le plus approprié pour tester les PSC en raison de sa mise en œuvre facile et haute performance. De même, Spiro-OMeTAD retient l'attention dans d'autres applications autres que dans les cellules solaires en raison de ses propriétés souhaitables.

La motivation de synthétiser HTM avec des molécules Spiro-liées était d'obtenir des matériaux avec une température de transition vitreuse (T_g) élevée, une stabilité morphologique, des matériaux vitreux amorphes et une facilité de traitement tout en conservant de bonnes propriétés électroniques [44].

1.6 Influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement Photovoltaïque :

1.6.1 Influence de la température :

La température a une influence considérable sur le comportement de la cellule et donc sur son rendement. Cette influence se traduit principalement par une diminution de la tension générée (et une très légère augmentation du courant).

Suivant les modèles, ce comportement induit, par degré, une perte de 0.5 % du rendement par rapport au rendement maximum de la cellule. On comprendra donc tout l'intérêt d'une ventilation correcte à l'arrière des panneaux [45].

La perte de tension d'un module ou d'une cellule peut être estimée par la formule suivante :

$$U(T^\circ) = U(25^\circ\text{C}) + (\Delta T^\circ \times a) \quad (1.7)$$

Avec :

- ΔT : augmentation de température par rapport aux conditions STC (25°C)
- a : coefficient de température V_{oc} [mV/K], valeur fournie par le fabricant

1.6.2 Influence du rayonnement :

L'éclairement correspond à l'intensité lumineuse captée par le module photovoltaïque, et se mesure en W/m^2 . La nuit, il est nul ($0 \text{ W}/\text{m}^2$). Il varie au cours de la journée entre 0 et $1\,000 \text{ W}/\text{m}^2$ (valeur maximum), en fonction de la saison. L'éclairement a une nette incidence sur la valeur de I_{cc} , lorsqu'il double, I_{cc} double aussi. L'éclairement a très peu d'incidence sur la tension à vide V_{co} [45].

1.7 Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque :

1.7.1 Avantages :

Cette énergie présente de nombreux avantages, à savoir :

- Les installations photovoltaïques sont en général de haute fiabilité, peu sujettes à l'usure, elles demandent peu d'entretien.
- Le montage des installations photovoltaïques est simple et les installations sont adaptables aux besoins de chaque projet.
- Il s'agit d'une source d'énergie électrique totalement silencieuse ce qui n'est pas le cas, par exemple des installations éoliennes.
- Il s'agit d'une source d'énergie inépuisable.
- L'énergie photovoltaïque est une énergie propre et non-polluante qui ne dégage pas de gaz à effet de serre et ne génère pas de déchets.
- Les systèmes photovoltaïques sont fiables : aucune pièce employée n'est en mouvement. Les matériaux utilisés (silicium, verre, aluminium), résistent aux conditions météorologiques extrêmes.
- Sur les sites isolés, l'énergie photovoltaïque offre une solution pratique pour obtenir de l'électricité à moindre coût.
- Le contrat d'achat est conclu pour une durée assez longue.

1.7.2 Inconvénients :

- Un cycle de vie en question : la durée de vie d'une installation photovoltaïque n'est pas éternelle mais de l'ordre de 20 à 30 ans.
- Le rendement des cellules photovoltaïques diminue avec le temps qui passe. On parle en général pour les panneaux photovoltaïques, d'une perte de rendement de 1 % par an.
- De plus, les panneaux solaires contiennent des déchets toxiques : cuivre, chrome, silicium, cadmium et tellure.
- Les rendements des panneaux photovoltaïques sont encore faibles et de l'ordre de 20 % (pour les meilleurs). L'énergie photovoltaïque convient donc mieux pour des projets à faible besoins, comme une maison unifamiliale, par exemple.

1.8 Conclusion :

Dans ce premier chapitre, nous avons pu expliquer les phénomènes de développement de l'énergie photovoltaïque, et l'importance qu'elle aura dans le monde de demain. L'ensemble des différentes technologies permettant de produire de l'électricité d'origine photovoltaïque a été exposé. Les grandeurs physiques associées aux cellules photovoltaïques, ainsi que les distinctes structures de cellules photovoltaïques organiques ont été mentionné, ainsi que les pérovskites hybrides possèdent des propriétés optiques et électroniques remarquables. Ces matériaux sont d'une grande modularité et la largeur de leur bande interdite peut être ajustée en jouant sur leur composition. Les charges photogénérées dans ces matériaux sont très mobiles. Elles peuvent être collectées par injection dans des phases adjacentes qui constituent des contacts sélectifs. Ces dernières doivent posséder des niveaux énergétiques adaptés, permettant la séparation de charges et limitant les phénomènes parasites de recombinaison. La grande mobilité des charges permet aussi l'utilisation de couches relativement épaisses, de quelques centaines de nanomètres, qui présentent une bonne absorption de la lumière solaire.

Chapitre 2

Résultats et discussions

Introduction :

Dans notre travail, on s'intéresse à l'étude de la cellule solaire à base de matériaux pérovskite hybride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$. Le but est visé de faire maximiser le rendement de la cellule proposée, et on calcule à chaque fois les caractéristiques densités du courant-tension (J-V). À partir des caractéristiques (J-V) fournies par SCAPS-1D, on peut déterminer les valeurs optimales des paramètres photovoltaïques tels que : la densité du courant de court-circuit (J_{cc}), la tension de circuit-ouvert (V_{co}), le facteur de forme (FF), et le rendement (η), et enfin le logiciel SCAPS-1D donne comme des résultats supplémentaires le rendement quantique externe (EQE), la densité de courant électrique $I(V)$, la puissance tension $P(V)$ et les bands d'énergie. Notre travail prévoit d'étudier séparément l'épaisseur de chaque couche et de déterminer la valeur optimale de l'épaisseur qui correspond au rendement maximal de la cellule solaire jusqu'à avoir une structure fiable de la cellule. Après cela, nous discuterons de chacun des :

1. Etudier l'influence de la température pour la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$).
2. Etudier l'influence de dopage (N_d) pour la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$).
3. Etudier l'influence de la densité de défaut pour la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$).

2.1 Structure de la cellule :

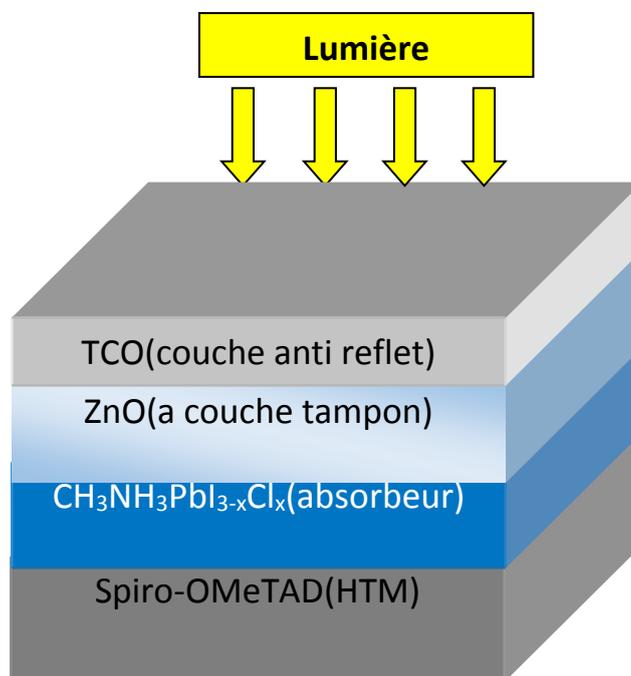


Figure 2.1 : Structure 3D de cellule solaire à base de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$)

La figure 2.2 montre le diagramme énergétique de la structure de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de TCO.

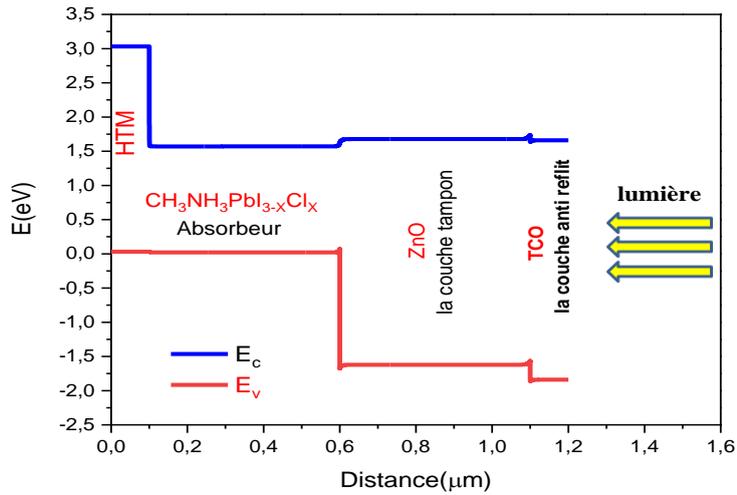


Figure2.2 : schéma de diagramme de bande d'énergie

Paramètres	TCO	ZnO	CH ₃ NH ₃ PbI _{3-x} Cl _x	Spiro-OMeTAD
Epissures (μm)	0.100	0.500	0.500	0.100
La band interdit (ev)	3.500	3.300	1.550	3.000
infinité d'électrons (eV)	9.000	3.900	3.900	2.450
Permittivité relative	9.000	9.000	6.500	3.000
CB densité effective (1/cm ³)	1.000E+19	1.000E+19	2.200E+17	2.200E+18
VB densité effective (1/cm ³)	1.000E+19	1.000E+19	1.800E+19	1.800E+19
Vélocités thermique d'électrons (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Vélocités thermique d'trous (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
La mobilité des trous (cm ² /Vs)	1.000E+1	5.000E+0	2.000E+0	2.000E+-4
La mobilité des électrons (cm ² /Vs)	2.000E+1	5.000E+1	2.000E+0	2.000E-4
La densité des donneurs N _D (1/cm)	1.000E+18	5.000E+17	1.000E+13	0.000E+0
La densité des accepteurs N _A (1/cm)	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	2.000E+18

Tableau 2.1 : montre les paramètres utilisés pour la simulation de cellule solaire en pérovskite mixte (CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x)

2.2 Effet de l'épaisseur de TCO :

La figure 2.3 présente la variation du l'effet de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche TCO pour une $T=300K$. On constate que l'effet de l'épaisseur de la couche TCO sur le rendement quantique externe est faible dans la gamme de $[400-800]nm$. Par contre dans la gamme de $[300,400]nm$, on remarque une diminution de l'amplitude de EQE lorsque l'épaisseur de de TCO croit.

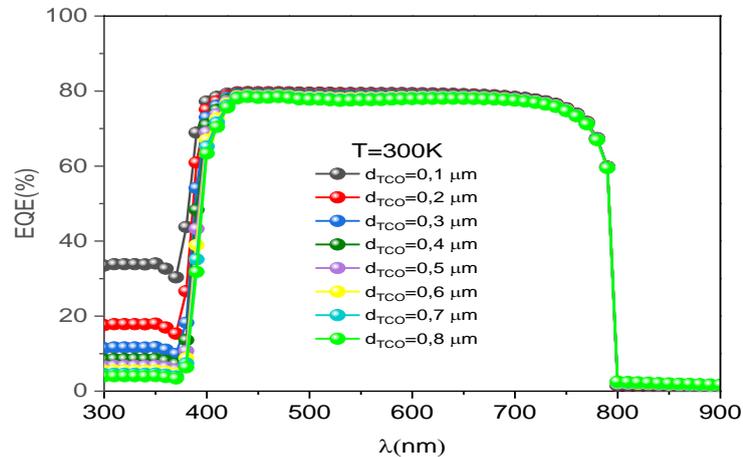


Figure 2.3 : Variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche TCO

La figure 2.4 présente la variation du la densité de courant J en fonction de la tension pour différentes épaisseurs de la couche TCO à $T=300K$ ($27^{\circ}C$). On observe que l'augmentation de l'épaisseur de la couche n'a pas un effet sur la tension de circuit ouvert V_{co} . En revanche, l'accroissement de l'épaisseur de la couche TCO induit une légère diminution de la densité du courant de court-circuit J_{cc} . La figure (2.5) présente les caractéristiques $P(V)$ en fonction d'épaisseur de la couche TCO à $T=300K$. On remarque que l'augmentation de l'épaisseur de la couche TCO a un effet faible sur la puissance maximale de la cellule solaire.

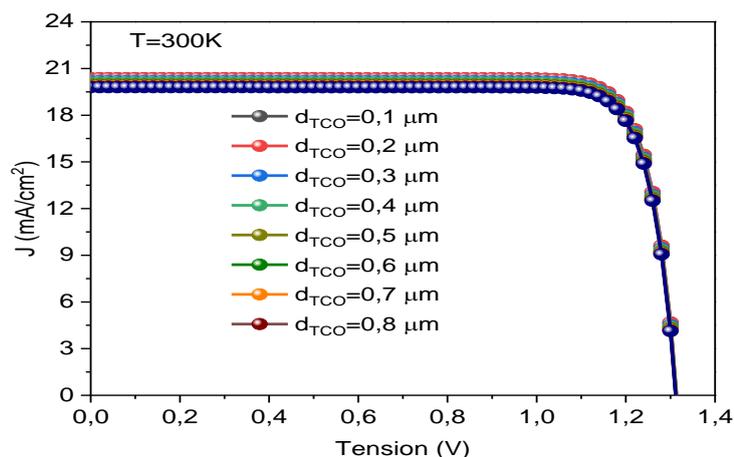


Figure 2.4 Variation de la densité de courant $J(V)$ pour différente épaisseur de la couche TCO

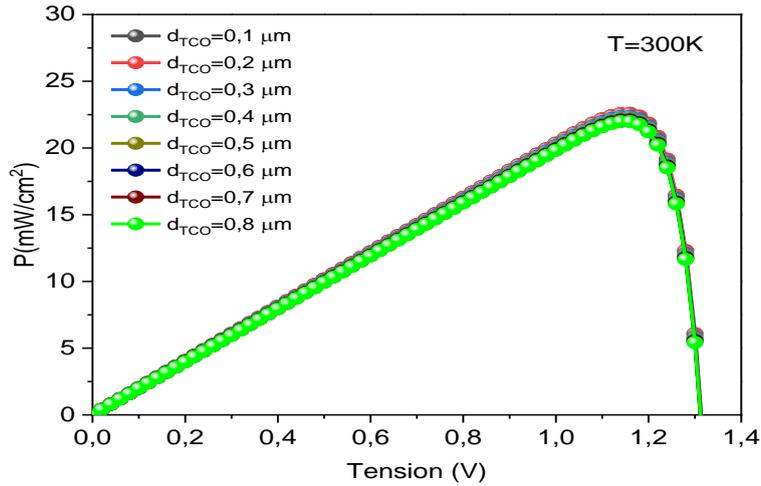


Figure 2.5 : Caractéristiques puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche TCO

Epaisseur(μm)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	Rendement (%)
0.1	1.3191	20.20	84.50	22.52
0.2	1.3186	20.01	84.51	22.30
0.3	1.3183	19.91	84.51	22.18
0.4	1.3181	19.83	84.51	22.09
0.5	1.3180	19.77	84.51	22.02
0.6	1.3178	19.72	84.52	21.96
0.7	1.3177	19.67	84.52	21.91
0.8	1.3176	19.63	84.52	21.86

Le tableau des résultats (2.2)

La figure 2.6 présente l'effet de l'épaisseur de TCO sur la densité du courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co}. L'augmentation de l'épaisseur de la couche TCO provoque une diminution faible des deux paramètres J_{cc} et V_{co}. Lorsque l'épaisseur de la couche TCO varie de 0.1μm à 0.8μm la densité du courant et la tension de circuit ouvert changent de 20.2 à 19.63mA/cm² et de 1.3191 à 1.3176V respectivement. La figure 2.7 présente la variation de facteur de forme FF le rendement η en fonction de l'épaisseur de la couche TCO à T=300K. On remarque qu'il y a une légère augmentation de facteur de forme de 84.50% à 84.52% avec une stabilisation dans l'intervalle [0.2-0.5] μm. Par contre, le rendement de la cellule subit une diminution de 22.52 à 21.86%.

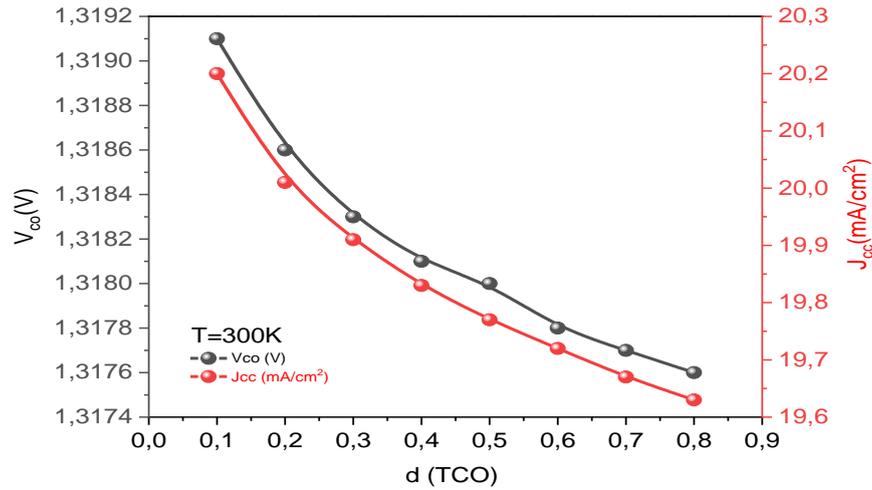


Figure 2.6 : Variation de Courant de court-circuit J_{cc} et tension circuit ouvert V_{co} en fonction d'épaisseurs de la couche TCO

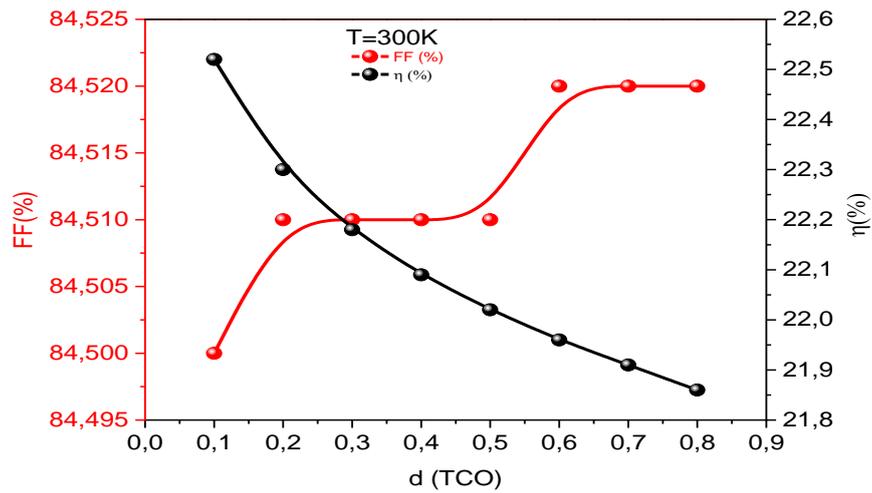


Figure 2.7 : Variation du Facteur de forme (FF) Le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la couche TCO

Après l'étude de l'effet de l'épaisseur de la couche anti-refletée (TCO) sur les paramètres de la cellule solaire. Nous avons optimisé l'épaisseur de la couche TCO qui égale $0.1\mu m$. Dans l'étude qui se suit nous fixons la valeur de l'épaisseur de la couche de TCO à $0.1\mu m$.

2.3 L'influence d'épaisseur de la couche ZnO :

La figure 2.8 présente la variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche ZnO avec $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $T=300K$. On constate que l'effet de l'épaisseur de ZnO sur EQE est très faible. L'amplitude de EQE ne dépasse pas 80% dans la gamme de 400-800nm.

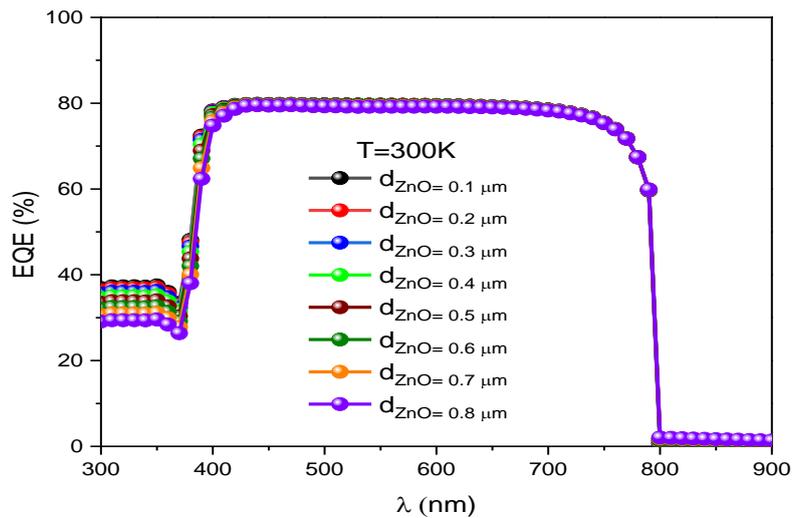


Figure 2.8 : Variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour différentes épaisseurs de la couche ZnO

La figure 2.9 présente la variation de la densité de courant $J(V)$ en fonction de la tension pour plusieurs épaisseurs de la couche ZnO avec $T=300K$ et $d_{TCO}=0.1\mu m$.

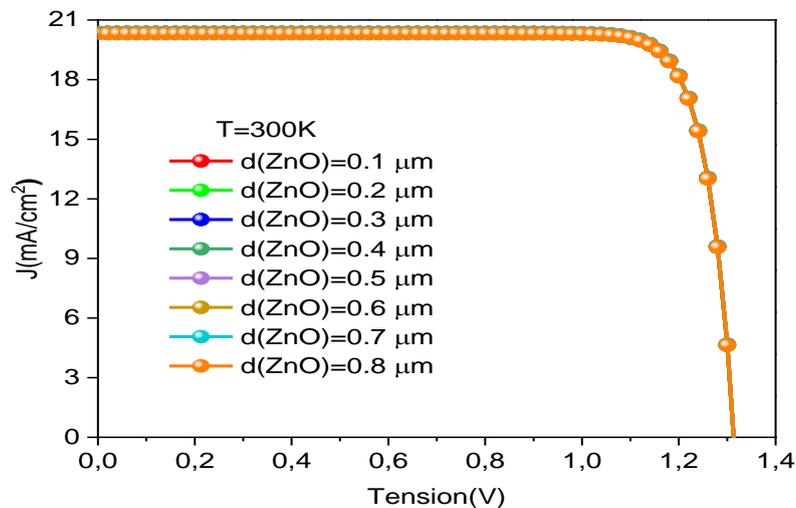


Figure 2.9 : Variation de la densité de courant $J(V)$ en fonction d'épaisseur pour la couche de ZnO

On remarque que la l'effet de l'épaisseur de cette couche est très faible sur la densité du courant et la tension de circuit ouvert. La figure 2.10 présente la caractéristique puissance tension P-V pour différentes épaisseurs de la couche ZnO avec $T=300K$ et $d_{TCO}=0.1\mu m$. On remarque que la variation l'épaisseur n'est pas d'effet sur la puissance maximale de la cellule solaire.

La table des résultats (2.3) :

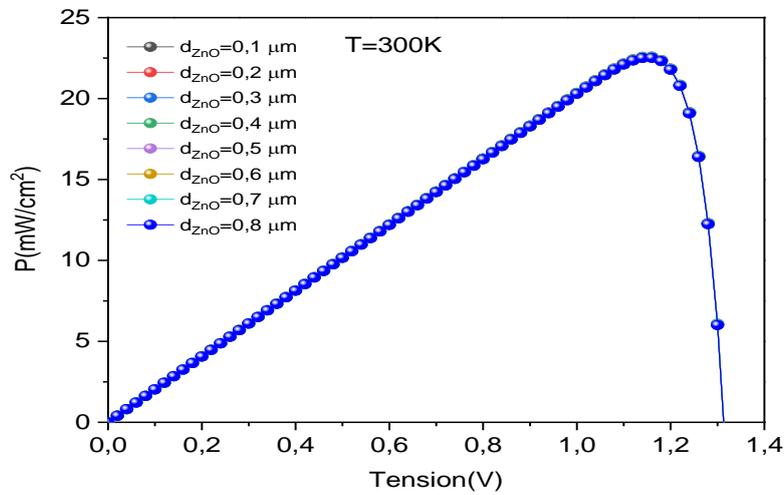


Figure 2.10 : Caractéristiques puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche ZnO

La figure 2.11 présente l'effet de l'épaisseur de la couche ZnO sur les paramètres tension de circuit ouvert et la densité du courant de court-circuit pour avec $T=300\text{K}$ et $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$. On remarque que l'augmentation de l'épaisseur de la couche ZnO induit une augmentation faible et la même remarque pour J_{cc} . La figure 2.12 présente la variation de facteur de forme FF et le rendement η pour différentes épaisseurs de la couche ZnO avec $T=300\text{K}$ et $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$. On remarque qu'il y a une augmentation de rendement en fonction de la variation d'épaisseur pour une valeur crête égal à 22.60%(point de saturation), après ça il y a une diminution de rendement jusqu'à 22.53% avec une stabilisation des valeurs de facteur de forme à la valeur de 84.41%.

Epaisseur (μm)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF(%)	Rendement (%)
0.1	1.3138	20.32	84.41	22.53
0.2	1.3138	20.34	84.41	22.57
0.3	1.3139	20.36	84.41	22.59
0.4	1.3139	20.37	84.41	22.60
0.5	1.3139	20.37	84.41	22.60
0.6	1.3139	20.36	84.41	22.59
0.7	1.3138	20.34	84.41	22.56
0.8	1.3138	20.31	84.41	22.53

Le tableau des résultats (2.3)

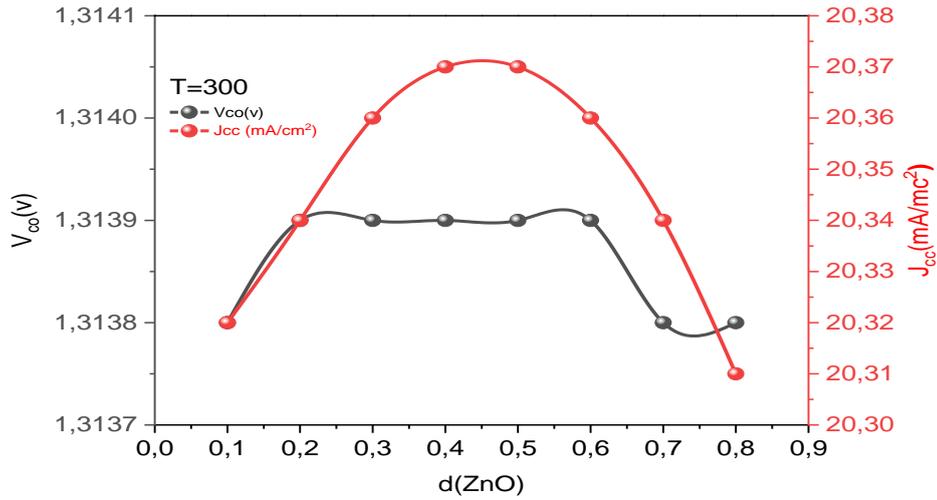


Figure 2.11 : Variation de courant de court-circuit Jcc et tension circuit ouvert Vco en fonction d'épaisseur de la couche ZnO

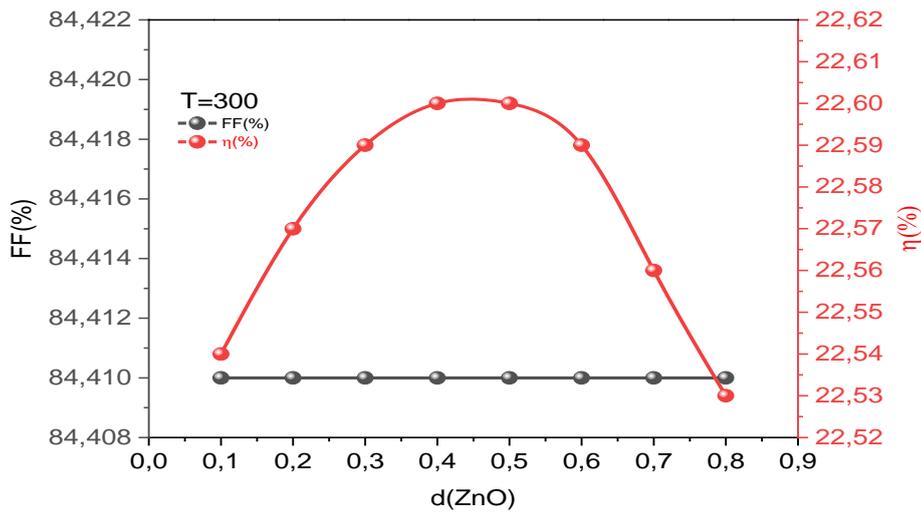


Figure 2.12 : La variation de facteur de forme (FF)et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur pour la couche de ZnO

La figure 2.13 présente l'évolution la densité du courant de court-circuit Jcc et le rendement η en fonction de l'épaisseurs de la couche ZnO avec T=300K et d_{TCO}=0.1μm. On observe que les deux paramètres Jcc et η augmentées jusqu'à atteignent le maximum.37mA/cm² et 22.60%respectivement (le point de saturation) ensuite ils diminuent rapidement. Cette étude nous permet d'optimiser l'épaisseur de la couche ZnO. Dans notre cas l'épaisseur de la couche de ZnO est optimisée à d=0.5μm.

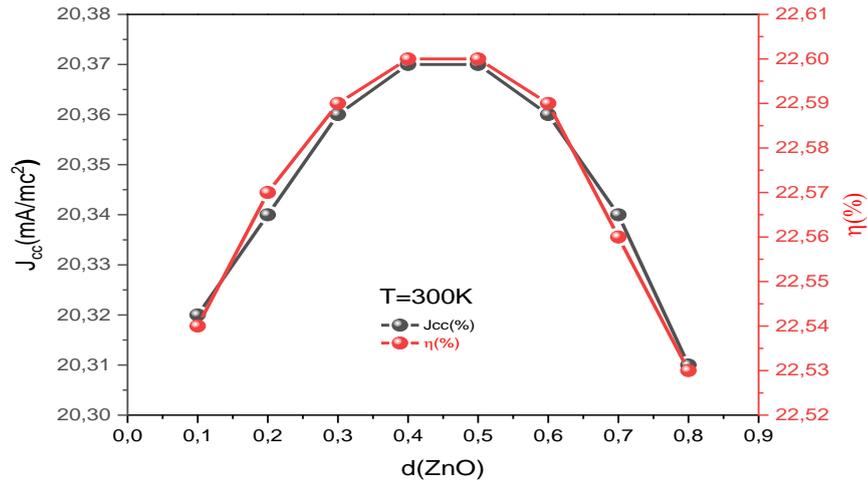


Figure 2.13 : La variation de courant de court-circuit J_{cc} et le rendement η en fonction d'épaisseur pour la couche de ZnO, $T=300K$ et $d_{TCO}=0.1\mu m$.

2.4 L'influence d'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$:

La figure 2.14 présente la variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs épaisseurs de la couche $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ avec $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$ (correspond à meilleur rendement). On remarque que l'amplitude de l'efficacité quantique externe (EQE) augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante. La variation de l'épaisseur de la couche absorbante de 0.1 à $0.8\mu m$ induit une augmentation de 60 à 80% . La figure 2.15 montre la variation de densité du courant $J(V)$ pour plusieurs épaisseurs de la couche absorbante $CH_3NH_3PbI_{3-x}Cl_x$ avec $T=300K$, $d_{TCO}=0.1\mu m$ et $d_{ZnO}=0.5\mu m$. On constate que l'augmentation de l'épaisseur de la couche active provoque une variation importante sur la densité du courant et la tension V_{co} . Lorsque, l'épaisseur de la couche absorbante varie de 0.1 à $0.8\mu m$, on observe un accroissement de la densité du courant de court-circuit et une diminution de la tension circuit ouvert.

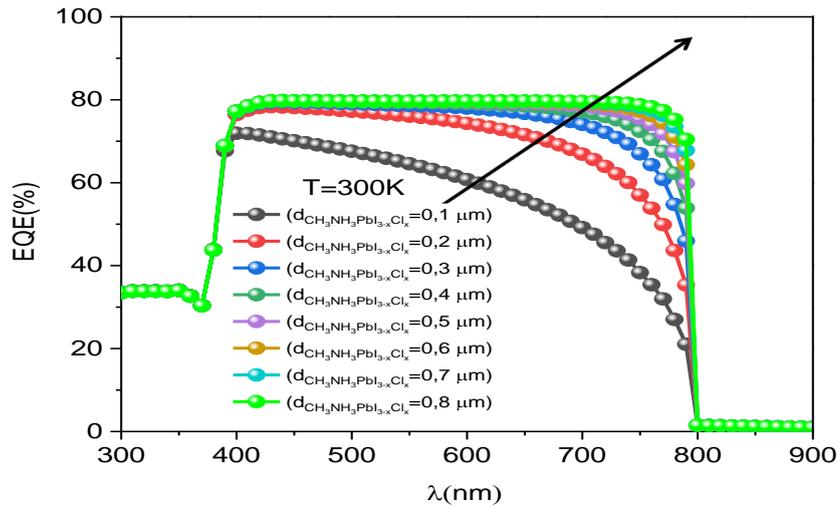


Figure 2.14 : La variation de l'effet de rendement quantique externe (EQE) en fonction de l'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $T=300\text{K}$ et $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$

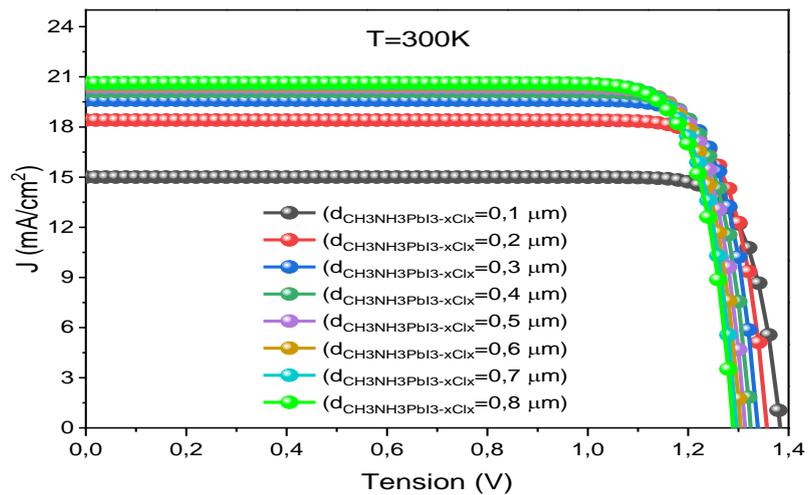


Figure 2.15 : La variation de la densité de courant $I(V)$ en fonction d'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$

La figure 2.16 présente la variation de la caractéristique puissance tension $P(V)$, pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ à $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$. On remarque que la puissance maximale croit avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante, par contre de tension diminue. L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante est important sur la puissance maximale par rapport à celle de la tension.

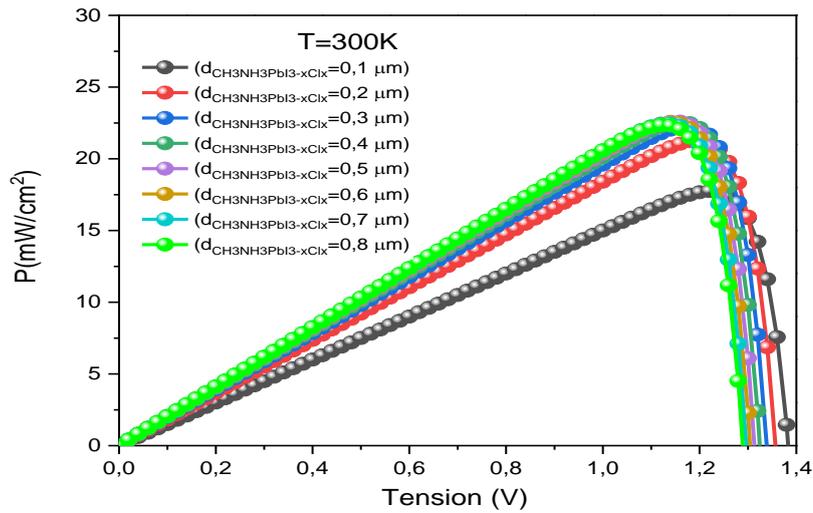


Figure 2.16 : La caractéristique puissance tension pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $T=300\text{K}$, $d_{\text{TfCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$

Epaisseur (μm)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	Rendement (%)
0.1	1.3824	14.63	85.50	17.30
0.2	1.3563	18.12	85.09	20.92
0.3	1.3382	19.34	84.82	21.95
0.4	1.3244	19.86	84.61	22.26
0.5	1.3133	20.12	84.42	22.31
0.6	1.3041	20.27	84.24	22.27
0.7	1.2963	20.35	84.08	22.18
0.8	1.2894	20.40	83.92	22.08

Le tableau des résultats (2.4)

La figure 2.17 montre la variation de la densité du courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} , pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, à $T=300\text{K}$, $d_{\text{TfCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$. On constate que la tension de circuit ouvert décroît rapidement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante mais la densité du courant de court-circuit croît jusqu'à atteindre la saturation au voisinage de $d=0.6\mu\text{m}$.

La figure 2.18 présente la variation du facteur de forme FF et le rendement η pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ pour $T=300\text{K}$, $d_{\text{TfCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$. On remarque que le facteur de forme diminue avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante, le facteur de forme varie de 85 à 84%, c'est-à-dire une faible variation. Par contre l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante induit une augmentation importante de rendement de la cellule solaire. Cette variation de l'épaisseur de la couche absorbante nous donne une variation de l'efficacité de la cellule solaire de 17.30% à 22.25%.

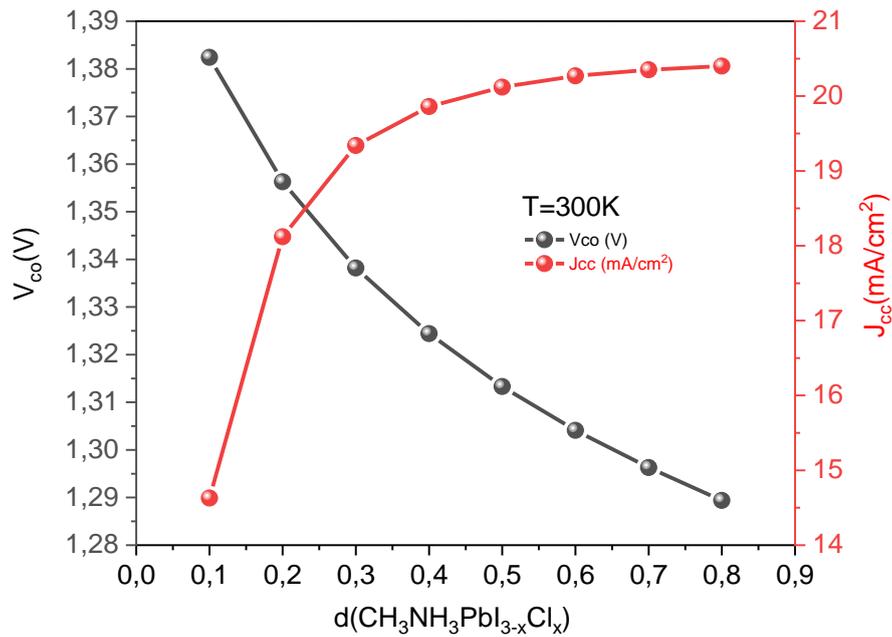


Figure 2.17 : La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de l'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$

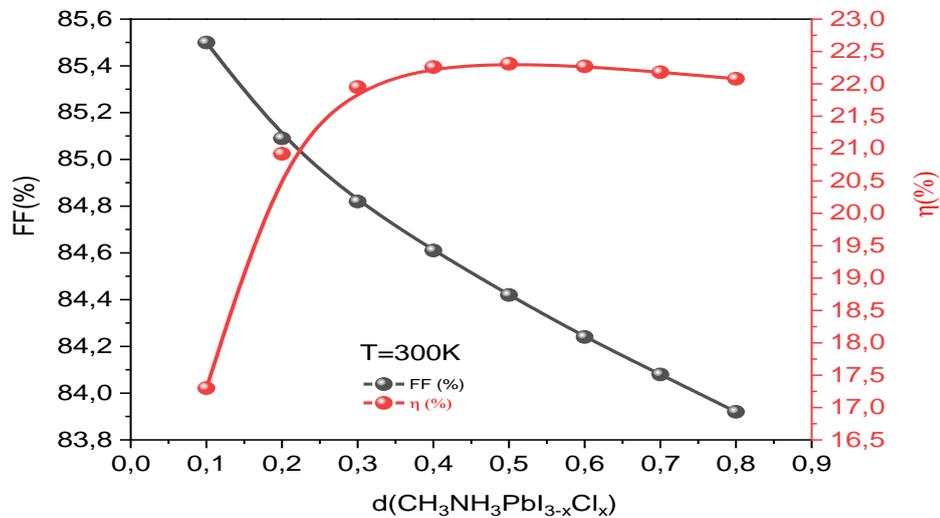


Figure 2.18 : La variation de La facteur de forme FF et le rendement η pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$, $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$.

La figure 2.19 présente la variation de courant de court-circuit J_{cc} et le rendement η pour différentes épaisseurs de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ pour $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$. L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante sur le rendement et la densité du courant de court-circuit est positif c'est-à-dire, il augmente les deux paramètres de sortie de la cellule. On peut avoir des valeurs optimales afin de réaliser des cellules solaires fiable.

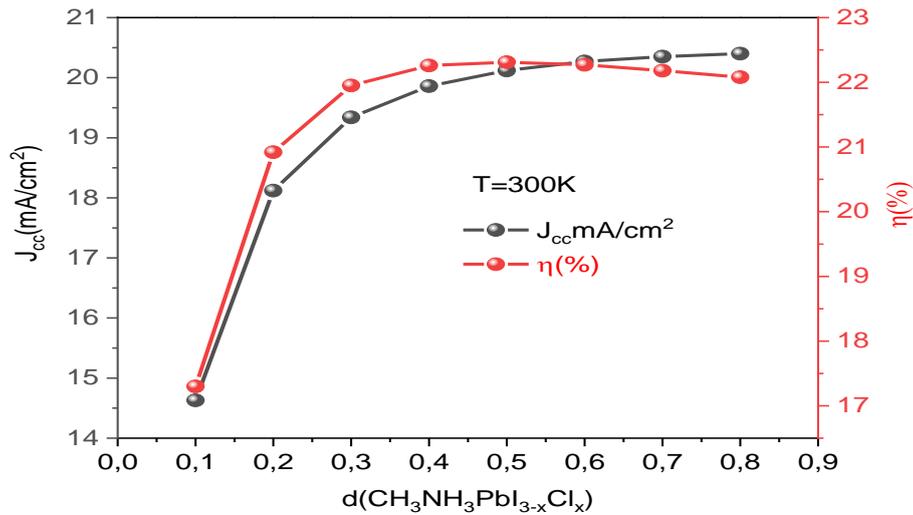


Figure2. 19 : La variation de courant de court-circuit J_{cc} et le rendement η en fonction d'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$ et $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$

2.5 L'influence de la température de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$:

La figure 2.20 présente la variation de La densité de courant $I(V)$ pour différentes valeurs de la température T varie de 280K à 350K pour une couche de pérovskite mixte à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ avec $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On constate que l'effet de la température sur l'efficacité quantique externe n'est pas important.

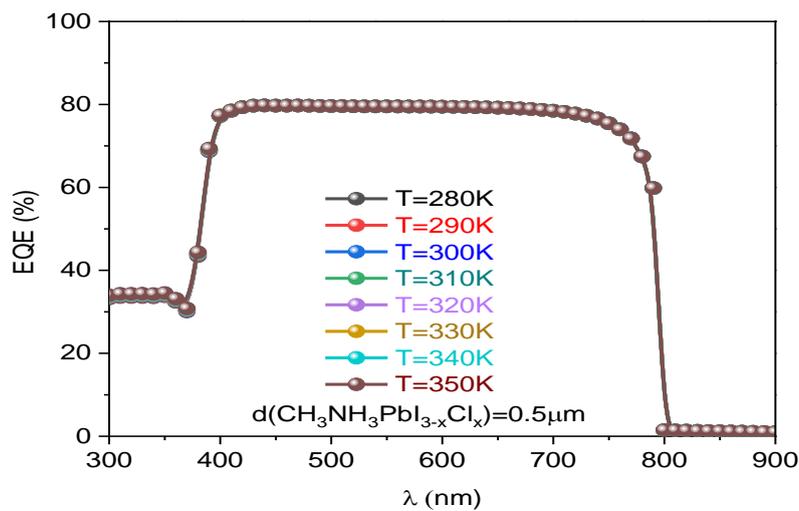


Figure 2.20 : La variation de l'effet de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la température

La figure 2.21 présente la variation de La densité de courant $I(V)$ pour différentes valeurs de la température T varie de 280K à 350K par pas de 10K, pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On remarque que l'augmentation de la température provoque une diminution de la tension de circuit ouvert cette diminution est due à l'effet de la température sur le courant de saturation et aussi l'énergie de la bande interdite diminue donc génération plus de porteurs de charge (électron/trou). Lorsque la température varie de 280 à 350K, la tension de circuit ouvert diminue de 1.33V à 1.25V. L'effet de la température sur la densité du courant de court-circuit est négligeable.

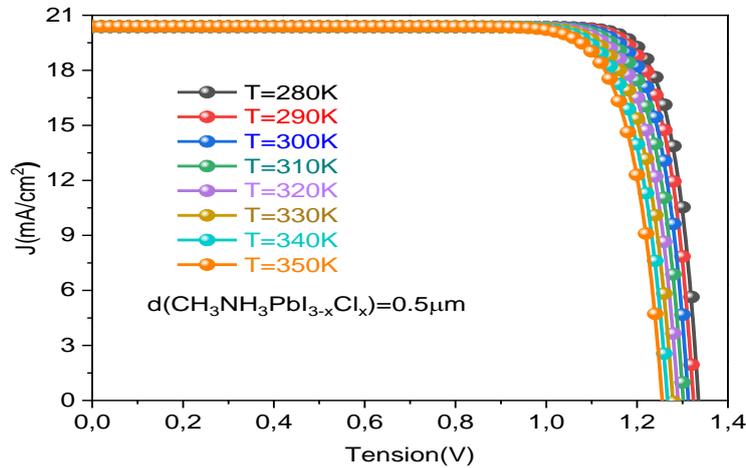


Figure 2.21 : variation de la densité de courant $I(V)$ en fonction de la variation de température

La figure 2.22 présente la variation de La Caractéristique puissance tension $P(V)$ pour différentes valeurs de la température T varie de 280K à 350K pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On remarque qu'il y a une augmentation de la puissance maximale alors la température. Alors la température a un effet important sur la puissance. On doit optimiser ce paramètre important qui peut dégrader la performance d'une cellule solaire.

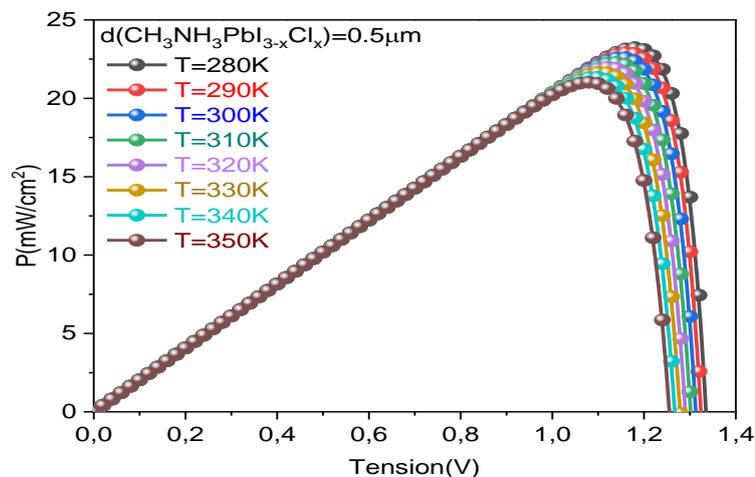


Figure 2.22 : La Caractéristique puissance tension pour différentes températures de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$

Température (K)	V _{co} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	Rendement (%)
280	1.3363	20.37	85.33	23.22
290	1.3252	20.37	84.87	22.91
300	1.3139	20.37	84.41	22.60
310	1.3027	20.38	83.95	22.28
320	1.2912	20.38	83.49	21.97
330	1.2797	20.38	83.02	21.65
340	1.2680	20.38	82.55	21.34
350	1.2563	20.39	82.08	21.02

Le tableau des résultats (2.5)

La figure 2.23 montre la variation de la densité du courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} pour différentes valeurs de la température T, pour une couche de pérovskite mixte (CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x) avec d_{TCO}=0.1 μm, d_{ZnO}=0.5 μm et d_{CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x}=0.5 μm. On remarque que l'augmentation de la température n'induit pas une variation importante de densité du courant de court-circuit J_{cc}. L'accroissement de la température provoque une diminution de V_{co}. Lorsqu'on varie la température de 280 à 350 K la tension V_{co} décroît de 0.09.

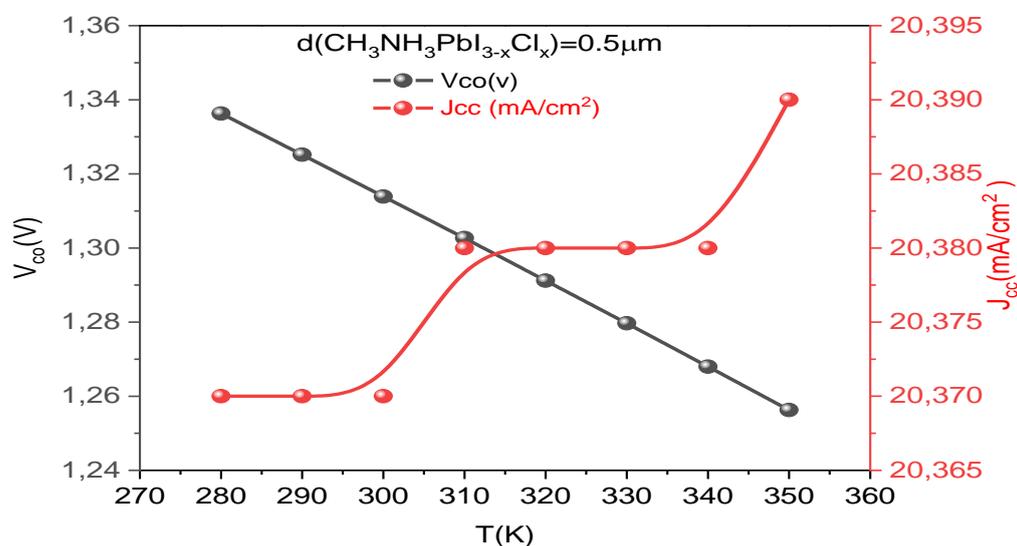


Figure 2.23 : La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de la variation de température

La figure 2.24 présente la variation de La facteur de forme FF et le rendement η pour différentes valeurs de la température T, pour une couche de pérovskite mixte (CH₃NH₃PbI_{3-x}Cl_x) avec d_{TCO}=0.1 μm, d_{ZnO}=0.5 μm et

$d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x} = 0.5 \mu\text{m}$. On remarque qu'il y a diminution linéaire pour les deux paramètres FF et η lorsque la température subit une augmentation importante. La figure 2.25 présente la variation de la tension de circuit ouvert V_{co} et le rendement η pour différentes valeurs de la température T varie de 280K à 350K par pas de 10K, pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5 \mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x} = 0.5 \mu\text{m}$. On remarque qu'il y a diminution linéaire pour les deux paramètres avec chaque augmentation de la température.

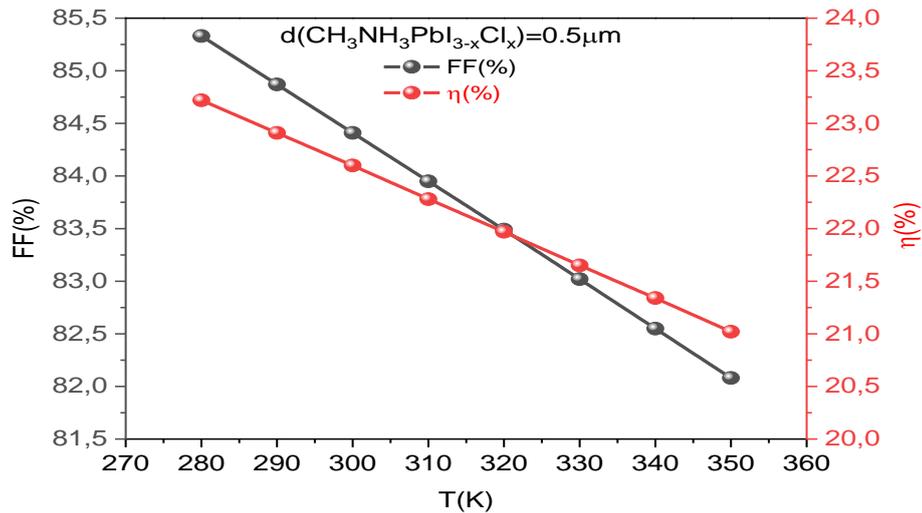


Figure 2.24 : La variation de facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la variation de température

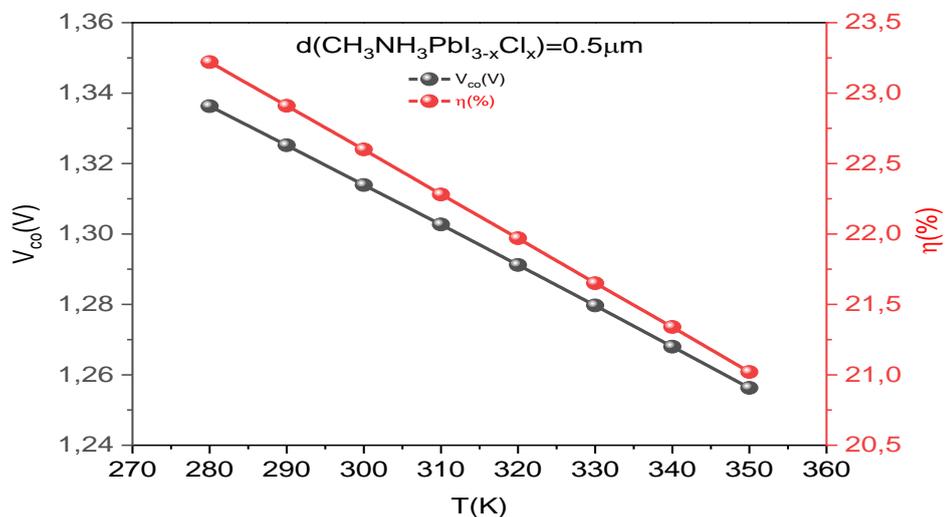


Figure 2.25 : La variation de la tension de circuit ouvert V_{co} et le rendement η en fonction de la température

2.6 L'influence de dopage (Nd) la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) :

$\text{Nd}(\text{cm}^{-3})$	$V_{\text{co}}(\text{V})$	$J_{\text{cc}}(\text{mA}/\text{cm}^2)$	FF(%)	Rendement (%)
10^{11}	1,3139	20,37	84,41	22,6
10^{12}	1,3139	20,37	84,41	22,6
10^{13}	1,3139	20,37	84,41	22,6
10^{14}	1,3139	20,37	84,41	22,6
10^{15}	1,3139	20,37	84,54	22,63
10^{16}	1,3148	20,36	86,79	23,24
10^{17}	1,3397	20,31	89,34	24,31

Le tableau des résultats (2.6)

La figure 2.26 présente la variation du courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} pour différentes valeurs de la température T varie de 280K à 350K par pas de 10K, pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $d_{\text{Tco}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On constate une stabilité des valeurs de deux paramètres V_{co} et J_{cc} à l'intervalle $[10^{11}-10^{14}]$. A partir de 10^{16}cm^{-3} on remarque un changement important. La tension V_{co} croit rapidement est atteint 1.34V par contre la densité du courant de court-circuit décrit rapidement jusqu'à la valeur minimale 20.31. Alors on doit optimiser l'effet des défauts de matériaux sur les paramètres V_{co} et J_{cc} .

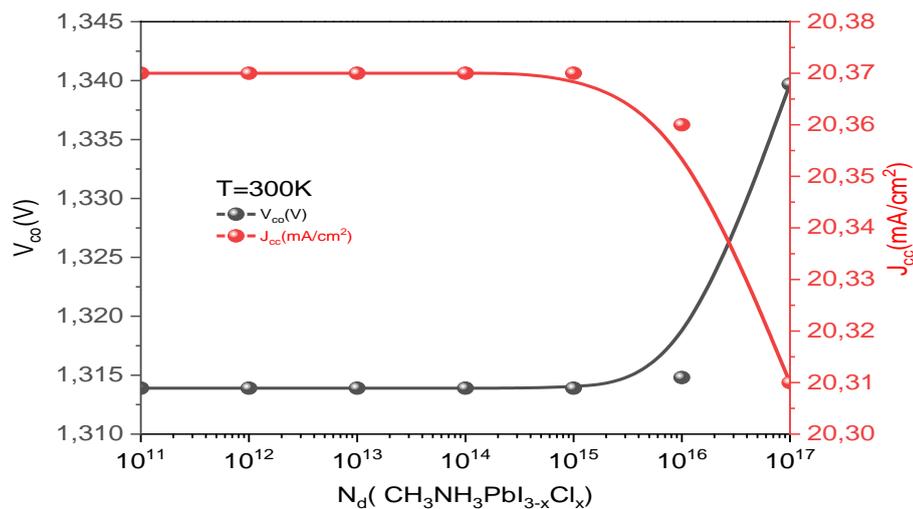


Figure 2.26 : La variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension circuit ouvert V_{co} en fonction de la variation de dopage (Nd)

La figure 2.27 présente la variation de facteur de forme FF et le rendement η pour différentes valeurs de la température T , pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $d_{\text{Tco}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On remarque une stabilité des valeurs des deux paramètres à l'intervalle $[10^{11}-10^{14}]$. Ensuite, les deux paramètres augmentent considérablement.

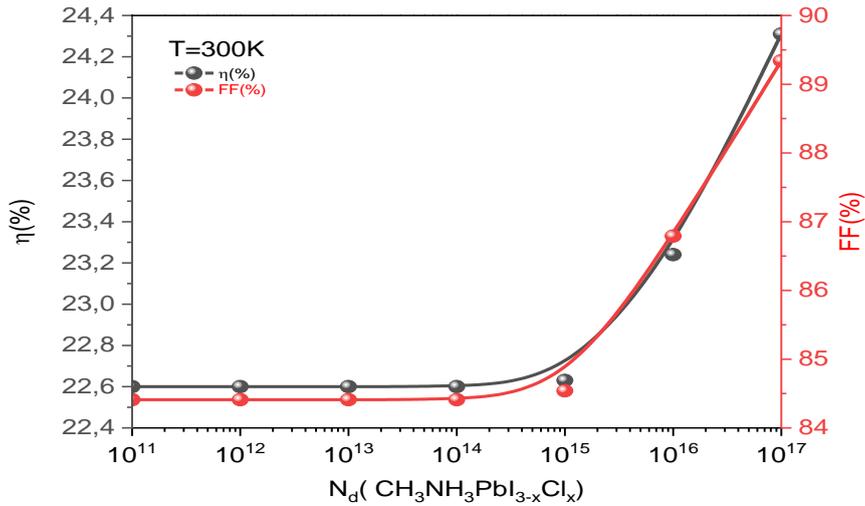


Figure 2.27 : La variation du facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction du la variation de dopage (N_d)

Dans le processus de simulation, nous pouvons éliminer les défauts totaux dans la couche absorbante, mais pratiquement ce n'est pas possible. Pour identifier les effets des défauts totaux sur les performances d'un appareil, quelques défauts sont ajoutés dans la couche absorbante et la densité des défauts est augmentée de 10^{11} à 10^{15} .

2.7 L'influence des défauts (N_t) la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) :

N_t (cm^{-3})	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	Rendement (%)
10^{11}	1,5986	20,37	85,84	27,96
10^{12}	1,4795	20,37	85,06	25,64
10^{13}	1,3609	20,37	84,42	23,41
10^{14}	1,2443	20,37	83,90	21,44
10^{15}	1,1395	20,34	83,55	19,37

Le tableau des résultats (2.7)

La figure 2.28 présente la variation de courant de court-circuit J_{cc} et la tension de circuit ouvert V_{co} pour différentes valeurs de la densité de défaut N_t pour une couche de pérovskite hybride ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On remarque qu'il y a une certaine stabilité des valeurs de J_{cc} à l'intervalle $[10^{11}-10^{14}]\text{cm}^{-3}$. La densité des défauts a un effet sur les caractéristiques (V_{co} , J_{cc} , FF et η). Ces derniers décroissent avec l'accroissement des défauts.

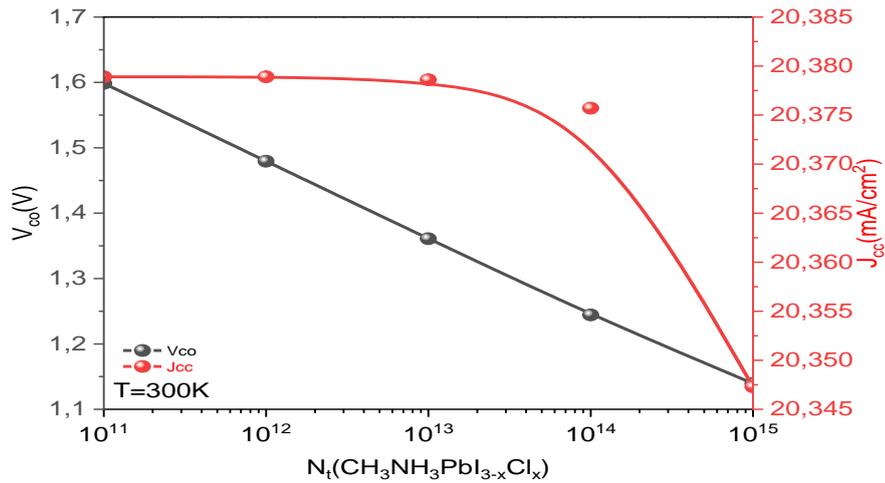


Figure 2.28 : La variation du courant de court-circuit J_{cc} la tension de circuit ouvert V_{co} en fonction de la densité des défauts

La figure 2.29 présente la variation de facteur de forme FF et le rendement η pour différentes valeurs de la densité de défaut N_i pour une couche de pérovskite mixte ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) avec $T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$. On observe qu'il y a diminution linéaire pour les deux paramètres lorsque les défauts augment. Alors on peut trouver un compromis entre les défauts et les paramètres de sortie afin de choisir la meilleure structure de la cellule solaire.

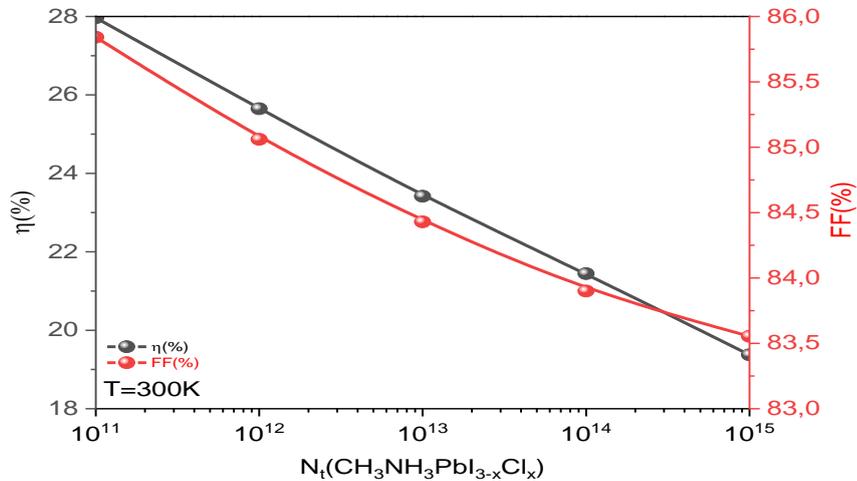


Figure 2.29 : La variation du facteur de forme FF et le rendement η en fonction de la densité des défauts

2.8 Conclusion :

Dans ce chapitre, les performances optimales de la cellule solaire à base de pérovskite mixte ont été déterminées par des simulations à l'aide du logiciel Scaps. Les résultats de simulation ont clairement montré que les épaisseurs des couches absorbantes de la cellule et les paramètres de (épaisseur, température, densité des défauts et la concentration de dopage) jouent un rôle très important dans les performances de la cellule solaire. Les résultats de simulation prévoient un rendement de conversion optimal de l'ordre de 27.9%.

Conclusion générale :

La protection de l'environnement est devenue, ces dernières années, une préoccupation majeure. De nombreuses voies de recherches se sont donc orientées vers l'utilisation des énergies renouvelables, dont l'énergie solaire. L'énergie solaire photovoltaïque est une énergie renouvelable car elle utilise une source d'énergie d'origine naturelle qui est le Soleil.

L'objectif de ce travail, est d'étudier et optimiser les caractéristiques électriques de la cellule solaire bas des matériaux pérovskite hybride pour un éclairage AM1.5.

Les résultats de simulation en première partie ont clairement ils basées sur la variation des épaisseurs des couches absorbant ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$), tampon (ZnO), antireflet (TCO) de la cellule pérovskite mixte. Cette optimisation concerne la géométrie de la cellule en l'occurrence.

Nous avons simulé la cellule solaire pérovskite Composé des classes suivantes [TCO/ZnO/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ /Spiro-OMeTAD], où nous obtenons de bons résultats pour ($T=300\text{K}$, $d_{\text{TCO}}=0.1\mu\text{m}$, $d_{\text{ZnO}}=0.5\mu\text{m}$ et $d_{\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x}=0.5\mu\text{m}$) :
 $V_{\text{oc}} = 1.3133$ (V) ; $J_{\text{cc}} = 20.12$ (mA/cm²) ; FF =84.42 (%) ; $\eta=22.31$ (%).

Dans la deuxième partie, après d'avoir une structure optimal et fiable de la cellule. Nous discuterons et étudier l'influence de la température, afin d'évaluer l'effet de dopage (N_d) et l'impact de la densité de défauts pour la couche absorbant ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$) et observer Les résultats de simulation sur les performances du dispositif

La température idéale ($T=280\text{K}$) : $V_{\text{co}} = 1.3363$ (V) ; $J_{\text{cc}} = 20.37$ (mA/cm²) ; FF =85.33 (%) ; $\eta=23.22$ (%).

La concentration de dopage idéale ($N_d=10^{17}\text{cm}^{-3}$) : [$V_{\text{co}} = 1,3397$ (V) ; $J_{\text{cc}} = 20,31$ (mA/cm²) ; FF =89,34 (%) ; $\eta=24,31$ (%)].

La densité de défauts idéale ($N_t=10^{11}\text{cm}^{-3}$) : [$V_{\text{co}} = 1,5986$ (V) ; $J_{\text{cc}}= 20,37$ (mA/cm²) ; FF =85,84 (%) ; $\eta=27,96$ (%)].

Références

- [1] <https://www.pourlascience.fr/sd/energie/une-cellule-solaire-a-perovskite-plus-stable-12747.php>
- [2] P. Destruel et I. Séguy, Techniques de l'Ingénieur, dossier RE25-1
- [3] <http://www.energie-photovoltaïque-et-solaire.com/historique.html>
- [4] Les cellules photovoltaïques par Pierre Destruel et Isabelle Seguy.
- [5] J. Zhao, A. Wang, M.A. Green et F. Ferrazza, Applied Physics Letters 1998, 73, 1991.
- [6] V.Y. Meritt, IBM Journal of Research and Development 1978, 22, 353
- [7] J.-C. Muller, Techniques de l'Ingénieur, dossier BE8579
- [8] B. O'Regan et M. Grätzel, Nature 1991, 353, 737
- [9] M. Taguchi, K. Kawamoto, S. Tsuge, T. Baba, H. Sakata, M. Morizane, K. Uchihashi, N. Nakamura, S.Kiyama et O. Oota, Progress in Photovoltaics: Research and Applications 2000, 8, 503
- [10] S.E. Shaheen, C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, F. Padinger, T. Fromherz et J.C. Hummelen, Applied Physics Letters 2001, 78, 841
- [11] R.R. King, D.C. Law, K.M. Edmondson, C.M. Fetzer, G.S. Kinsey, H. Yoon, R.A. Sherif et N.H. Karam, Applied Physics Letters 2007, 90, 183516
- [12] P. Wang, Q. Dai, S.M. Zakeeruddin, M. Forsyth, D.R. MacFarlane et M. Gratzel, J. Am. Chem. Soc. 2004, 126, 13590
- [13] V.Y. Meritt, IBM Journal of Research and Development 1978, 22, 353
- [14] C.W. Tang, Applied Physics Letters 1986, 48, 183
- [15] S.E. Shaheen, C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, F. Padinger, T. Fromherz et J.C. Hummelen, Applied Physics Letters 2001, 78, 841
- [16] P. Peumans et S.R. Forrest, Applied Physics Letters 2001, 79, 126
- [17] J. Xue, S. Uchida, B.P. Rand et S.R. Forrest, Applied Physics Letters 2004, 84, 3013
- [18] <https://www.universalis.fr/media/DE161103/>

- [19] MOLLER (C.K.). – Crystal structure and photoconductivity of caesium plumbohalides. *Nature*, 182(4647), p. 1436-1436 (1958).
- [20] WEBER (D.). – $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, a Pb(II)-system with cubic perovskite structure. *Z. Naturforschung B*, 33(12), p. 1443-1445 (1978).
- [21] WELLER (M.T.), WEBER (O.J.), HANRY (P.F.), DIPUMPO (A.M.) et HANSEN (T.C.). – Complete structure and cation orientation in perovskite photovoltaic methylammonium lead iodide between 100 and 352 K. *Chem. Commun.*, 51, p. 4180-4183 (2015).
- [22] NOH (J.H.), IM (S.H.), HEO (J.H.), MANDAL (T.N.) et SEOK (S.I.). – Chemical management for colorful, efficient, and stable inorganic- organic hybrid nanostructured solar cells. *Nano Lett.*, 13, p. 1764-1769 (2013).
- [23] WONG (A.B.), LAI (M.), EATON (S.W.), YU (Y.), LIN (E.), DOU (L.), FU (A.) et YANG (P.). – Growth and anion exchange conversion of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ nanorod arrays for light emitting diodes. *Nano Lett.*, 15, p. 5519-5524 (2015).
- [24] WU (K.), BERA (A.), MA (C.), DU (Y.), YANG (Y.), LI (L.) et WU (T.). Temperature-dependent excitonic photoluminescence of hybrid organometal halide perovskite films. *Phys.Chem. Chem. Phys.*, 16, p. 22476-22481 (2014).
- [25] <https://www.mdpi.com/1996-1944/9/3/123/htm>
- [26] Global Market outlook for photovoltaics until 2019. *Solar Power Europe*.
- [27] “Solar Generation V” Greenspace-European. Photovoltaic Industry Association.
- [28] N-G Park. (2013). Organometal Perovskite Light Absorbers Toward a 20% Efficiency Low-Cost Solid-State Mesoscopic Solar Cell. *The Journal of Physical Chemical Letters*.
- [29] T. Baikie, Y. Fang, J. M. Kadro, M. Schreyer, F. Wei, S. G. Mhaisalkar & T. J. White. (2013). Synthesis and crystal chemistry of the hybrid perovskite $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbI}_3$ for solid- state sensitised solar cell applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 1, 5628-5641.
- [30] P. Umari, E. Mosconi & Filippo De Angelis. (2014). Relativistic GW calculations on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ and $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ Perovskites for Solar Cell Applications. *Scientific Reports*, 4, 4467.

- [31] Y.H Chang and C.H. Park. (2004). First-principles study of the structural and the electronic properties of the lead-halide-based inorganic-organic perovskites $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbX}_3$ and CsPbX_3 ($\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$). *J. of the Korean Phys. Soc.*, 44(4), 889-893.
- [32] M. I. Ahmed, A. Habib & S. S. Javaid. (2015). Perovskite Solar Cells: Potentials, Challenges, and Opportunities. Hindawi.
- [33] D. B. Mitzi, S. Wang, C. A. Feild, C. A. Chess, & A. M. Guloy. (1994). Conducting Layered Organic-inorganic Halides Containing (1 1 0)-Oriented Perovskite Sheets. *Science*, 267, 1473-1476.
- [34] E. Knittle & R. Teanloz. (1987). Synthesis and Equation of State of $(\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3$ Perovskite to Over 100 Gigapascals. *Science*, 235, 668-670.
- [35] S. A. Kulkarni, T. Baikie, P. P. Boix, N. Yantara, Nripan Mathews & S. Mhaisalkar. (2014). Band-gap tuning of lead halide perovskites using a sequential deposition process. *Journal of Materials Chemistry A*, 2, 9221-9225.
- [36] Y. Takahashi, Obara, R., Z-Z Lin, Y. Takahashi, T. Naito, T. Inabe, K. Terakura. (2011). Charge-transport in tin-iodide perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$: origin of high conductivity. *Dalton Transactions*, 4, 2423–2429.
- [37] J. Cui, H. Yuan, J. Li, X. Xu, Y. Shen, H. Lin & M. Wang. (2015). Recent progress in efficient hybrid lead halide perovskite solar cells. National Institute for Materials Science.
- [38] N-G Park. (2014). Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology. *Materials Today*, 18(2), 65–72.
- [39] <https://aip.scitation.org/doi/full/10.1063/1.4871795>
- [40] <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352340915000384?via%3Dihub>
- [41] R. Ihly et al., “Efficient charge extraction and slow recombination in organic– inorganic perovskites capped with semiconducting single-walled carbon nanotubes,” *Energy & Environmental Science*, vol. 9, no. 4, pp. 1439–1449, 2016.
- [42] Mémoire de fin d'étude en Master, thème : Étude de l'effet des caractéristiques de la couche TCO sur les propriétés de la cellule PV en silicium, présenté par : Melle Bouchra BOULESBAA, Université Mohammed Seddik BENYAHIA – Jijel, 2019
- [43] A.Moustaghfir « Élaboration et caractérisation de couches minces d'oxyde de zinc. Application à la photoprotection du polycarbonate », Thèse de doctorat, université Blaise Pascal, (2004).
- [44] <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/full/10.1002/admi.201700623>

[45] Thèse de magister, Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires, S. BENSALÉM, UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF, 2011

Annexe

Introduction :

Ces dernières années, en raison des coûts élevés de l'expérimentation et la fabrication des cellules solaires, les chercheurs se sont orientés vers la simulation numérique. L'utilisation des différents logiciels de simulation a permis de déterminer l'influence des paramètres physiques et géométriques des échantillons en couches minces avant de les fabriquer.

Parmi les logiciels de simulation des cellules solaires, très sophistiqué, on peut citer : SILVACO-ATLAS et SCAPS. Ces logiciels permettent de simuler les cellules solaires en couches minces et de déterminer les caractéristiques électriques et optiques tel que la caractéristique courant-tension (I-V). Ils permettent aussi de calculer les paramètres photovoltaïques tels que : la densité du courant de court-circuit (I_{sc}), la tension en circuit- ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF), la puissance maximale (P_{max}), le rendement de conversion photovoltaïque (η) et la réponse spectrale en fonction de la longueur d'onde du spectre.

3.1 Techniques de modélisation :

En modélisation numérique, il a été difficile de discrétiser un dispositif au moyen d'une grille « grid » (en 2D) ou d'un maillage « mesh » (en 3D). Un maillage avec une concentration de points uniformément élevée ne peut pas être traité car il contiendrait des millions de points de maillage. Donc, il est nécessaire de choisir un maillage dense dans les régions où l'ensemble des variables d'entrée et de sortie change à des distances faibles ; dans les autres régions, un maillage plus grossier suffit. Un bon choix de la grille détermine si les algorithmes numériques appliqués convergent rapidement et vers une solution correcte ou non [62], [63]. Pour modéliser précisément les propriétés électriques de sorties dans la plupart des types de cellules solaire, il suffit de résoudre les équations de base des semi-conducteurs [64] avec l'approximation dérive- diffusion:

- Equation de poisson :

$$-\nabla E = \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \Psi) = -q(p - n + N_D^+ - N_A^-) \quad (3.1)$$

- Equations de continuité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R_n \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R_p \quad (3.3)$$

- Equations de dérive-diffusion:

$$J_n = -q\mu_n n \nabla \Psi + qDn \nabla n \quad (3.4)$$

$$J_p = -q\mu_p p \nabla \Psi + qDp \nabla p \quad (3.5)$$

3.2 Utilisation du SCAPS :

Le programme est organisé en plusieurs panneaux dans lesquels l'utilisateur peut définir les paramètres ou dans lesquels les résultats sont calculés [65]. SCAPS analyse la physique du modèle et explique les profils de recombinaison, la distribution du champ électrique, le mécanisme de transport de la porteuse et les densités de courant individuelles. Le SCAPS possède trois grandes fenêtres :

3.2.1 Fenêtre d'exécution (Action Panel) :

La fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS est accessible dès le démarrage du logiciel. Elle est constituée de différents blocs comme le montre la figure 3.1 :

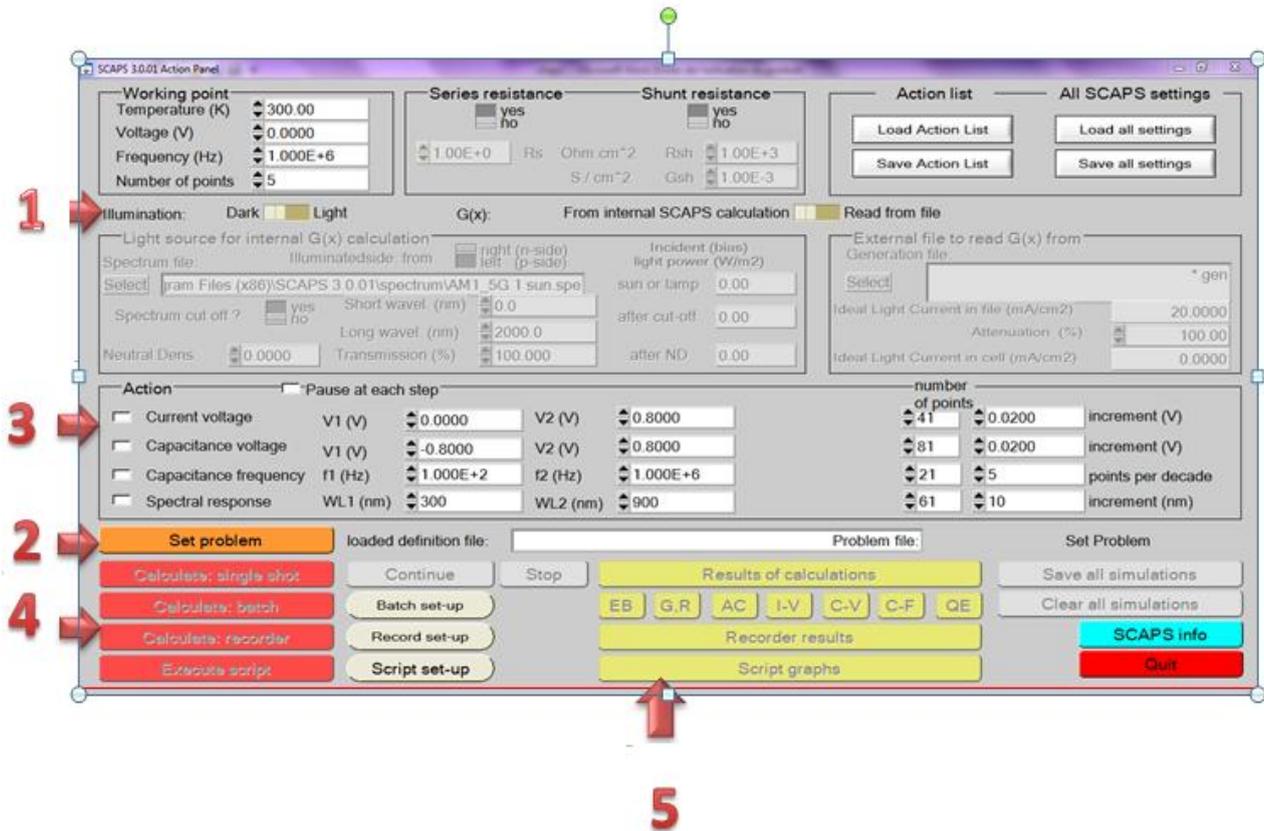


Figure 3.1: Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS

- ✓ **Bloc1** : permet la spécification des conditions de simulation :
 - Spécification du point de fonctionnement (température, tension, fréquence).
 - Condition d'illumination.
 - Résistance.
- ✓ **Bloc2** : permet de définir le problème : spécification de la géométrie, des matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire.
- ✓ **Bloc 3** : permet de sélectionner les grandeurs simuler à savoir : la caractéristique I- V, la capacité – voltage, la capacité-fréquence et la réponse spectrale.
- ✓ **Bloc 4** : permet de lancer les calculs.
- ✓ **Bloc 5** : permet une visualisation des résultats.

3.2.2 Définir le point de fonctionnement :

Le point de fonctionnement spécifie les paramètres qui ne sont pas modifiés dans une mesure de simulation et qui sont important pour cette mesure.

- la température T: importante pour toutes les mesures. Note: dans SCAPS, seulement NC (T), NV (T), les vitesses thermiques, la tension thermique kT et toutes leurs dérivés sont les seules variables qui ont une dépendance explicite de la température; vous devez entrer pour chaque T les paramètres de matériaux correspondants.
- la tension V: est éliminée dans les simulations I-V et C-V. C'est la tension de polarisation continue dans la simulation C-f et dans la simulation QE (h). SCAPS commence toujours à 0 V et passe à la tension du point de fonctionnement en un nombre de pas que vous devez spécifier (number of point).
- La fréquence f: est ignorée dans les simulations I-V, QE (h)et C-f. C'est la fréquence à laquelle la mesure C-V est simulée.

Working point	
Temperature (K)	300.00
Voltage (V)	0.0000
Frequency (Hz)	1.000E+6
Number of points	5

Figure 3.2: Définition du point de fonctionnement.

- L'éclairement (illumination): est utilisé pour toutes les mesures. Pour la mesure QE (h), il détermine les conditions de lumière de polarisation. Les réglages de base sont les suivants : sombre ou clair, choix du côté éclairé, choix du spectre. Une illumination à un soleil (= 1000 W/m²) avec le spectre global de la masse d'air 1,5 est le paramètre par défaut, mais vous disposez d'un large choix de lumière monochromatique et de spectres pour vos simulations spécialisées. Si vous disposez d'un simulateur optique, vous pouvez immédiatement charger un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre.

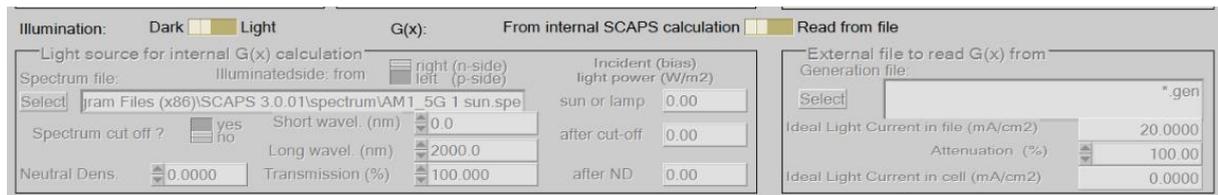


Figure 3.3: Choix de l'illumination.

3. 2.3 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problème) :

Lorsque vous cliquez sur le bouton "Set Problem" dans le panneau Actions (figure 3.1 bloc 2), le panneau "Solar cell definition" s'affiche (Figure 3.4). Ce panneau permet de créer/éditer des structures de cellules solaires, d'afficher une fenêtre qui contient un grand nombre de données comme l'énergie de gap, la permittivité électrique, l'affinité, le dopage, et le type de dopage. En plus, les défauts de différents types peuvent être définis, à la fois, dans la masse de couches et aux interfaces. En considérant leurs états de charge et la recombinaison à leurs niveaux à savoir : le type de charge, la distribution énergétique, la propriété optique et les transitions métastables entre les niveaux, et de les sauvegarder ou de les charger à partir de fichiers de définition. Ces fichiers de définition sont des fichiers ASCII standard portant l'extension «*.def».

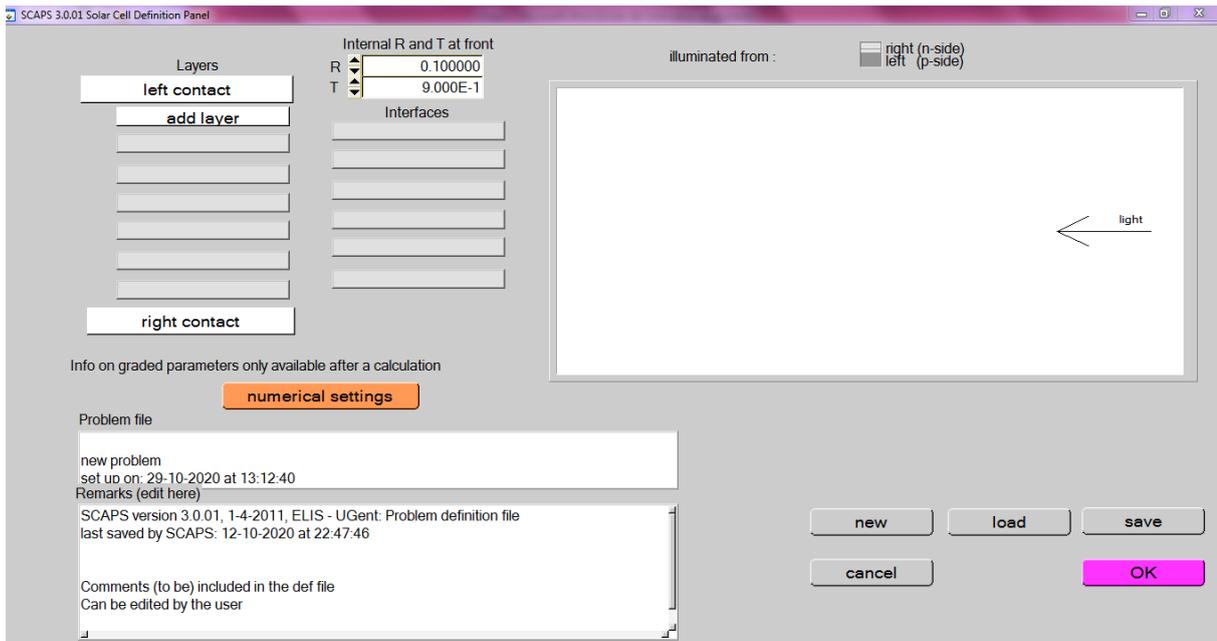


Figure 3.4: Panneau de définition de la structure.

Les propriétés des couches, de contact et d'interface peuvent être modifiées en cliquant sur la case appropriée, comme illustré à la figure 3.5. De la même manière, vous pouvez ajouter des couches en cliquant sur "Add layer".

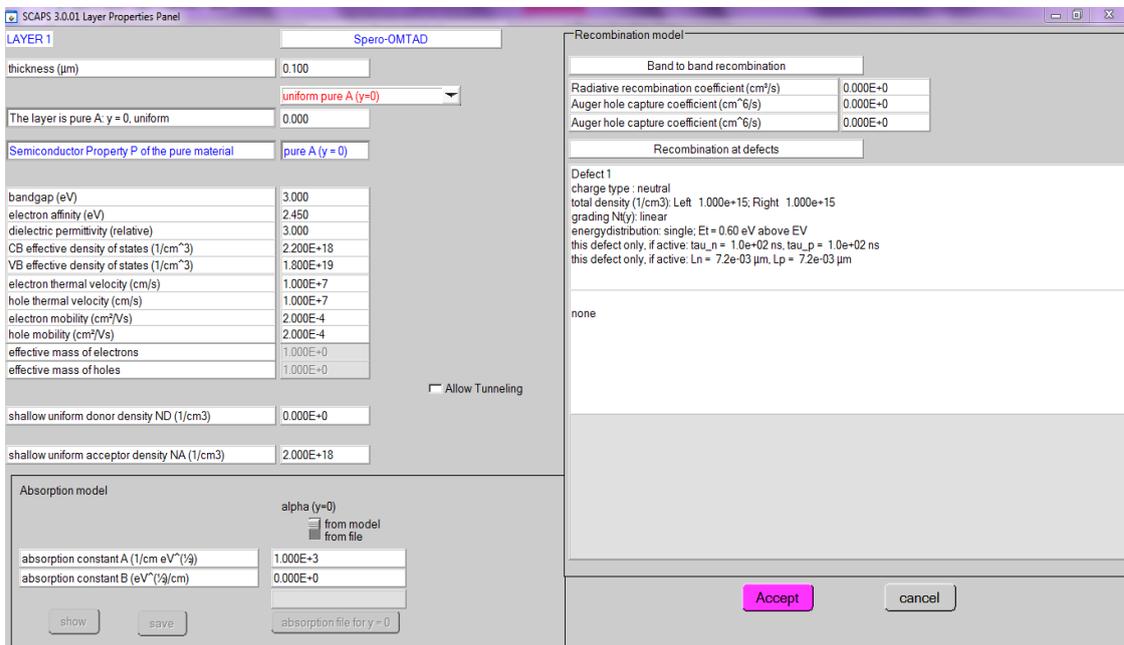


Figure 3.5: Panneaux de définition des propriétés des couches.

3.2.4 Défaut (Defects) :

Dans SCAPS, seule la référence par défaut est utilisée : tension appliquée au contact gauche, flèche de référence actuelle de gauche à droite, donnant lieu à une référence en tant que consommateur. Dans toutes les sorties (graphiques, tableaux d'affichage/enregistrement), le résultat est affiché conformément au choix de l'utilisateur en matière de référence.

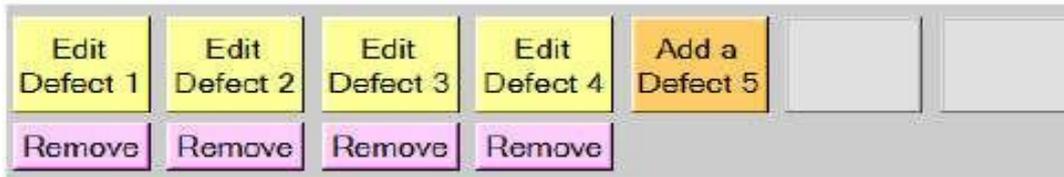


Figure 3.6: Ajouter/supprimer “defects”.

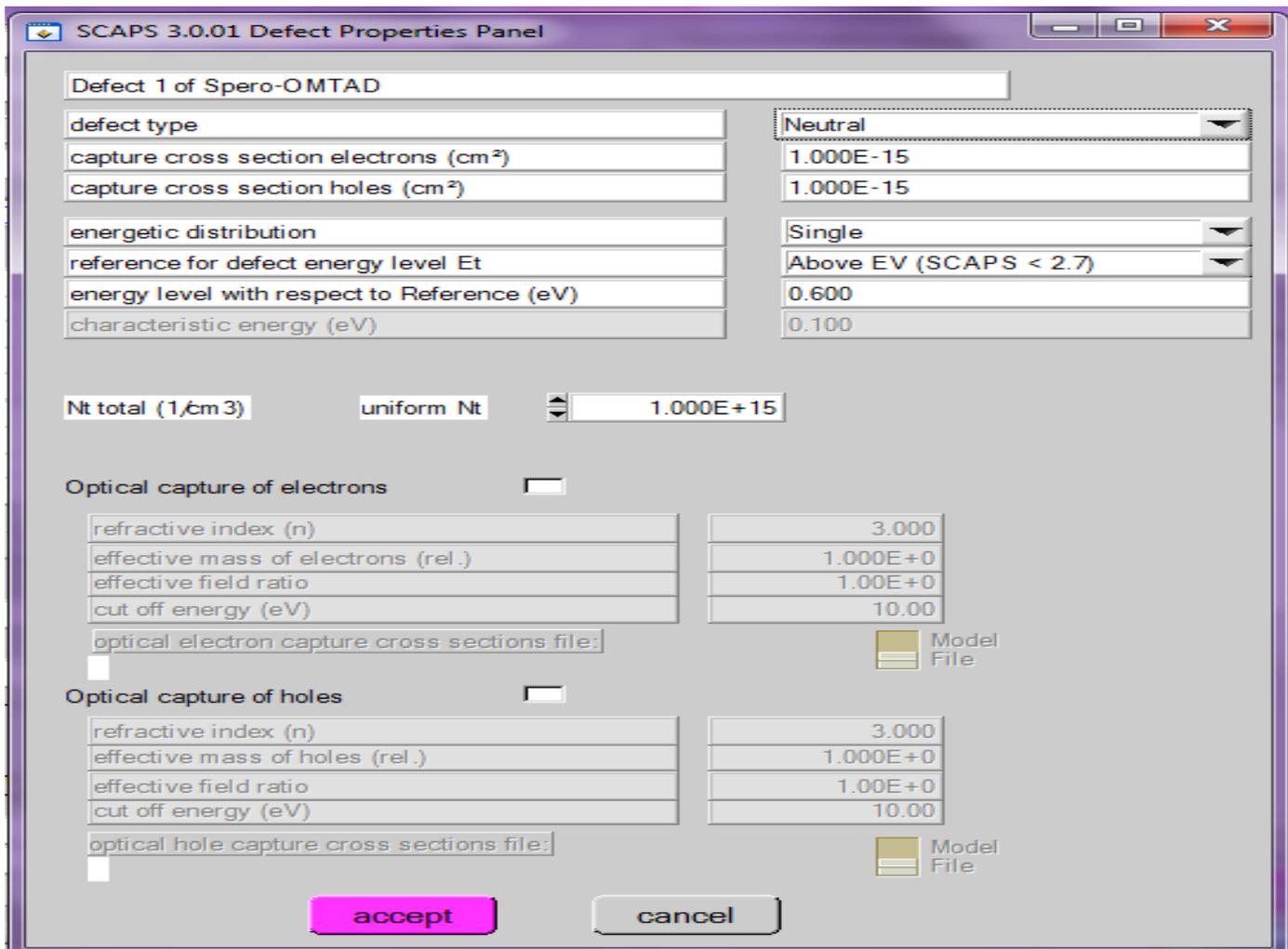


Figure 3.7: Panneaux de définition des propriétés par défaut.

