



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITÉ «ABBÈS LAGHROUR» KHENCHÉLA
FACULTÉ DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE



Département Sciences de la matière

N° de série :.....

Mémoire de fin d'études
Pour l'obtention du diplôme de Master (L.M.D)

Spécialité : Physique
Option : Physique des matériaux

***Etude et simulation d'une cellule solaire
à base de pérovskite***

Présenté le : 26 /06/2022

Dirigé par : Dr. MELLAL Saida

Réalisé par :

- MAANSRI Dounya
- KARKOURI Ilham

Membres de jury :

- Dr Hemam Zooubir MCB Président
- Dr Khemissi Saadeddine MCA Examineur

Année universitaire : 2021/2022

Remerciements

*Avant tout nous tenons nos remerciements à **ALLAH** de nos
avoir donné la force et le courage.*

A la suite Nous tenons à remercier vivement :

***Dr. Saida Mellal** notre encadreur*

*Nous sommes très reconnaissants à nos familles pour les
encouragements, la confiance et le soutien moral dont ils ont
toujours fait preuve.*

*Nous tenons également à remercier messieurs les membres de jury
pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre
Soutenance ;*

Et tous les enseignants du Département de physique

Merci...

Remerciements

*Avant tout nous tenons nos remerciements à **ALLAH** de nos
avoir donné la force et le courage.*

A la suite Nous tenons à remercier vivement :

***Dr. Saida Mellal** notre encadreur*

*Nous sommes très reconnaissants à nos familles pour les
encouragements, la confiance et le soutien moral dont ils ont
toujours fait preuve.*

*Nous tenons également à remercier messieurs les membres de jury
pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre
Soutenance ;*

Et tous les enseignants du Département de physique

Merci...

Liste des Figures

Chapitre I

Figure I.1: premiers satellites avec panneaux solaires	5
Figure I.2 : Illustration de l'effet photovoltaïque.....	6
Figure I.3 : conversion de l'énergie solaire électricité	7
Figure I.4: Principe de la conversion photovoltaïque	8
Figure I. 5: Schéma électrique réel d'une cellule solaire	9
Figure I.6 : (a) caractéristique courant-tension de la cellule photovoltaïque éclairement et (b) représentation conventionnelle de la courbe I(V)	10
Figure I.7 : (a) Exemples de technologies photovoltaïques (b) Etat du développement pour ces technologies photovoltaïques	11
Figure I.8: cellule photovoltaïque à base de silicium monocristallin	12
Figure I.9 : Cellule en silicium poly cristallin	13
Figure I.10 : cellule photovoltaïque au silicium amorphe.....	14
Figure I.11: Cellules de CIGS.....	14
Figure I.12: Cellules de CdTe.....	15
Figure I.13: Schéma d'une structure tandem.....	16
Figure I.14: Principe de la cellule à hétérojonction	17
Figure I. 15 : schéma de principe d'une cellule organique.....	18
Figure I.16: Cellules solaires à colorant.....	18
Figure I.17 : Evolution de l'efficacité des cellules solaires en fonction des années	20

Chapitre II

Figure II.1 : Représentation de la structure de la pérovskite	25
Figure II.2 : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires	27

Liste des Figures

Figure II.3: L'évolution du rendement de conversion des cellules solaires à pérovskite (PSC) de 2008 à 2020	29
Figure II. 4 : Les architectures les plus utilisés dans les cellules solaires à base de pérovskite, (a) méso poreux, (b) couche de recouvrement (Capping-layer), (c) n-i-p planaire et (d) p-i-n planaire	30
Figure II.5: Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite.	32
Figure II. 6: Diagramme d'alignement des bandes de l'ETL et de l'HTL utilisé dans les cellules solaires à base de pérovskite.	33

Chapitre III

Figure III. 1: Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS	44
Figure III.2: Définition du point de fonctionnement	45
Figure III. 3: Choix de l'illumination	46
Figure III. 4 : Panneau de définition de la structure	46
Figure III. 5: Panneaux de définition des propriétés des couches.	47
Figure III. 6: Ajouter/supprimer "defects".	47
Figure III. 7: Panneaux de définition des propriétés par défaut.	48
Figure III. 8 : Processus de recombinaison a) radiative, b) Auger et c) SRH.....	49
Figure III. 9 : Modèle de recombinaison	50
Figure III. 10 : Propriétés du contact.	50
Figure III. 11: Stratégie de fonctionnement de SCAPS.....	52
Figure III. 12: Panneau d'affichage des résultats de bande d'énergie, courant et concentration	53
Figure III. 13 : Panneau I-V avec visualisation des paramètres de la cellule.	54
Figure III. 14: Panneau du rendement quantique	55
Figure III. 15: Les choix possible du panneau de rendement quantique QE	55
Figure III.16: La structure de la cellule solaire pérovskite de référence	56

Liste des Figures

Figure III.17: Structure de la cellule solaire pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en logiciel SCAPS-1D	57
Figure III.18 : Courbe des caractéristique J(V) de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	59
Figure III.19 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour différentes épaisseurs de PVK	61
Figure III.20: Variation de V_{co} , J_{sc} , FF et du rendement PCE en fonction de l'épaisseur de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	61
Figure III.21: Variation de rendement quantique externe (EQE) de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour différentes épaisseurs de PVK	62
Figure III.22 Caractéristiques J(V) de la cellule pour différent dopages de la couche pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).	64
Figure III.23: Variation de V_{co} , J_{sc} , FF et du rendement PCE en fonction du dopage de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	64
Figure III.24 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour différentes densités de défauts N_t dans l'absorbeur	66
Figure III.25 : Variation des paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE en fonction de défaut N_t de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	67
Figure III.26 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour différentes températures de la cellule	69
Figure III.27: Variation des paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE en fonction de la température	69
Figure III.28: paramètres photovoltaïques de la structure optimisée	71

Liste des Tableaux

Chapitre II

Tableau II. 1. Les différentes molécules correspondantes aux différentes familles de pérovskite	25
Tableau II. 2 : les différents composés des pérovskites les plus répandues dans le domaine du photovoltaïque.....	26
Tableau II.3: Comparaison des performances des cellules à base de matériaux pérovskites Cellules à base de matériaux pérovskites	34

Chapitre III

Tableau III.1 : Propriétés électriques et optiques des couches de la cellule utilisés dans la simulation	57
Tableau III.2: Les paramètres (V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE) d'une cellule solaire à base de $CH_3NH_3PbI_3$	59
Tableau III.3: Effet de l'épaisseur $CH_3NH_3PbI_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE	60
Tableau III.4: Effet de la concentration du dopage $CH_3NH_3PbI_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE	63
Tableau III.5: Effet des défauts Nt dans la couche Pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE	66
Tableau III.6: Effet de la température de la PSC sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE	68

Liste des Symboles et abréviations

<i>Symbole</i>	<i>Signification</i>
c-Si	Silicium monocristallin
a-Si	Silicium amorphe
a-Si:H	Silicium amorphe hydrogéné.
CdTe	Tellurure de cadmium
CuInSe ₂	Diséléniure de cuivre-indium
CIGS	Diséléniure de cuivre-indium-gallium.
PCE	Efficacité de conversion de puissance
HTL	Matériau de transport des trous.
ETL	Matériau de transport des électrons
N _t	Densité de défauts.
ND	Concentration de dopage (donneur).
I _{cc}	Courant de court-circuit.
V _{oc}	Tension de circuit ouvert
FF	Facteur de forme
PCE	Rendement de conversion de la cellule solaire. Solar Cell
SCAPS	Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension
Pb	Plomb
CH ₃ NH ₃ PbI ₃	Pérovskite à base de Pb.
SnO ₂ :F	Oxyde d'étain
TiO ₂	Oxyde de titane.
Cu ₂ O	Oxyde de cuivre.
J _{sc}	Densité du courant de court-circuit.
PV	Photovoltaïque.

Liste des Symboles et abréviations

Sn	Etain
PSC	Efficacité de conversion de puissance
Pm	Puissance maximale.
QE	Rendement quantique de la cellule.
R _s	La résistance série.
R _p	Résistance shunt
I _{ph}	Photo-courant.
CaTiO ₃	Titanate de calcium
ABX ₃	Structure d'un cristal de pérovskite générique
CH ₃ NH ₃ I ⁺ = MA	Methylammonium
HC[NH ₂] ²⁺ =FA	Formamidinium
CsPbBr ₃	Halogénéiorganique
L _D	Longueur de diffusion
D	Coefficient de diffusion
τ	Temps de vie des porteurs
Au	Or
Al	Aluminium
Ag	Argent
HOMO	Acronyme de la plus haute orbitale moléculaire occupée
φ	Potentiel
q	Charge élémentaire
ε	Permittivité
n	Densité des électrons libres
p	Densité de trous libres

Liste des Symboles et abréviations

N_D	Densité de dopage de type donneur
N_A	Densité de dopage de type accepteur
p_t	Densité des piégé à trous
n_t	Densité des piégé à électrons
G_n	Taux de génération optique d'électrons
G_p	Taux de génération optique des trous
R_n	Taux de recombinaison d'électrons
R_p	Taux de recombinaison des trous.
$J_n . J_p$	Densité de courant d'électrons et des trous
CdS	Sulfure de Cadmium
μ_n	Mobilité des électrons
μ_p	Mobilité des trous.
D_n	Coefficient de diffusion des électrons
D_p	Coefficient de diffusion des trous
K_B	Constante de Boltzmann
T	Température.
L_n	Longueur de diffusion de l'électron.
L_p	Longueur de diffusion de trou
N_C	Densité effective d'état de la bande de conduction
N_V	Densité effective d'état de la bande de valence
SRH	Shockley-Read-Hall
γ	Coefficient de recombinaison
n_i	Concentration intrinsèque
n_0	Concentration des électrons à l'équilibre.

Liste des Symboles et abréviations

p_0	Concentration des trous à l'équilibre
α	Coefficient d'absorption
Φ_m	Travail de sortie
χ	Affinité électronique
J_{ph}	Densité de courant générée par la lumière
E_g	Energie de gap.
ν	Fréquence
h	Constant de Planck
λ	Longitude d'onde
V_m	Tension maximale
I_m	Courant maximal
P_{in}	Puissance lumineuse incidente w
ψ	Potentiel électrostatique
$\epsilon_0 \cdot \epsilon_r$	Permittivité du semi-conducteur
<i>GaAs</i>	Arséniure de Gallium
ETM	Matériau de transport d'électrons
HTM	Matériau de transport de trous
PVK	Pérovskite

Table des matières

Table de matières

Table de matières

Dédicaces

Remerciements

Liste des figures I

Liste des Tableaux..... IV

Liste des Symboles et abréviations V

Introduction Générale 1

Chapitre I : Généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires

I.1 Introduction 4

I.2 Historique 4

I. 3. Définition d'une cellule solaire PV ou l'effet photovoltaïque 5

I.4 Conversion photovoltaïque 6

 I.4.1 Principe de fonctionnement 7

 I.5 Schéma électrique équivalent 8

I.6 Caractéristiques électriques et paramètres de la cellule photovoltaïque 9

I.7 Types de cellules photovoltaïques 11

 I.7.1 Première génération 12

 I.7.1.1. Cellules cristallines 12

 a- Cellules en silicium poly cristallin 12

 b- Cellules en silicium monocristallin 12

 I.7.2 Deuxième génération 13

 I.7.2.1 Cellules à base de couches minces 13

 a- Cellules en silicium amorphe 13

 b- Cellules CIGS 14

 c- Cellules CdTe 15

 d- Les cellules à base de CZTSSe 15

 I.7.3 Troisième génération 15

 I.7.3.1 cellules à jonction 15

 I.7.3.2 Cellules organique 18

 I.7.3.3 Cellules solaires sensibilisées par colorant (CSSC) 18

 I.7.3. 4 Cellules des pérovskites 19

Table de matières

I.8 Avantages et inconvénients d'un système photovoltaïque	21
I.9 Conclusion.....	21
Chapitre II : Cellule solaire pérovskites	
II.1.Introduction	24
II.2 Le matériau pérovskite	24
II.3 structure de la pérovskite	24
II.3.1 Structure cristallographique de la pérovskite	24
II.4 Propriétés des matériaux pérovskites	26
II.4 .1 Propriétés électriques	26
II.4 .2 Propriétés optique	27
II.5. Matériau pérovskite à base de plomb(Pb) :	28
II.6. Cellules solaires pérovskites	29
II .7. Architectures des cellules à base des pérovskites	30
II.8. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskite	31
II.9.Extraction de la charge	32
II.10. Matériaux de transport	33
II.10.1. Matériaux de transport d'électron	33
II.10.2.Matériaux de transport de trous	34
II.11. Comparaison des performances de quelques cellules a perovskites	34
1.12. Influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement Photovoltaïque	36
1.12.1. Influence de la température	36
1.12.2 Influence du rayonnement	36
II.13. Conclusion	36
Chapitre III : Simulation et discussion des résultats	
III.1 Introduction.....	41
III.2. Equations de base	41
III.3. Logiciels de simulation les plus utilisés	43
III.4. Logiciel SCAPS	43
III.4.1. Utilisation du SCAPS	43
III.4.2 Fenêtre d'exécution (Action Panel)	44
III.4.3 Définir le point de fonctionnement	45
III.4.4 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)	46
a) Défaut (Defects)	47

Table de matières

b) Mécanisme de recombinaison	48
c) Absorption	49
d) Contact	50
e) Théorie de fonctionnement	51
III.4.5 Fenêtre de résultat	52
a) Panneau I-V (I-V panel)	53
b) Panneau QE (QE-panel).....	54
III.4.6 Avantages et inconvénients du SCAPS	55
III. 5. Simulation de la cellule pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$)	56
III.5.1 Structure de la cellule	56
III.5.2 Caractéristiques photovoltaïques utilisées pour la modélisation de la PSC	57
III.6 Résultats et discussions	58
III.6.1 Caractéristiques électriques de la cellule solaire	58
III.6.2 Influence de l'épaisseur de la couche absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les performances électriques	60
III.6.3 Influence du dopage (Nd) de la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$)	63
III.6.4 Influence de la concentration de défauts N_t de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE.....	65
III.6.5 Influence de la température T (K) sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE.....	68
III.6.6 Courbe des caractéristiques I-V optimisée.....	70
III.7 .Conclusion	71
Conclusion Générale	73
Résumé	75

Introduction Générale

Introduction Générale

Introduction Générale

Les énergies renouvelables sont une réalité quotidienne au service du développement et de l'environnement. Dans ce cadre, la disponibilité de l'énergie (électrique, thermique,...) représente un des problèmes les plus urgents que rencontrent plusieurs pays en voie de développement. La plus grande partie de la population touchée par ce problème se retrouve en milieu rural, éloignée des grands réseaux de distribution d'électricité dont l'extension s'avère trop coûteuse pour les territoires isolés, peu peuplés ou à accès difficiles.

Pour tenter de résoudre cette crise, l'utilisation de systèmes solaire utilisant l'énergie solaire est reconnue comme étant l'un des moyens efficaces de prévention active pour irriguer des terrains agricoles, l'adduction en eau potable des populations, chauffage d'eau, en termes d'autonomie, de fiabilité et de performance. Les systèmes solaires photovoltaïques (PV) ne contiennent aucune pièce mobile. Ils sont fiables, requièrent peu d'entretien, sont silencieux et ne produisent aucune émission de polluants.

La conversion de la lumière en électricité, appelée effet photovoltaïque, a été découverte par Alexandre Edmont Becquerel en 1839 [1]. Les cellules solaires photovoltaïques sont des semi-conducteurs capables de convertir directement la lumière en électricité. Le développement de la technologie des modules solaires a contribué efficacement dans la diffusion de l'exploitation des systèmes PV. Ce sont des systèmes modulaires : les éléments de base (modules de cellules solaires) sont vendus dans un vaste éventail de capacités d'alimentation électrique qui vont d'une fraction de watt (par exemple les montres et les calculettes à pile solaire) à plus de 300 *Watts*. L'interconnexion des modules permet d'obtenir la puissance qu'exige l'application. Certaines centrales photovoltaïques de démonstration produisent une puissance allant jusqu'à plusieurs mégawatts, bien que la plupart des systèmes PV installés soient de dimension beaucoup plus modeste [2].

Ces dernières années, la demande de ressources énergétiques durables et propres a conduit à une croissance intense du développement de cellules photovoltaïques. Pour exploiter au mieux l'énergie solaire, la technologie photovoltaïque doit répondre à trois facteurs importants, l'efficacité, la stabilité et le faible coût.

Actuellement les cellules solaires à pérovskite de la troisième génération sont les plus prometteuses de toutes les autres générations, montrant un développement rapide et ouvrant de nouvelles directions dans le domaine photovoltaïque. Les pérovskites sont des matériaux

Introduction Générale

décrits par la formule ABX_3 , présentant des propriétés électriques, structurales et optiques très avantageuses. La pérovskite en tant qu'absorbteur de lumière dans les cellules solaires a permis en peu de temps d'obtenir des améliorations significatives de l'efficacité de conversion de puissance (PCE). Depuis le premier essai d'une cellule solaire à base de pérovskite en 2009, le PCE de ces cellules solaires s'est rapidement amélioré de 3,8% à 25,2% [3].

La conception et la simulation de ces couches minces fait actuellement l'objet d'une attention croissante, vu l'importance qu'apporte pour le domaine de photovoltaïque couche mince. En effet, l'utilisation d'outils de simulation informatique joue un rôle essentiel dans la conception, le développement et l'optimisation de dispositifs électroniques et physiques. Grâce à ces méthodes, nous pouvons réduire à la fois le temps et les coûts.

Ce travail de fin d'études a pour objectif principal d'améliorer le rendement de la cellule solaire à base de pérovskite en utilisant un programme de simulation numérique unidimensionnel. En effet, il s'agit d'étudier le mécanisme et l'influence de plusieurs paramètres sur les performances de la cellule solaire tels que l'épaisseur de pérovskite, la densité de défauts, et le dopage...etc.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante :

Après une introduction générale, le premier chapitre présente des généralités sur la conversion photovoltaïque, le principe de fonctionnement des cellules solaires et le développement technologique des différentes générations.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les propriétés fondamentales du composé Pérovskite. Nous décrirons les propriétés optiques et électriques de ces matériaux. Dans ce chapitre nous allons aussi présenter la cellule solaire à base de pérovskite en exposant sa structure et son principe de fonctionnement ; puis on étudiera l'influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement Photovoltaïque.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le logiciel SCAPS utilisé dans notre étude de simulation de la cellule solaire pérovskite à base de Pb. Dans ce chapitre nous allons essayer à travers des discussions et des interprétations des résultats de comprendre le rôle de différents facteurs agissant sur les performances des cellules.

Enfin nous clôturerons le travail par une conclusion générale ainsi que des perspectives de ce travail.

Introduction Générale

Bibliographie de l'introduction générale

- [1] Office fédéral des questions conjoncturelles Service de la technologie, Centrales photovoltaïques : Guide pour le dimensionnement et la réalisation de projets, A l'usage des bureaux d'ingénieurs, Coordination romande du programme d'action « Construction et énergie » EPFL-LESO, Case postale 12, 1015 Lausanne, Juin 2006.
- [2] Direction des ressources en électricité, Les systèmes photovoltaïques Guide de l'acheteur, Canada, 2003, N°de catalogue : M92-28/2001F, ISBN : 0-662-86306-2.
- [3] Kaouala Abdelli , Lynda Abdelli “design of perovskite solar cells “,., Mémoire de Master, Université Mohammed Khider à Biskra 2019/2020.

Chapitre I

Généralités sur le

photovoltaïque et les cellules

solaires

I.1 Introduction

L'augmentation du coût des énergies classiques d'une part, et la limitation de leurs ressources d'autre part, font que l'énergie photovoltaïque devient de plus en plus une solution parmi les options énergétiques prometteuses avec des avantages comme l'abondance, l'absence de toute pollution et la disponibilité en plus ou moins grandes quantités en tout point du globe terrestre. Actuellement, on assiste à un regain d'intérêt pour les installations utilisant l'énergie solaire, surtout pour les applications sur des sites isolés.

I.2 Historique

Considéré dans l'Antiquité comme un dieu, le soleil est aujourd'hui réduit au statut d'énergie, une énergie qu'il nous faut apprendre à capter, transformer, à stocker...La conversion de la lumière en électricité, appelé effet photovoltaïque, a été découverte en 1839 par un physicien français, Alexandre Edmond Becquerel (en irradiant une électrode en argent dans un électrolyte, il obtint une tension électrique).

En 1875, le physicien Werner Von Siemens expose devant l'Académie des Sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. La première cellule solaire fonctionnelle fut construite en 1883 par Charles Fritts. Mais le rendement de sa cellule, étant très faible, empêcha à l'époque son utilisation. Seulement, le phénomène est encore considéré comme anecdotique jusqu'à la Seconde Guerre Mondiale. Les premières vraies cellules sont apparues en 1930 avec les cellules à oxyde cuivreux puis au sélénium.

Les recherches après la guerre ont permis d'améliorer leurs performances et leur taille et ce n'est qu'en 1954 que trois chercheurs américains, Chapin, Pearson et Prince mettent au point une cellule photovoltaïque au silicium dans les laboratoires de la compagnie Bell téléphone. On entrevoit alors la possibilité de fournir de l'électricité grâce à ces cellules. Au même moment, l'industrie spatiale naissante, cherche de nouvelles solutions (autre que le procédé nucléaire) pour alimenter ses satellites.

Le premier satellite scientifique Américain l'Explorer-6 lancé en aout 1959 il est équipé de panneaux solaires, il a une masse de 40 Kg et dispose d'une caméra sommaire pour voir la terre. En 1958, les premiers satellites avec des panneaux solaires sont envoyés dans l'espace et au même moment une cellule avec un rendement de 9% est mise au point. Mais il faudra attendre les années 70 pour que les gouvernements et les industries investissent

dans la technologie photovoltaïque. En effet des efforts ont été faits pour réduire les coûts de sorte que l'énergie photovoltaïque soit également utilisable pour des applications terrestres. Et en 1973, la première maison alimentée par des cellules photovoltaïques est construite à l'université de Delaware.

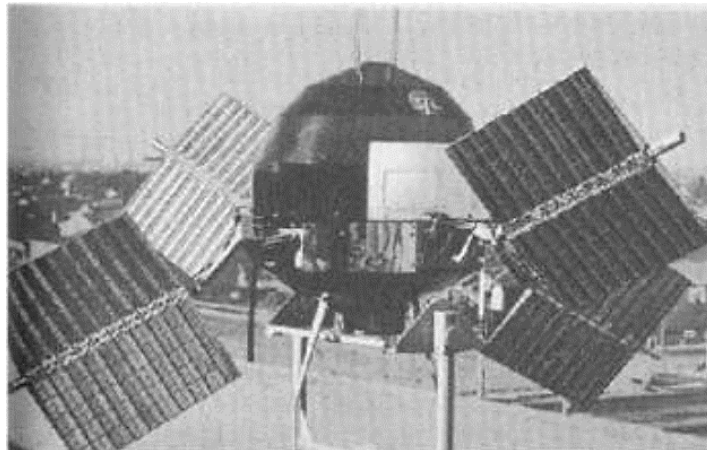


Figure I.1: premiers satellites avec panneaux solaires [1]

Ainsi au cours des années 80, la technologie photovoltaïque terrestre a progressé régulièrement par la mise en place de plusieurs centrales de quelques mégawatts. La croissance de l'industrie fut spectaculaire, et notamment à travers de nombreux produits de faible puissance fonctionnant grâce à l'énergie solaire, tel que : montres, calculatrices, balises radio et météorologiques, pompes et réfrigérateurs solaires. En 1983 la première voiture, alimentée par énergie photovoltaïque, parcourt une distance de 4000 km en Australie. En 1995, des programmes de toits photovoltaïques raccordés au réseau ont été lancés, au Japon et en Allemagne, et se généralisent depuis 2001. Bien que le prix se soit peu stabilisé, la quantité de modules photovoltaïques expédiés chaque année ne cesse d'augmenter [1].

I. 3 Définition d'une cellule solaire PV ou l'effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière. [2]

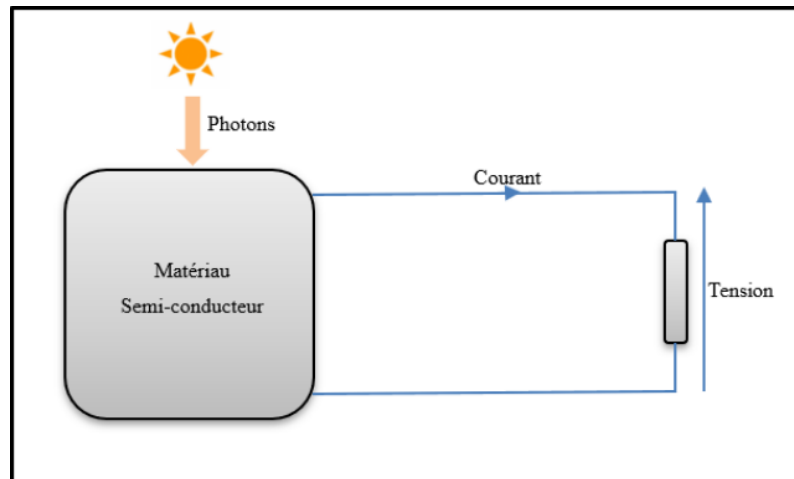


Figure I.2 : Illustration de l'effet photovoltaïque [2]

I.4 Conversion photovoltaïque

La conversion d'une énergie solaire (énergie du photon) en énergie électrique est appelée l'effet photovoltaïque. Ce dernier a été découvert par Antoine Becquerel en 1839 qui mit en évidence l'apparition d'une tension aux bornes de deux électrodes immergées dans une solution électrolytique, lorsque celle-ci était exposée à la lumière naturelle [3].

La recherche dans le domaine de l'énergie solaire photovoltaïque est appelée à surmonter le défi suivant: améliorer le rendement de conversion des cellules solaires tout en diminuant le coût de production de l'énergie propre pour assurer une utilisation très large et la rendre accessible à tous [4].

Le développement de l'énergie photovoltaïque passe obligatoirement par une recherche accentuée pour résoudre cette énigme. Trois axes essentiels doivent être optimisés séparément par un choix déterminant :

- le matériau;
- la technique de croissance ;
- la structure.

En considérant le coût de fabrication, la cellule doit être conçue au moyen de couches minces assurant un gain énorme de matière, ce qui revient à choisir la filière des matériaux photovoltaïques à grand pouvoir d'absorption [5].

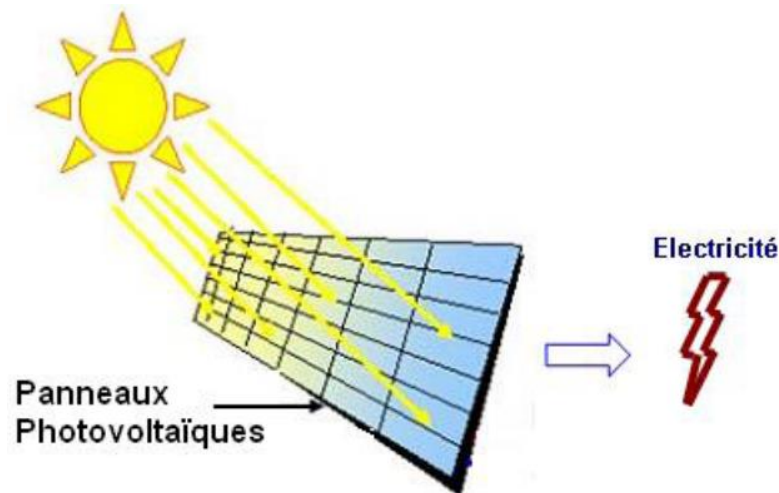


Figure I.3 : conversion de l'énergie solaire en électricité [5]

I.4.1 Principe de fonctionnement

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière [6].

Ce matériau comporte 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 matériau n diffusent dans le matériau p. 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. Une jonction (dite p-n) a été formée. 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 aussi un trou capable de se mouvoir, 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 : le courant électrique circule (figure I-4).

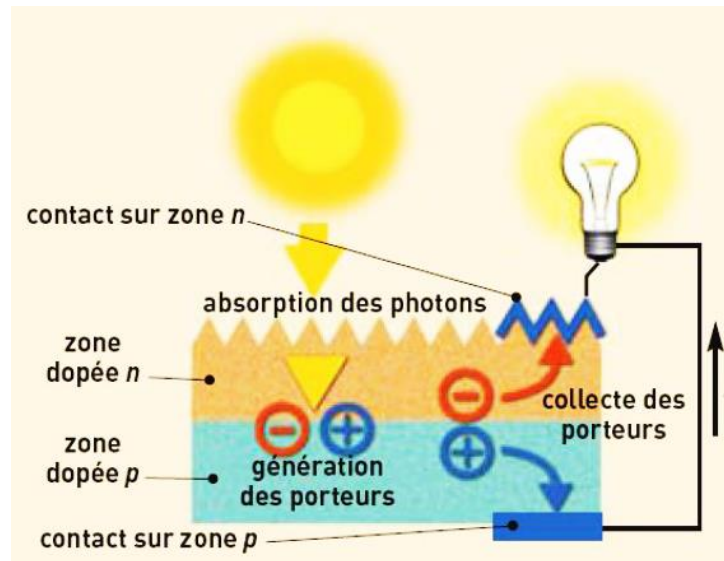


Figure I.4: Principe de la conversion photovoltaïque

Il convient donc de noter que la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si trois phénomènes physiques de base ont lieu quasi simultanément :

- L'absorption d'un maximum de photons possible.
- La transformation de l'énergie ainsi absorbée en charges électriques libres.
- La collecte, sans perte, de ces derniers vers un circuit électrique extérieur.

Le premier phénomène est l'absorption optique de photons par un matériau semi-conducteur approprié dans la partie la plus intense du spectre solaire [7].

Si l'on prend un semi-conducteur à grand gap, l'absorption sera limitée aux petites longueurs d'onde, dans l'ultra-violet, alors que la partie la plus importante du spectre solaire se situe dans le visible et le proche infra-rouge. Pour absorber un maximum de photons, il faudrait donc un semi-conducteur possédant un petit gap. Mais alors la tension de sortie est proportionnelle au gap, donc la puissance de la cellule ($P = IV$) seraient trop faibles pour exploiter cette pile. La valeur optimale du gap du matériau utilisé comme absorbeur se situe vers 1.5 eV. Le second concerne la séparation rapide des électrons et des trous avant leur recombinaison. Le troisième porte sur l'entraînement des électrons et des trous vers les électrodes collectrices (collecte des porteurs).

I.5 Schéma électrique équivalent

Son schéma équivalent est représenté par une diode idéale montée en parallèle avec une source de courant (figure 5). Les résistances série R_s et shunt R_{sh} modélisent les pertes engendrées par la résistivité des couches et la présence de courants de fuite [8].

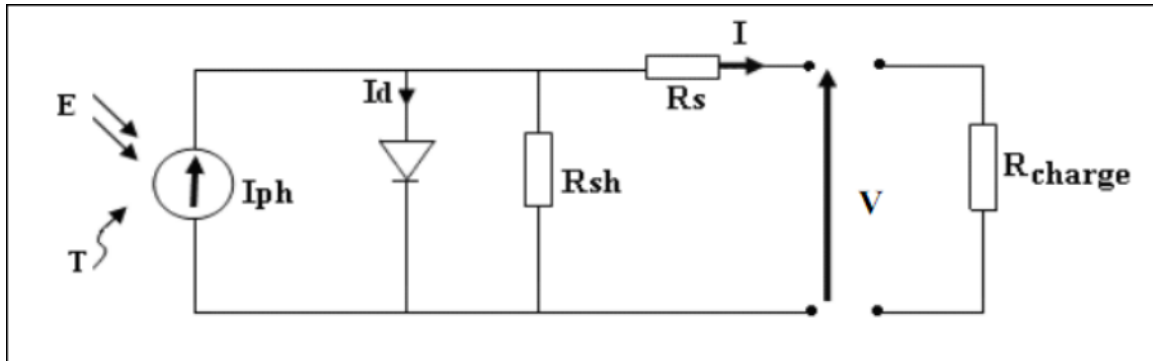


Figure I. 5: Schéma électrique réel d'une cellule solaire [8]

I.6 Caractéristiques électriques et paramètres de la cellule photovoltaïque

Afin d'obtenir un générateur électrique autonome, il faut que la diode soit polarisée en direct. L'effet photovoltaïque est à la fois une création d'un photocourant mais aussi d'une tension qui auto-polarise la diode en direct : on a une génération d'une puissance électrique. En effet, en circuit ouvert, la photogénération de porteurs entraîne une augmentation du nombre d'électrons du côté n de la jonction et de trous du côté p. La séparation de ces charges induit un champ électrique opposé à celui déjà existant à la jonction. Un nouvel équilibre est obtenu pour lequel une tension existe entre les terminaux du circuit extérieur. C'est la tension de circuit ouvert V_{co} , pour laquelle le courant photogénéré et le courant d'obscurité se compensent exactement ($I=0$). C'est la tension maximale fournie par la cellule solaire, permettant d'évaluer le nombre de recombinaisons dans la structure (plus V_{co} est faible, plus il y a de recombinaisons). V_{co} représente la tension en circuit ouvert c'est la tension aux bornes de la cellule en absence de tout courant, sans circuit de charge pour un éclairement fixe. Cette grandeur est donnée par la relation :

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \log \log \left(1 + \frac{I_{cc}}{I_o} \right) \quad (I.1)$$

Un autre paramètre important de la cellule est le courant de court-circuit I_{cc} . C'est le courant maximum que l'on peut extraire de la structure. Il correspond idéalement au courant photogénéré.

Ce courant dépend fortement du taux de génération optique G et de la longueur de diffusion L_D des porteurs (et donc des recombinaisons). Cette grandeur est donnée par l'équation analytique :

$$I_{cc} = I_{ph} - I_0 \exp \left[\left(\frac{qR_s I_{cc}}{nKT} \right) - 1 \right] - \frac{R_s I_{cc}}{R_p} \quad (I.2)$$

La caractéristique $I(V)$ d'une cellule solaire est la superposition d'un courant de diode sous obscurité et d'un courant photogénéré. L'éclairement de la structure a pour effet de déplacer la courbe $I(V)$ de la diode vers les courants inverses. Puisque la photodiode est considérée comme un générateur, la convention est d'inverser l'axe des courants, comme illustré par la Figure I.6. Notons que la cellule photovoltaïque n'impose ni le courant ni la tension de fonctionnement, seule la courbe $I(V)$ est fixée. C'est la valeur de l'impédance de la charge aux bornes de la cellule qui va imposer le point de fonctionnement. Il est donc essentiel de choisir une charge telle que la puissance délivrée soit maximale. Le maximum de puissance disponible est défini par la tension V_m et le courant I_m .

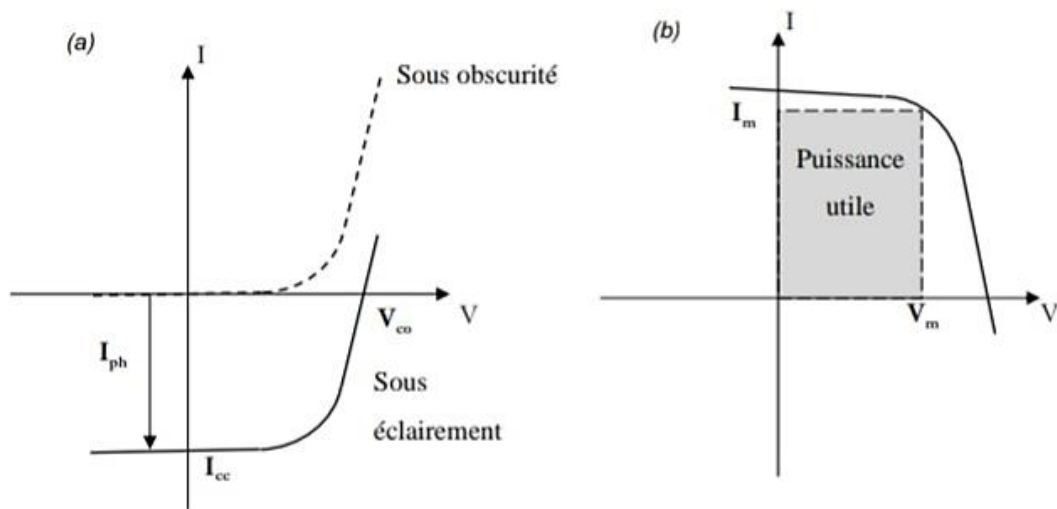


Figure I.6 :(a) caractéristique courant-tension de la cellule photovoltaïque éclairage et (b)représentation conventionnelle de la courbe $I(V)$ [9]

La qualité électrique de la cellule est déterminée par le facteur de forme FF donné par l'équation suivante :

$$FF = \frac{I_m V_m}{I_{cc} V_m} \quad (I.3)$$

Le point de fonctionnement de la cellule sur la courbe $I(V)$ est déterminé par l'impédance de la charge. Il est donc important de pouvoir travailler avec les valeurs V_m et I_m afin d'utiliser la puissance maximale.

Le rendement η (ou PCE) est un autre paramètre important pour comparer les performances des photopiles. Il est défini par le rapport de la puissance fournie sur la puissance incidente P_{in} :

$$\eta = \frac{V_m I_m}{P_{in}} = \frac{FF \cdot V_{oc} I_{sc}}{P_{in}} \quad (I.4)$$

Pour comparer de manière objective le rendement des cellules solaires, la puissance incidente doit être prise comme identique, par convention sous AM1.5 et à 25°C. Afin de comparer la production photovoltaïque avec les autres sources d'énergie, la littérature utilise souvent l'unité Watt crête (W_C ou W_p on anglais *peak Watt*). Elle correspond à la puissance nominale d'une cellule ou d'un module photovoltaïque sous des conditions d'ensoleillement standard (AM1.5) [9].

I.7 Types de cellules photovoltaïques

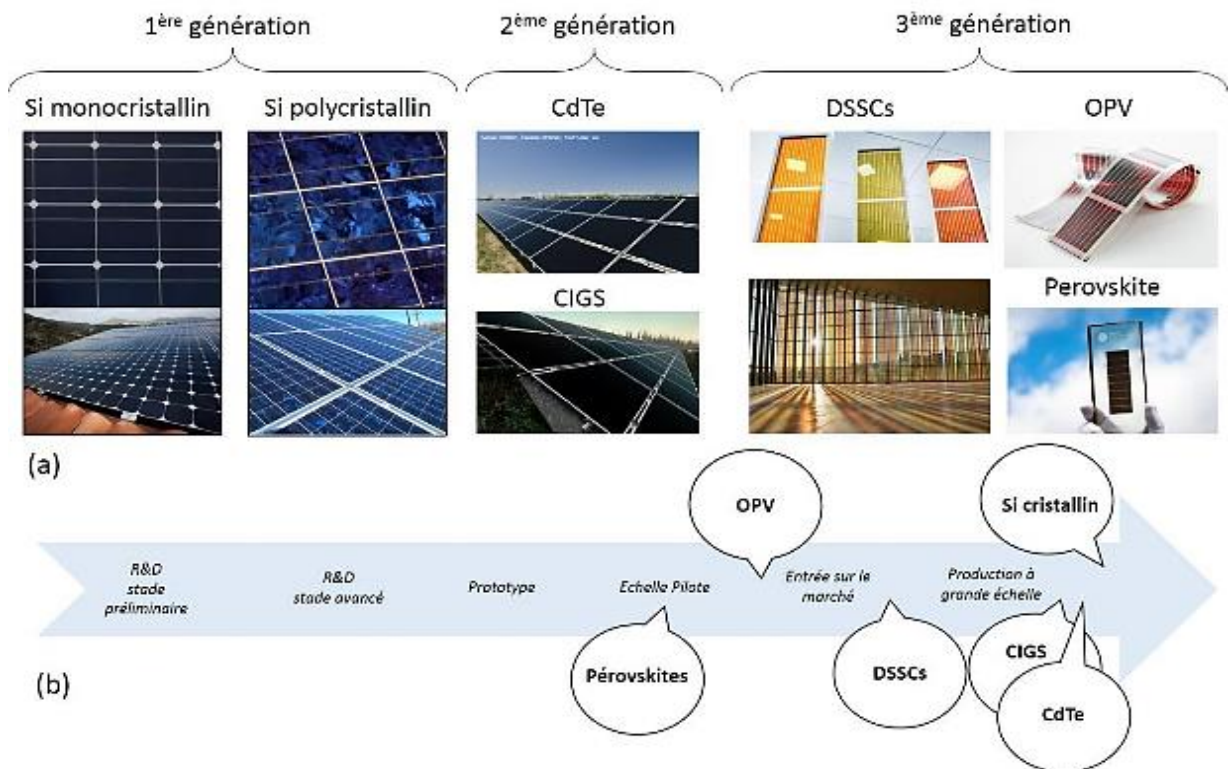


Figure I.7 : (a) Exemples de technologies photovoltaïques (b) Etat du développement pour ces technologies photovoltaïques [10]

I.7.1 Première génération

I.7.1.1. Cellules cristallines

Ces cellules, généralement en silicium, ne comprennent qu'une seule jonction p-n. On distingue deux types de cellules cristallines :

a- Cellules en silicium monocristallin

Les cellules au silicium monocristallin offrent le meilleur rendement parmi les panneaux solaires disponibles dans le commerce : entre 13 à 15%. Il faudra donc moins de cellules pour atteindre la puissance désirée, mais comme le silicium monocristallin est aussi le plus cher, son seul avantage est finalement d'utiliser une surface réduite : il faut environ 7m² pour obtenir 1 kilo-Watt-crête (kWc) (Figure I.9) [11].



Figure I.8 : Cellule photovoltaïque à base de silicium monocristallin [12].

b- Cellules en silicium poly cristallin

Les techniques de production du silicium poly cristallin sont beaucoup plus simples que celles du silicium monocristallin, et donc bien moins chères à mettre en œuvre. Néanmoins, la qualité de ce matériau est moins bonne à cause de la présence de joints de grains qui introduisent des zones fortement recombinantes et un taux assez élevé des Impuretés métalliques et autres. Ces joints sont constitués par les surfaces adjacentes des Grains d'orientations cristallographiques différentes et contiennent beaucoup de liaisons pendantes. Ils ont pour effet de réduire la durée de vie globale des porteurs.

En outre, ces joints de gains bloquent le flux de porteurs et ils constituent une voie éventuelle d'un courant de fuite à travers la jonction. Ce genre de cellule est également bleu, mais pas uniforme, on distingue des motifs créés par les différents cristaux [13].

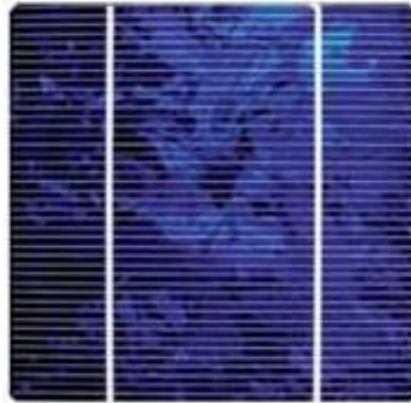


Figure I.9: cellule en silicium poly cristallin [13]

I.7.2 Deuxième génération

I.7.2.1 Cellules à base de couches minces

a- Cellules en silicium amorphe

Ses atomes sont donc agencés sans réelle organisation, ce qui leur permet de mieux capter la lumière (par rapport au silicium cristallin).

Problème : les charges générées ont plus de difficulté pour se déplacer à cause de la désorganisation de la matière, ce qui se traduit par un mauvais coefficient de conversion, par conséquent, leur rendement est faible. La désorganisation atomique a d'autres conséquences. Les électrons de valence des atomes de Si ne forment pas toujours des liaisons covalentes au sein du semi-conducteur. Il apparaît alors des liaisons pendantes qui peuvent dénaturer les propriétés électroniques du matériau. Pour limiter ce phénomène, les couches de silicium sont régulièrement passivées avec de l'hydrogène (a-Si:H). Des atomes d'hydrogène établissent des liaisons avec les électrons restés libres, et réduisent ainsi le nombre de liaisons pendantes [14].



Figure I.10 : cellule photovoltaïque au silicium amorphe[14]

b- Cellules CIGS

Les cellules CIGS renferment un absorbeur composé de cuivre, de gallium, d'indium et de sélénium. Cette couche de 1 à 2,5 μm d'épaisseur étant dopée p, elle doit être recouverte d'un matériau de type n, par exemple du sulfure de cadmium (CdS). Tiens donc, du cadmium qui pose un problème à l'environnement à cause de la toxicité de Cd, mais il est le plus utilisé avec des épaisseurs de l'ordre de 0.04 à 0.07 μm . Puisqu'il y a deux semi-conducteurs différents, les cellules CIGS sont donc à base des hétérojonctions. Comme son homologue au silicium amorphe, la cellule CIGS résiste mieux à l'échauffement que les cellules au silicium cristallin, mais moins bien que les cellules au CdTe. En plus, elle capte un peu mieux la lumière en début et en fin de journée (quelques pour cent) [14].



Figure I.11: Cellules de CIGS [15]

c- Cellules CdTe

Le faible rendement des cellules à base de silicium amorphe ont motivé les scientifiques à chercher des alternatives. Le matériau le plus prometteur est le tellure de cadmium (CdTe) qui offre la possibilité de produire des modules à des coûts plus faibles avec un rendement de 10%, et un avantage qui réside dans la forte absorption du tellure de cadmium. Cependant la toxicité du matériau freine le développement de cette technologie [14].



Figure I.12: Cellules de CdTe [16].

d- Les cellules à base de CZTSSe

$\text{LeCu}_2\text{Zn Sn (SxSe}_{1-x})_4$ communément appelé (CZTSSe) apparaît comme un matériau très attractif et à fort potentiel, dans les cellules solaires à base couches minces, du fait qu'il est fabriqué à partir de matériaux non toxiques, des matières premières abondantes en terres et à faible coût. Ce matériau présente un potentiel de rendement es travaux menés pour développer ces matériaux quaternaires ont pu atteindre un rendement jusqu'au 12.6% [17].

I.7.3 Troisième génération

I.7.3.1 cellules à jonction

a- Cellules tandem

Les cellules tandem sont obtenues à partir de deux cellules simples empilées l'une sur l'autre, par exemple, une couche mince de silicium amorphe empilée sur une couche silicium cristallin. Ce tandem est censé optimiser le rendement comparé à celui produit par des cellules simples seules et ce qu'elles que soient leur caractéristiques, amorphes, cristallines ou microcristallines. Il s'agit de l'empilement de deux cellules l'une sur l'autre. Ces deux cellules sont mises en série grâce à une couche de recombinaison des porteurs de charges.

La tension de circuit ouvert du dispositif est donc la somme des tensions de circuit ouvert des cellules si elles étaient prises seules, et le courant de court-circuit est le plus faible des deux cellules. Cette structure offre l'avantage de pouvoir utiliser deux matériaux dont les bandes interdites (Spectres d'absorption) diffèrent. Ce dispositif est capable d'absorber la somme des deux spectres d'absorption. Les couches actives peuvent être composées de mélanges polymère/fullerène ou de petites molécules. On peut par ailleurs utiliser différents types de matériaux dans les deux couches, ce qui donne une grande latitude quant à la fabrication de la cellule.

La première des cellules tandem était par exemple composée d'une couche de petites molécules évaporées pour la première cellule et d'une couche polymère déposée par voie humide pour la seconde. Par la suite, des cellules tandem utilisant différents matériaux ont été testées, jusqu'à atteindre des rendements de 6,7% grâce à l'utilisation d'une couche de recombinaison en TiO_x et de deux polymères dont les bandes interdites sont différentes [18].

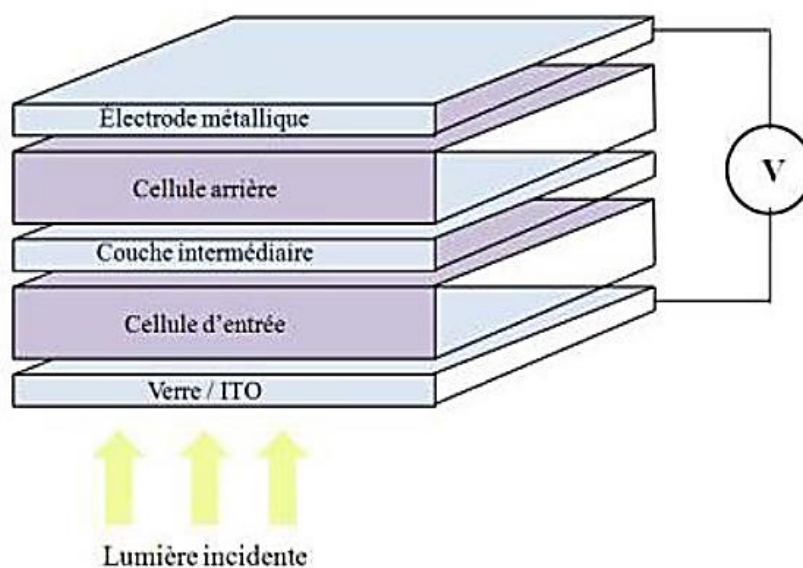


Figure I.13: Schéma d'une structure tandem [18].

b- Cellules multi-jonctions

Les cellules multi-jonction sont constituées à partir de différentes couches minces, ce qui optimise le travail d'absorption des calories solaires, puisées plus largement, et ce qui permet un meilleur rendement et une plus grande production.

Ce type de cellules n'est pas vendu à des fins commerciales et reste utilisée dans le domaine spatial. Et pour cause, les techniques d'exploitation sont très complexes. On parle de jet moléculaire ou d'épitaixie. Le fonctionnement de ces cellules réside sur le même principe que celui des cellules Tandem. Les cellules multi-jonction sont composées d'un grand nombre de semi-conducteurs (GaAs, Ge, $GaInP_2$...) possédant chacun un spectre limité.

En choisissant des matériaux dont les longueurs d'onde limites sont les plus proches possibles les unes des autres, l'ensemble des cellules absorbe un spectre, le plus complet possible donnant à l'ensemble un rendement très élevé pouvant atteindre 50%. Le gros défaut de ces cellules est leur coût de fabrication, car aucune production industrielle n'a encore pu être mise en place.

Ces cellules limitent les pertes d'énergie car il suffit d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux, en empilant des jonctions possédant des gaps décroissants, (Figure I.14). Ainsi il est possible d'exploiter le spectre solaire dans sa quasi-totalité avec des rendements de conversion très importants [19].

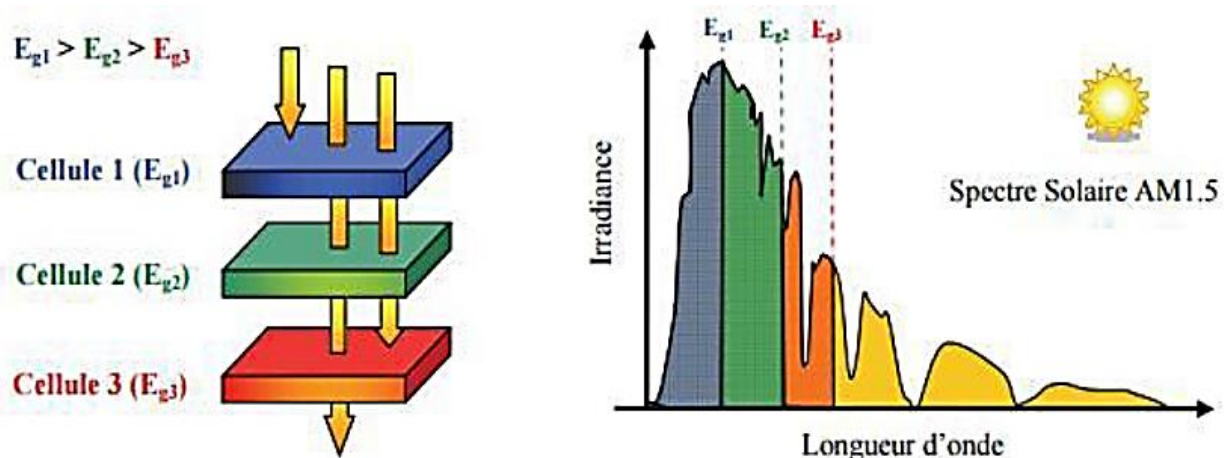


Figure I.14: Principe de la cellule à hétérojonction [19].

I.7.3.2 Cellules organique

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable. L'intérêt de ces cellules vient aussi du fait que, contrairement aux cellules à base de matériaux inorganiques, elles offrent beaucoup d'avantages : la possibilité d'être déposée en grande surface, la facilité de fabrication et de manipulation, la possibilité de réaliser ces cellules sur des substrats flexibles, et grâce à des coûts de fabrication et de matériaux plus faibles, ces cellules devraient dans l'ensemble revenir beaucoup moins chères que leurs concurrentes. Elles possèdent en revanche à l'heure actuelle des durées de vie jugées inférieures à celles des cellules inorganiques, et des rendements de conversion plus faibles [20].

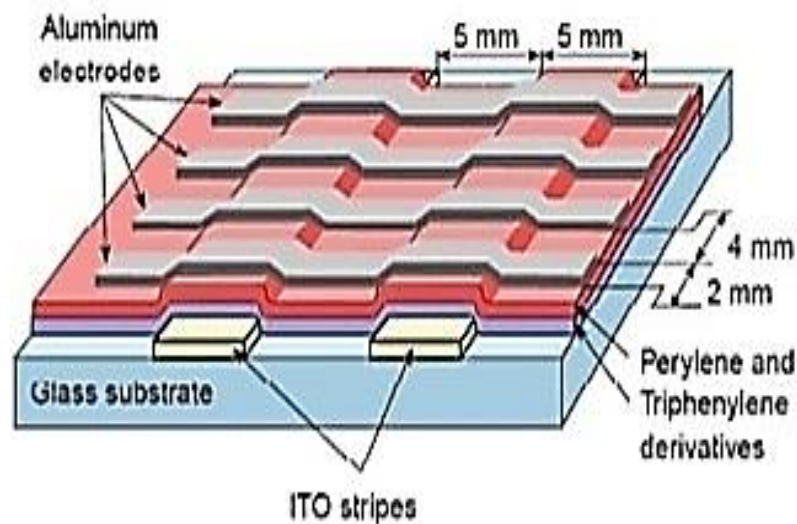


Figure I. 15 : schéma de principe d'une cellule organique[20]

I.7.3.3 Cellules solaires sensibilisées par colorant (CSSC)

Inspiré par la photosynthèse, l'équipe de Michael Grätzel a développé au début des années 90 des cellules solaires 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 cm^2 , réalisé par la société Sharp [21].



Figure I.16: Cellules solaires à colorant [22]

I.7.3. 4 Cellules des pérovskites

C'est un nouveau type des cellules photovoltaïques, elle n'est pas encore sortie des laboratoires. Cette filière est considérée comme étant la technologie la plus prometteuse des systèmes photovoltaïques solaires récents. Les cellules solaires en pérovskite présentent aujourd'hui une alternative attrayante aux cellules en silicium qui dominent aujourd'hui le marché.

Par comparaison entre le silicium et les pérovskites, le premier a besoin de 30 ans pour atteindre le record 25,7%, mais les pérovskites ont besoin que de 6 ans pour atteindre un rendement de 20% de plus les pérovskites ont une capacité d'absorption des photons 10 fois supérieure au silicium et une bonne séparation des charges électriques et leur mobilité. Malgré ces performances les cellules a pérovskites ne peuvent pas concurrencer les cellules à base de silicium car à partir de 40°C elles commencent à se dégradées, et aussi elles deviennent instable lorsque l'humidité dépasse 35%. Donc l'intérêt des chercheurs n'est pas toujours à trouver des meilleurs rendements, mais ils cherchent aussi à améliorer la stabilité de ces cellules [23].

La figure (I.18) montre les rendements record de cellules toutes filières confondues. Malgré que la filière des pérovskites soit l'une des filières les plus récentes, on observe une forte progression du rendement des cellules photovoltaïques pérovskites depuis 2013.

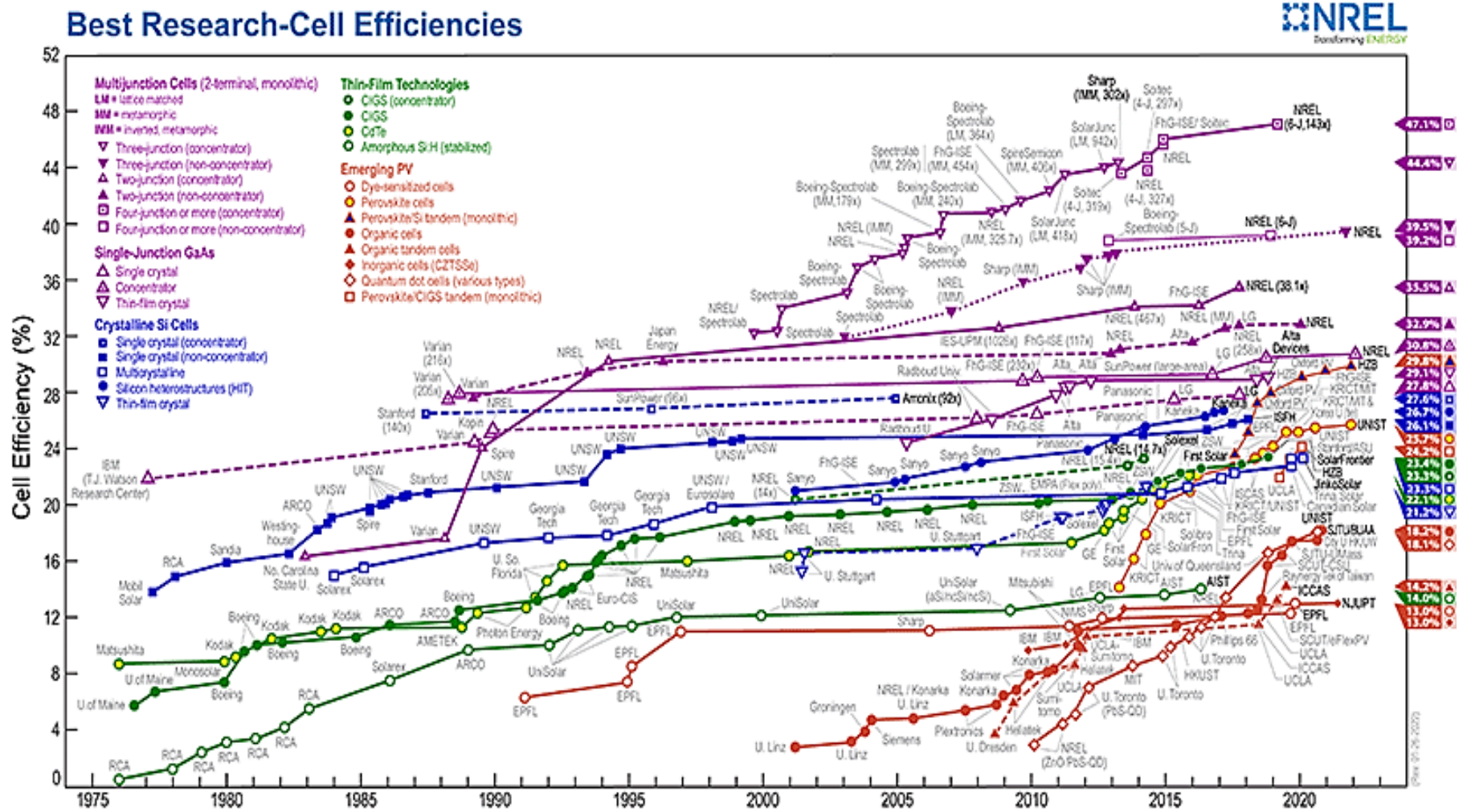


Figure I.17 : Évolution des rendements maximaux en laboratoire sur différentes technologies de cellules PV – 1975 à 2020

Sources : National Renewable Energy Laboratory – 2020 et ISE, Photovoltaics Report – 2020 [23]

I.8 Avantages et inconvénients d'un système photovoltaïque :

Le système photovoltaïque a beaucoup d'avantages [24] :

- Energie solaire inépuisable.
- Carburant gratuit.
- Energie solaire fournissant de l'électricité aux zones rurales les plus isolées ;
- Panneaux solaires demandant très peu d'entretien ;
- Panneaux solaires silencieux et non dérangeants ;
- Panneaux solaires recyclables.

Malgré cela, les sources photovoltaïques présentent aussi quelques inconvénients :

- Tributaires aux conditions météorologiques : les sources photovoltaïques ne fonctionnent pas quand l'énergie solaire n'est pas disponible ;
- Fabrication du module PV qui relève de la haute technologie ;
- Coût : l'installation PV nécessite des investissements d'un coût élevé ;
- Rendement : le rendement de conversion d'un module PV est faible ;
- Taille des installations : L'énergie solaire n'est pas compétitive lorsqu'il s'agit d'une production importante d'énergie, parce qu'elle nécessite une grande surface

I.9 Conclusion

Le monde de la conversion photovoltaïque, aussi bien au niveau de la recherche qu'au niveau industriel, connaît depuis quelques années une mutation profonde associée à l'intérêt croissant pour l'énergie photovoltaïque. Ce chapitre nous a permis d'explorer la relation entre le rayonnement solaire incident et la conversion photovoltaïque dans la cellule solaire éclairée. On a présenté aussi le principe de la conversion photovoltaïque ainsi que les paramètres électriques et les types des cellules photovoltaïques. Dans le chapitre qui suit on va présenter les propriétés fondamentales de notre matériau la pérovskite utilisée dans la structure de notre cellule solaire comme absorbeur.

Bibliographie du Chapitre I

- [1] Ali Sayigh, « Comprehensive Renewable Energy », Elsevier Ltd, UK, 2012
- [2] Le photovoltaïque–Module 3 – Fonctionnement et Technologies,2010 pages 3,4,5,6/10.
- [3] J. Royer, T. Djiako, E. Schiler, B. Sadasy, « Le pompage photovoltaïque » Université d'Ottawa,1998.
- [4] N. Oleksiy, « Simulation, fabrication et analyse des cellules photovoltaïque à contacts arrière interdigités », thèse de doctorat, Institut nationale des sciences appliquées, Lyon,2005.
- [5] Nichapour Oleksiy « simulation, fabrication et analyse de cellule photovoltaïque contacte arrière interdigités » Thèse de doctorat. L'institut national des sciences appliquées de Lyon 2005
- [6] Kirchartz T, Taretto K, Rau U. « Efficiency limits of organic bulk heterojunction solar cells ». The J PhysChemC, 2009 ;113:17958–66
- [7] A. Ricaud – Photopiles solaires « De la physique de la conversion photovoltaïque aux filières, matériaux et procédés ». Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne (1997).
- [8] Kateb Mohamed Nadjib, Mokrani zakaria, « Conception et simulation électrique d'une cellule solaire en Si par le logiciel Tcad-Silvaco », mémoire de master, université Biskra, 2011.
- [9] Rem de Bettignies « Cellules photovoltaïques organique dérivée de nouveaux systèmes conjugués » Thèse de doctorat, Université, Angers ,2003.
- [10] Raphaëlle Belchi « Architectures à base de nanostructures de carbone et TiO pour le photovoltaïque », Thèse de doctorat, l'Université Paris-Saclay, 2019.
- [11] M.A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa et W. Warta, « Progress in Photovoltaics: Research and Applications » 2008, 16, 61
- [12] N. BANDADLA, « optimisation des émetteurs sélectifs et passivables des cellules solaires conventionnelles », mémoire de magister, université de Tlemcen, 2012.

- [13] N. BANDADLA, « optimisation des émetteurs sélectifs et passivables des cellules solaires conventionnelles à base de mc_si », mémoire de magister, université de Tlemcen, 2012.
- [14] K. AMARA, « Contribution à l'étude d'une conception d'une centrale photovoltaïque de puissance (1MW) interconnectée au réseau de distribution électrique moyenne tension », thèse de magister, université de Tizi- Ouzou, 2015
- [15] P. Pière, « Optimisation du transfert d'énergie dans les systèmes photovoltaïques » Thèse de Doctorat de l'Université de Metz, (2011).
- [16] Rafiaa KIHAL, « Préparation par électrodéposition de semi-conducteurs en couche minces à base d'étain pour des cellules photovoltaïques », Thèse de doctorat, Université Guelma, 2018.
- [17] T. Minemoto et M. Murata, «Modélisation d'appareils de cellules solaires à pérovskite basée sur une similarité structurelle avec des cellules solaires à semi-conducteurs inorganiques à couches minces», Journal physique appliquée, vol.116, n°5, p.504-505, 2014.
- [18] M. C. ABDELLI, Etude des cellules photovoltaïques organiques, mémoire de master, université de Tlemcen, 2013.
- [19] S. PETIBON, « Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques », thèse de doctorat, université de Toulouse, 2009.
- [20] M. BELARBI, « Modélisation des paramètres électriques d'une cellule solaire sensibilisée par colorant », mémoire de master, université de Tlemcen, 2013.
- [21] F. NEMMAR BELHOCINE, « Etude et réalisation de cellules solaires photovoltaïques à base de matériaux organiques », thèse de doctorat, université de Tizi-Ouzou, 2014.
- [22] M. Grau, « Réalisation de nouvelles structures de cellules solaires photovoltaïques à partir de couches minces de silicium cristallin sur substrat de silicium préparé par frittage de poudres », Thèse de Doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 2012.
- [23] Zouhair El Jouad. « Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques ». Physique [physics]. Université d'Angers, 2016.
- [24] M. Zandi, « Contribution au pilotage des sources hybrides d'énergie électrique », Thèse Doctorat, Université - Institut National Polytechnique de Lorraine, 2010.

Chapitre II

Cellule Solaire pérovskites

II.1 Introduction

En seulement quelques années, les pérovskites halogénées ont su devenir des candidats prometteurs pour le photovoltaïque. Du fait de propriétés typiques, il est possible, pour une cellule pérovskite, de se rapprocher des rendements de conversion des cellules silicium, technologie mature et la plus répandue. Dans ce deuxième chapitre, nous exposerons la structure de la pérovskite avec ses différentes propriétés. Par la suite, nous présenterons le fonctionnement des cellules photovoltaïques à base de pérovskite. Pour finir, nous introduirons l'influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement photovoltaïque.

II.2 Le matériau pérovskite

Le matériau pérovskite fut découvert en 1839 sous la forme CaTiO_3 , mais il fallut attendre les années 2000 pour une première démonstration de cellule photovoltaïque pérovskite. Kojima et al utilisèrent du $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ sur du TiO_2 nano poreux en se basant sur une cellule Grätzel (ou cellule solaire à pigment photosensible) [1], et obtinrent un rendement de conversion de 2,2 % [2]. A partir de là, l'engouement pour les pérovskites dans le solaire monta en flèche. Il faut dire que la pérovskite présente de nombreux avantages : excellentes propriétés optoélectroniques, faibles coûts des matières premières, bande interdite ajustable et vaste éventail de techniques de dépôt [3].

II.3 Structure de la pérovskite

II.3.1 Structure cristallographique de la pérovskite

D'une manière générale, le matériau pérovskite est un matériau présentant la même structure que le titanate de calcium (CaTiO_3), c'est-à-dire quatre octaèdres BX_3 qui entourent un cation A et de formule chimique ABX_3 (voir Figure 1). Il est décomposé en deux groupes : les pérovskites inorganiques, qui sont sous forme d'oxydes, et les pérovskites halogénées qui peuvent être inorganiques ou hybrides (organiques-inorganiques) [4], [5]. On peut voir dans le Tableau 1 les différents composés pour chacune des pérovskites.

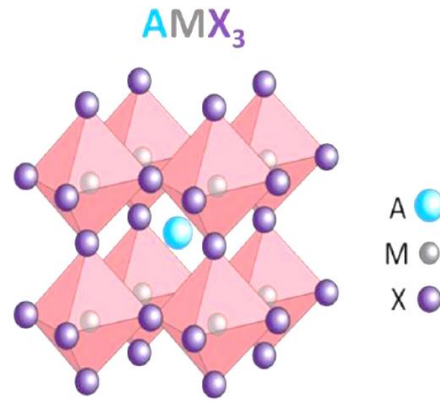


Figure II.1 : Représentation de la structure de la pérovskite

	Oxydes	Halogénées inorganique	Halogénées hybrides
A	Cation divalent ($Mg^{2+}, Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}, \dots$)	Métal alcalin monovalent (Li^+, Na^+, K^+, \dots)	Petite molécule organique MA(méthylammonium)F A(formamidinium)
B	Cation métallique ($Ti^{4+}, Si^{4+}, Sn^{4+}, \dots$)	Métal ionique divalent (Pb^{2+} ou Sn^{2+})	
X	Oxygène	Halogène (Cl^-, Br^- ou I^-)	

Tableau II. 1. Les différentes molécules correspondantes aux différentes familles de pérovskites

Dans le domaine du photovoltaïque, les pérovskites hybrides halogénées ont suscité un grand engouement puisque ce sont celles qui ont donné les meilleures performances de conversion. Les premières cellules certifiées étaient d'ailleurs composées de pérovskite ayant pour formule chimique $CH_3NH_3PbI_3$ le méthyl ammonium (ou MAPI). Les différents composés fréquemment utilisés dans le domaine du solaire sont donnés dans le Tableau II.2 [6], [7].

Les formules les plus répandues sont le formamidinium ($NH_2CH=NH_2^+$, FA) FAPI, le MAPBr, le MASnCl ou le $CsPbX_3$. En général, le chlore est souvent associé à l'iode (MAPI Cl). De même, de nombreuses cellules sont créées à partir de pérovskites mixtes, qui

contiennent un mélange de plusieurs cations et anions afin de tirer les bénéfices de chacun des composés.

	A	B	X
Composés	MA ; FA ; Cs	Pb ²⁺ ; Sn ²⁺	Cl ⁻ ; Br ⁻ ; I ⁻

Tableau II. 2 : les différents composés des pérovskites les plus répandues dans le domaine du photovoltaïque [6], [7]

II.4 Propriétés des matériaux pérovskites

Ces dernières années, des matériaux de type pérovskite sont de plus en plus intéressante important car ils ont un grand potentiel pour contribuer à pile à combustible solide, électrolyte solide, résistance fixe, actionneurs, appareils électromécaniques, transducteurs, etc. en raison de la structure cristalline particulière, le magnétisme, la conductivité électrique, Piézoélectrique et propriétés électro-optique, l'activité catalytique et la sensibilité de gaz,...etc. [8]. Comme un important matériau fonctionnel, LaFeO₃ avec une structure de pérovskite type ABO₃ typique a de nombreux champs d'application, tels que l'oxydation catalytique, états de surface électroniques et ces caractères sensibles au gaz [9] de structure pérovskite de type ABO₃.

II.4 .1 Propriétés électriques

Elles sont supraconductrices à des températures relativement élevées, elles transforment la pression mécanique ou la chaleur en électricité (piézoélectricité), accélèrent les réactions chimiques (catalyseurs) et changent soudainement leur résistance électrique lorsqu'elles sont placées dans un champ magnétique (magnétorésistance), de nombreuses études électrochimiques sur les électrodes à base de ces oxydes ont été effectuées en milieu aqueux [10]. Elles ont révélé un rôle électro catalytique important dans la réaction d'électrode à oxygène à température ambiante. La pérovskite devient ionique et covalente, double nature dans les structures électroniques.

Des travaux expérimentaux de recherche montrent les différentes valeurs de bande interdite pour les pérovskites. La bande interdite de la pérovskite dépend du processus de synthèse et de la taille du cation organique/inorganique, des ions métalliques et très moins d'ion halogénure. La bande interdite de: CH₃NH₃PbI₃, CH₃NH₃PbBr₃, CH₃NH₃PbCl₃,

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}_3$ sont: 1.49, 1.26, 1.95 et 2.46 eV, respectivement [11], [12], alors que la bande passante la plus utilisée pour $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ est 1.57 eV [13].

II.4 .2 Propriétés optique

La couche absorbante est un élément très important dans la structure de la cellule solaire pour obtenir une meilleure performance. Ainsi, la résistance d'absorption optique est un facteur crucial des matériaux. La pérovskite est un matériau à bande interdite directe et, par conséquent, elle a une force d'absorption optique élevée et une plage plus large pour absorber suffisamment d'énergie solaire pour atteindre une valeur élevée d'efficacité de conversion de puissance.

Dans la cellule solaire, la pérovskite fonctionne comme une couche intrinsèque. Ainsi, dans la cellule solaire de Pérovskite, une jonction p-i-n est formée. Il fonctionne de la même manière que la cellule solaire p-n, sauf que la couche d'épuisement devient plus large en raison de la couche intrinsèque (i.e. la couche de pérovskite fonctionne comme absorbeur de lumière).

Comme la cellule a une couche d'épuisement plus large, elle occupe plus d'espace pour l'absorption de la lumière. La pérovskite a un coefficient d'absorption élevé. Le coefficient d'absorption est comparé à divers matériaux de cellules solaires pour différentes longueurs d'onde à la figure II.2:

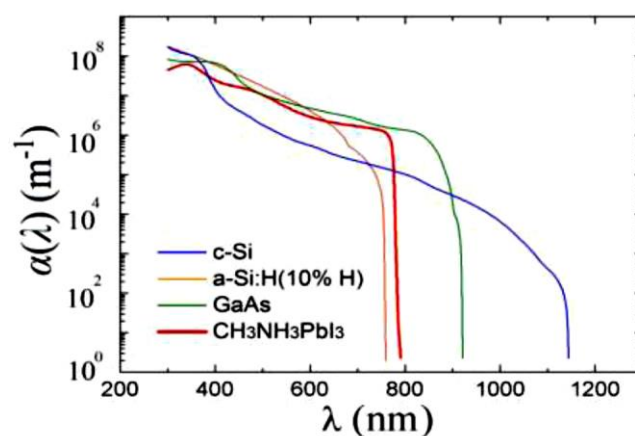


Figure II.2 : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires [13].

De la figure II.2 on peut voir qu'à la longueur d'onde visible le coefficient d'absorption de la pérovskite est plus élevé, de sorte que la pérovskite peut absorber plus de photons. Ainsi, le matériau pérovskite convient à l'application de cellules solaires.

La couche de pérovskite agit également comme porteur de charge entre le matériau de type n et de type p. Normalement, la pérovskite est prise en couche mince entre le matériau de type n et de type p. Après avoir absorbé le photon de la paire d'électrons-trous du rayonnement solaire est généré. La pérovskite transporte des électrons vers le matériau de type n et transporte des trous vers les matériaux de type p [13].

II.5. Matériau pérovskite à base de plomb (Pb) :

La pérovskite halogénée de plomb organique et inorganique (MAPbX, X= cl, I, Br) est le matériau semi-conducteur le plus probable en raison de ses propriétés électroniques uniques. La température varie d'un type à l'autre car ils n'ont pas la même composition [14].

MAPbI₃ :

- un fort coefficient d'absorption.
- une bande interdite considéré directe.

La mobilité des charges très élevées.

- bénéficie de longueurs de diffusion de charges importantes.
- La durée de vie des charges est élevée

MAPbBr₃ :

• Plus stable à température ambiante grâce à la structure cubique et une grande compression en raison de la taille plus petite [15].

- Plus résistant à l'eau.
- Haut performance par rapport à MAPbI₃.
- L'utilisation d'une transparence optique supérieure.
- La conductivité électrique du mouvement de charge est élevée.

MAPbcl₃ :

- Sensibilité aux rayons ultraviolets (UV) [16].
- Appareils électriques limites en raison de faible cristallinité [16].

II.6. Cellules solaires pérovskites

L'avènement de la pérovskite hybride a émerveillé les groupes de recherche du secteur photovoltaïque, car il a démontré une performance élevée et une croissance rapide au cours des 5 dernières années [18]. Ces matériaux ont entraîné une augmentation de l'efficacité de conversion de l'énergie (PCE) pour les appareils photovoltaïques (PV) allant au-delà de 20% [19].

Les PSC hybrides organiques-inorganiques suscitent un grand intérêt depuis 2009 avec un rendement de conversion (PCE) qui est passé de 3,8 % à 6,5 % en 2011 et à environ 23,3 % en 2016 et atteint 25,2 % en 2021 comme illustré à la Figure II. 3.

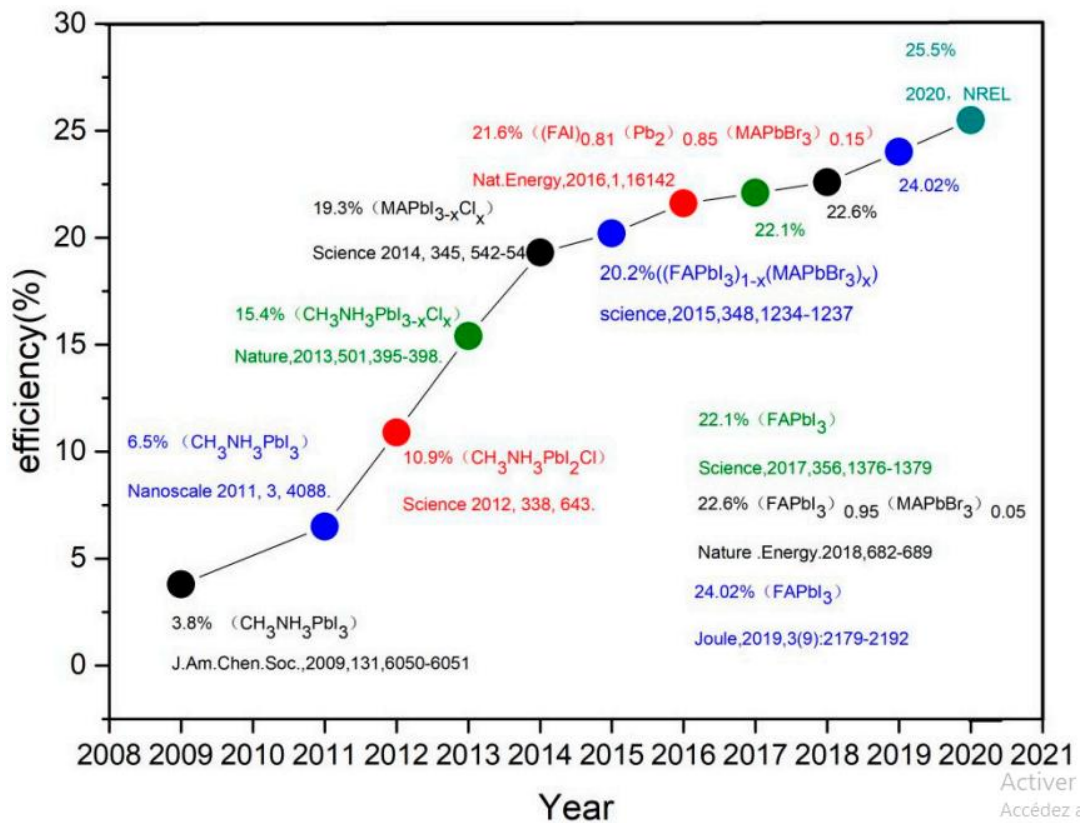


Figure II.3 : L'évolution du rendement de conversion des cellules solaires à pérovskite (PSC) de 2008 à 2020 [20].

II .7. Architectures des cellules à base des pérovskites

Il existe quatre architectures principales utilisées dans la conception et la fabrication des cellules solaires à base de pérovskite avec des performances différentes. Ces architectures sont appelées méso poreux, couche de recouvrement, n-i-p planaire et p-i-n planaire, comme illustrée sur la Figure II.4. Pour la modélisation et la simulation numérique, il sera préférable d'utiliser la configuration d'une cellule solaire à couche mince type p-i-n ou n-i-p planaire à hétérojonction. Ces dernières caractérisent les cellules solaires à base de pérovskite, d'une manière similaire à la structure de cellules solaires à semi-conducteurs composites à couche mince, telles que CIGS [21], [22].

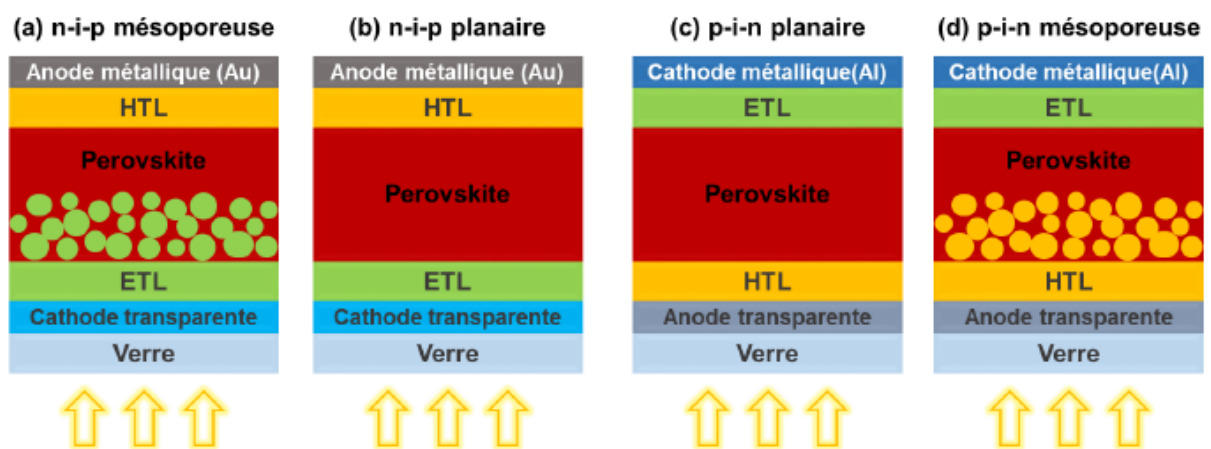


Figure II. 4 : Les architectures les plus utilisés dans les cellules solaires à base de pérovskite, (a) méso poreux, (b) couche de recouvrement (Capping-layer), (c) n-i-p planaire et (d) p-i-n planaire

Les configurations ci-dessus sont couramment utilisées dans les dispositifs à cellules solaires en pérovskite. La Figure II.4(a) présente une structure méso poreuse : un substrat de verre et une électrode transparente, sur laquelle est déposée une couche compacte de transport d'électrons (ETL), généralement du TiO_2 . Puis, un ETL méso poreux (TiO_2 ou Al_2O_3) est produit en frittant de petites particules ensemble à haute température ($> 400\text{ }^\circ\text{C}$). Cette structure mésoscopique poreuse est ensuite remplie de la couche active de pérovskite sur laquelle repose la couche de transport de trous solides (HTL), et un contact arrière opaque (généralement de l'or (Au)). A partir de cette configuration mésoscopique, la structure de la couche de recouvrement (Capping-layer) a évolué. Comme il a été constaté que la pérovskite n'a pas besoin de l'interface ETL / pérovskite pour séparer les excitons photo-générés en charges libres et que le matériau à base de pérovskite est capable de

transporter efficacement les charges ambipolaires, l'épaisseur de la structure mésoscopique a été réduite de manière significative et une couche épaisse de recouvrement (capping-layer) de pérovskite pure est créé sur le dessus (Figure II.4(b)) [21], [23]. En excluant complètement la structure méso poreuse, une structure n-i-p planaire se forme sans nécessité d'étape de frittage à haute température (Figure II.4 (c)). L'architecture p-i-n planaire est réalisée en déposant le HTL (généralement du poly (3,4-éthylènedioxythiophène): polystyrène sulfonate (PEDOT: PSS)) sur le substrat en verre transparent recouvert d'électrode. Ensuite, la couche de pérovskite est déposée, suivie du dépôt de l'ETL (généralement l'ester méthylique de l'acide [6,6] -phényl-C61-butyrique (PCBM)) et d'un contact arrière opaque (de l'aluminium (Al) ou de l'argent (Ag)), (Figure II.4 (d)).

II.8. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskite

Dans une cellule pérovskite la couche active est prise en sandwich entre une couche de type p, également appelée HTL (Hole Transport Layer), et une couche de type n appelée ETL (Electron Transport Layer), créant ainsi une configuration p-i-n. Le succès de la pérovskite en tant qu'absorbeur solaire dépend en grande partie de la longue longueur de diffusion des charges et des mobilités élevées des porteurs dans le milieu.

Le principe de fonctionnement de la cellule solaire à base de pérovskite repose sur l'absorption de photons par la couche active de pérovskite. L'absorbeur de pérovskite a une faible énergie de liaison à l'exciton qui indique la génération de porteurs de charge libre lors de l'absorption de photons et se produit en quelques pico secondes. Ces porteurs de charge libres générés sont ensuite transportés vers les

Contacts d'interface. Pendant le processus de transfert (figure II.5), le processus souhaité (flèche rouge) se déroule en trois étapes :

- Photoexcitation dans l'absorbeur de pérovskite (1).
- Transfert d'électrons dans l'ETL (2).
- Transfert de trous en HTL (ou transfert équivalent d'électrons de HTL en pérovskite) (3).

Toutefois un grand nombre de processus indésirables peuvent survenir (flèche verte). Ces processus consistent en :

- Une recombinaison des espèces photo-générées (4).

- Un transfert de charge arrière aux interfaces de HTL et de TiO₂ avec de la pérovskite (5, 6)
- Un contact direct entre HTL et TiO₂ (7).

Finalement, après avoir surmonté les barrières d'extraction au niveau des interfaces, les porteurs de charge restants peuvent être transférés via des interfaces de contact sélectives et peuvent être extraits par les électrodes respectives [23].

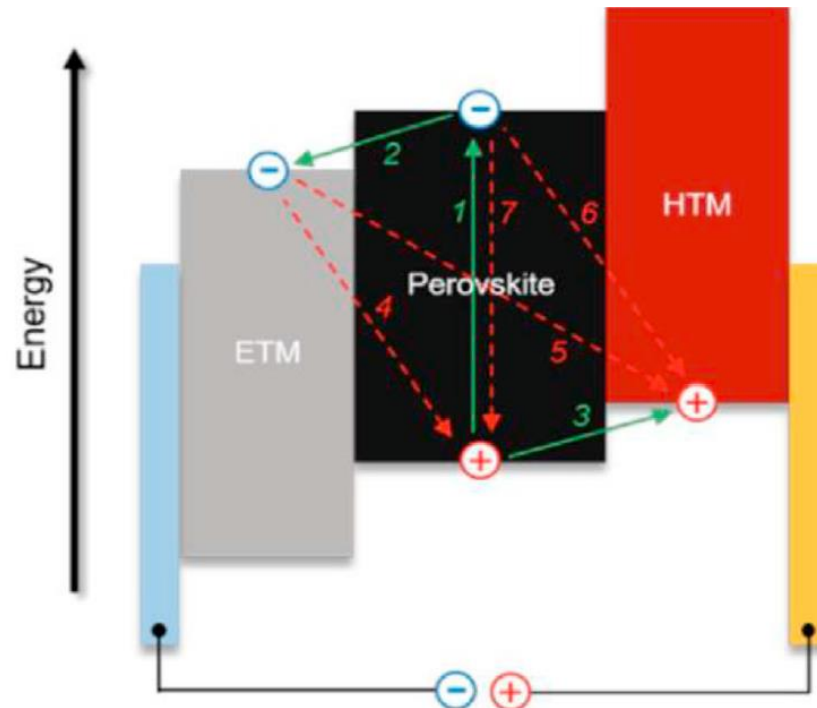


Figure II.5: Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite [24].

II.9. 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 [25].

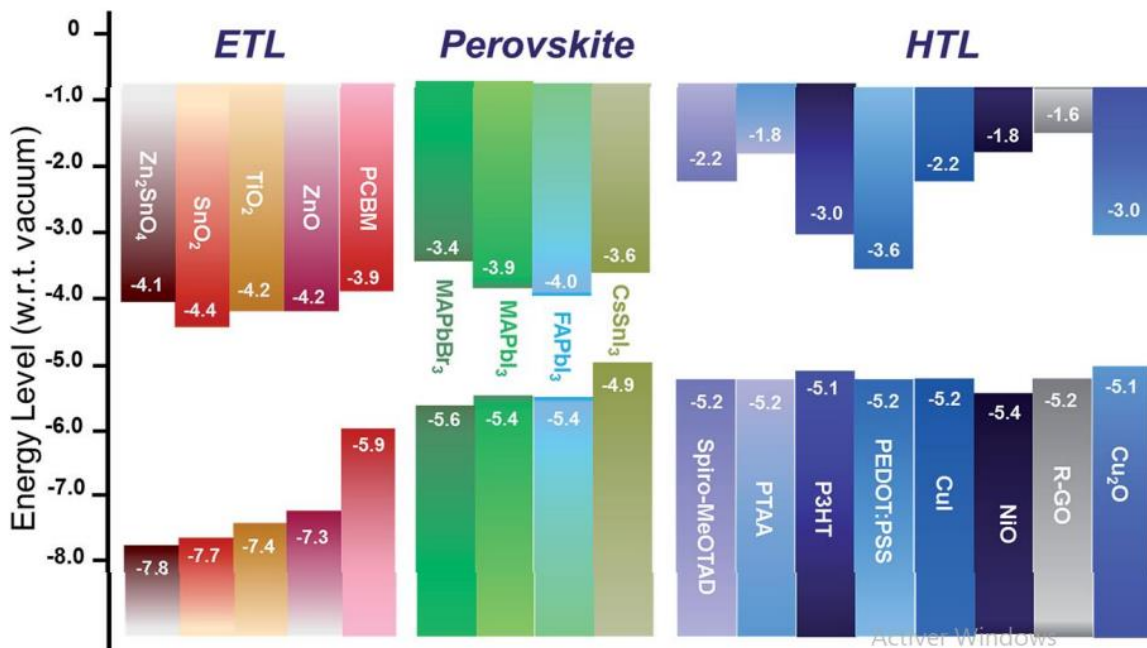


Figure II. 6: Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite)

II.10. Matériaux de transport

Dans une cellule solaire à pérovskite, les couches ETL, HTL et pérovskites sont le chemin que doivent parcourir les porteurs photo-générés avant d'être collectés. Une bonne compréhension des effets de chacune de ces couches sur les performances est essentielle pour l'optimisation de la cellule.

II.10.1. Matériaux de transport d'électron

Pour qu'un matériau soit utilisé comme couche de transport d'électrons dans les cellules solaires à pérovskite, il doit avoir une mobilité d'électrons élevée et une largeur de bande interdite plus élevée [26]. C'est pour ça les matériaux organiques-inorganiques sont largement utilisés dans les cellules solaires à pérovskite comme matériaux de transport d'électrons. Avec une mobilité électronique élevée, ils peuvent effectuer efficacement la transmission d'électrons.

II.10.2. Matériaux de transport de trous

L'utilisation d'un matériau de transport de trous (HTL) dans les cellules solaires à pérovskite est indispensable [27]. Cette couche présente une barrière énergétique physique entre l'anode et la couche de pérovskite qui bloque le transfert d'électrons à l'anode [28], elle permet aussi d'améliorer l'efficacité du transfert de trous [29], [30]. De plus la présence d'une couche de HTL a montré une amélioration de la couverture de surface par rapport à celle d'une couche de pérovskite seule [31].

Pour une extraction efficace des trous à l'interface pérovskite-HTL, la couche HTL doit avoir :

- Une mobilité élevée des trous pour réduire les pertes pendant le transport des trous vers le contact collecteur de trous.
- Un potentiel d'ionisation compatible avec celui de la pérovskite (c'est-à-dire le maximum de bande orbitale (HOMO) doit être légèrement au-dessus de la bande de valence de la couche pérovskite afin de minimiser les pertes par injection,
- Une stabilité thermique élevée et une forte résistance face aux facteurs de dégradation externes tels que l'humidité et l'oxygène pour un fonctionnement PV durable à long terme.

II.11. Comparaison des performances de quelques cellules a pérovskites

Les performances des cellules photovoltaïques à base de matériaux pérovskites dépendent de plusieurs paramètres, tels que l'architecture de la cellule, les matériaux utilisés pour la couche active, les couches inter faciales pour le transport d'électrons ETM et pour le transport de trous HTL et le type d'électrodes ainsi que les techniques et les conditions de fabrications.

Le tableau II.3 donne les performances de quelques cellules de la nouvelle génération à base de matériaux pérovskites.

Structure de la cellule	J_{cc}	V_{co}	FF	η	Réf
FTO/TiO ₂ / CH ₃ NH ₃ PbI _{3-x} XCl _x /spiro-OMeTAD/Au	15.3	0.8	55	6.7	[32]

FTO/SnO ₂ /TiO ₂ /MAPbI _{3-x} (Ac) _x /Au	23.68	1.06	68	17.07	[33]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /Po-spiro OmeTAD/Au	22.3	0.98	68.2	15.4	[34]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ :ITIC/Po-spiro- OmeTAD/Au	23.74	1	72.8	17.59	[34]
FTO/TBD-TiO ₂ /MAPbI ₃ /spiro- OMeTAD/Au	20.5	1.05	63.1	13.9	[35]
FTO/TT-TiO ₂ /MAPbI ₃ /spiro-OMeTAD/Au	23.2	1.1	68	17.4	[35]
ITO/SnO ₂ /MAPbI ₃ /spiro-OMeTAD/Au	22.01	1.05	69	15.98	[36]
ITO/SnO ₂ /MAPbI ₃ - (Gua _{1-x} MA _x)PbI ₃ /spiro-OMeTAD	22.46	1.1	75	18.54	[36]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ / /FTO(rGOpur)	15.86	0.71	45	5.10	[37]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /B-rGO/FTO (10% de bore)	15.91	0.71	56	7.09	[37]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /B-rGO/FTO (20% de Bore)	16.74	0.88	60	8.96	[37]
ITO/PEDOT :PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ (MAPbI ₃)/ PCBM/BCP/Al	18.94	1.01	74.01	14.6	[38]
ITO/AuCl _{3-GR} /PEDOT :PSS/ CH ₃ NH ₃ PbI ₃ (MAPbI ₃)/PCBM/BCP/Al	20.13	1.01	77.53	15.77	[38]

Tableau II.3: Comparaison des performances des cellules à base de matériaux pérovskites Cellules à base de matériaux pérovskites

1.12. Influence de quelques paramètres extérieurs sur le rendement Photovoltaïque

1.12.1. 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 [39].

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

$$U(T^{\circ}) = U(25^{\circ}\text{C}) + (\Delta T^{\circ} \times a) \quad (\text{II.1})$$

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

1.12.2 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 d' I_{cc} , lorsqu'il double, I_{cc} double aussi. L'éclairement a très peu d'incidence sur la tension à vide V_{co} [39].

II.13 Conclusion

L'amélioration des performances des dispositifs photovoltaïques à base de matériaux pérovskites nécessite le développement de nouveaux matériaux, optimisation de la structure des cellules et les technologies de fabrication associées. Des recherches plus profondes dans ce domaine peuvent ouvrir de nouvelles voies pour accroître le rendement de conversion et permettent une compréhension plus complète du principe de fonctionnement de ces dispositifs.

Bibliographie de Chapitre II

- [1] B. O'Regan and M. Grätzel, « A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films », *Nature*, vol. 353, n°. 24, pp. 737–740, 1991.
- [2] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai, and T. Miyasaka, « Novel Photoelectrochemical Cell with Mesoscopic Electrodes Sensitized by Lead-halide Compounds (11)» *ECS Meet. Abstr.*, 2008-02, n°. 1, p. 27, 2006.
- [3] M. A. Green, A. Ho-Baillie, and H. J. Snaith, « The emergence of perovskite solar cells, » *Nat. Photonics*, vol. 8, no. 7, pp. 506–514, Jul. 2014
- [4] M. Cyrotet al., « Properties of a new perovskite oxyde Sr₂VO₄, » *J. Solid State Chem.*, vol. 85, no. 2, pp. 321–325, Apr. 1990.
- [5] J.-W. Lee, D.-J. Seol, A.-N. Cho, and N.-G. Park, “High-Efficiency Perovskite Solar Cells Based on the Black Polymorph of HC(NH₂)₂PbI₃,” *Adv. Mater.*, vol. 26, no. 29, pp. 4991–4998, Aug. 2014.
- [6] L. K. Ono, E. J. Juarez-Perez, and Y. Qi, “Progress on Perovskite Materials and Solar Cells with Mixed Cations and Halide Anions,” *ACS Appl. Mater. Interfaces*, vol. 9, no. 36, pp. 30197–30246, Sep. 2017.
- [7] Q. Wali, F. J. Iftikhar, M. E. Khan, A. Ullah, Y. Iqbal, and R. Jose, “Advances in stability of perovskite solar cells,” *Org. Electron.*, vol. 78, p. 105590, Mar. 2020.
- [8] J. Hutton and R.J. Nelmes, *Acta Cryst. A* 37 (1981) 916,
- [9] L. Pauling, New-York: Cornell University Press. p. 267, (1967).- T. R. Shrout and A. Halliyal. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, 66 [4] 704-711 (1987).
- [10] Zhang, R., Jiang, B. and CAO, W. « elastic piezoelectric and dielectric properties of multidomain.0.67PB(Mg_{1/3}Nb_{2/3})O₃-0.33PbTiO₃ single crystals ». *Journal of applied Physic*, 90 (2001) 3471-3475.
- [11] Luo S. and Daud W.A. « Recent progress in organic-inorganic halide perovskite solar cells: mechanism and material design ». *J. Mater. Chem. A*. 2015.
- [12] Keith T. Butler, Jarvis M. Frost and Aron Walsh, « Band alignment of the hybrid halide perovskites CH₃NH₃PbI₃, CH₃NH₃PbBr₃, CH₃NH₃PbCl₃ ». *Materials Horizons*, 2 (2014) 218-220.

- [13] H. Zhou, Q. Chen, G. Li, S. Luo, T. b. Song, H. S. Duan, Z. Hong, J. You, Y. Liu and Y. Yang, "interface engineering of highly efficient perovskite solar cells", *science*, 345 (2014)
- [14] M. Spalla, « Stabilité intrinsèque des cellules solaires pérovskites : impact de la formulation de la couche active et des couches de transport de charges », p. 226.
- [15] «K. Wu et al."Temperature-dependent excitonic photoluminescence of hybrid organometal halide perovskite films " vol. 16, no 41, p. 22476-22481, sept. 2014, »
- [16] « Zhishuai Yuana , Wei Huangb , Shoutao Maa, Wei Hu and Wei Zhanga "High Performance Perovskite CH₃NH₃PbCl₃ Single Crystal Photodetector: Benefiting From Evolutionary Preparation Process "p10».
- [17] Mottakin, M.; Sobayel, K.; Sarkar, D.; Alkhamash, H.; Alharthi, S.; Techato, K.; Shahiduzzaman, M.; Amin, N.; Sopian, K.; Akhtaruzzaman, M. « Design and Modelling of Eco-Friendly CH₃NH₃SnI₃-Based Perovskite Solar Cells with Suitable Transport Layers ». *Energies* 2021,
- [18] Rocks C. et al. 2017 « Understanding surface chemistry during MAPbI₃ spray deposition and its effect on photovoltaic performance » *Journal of Materials Chemistry C* 5
- [19] KANOUN Ahmed-Ali « Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques » Thèse de doctorat, Université Abou-Bekr Belkaid – Tlemcen, 2019.
- [20] T. Dai, Q. Cao, L. Yang, M. H. Aldamasy, M. Li, Q. Liang, H. Lu, Y. Dong, and Y. Yang, « Strategies for High-Performance Large-Area Perovskite Solar Cells toward Commercialization », *Crystals*, 11(3)(2021)295.
- [21] T. Minemoto and M. Murata, « Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells » *Journal of applied physics*, vol. 116, n° 5, 2014.
- [22] M. M. Lee, J. Teuscher, T. Miyasaka, T. N. Murakami, and H. J. Snaith, « Efficient hybrid solar cells based on meso-superstructure of organometal halide perovskites » *Science*, vol. 338, no. 6107, pp. 643–647, 2012.
- [23] M. A. Green, A. Ho-Baillie, and H. J. Snaith, « The emergence of perovskite solar cells » *Nature photonics*, vol. 8, no. 7, p. 506, 2014.
- [24] <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2021.04.002>

- [25] R. Ihlyet 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.
- [26] Chakrabarti T, Saha M, Khanda A, Sarkar SK. « Modeling of Lead-Free CH₃NH₃SnI₃-Based Perovskite Solar Cell Using ZnO as ETL ». *Advances in Communication, Devices and Networking*: Springer; 2018. p. 125-31.
- [27] Calio L, Kazim S, Graetzel M, Ahmad S. « Hole - matériaux de transport pour cellules solaires à pérovskite ». *Angewandte Chemie édition internationale* 2016 .
- [28] Tress W, Marinova N, Inganäs O, Nazeeruddin MK, Zakeeruddin SM, Graetzel M. « Le rôle de la couche de transport de trous dans les cellules solaires à pérovskite, réduisant la recombinaison et augmentant l'absorption ». *2014 IEEE 40th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC)* : IEEE ; 2014.
- [29] Zhu L, Xiao J, Shi J, Wang J, Lv S, Xu Y, et al. « Cellules solaires efficaces à pérovskite CH₃NH₃PbI₃ avec couches de transport de trous 2TPA-n-DP ». *Nano recherche* 2015 ; 8 : 1116-27
- [30] Bakr ZH, Wali Q, Fakharuddin A, Schmidt-Mende L, Brown TM, Jose R. « Avancées dans l'ingénierie des matériaux de transport de trous pour des cellules solaires à pérovskite stables et efficaces ». *Nano énergie* 2017 ; 34 : 271-305.
- [31] Zhang Y, Liu W, Tan F, Gu Y. « Le rôle essentiel de la couche de transport de trous poly (3-hexylthiophène) dans les cellules solaires à pérovskite ». *Journal des sources d'énergie* 2015 ; 274 : 1224-30.
- [32] G.E Eperon, V.M. Burlakov, P. Docampo, A. Goriely and H.J. Snaith, « Morphological control for high performance, solution processed planar heterojunction perovskite solar cells', *Advanced Functional Materials* », Vol. 24, N°1, 2014.
- [33] Y. Xiao, L. Yang, G. Han, Y. Li, M. Li, and H. Li, « Effects of methylammonium acetate on the perovskite film quality for the perovskite solar cell », *Organic Electronics*, Vol. 65, pp. 201 - 206, 2019.
- [34] R. Singh, and V.K. Shukla, « ITIC-based bulk heterojunction perovskite film boosting the power conversion efficiency and stability of the perovskite solar cell », *Solar Energy*, Vol. 178, pp. 90 - 97, 2019.

- [35] X. Li, J. Zhang, X. Zhu, J. Yu, and K. Fan, « Effects of Ti precursors on the performance of planar perovskite solar cells », *Applied Surface Science*, Vol. 462, pp. 598 - 605, 2018.
- [36] S. Wang, Y. Zhu, W. Sun, X. Miao, Z. Ma, C. Yang and C. Wang, « Large guanidinium cation enhance photovoltage for perovskite solar cells via solution-processed secondary growth technique », *Solar Energy*, Vol. 176, pp. 118 - 125, 2018.
- [37] D. Selvakumar, G. Murugadoss, A. Alsalme, A.M. Alkathiri and R. Jayavel, « Heteroatom doped reduced graphene oxide paper for large area perovskite solar cells », *Solar Energy*, Vol. 163, pp. 564 - 569, 2018.
- [38] J.I. Kim, C.W. Jang, J.H. Kim, S. Kim and S.H. Choi, « Use of AuCl₃-doped graphene as a protecting layer for enhancing the stabilities of inverted perovskite solar cells ». *Applied Surface Science*, Vol. 455, 2018.
- [39] S. BENSALÉM, « Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires », Thèse de magister, Université Farhat Abbas – Setif, 2011

Chapitre III

Simulation et discussion des résultats

III.1 Introduction

Dans notre travail, on s'intéresse à l'étude de la cellule solaire à base de matériaux pérovskite Tri-iodure de plomb méthylammonium $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en se basons sur la simulation via le logiciel SCAPS-1D. 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 (PCE), 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 l'effet de l'épaisseur de l'absorbeur et de déterminer la valeur optimale qui correspond au rendement maximal de la cellule solaire. Après cela, nous discuterons de chacun des :

1. l'influence de dopage (N_d) de la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).
2. l'Influence de la densité de défaut (N_t) de la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).
3. l'influence de la température sur la cellule solaire à base de matériaux pérovskite

III.2. Equations de base

Pour modéliser précisément les propriétés électriques des cellules solaires le logiciel SCAPS résout numériquement les équations de base des semi-conducteurs [1] avec l'approximation dérive diffusion.

Equation de poisson

L'équation de Poisson est utilisée pour décrire la relation entre les charges potentielles et spatiales.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = q\varepsilon[n(x) - p(x) - N_D^+(x) + N_A^-(x) - p_t(x) + n_t(x)] \quad (\text{III.1})$$

Où, φ est le potentiel, q est la charge élémentaire, ε est la permittivité, n est la densité des électrons libres, p est la densité de trous libres, N_D est la densité de dopage de type donneur, N_A est la densité de dopage de type accepteur, p_t est la densité des piégé à trous et n_t est la densité des piégé à électrons.

Équations de continuité

Ces équations permettent d'analyser simultanément la dérive, la diffusion, la génération et la recombinaison des porteurs.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R_n \quad (III.2)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R_p \quad (III.3)$$

Où, G_n (G_p) est le taux de génération optique d'électrons (trous), et R_n (R_p) est le taux de recombinaison d'électrons (trous).

J_n, J_p sont les densités de courant d'électrons et de trous données par les équations de transport (III.4) et (III.5).

$$J_n = -qn\mu_n \nabla \Psi + qD_n \nabla n \quad (III.4)$$

$$J_p = -qp\mu_p \nabla \Psi + qD_p \nabla p \quad (III.5)$$

Où q est la charge élémentaire, μ_n (μ_p) est la mobilité des électrons (trous), et D_n (D_p) est le coefficient de diffusion des électrons (trous).

Le coefficient de diffusion dépend de la mobilité des porteurs comme il est montré dans les équations (III.6) et (III.7).

$$D_n = \frac{\mu_n K_B T}{q} \quad (III.6)$$

$$D_p = \frac{\mu_p K_B T}{q} \quad (III.7)$$

Où, K_B est la constante de Boltzmann, T est la température.

Longueur de diffusion

La longueur de diffusion décrit la capacité de transport des porteurs dans un dispositif de cellule solaire. Cela dépend du coefficient de diffusion et de la durée de vie des porteurs [2]. Cela est représenté dans les équations (III.8) et (III.9).

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (III.8)$$

$$L_p = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (III.9)$$

Où, $L_n(p)$ est la longueur de diffusion de l'électron (trou), $\tau_n(p)$ est la durée de vie de l'électron (trou).

III.3. Logiciels de simulation les plus utilisés

La simulation numérique est une technique permettant d'étudier et d'analyser le comportement d'un dispositif réel. Au fil des années la simulation s'est révélée un outil fiable et indispensable pour étudier et comprendre les propriétés des cellules solaires, telles que les propriétés optiques, électriques et mécaniques [3]. Elle contribue également à réduire les coûts de traitement et le temps consacré à la fabrication des cellules solaires en fournissant des informations utiles sur la manière de faire varier les paramètres de production pour améliorer les performances des cellules solaires [4].

Durant ces dernières années de nombreux simulateurs solaires ont été développés dans le but de modéliser et de simuler les cellules solaires. On peut citer comme les logiciels de simulation numériques tels que : AMPS, wxAMPS, PC1D, AFORS-HET, ASA, SILVACO, SCAPS.

III.4. Logiciel SCAPS

SCAPS « Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension » est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé à l'Université de Gent en Belgique pour simuler les caractéristiques électriques des dispositifs photoniques tels que les cellules solaires à couches minces [1],[5].

En premier temps, SCAPS a été développé pour modéliser des systèmes photovoltaïques comprenant des semi-conducteurs tel que CuInSe₂ et de CdTe. Par la suite, ce logiciel a été élargi pour d'autres cellules telles que les cellules cristallines à base de Si et GaAs et les cellules amorphes. Ce logiciel permet de simuler des cellules solaires constituées au maximum de sept couches ayant chacune des propriétés différentes tel-que le profil de dopage, l'épaisseur, la distribution énergétique des niveaux donneurs ou accepteurs, l'absorption optique ...etc. Il calcule les bandes d'énergies, les concentrations et les courants,

les caractéristiques I-V, les caractéristiques alternatives et la réponse spectrale (QE). Depuis SCAPS a été adapté également pour les cellules solaires graduées [6].

III.4.1. Utilisation du SCAPS

Le logiciel est organisé en plusieurs panneaux dans lesquels l'utilisateur peut définir les paramètres ou dans lesquels les résultats sont calculés [7]. SCAPS analyse la physique du modèle en tenant en compte des profils de recombinaison, de la distribution du champ électrique, des mécanismes de transports des porteurs et des densités de courant individuelles

III.4.2 Fenêtre d'exécution (Action Panel)

La fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS est accessible dès le démarrage du logiciel. Elle est constituée de différent bloc comme le montre la figure III.1 :

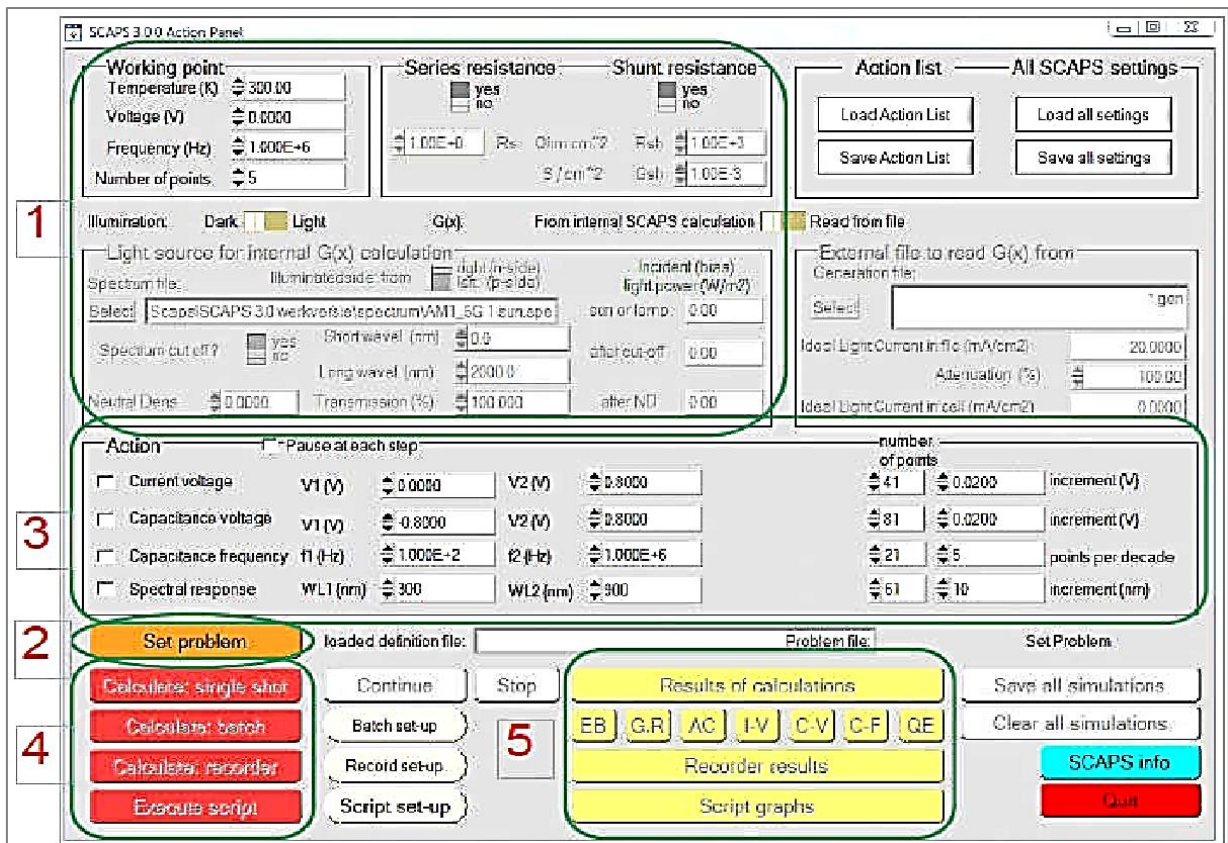


Figure III. 1: Fenêtre d'exécution « Action panel » de SCAPS [7]

- Bloc1 : permet la spécification des conditions de simulation :
- Spécification du point de fonctionnement (température, tension, fréquence).
- Condition d'illumination.
- Résistance.

- Bloc 2 : 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 à simuler à savoir : la caractéristique IV, la capacité – voltage, la capacité-fréquence et la réponse spectrale.
- Bloc 4 : permet de lancer les calculs.
- Bloc 5 : permet une visualisation des résultats.

III.4.3 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 importants pour cette mesure.

- la température T: importante pour toutes les mesures. Note : dans SCAPS, Seulemment 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 (λ). 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 (λ) et C-f. C'est la fréquence à laquelle la mesure C-V est simulée.

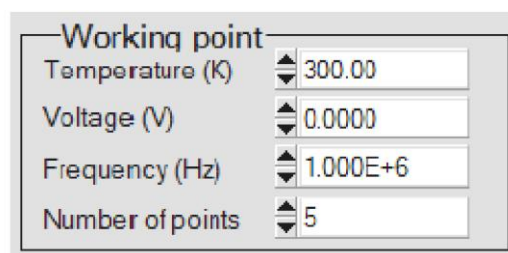


Figure III.2: Définition du point de fonctionnement [7]

- L'éclairement (illumination): est utilisé pour toutes les mesures. Pour la mesure QE(λ), 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.

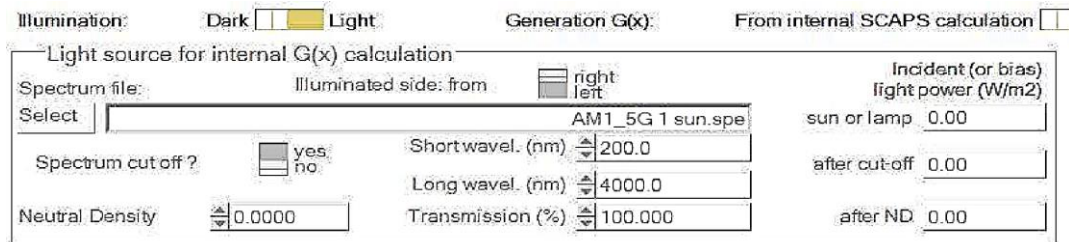


Figure III. 3: Choix de l'illumination [7]

III.4.4 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)

Lorsque vous cliquez sur le bouton "Set Problem" dans le panneau Actions (Figure III.1 bloc 2), le panneau "Solar cell definition" s'affiche (Figure III.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 ».

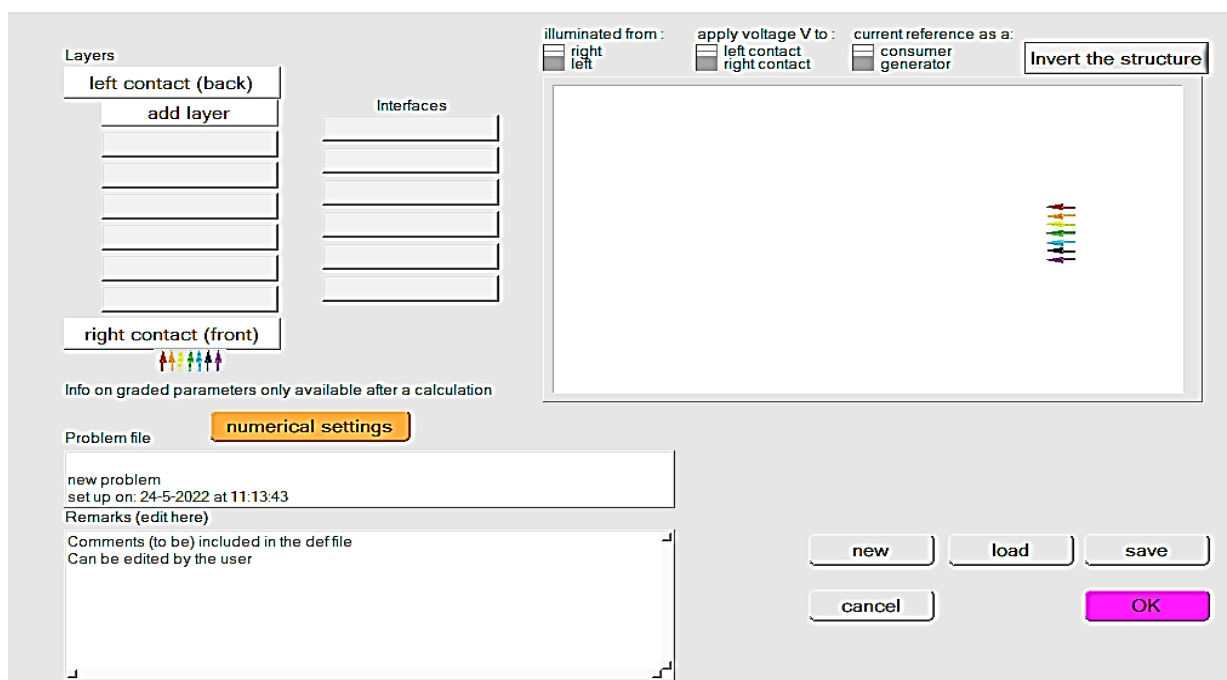


Figure III. 4 : Panneau de définition de la structure [7]

Les propriétés des couches, de contact et d'interface peuvent être modifiées en cliquant sur la case appropriée, comme illustré à la figure III.5. De la même manière, vous pouvez ajouter des couches en cliquant sur "Add layer".

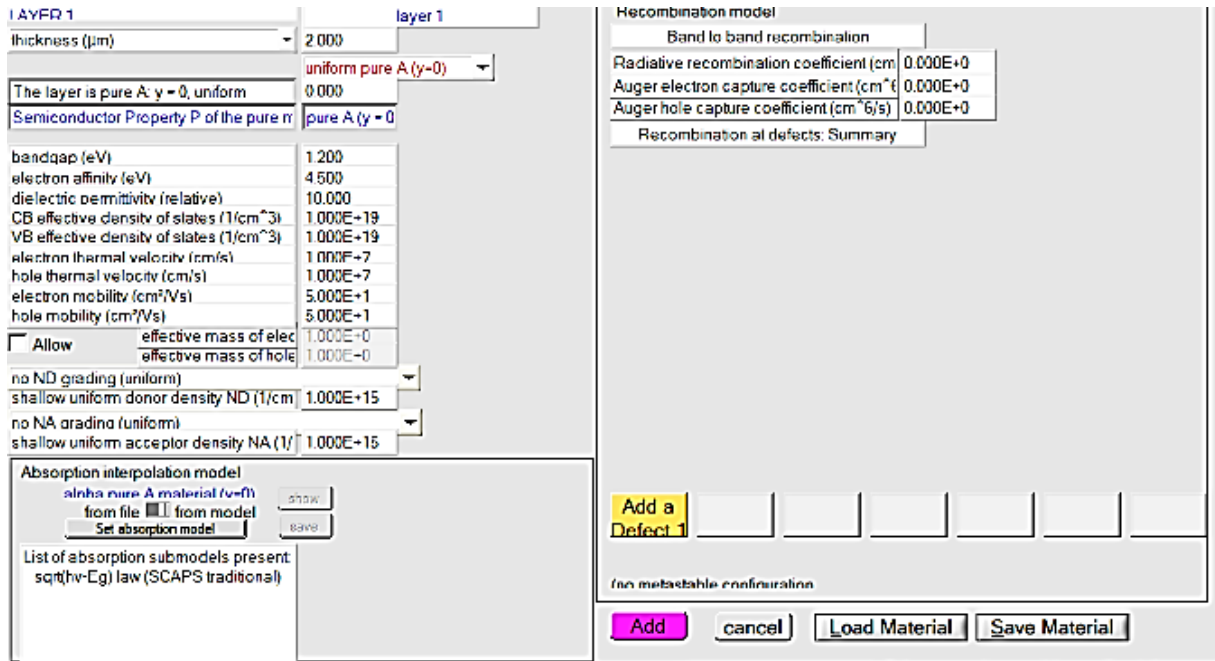


Figure III. 5: Panneaux de définition des propriétés des couches [7]

a) 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 III. 6: Ajouter/supprimer "defects" [7]

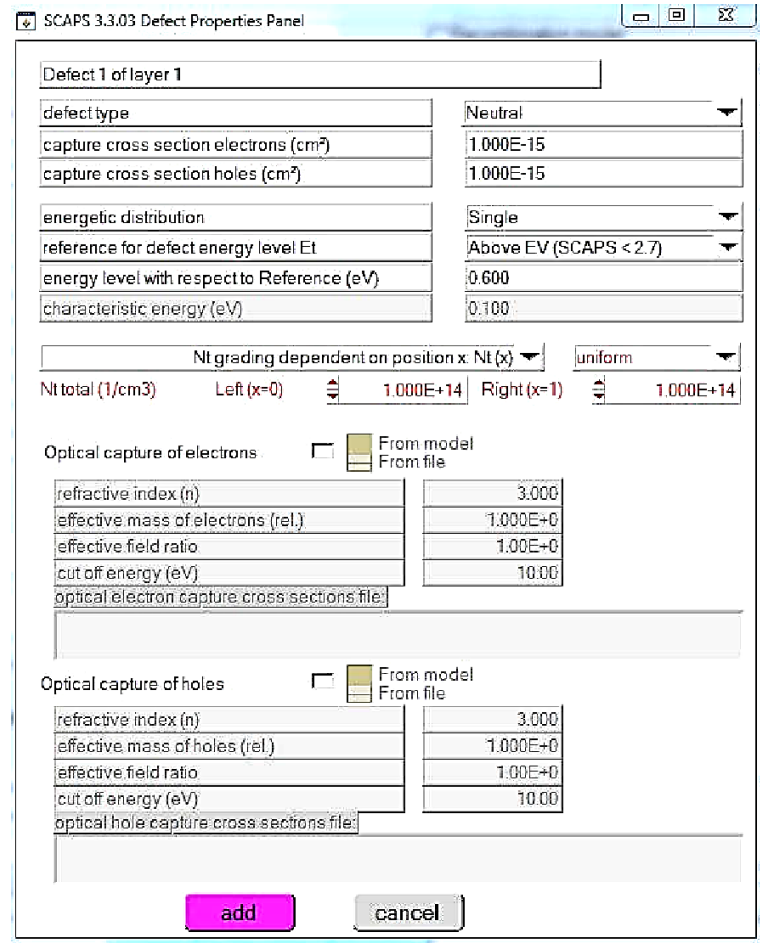


Figure III. 7: Panneaux de définition des propriétés par défaut [7]

b) Mécanisme de recombinaison

Dans SCAPS, on retrouve trois types différents de processus de recombinaison : Band-à-band (radiatif), Shockley-Read-Hall (SRH) et Auger.

- Recombinaison bande à bande : est un processus inverse à celui de l'absorption de photons. Les électrons dans la bande de conduction redescendent dans la bande de valence émette un photon et se recombinent avec des trous (Figure IV.8.a). Le taux de recombinaison dans ce cas peut être exprimé par :

$$R = \gamma(np - n_i^2) \tag{III. 10}$$

- Recombinaison Auger : est un processus lors duquel une recombinaison de pair électron-trou se produit pendant la transition d'un niveau d'énergie élevé à un niveau d'énergie faible et l'énergie résultante est transmise à un troisième porteur (Figure III.8.b). Il peut être décrit par :

$$R = (C_n^A + C_p^A)(np - n_i^2) \tag{III. 11}$$

- Recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) : également appelée recombinaison assistée par un piège (Figure III.8.c). Elle se produit en raison de défauts ou d'impuretés dans les matériaux. Le taux de recombinaison SRH est donné par :

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_0) + \tau_n(p + p_0)} \quad (III.12)$$

Où, R est le taux de recombinaison, γ est le coefficient de recombinaison, τ_n et τ_p sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous. n_0 et p_0 sont respectivement les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre, C_n^A et C_p^A sont des constantes, qui peuvent être définies dans SCAPS.

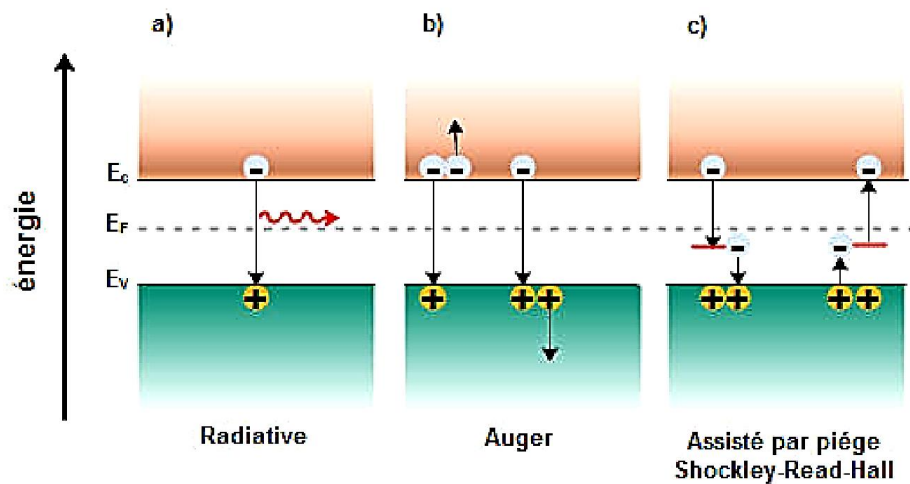


Figure III. 8 : Processus de recombinaison a) radiative, b) Auger et c) SRH [7]

c) Absorption

Le coefficient d'absorption peut être défini comme le degré d'absorption d'énergie par un matériau. Il est déterminé par la nature du matériau (Figure IV.9). Dans SCAPS, le coefficient d'absorption est donné par l'équation III.13 :

$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_{gap}} \quad (III.13)$$

Où, A et B sont les constantes d'absorption, h est la constante de Planck et ν est la vitesse de la lumière [8].

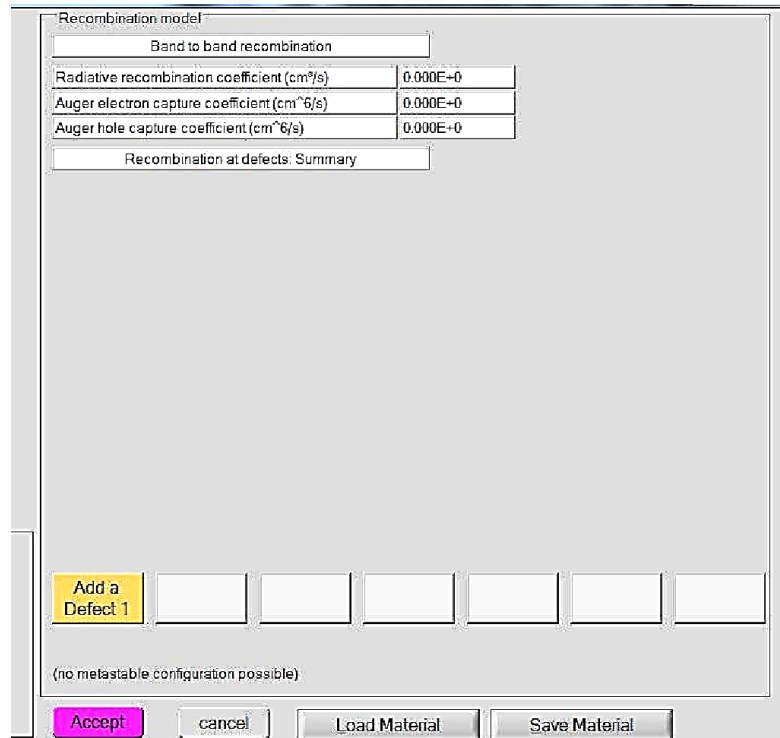


Figure III. 9 : Modèle de recombinaison [7]

d) Contact

Les propriétés du contact peuvent être définies en cliquant sur le bouton de contact avant ou arrière dans le panneau de définition de cellule, ce qui ouvre le "panneau des propriétés du contact", Figure III.10.

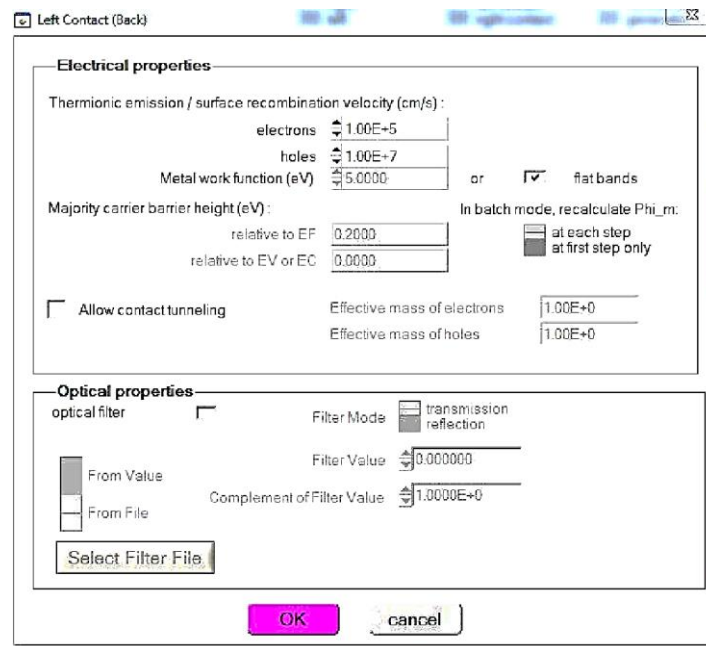


Figure III. 10 : Propriétés du contact [7]

Le travail de sortie est l'énergie minimale requise pour déplacer un électron d'un solide vers le vide. La valeur du travail de sortie est utilisée pour décrire la force de l'énergie de liaison d'un électron dans les matériaux. Dans SCAPS, le travail de sortie peut être définie par l'utilisateur ou calculé à l'aide du modèle de SCAPS, comme représenté dans les équations III.14, III.15 et III.16.

Contact de type-n :

$$\phi_m = \chi + K_B T \ln \ln \left(\frac{N_C}{N_D - N_A} \right) \quad (III. 14)$$

Contact de type-p :

$$\phi_m = \chi + E_{gap} - K_B T \ln \ln \left(\frac{N_C}{N_A - N_D} \right) \quad (III. 15)$$

Contact de type intrinsèque :

$$\phi_m = \chi + K_B T \ln \ln \left(\frac{N_C}{n_i} \right) \quad (III. 16)$$

Où, ϕ_m est le travail de sortie, χ est l'affinité électronique, N_C est la densité effective d'état de la bande de conduction, N_A et N_D sont la concentration de dopage des accepteurs et des donneurs et n_i est la concentration intrinsèque.

e) Théorie de fonctionnement

La théorie principale de SCAPS-1D consiste à résoudre les équations de Poisson et les équations de continuité. La figure III.11 montre la stratégie de fonctionnement de SCAPS-1D. Chaque calcul commence au point départ et utilise l'hypothèse initiale, qui est exprimée en utilisant des niveaux de quasi-Fermi, pour obtenir la situation d'équilibre. Dans cette situation, aucun éclairage et tension ne sont appliqués. Lorsque le point de travail est défini dans un état sans éclairage, la condition d'équilibre est appliquée pour calculer la solution. Lorsqu'elle est réglée dans des conditions d'éclairage, la situation de court-circuit sera calculée et cette nouvelle valeur sera utilisée comme valeur initiale de l'étape suivante.

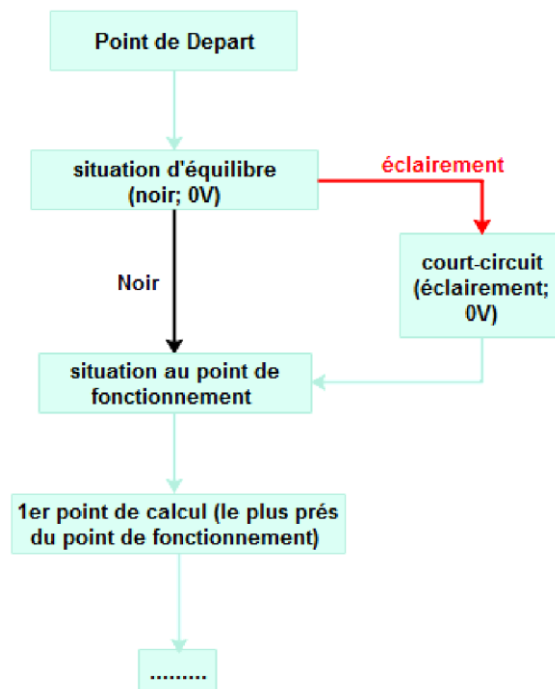


Figure III. 11: Stratégie de fonctionnement de SCAPS[7]

SCAPS utilise pour la convergence un schéma d'itération de type Gummel avec l'algorithme de Mewton-Raphson pour les calculs numériques. Après avoir défini un point de calcul, SCAPS suivra l'algorithme de Newton-Raphson pour effectuer le calcul d'itération jusqu'à l'obtention de la valeur d'optimisation.

III.4.5 Fenêtre de résultat

Cette fenêtre affiche les résultats de la simulation sous forme de graphe avec la possibilité de les sauvegarder ou exporter leurs valeurs. SCAPS est capable de calculer les bandes d'énergie, les concentrations et les courants à un point de fonctionnement donné (Figure III.12), les caractéristiques (I-V), les caractéristiques (C-V) et (C-f), le rendement quantique (QE), et les bandes d'énergies en régime alternatif (ac-bands).

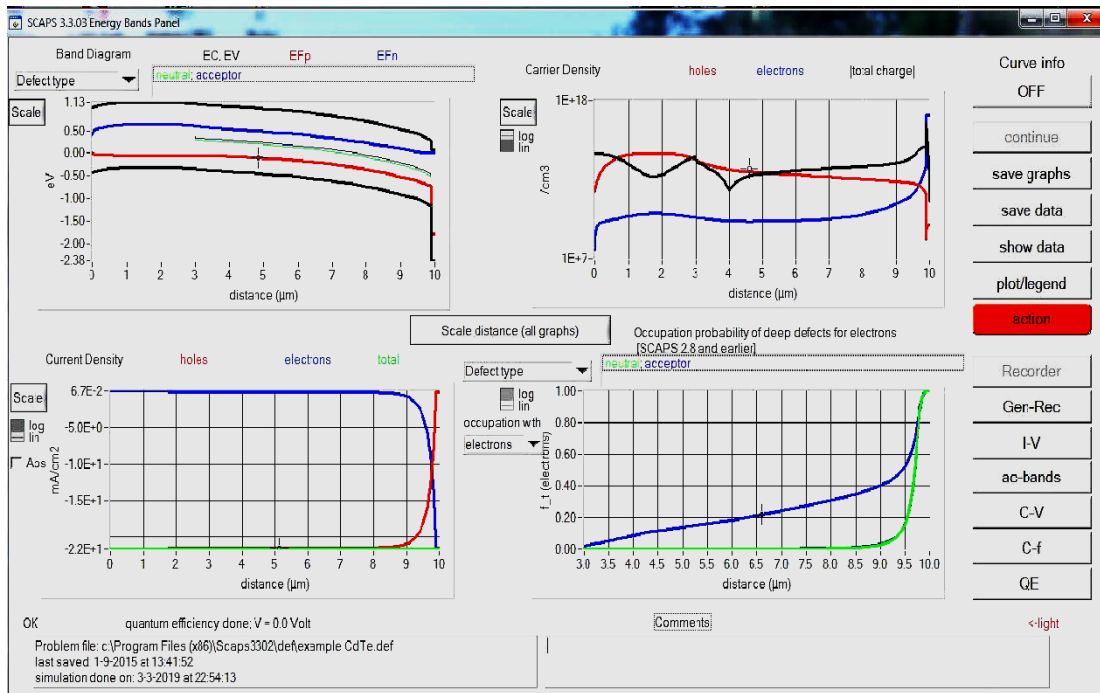


Figure III. 12: Panneau d'affichage des résultats de bande d'énergie, courant et concentration [7]

a) Panneau I-V (I-V panel)

Les résultats des simulations courant-tension sont représentés sur le panneau IV « IV panel ». Le graphique de gauche affiche toutes les simulations I-V. Le graphique de droite fournit des informations détaillées sur les courants de recombinaison dans la dernière simulation. Cela permet de voir le mécanisme de recombinaison principal dans la structure pour des tensions variables. Si la simulation est effectuée sous illumination, les paramètres de la cellule solaire sont calculés et affichés (Figure III.13).

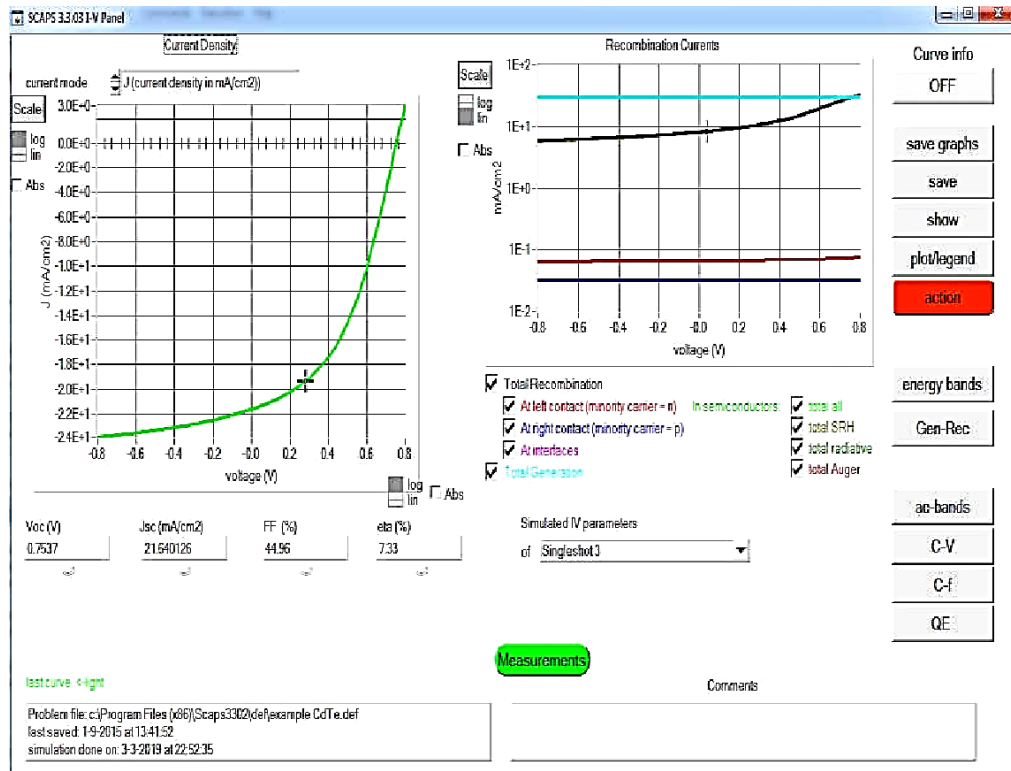


Figure III. 13 : Panneau I-V avec visualisation des paramètres de la cellule [7]

b) Panneau QE (QE-panel)

Comme le montre la figure III.14, ce panneau permet d'analyser les simulations du rendement quantique. Sur l'axe horizontal, il est possible d'afficher la longueur d'onde ou l'énergie photonique de la lumière monochrome. Sur l'axe vertical on a plusieurs possibilités (Figure III.15).

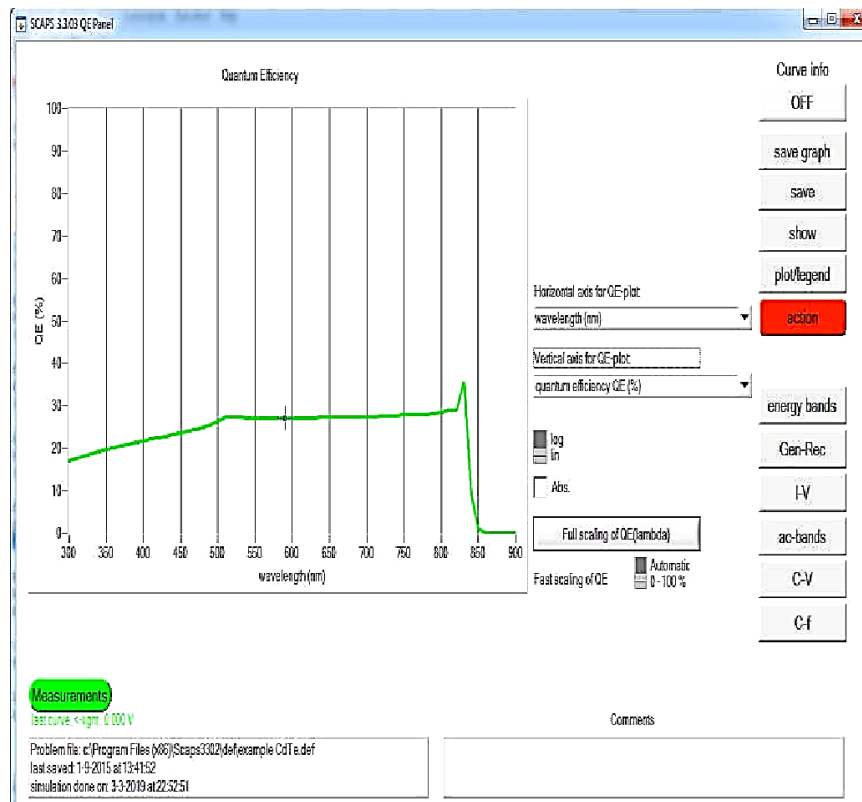


Figure III. 14: Panneau du rendement quantique [7]

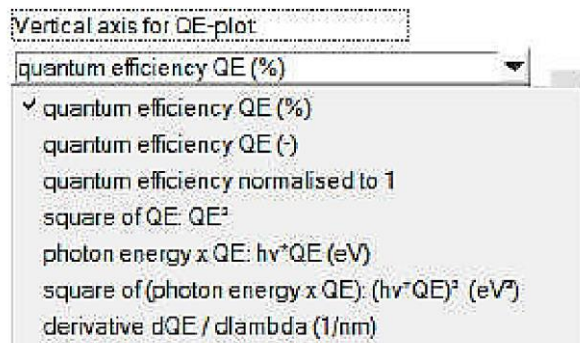


Figure III. 15 : Les choix possible du panneau de rendement quantique QE [7]

III.4.6 Avantages et inconvénients du SCAPS

SCAPS offre plusieurs avantages : une grande vitesse d'exécution, des fichiers d'entrée accessible aux utilisateurs en format texte (donnée spectrale, paramétré de description du dispositif, la possibilité d'introduire des interfaces et la prise en compte des phénomènes de recombinaison, la possibilité d'introduire les résistances séries et parallèles et permet de visualiser les caractéristiques capacité-tension et capacité-fréquence.

Néanmoins, ses inconvénients impliquent l'absence de la gestion du phénomène de réflexion aux interfaces des différentes couches constituant la cellule solaire [9].

III. 5. Simulation de la cellule pérovskite ($CH_3NH_3PbI_3$)

Dans cette étude nous appuyons sur une cellule solaire pérovskite à base de $CH_3NH_3PbI_3$ en raison de ses multiples caractéristiques : son coefficient d'absorption élevé, son mécanisme de transmission élevé, sa facilité de fabrication....etc.

III.5.1 Structure de la cellule

Nous avons pris comme référence la structure développée par Ali Husaina et John Fuller [10]. Le schéma simplifié de la structure de référence est représenté sur la figure III.16.

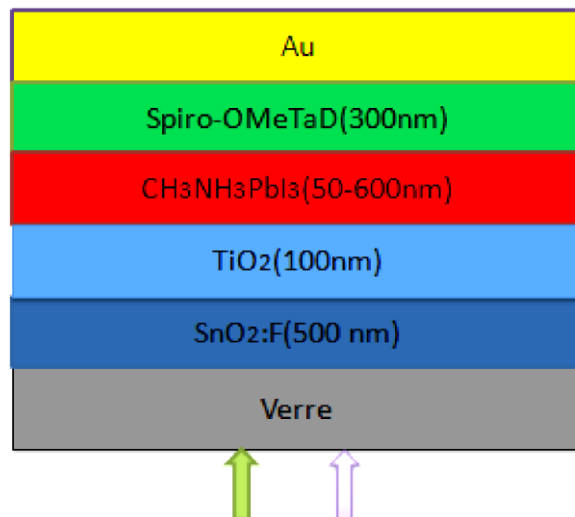


Figure III.16: La structure de la cellule solaire pérovskite de référence [10]

La figure III.16 montre les couches de cellules solaires de la couche de contact en Or (Au) avec une fonction de travail de 5.1eV, Spiro-OMeTAD comme couche de transfert de trous HTL de type p, $CH_3NH_3PbI_3$ la couche absorbante de type n est le cœur de la cellule et le TiO_2 couche de transfert d'électrons ETL de type n. Le dioxyde d'étain dopé au fluor ($SnO_2:F$) représente la couche d'oxyde transparent et conducteurs (Transparent Conductive Oxides:TCO) comme le FTO.

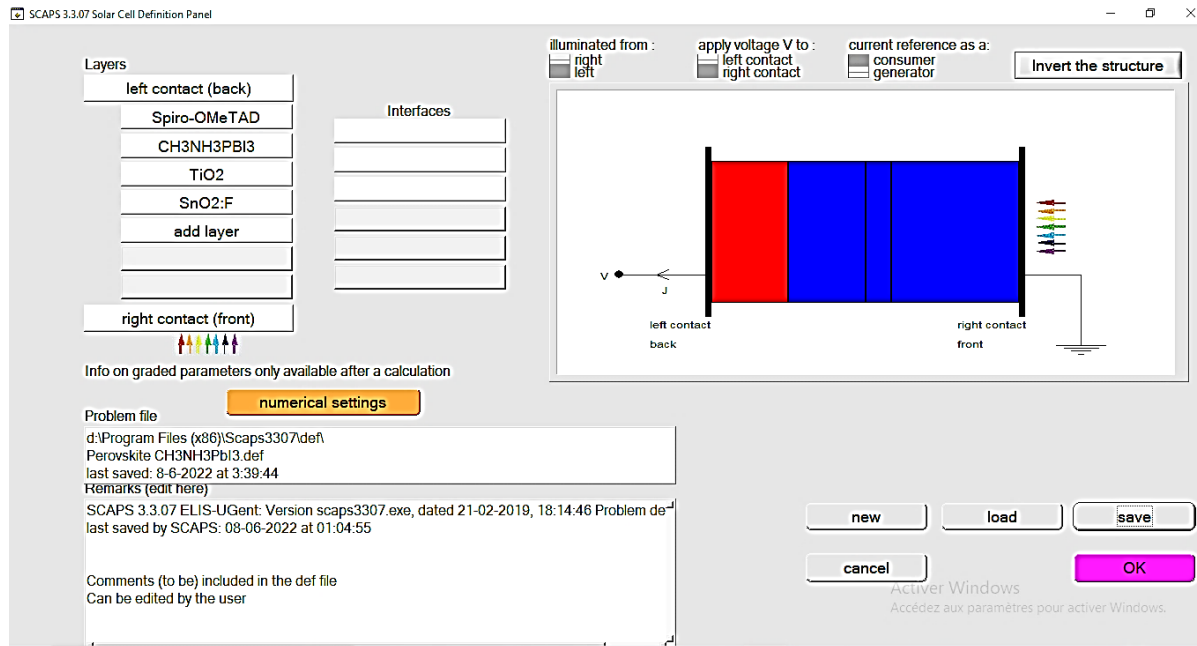


Figure III.17: Structure de la cellule solaire pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ en logiciel SCAPS-1D

III.5.2 Caractéristiques photovoltaïques utilisées pour la modélisation de la PSC

Propriétés électriques et optiques des couches de la cellule utilisés dans la simulation [10] ont été résumés dans le tableau 1,

Caractéristiques PSC	SnO_2	TiO_2 (ETL)	$CH_3NH_3PbI_3$ (PVK)	Spiro-OMeTAD (HTL)
Epaisseur (nm)	500	100	50-600	300
Bande interdite (ev)	3.5	3.2	1.55	2.9
Affinité électronique (ev) χ	4	4.26	3.9	2.2
Permittivité électrique	9	38-108	30	3
CB densité effective des états (cm^{-3})	$2.2 * 10^{17}$	$2.00 * 10^{18}$	$2.2 * 10^{18}$	$2.5 * 10^{18}$

VB densité effective des états (cm^{-3})	$2.2 * 10^{16}$	$1.8 * 10^{19}$	$1 * 10^{18}$	$1.8 * 10^{19}$
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$
Vitesse thermique du trou (cm/s)	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$	$1 * 10^7$
Mobilité électronique (cm^2/Vs)	20	$2.00 * 10^4$	2.20	$2.00 * 10^{-4}$
Mobilité des trous (cm^2/Vs)	10	$1 * 10^3$	2.2	$2.00 * 10^{-4}$
Densité de donneur Nd (cm^{-3})	$1 * 10^{15}$	$6 * 10^{19}$	$9 * 10^{20}$	0
Densité d'accepteur Na (cm^{-3})	0	0	0	$1 * 10^{22}$
Défaut Nt (cm^{-3})	$1 * 10^{15}$	$1 * 10^{15}$	$8.5 * 10^{13}$	$1 * 10^{15}$

Tableau III.1 : Propriétés électriques et optiques des couches de la cellule utilisés dans la simulation

III.6 Résultats et discussions

Afin d'examiner et d'étudier la cellule solaire Pb-pérovskite, une modélisation numérique a été réalisée à l'aide du logiciel de simulation SCAPS-1D. Initialement, nous on simulera une cellule solaire de référence: ($SnO_2/TiO_2/ CH_3NH_3PbI_3/Spiro-OMeTAD/Au$) avec les propriétés électroniques données dans le tableau -1- et ayant des épaisseurs de couche 100 nm, 300 nm et 300 nm pour ETM, PVK et HTL respectivement. La simulation a été réalisée à $T=300$ °K et une masse d'air AM1.5G, éclairage de $1000W/m^2$.

III.6.1 Caractéristiques électriques de la cellule solaire

Sur la figure III.18, figure la caractéristique J-V de la structure simulée.

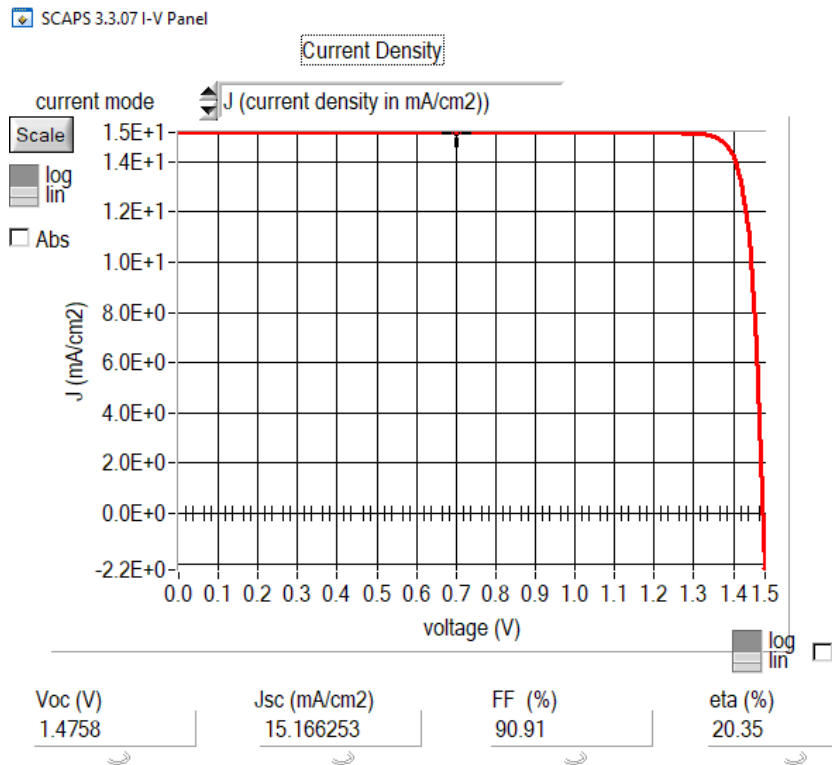


Figure III.18 : Courbe des caractéristique J(V) de la cellule solaire à base de $CH_3NH_3PbI_3$

Comme la montre la figure III.18, la valeur de J_{sc} de la cellule PSC est de 15.16 mA/cm². De plus la valeur de V_{oc} est de 1.47 V. Par conséquent l'efficacité de conversion de puissance PCE est de 20.35 %.

Les performances électriques de la cellule simulée sont rapportées dans le tableau 2 et comparées par la suite avec celles de la référence [10], où on remarque la correspondance totale.

Paramètres PV	Simulation	Référence [10]
V_{co} (V)	1.47	1.48
J_{sc} (mA/cm ²)	15.16	15.16
FF (%)	90.91	90.91
PCE(%)	20.35	20.34

Tableau III.2: Les paramètres (V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE) d'une cellule solaire à base de $CH_3NH_3PbI_3$

Pour améliorer encore les performances de la cellule solaire Pb-pérovskite avec plus de reproductibilité et une stabilité élevée, un processus d'optimisation est appliqué au dispositif PSC par variation de l'épaisseur, du dopage Nd et de la concentration de défauts Nt de la couche pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ et la variation de la température T(°K). Les résultats de variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et PCE) sont discutés dans les sections III.6.2, III.6.3, III.6.4 et III.6.5 respectivement.

III.6.2 Influence de l'épaisseur de la couche absorbeur $CH_3NH_3PbI_3$ sur les performances électriques

L'épaisseur de la couche absorbante est un paramètre important qui joue un rôle essentiel dans l'optimisation des performances de la cellule solaire. Il devrait être optimal afin d'augmenter la densité des électrons et des trous photo-générés et de minimiser leur recombinaison [11]. Nous avons étudié l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante sur les paramètres de performance de la cellule solaire pérovskite à base de $CH_3NH_3PbI_3$. L'épaisseur de la couche pérovskite (PVK) a été modifiée de 100-600 nm en fixant l'épaisseur de la couche HTL à 300 nm et celle de la couche ETL à 100 nm.

Les résultats obtenus par la simulation SCAPS sont regroupés dans le tableau III.3.

Epaisseur PVK (nm)	V_{co} (V)	J_{sc} (mA /m ²)	FF (%)	PCE (%)
100	1.4711	9.7186	89.97	12.86
150	1.4759	12.2241	90.40	16.31
200	1.4772	13.8135	90.65	18.50
250	1.4796	14.7353	90.81	19.76
300	1.4758	15.1662	90.91	20.35
350	1.4743	15.2381	90.97	20.44
400	1.4726	15.0490	91.01	20.17
450	1.4708	14.6725	91.03	19.64
500	1.4689	14.1649	91.04	18.94
600	1.4652	12.9170	91.03	17.23

Tableau III.3: Effet de l'épaisseur $CH_3NH_3PbI_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE

L'influence de l'épaisseur de la couche absorbante $CH_3NH_3PbI_3$ de 100 nm à 600 nm sur les caractéristiques J(V) et le facteur de forme sont illustrés sur les figures III.19 et III.20, pour un coefficient d'absorption égale à $10^5 cm^{-1}$.

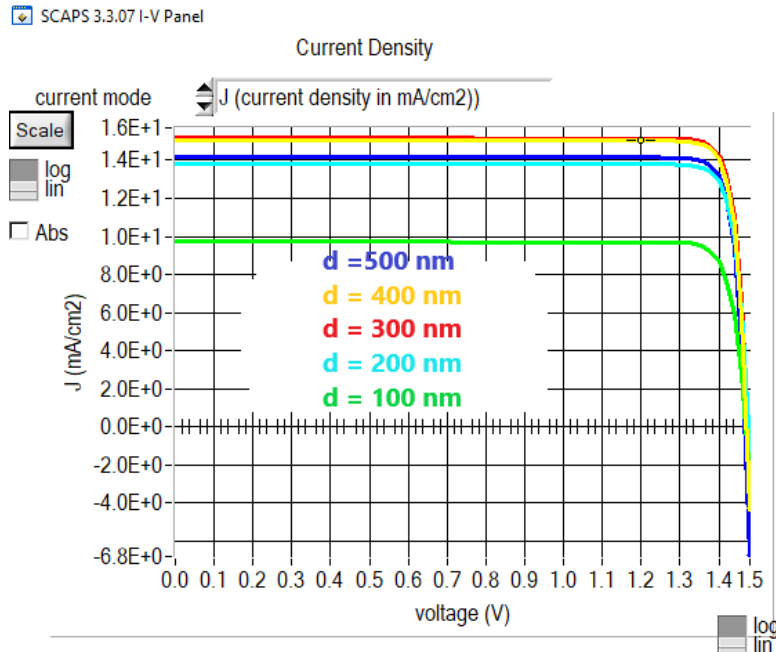


Figure III.19 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $CH_3NH_3PbI_3$ pour différentes épaisseurs de PVK

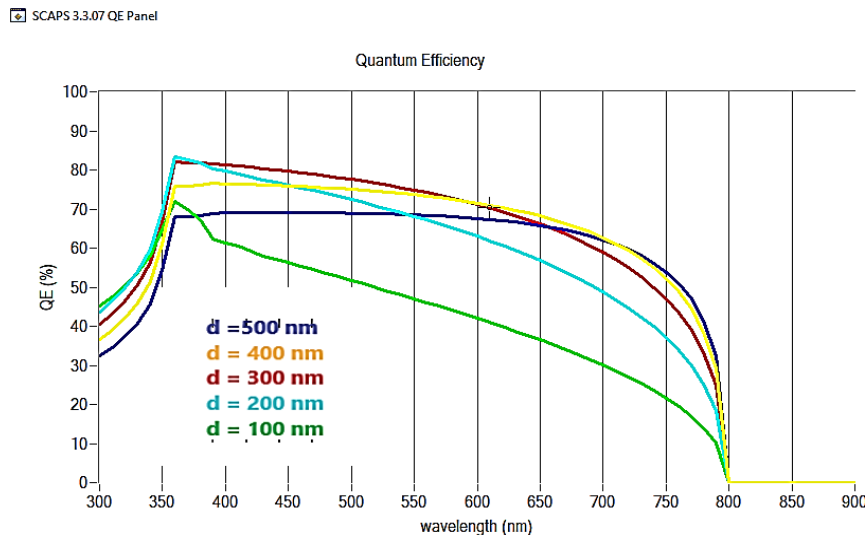


Figure III.20: Variation de rendement quantique externe (EQE) de la cellule solaire $CH_3NH_3PbI_3$ pour différentes épaisseurs de PVK

La figure III.20 présente la variation de rendement quantique externe (EQE) en fonction de la longueur d'onde pour plusieurs épaisseurs de la couche $CH_3NH_3PbI_3$, on

remarque que l'efficacité quantique externe (EQE) augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante, une variation de 100 à 300nm induit une augmentation de 70 à 85%, cependant au-delà de 300nm elle se stabilise à 70% sur la gamme [350-700 nm] du spectre solaire.

La figure III.21 présente la variation des paramètres V_{co} , J_{sc} , FF et du rendement PCE en fonction de l'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_3$.

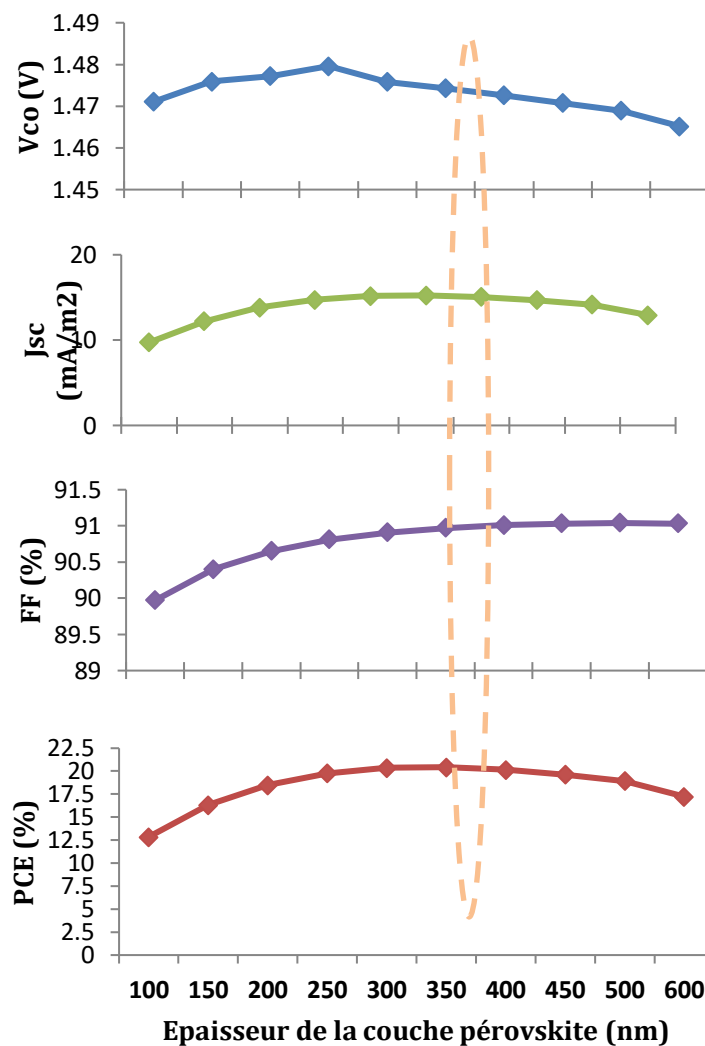


Figure III.21: Variation de V_{co} , J_{sc} , FF et du rendement PCE en fonction de l'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_3$

Les résultats reportés sur le tableau III.3 et affichés aux figures III.19 et III.21 montrent que tous les paramètres photovoltaïques augmentent lorsque l'épaisseur de la couche absorbante $CH_3NH_3PbI_3$ varie de 100 nm à 350 nm à cause du plus de matière pérovskite exposé à la lumière par conséquent plus d'énergie absorbé dans cette couche avec plus des

pairs électrons-trous générés, un rendement maximum de 20.44% est observé pour une épaisseur de PVK d'environ 340 nm. Tandis que à partir de l'épaisseur 350 nm, les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , et PCE diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite, cela est due à la recombinaison interne dans la Pérovskite à cause de la courte durée de vie des porteurs de charge, qui n'auront pas de temps suffisant pour d'accéder à la bande de conduction de la pérovskite. Le FF reste presque constant et cela à cause de la saturation des couches ETL (TiO₂) et HTL (Spiro-OMeTAD).

On conclut que les meilleures performances de la cellule solaire sont obtenues pour une épaisseur d'absorbant PVK de 350 nm.

III.6.3 Influence du dopage (Nd) de la couche (CH₃NH₃PbI₃)

Après avoir identifié les propriétés optimales de l'épaisseur de l'absorbeur, nous allons étudier l'effet de la concentration de donneurs Nd de la couche absorbante sur les caractéristiques de la cellule. Nous avons simulé les performances de la cellule avec la variation de concentration du dopage de la Pérovskite CH₃NH₃PbI₃ de la valeur 10¹⁴cm⁻³ à 10²¹cm⁻³, tout en considérant la valeur optimale de l'épaisseur d'absorbeur de 350 nm. Les résultats obtenus sont reportés au tableau III.4

Dopage (cm ⁻³)	V _{co} (V)	J _{sc} (mA /m ²)	FF (%)	PCE (%)
10 ¹⁴	1.1572	20.4204	81.32	19.22
10 ¹⁵	1.1541	20.4206	81.28	19.15
10 ¹⁶	1.1534	20.4186	80.38	18.93
10 ¹⁷	1.2276	18.9107	70.19	16.29
10 ¹⁸	1.2930	15.5697	82.16	16.54
10 ¹⁹	1.3559	14.9844	87.87	17.85
10 ²⁰	1.4176	14.9943	90.06	19.14
9.10 ²⁰	1.4743	15.2381	90.97	20.44
10 ²¹	1.4772	15.2489	90.98	20.50
2.10 ²¹	1.4954	15.3235	91.14	20.89

Tableau III.4: Effet de la concentration du dopage CH₃NH₃PbI₃ sur les paramètres photovoltaïques V_{co}, J_{sc}, FF et PCE

La figure III.22 présente les caractéristiques J(V) de la cellule pour différents dopages de la couche pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).

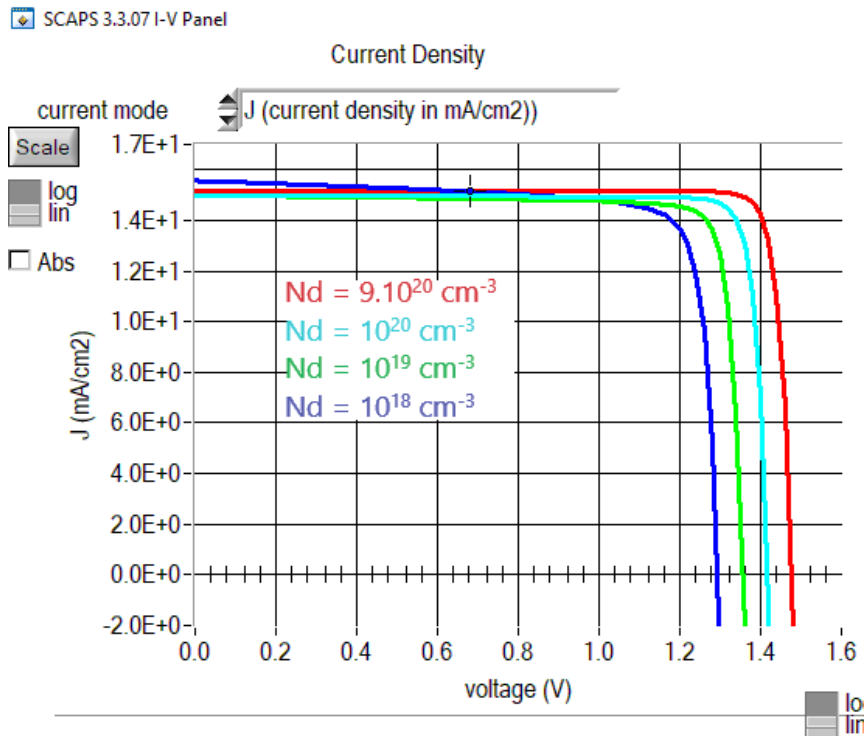
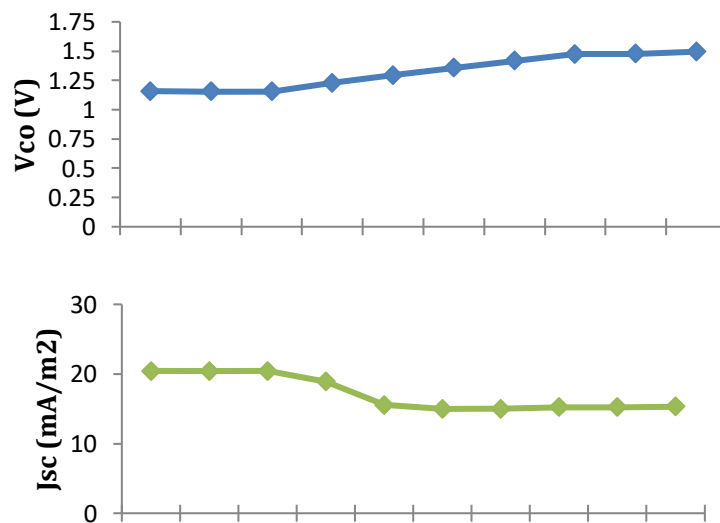


Figure III.22 Caractéristiques J(V) de la cellule pour différent dopages de la couche pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).



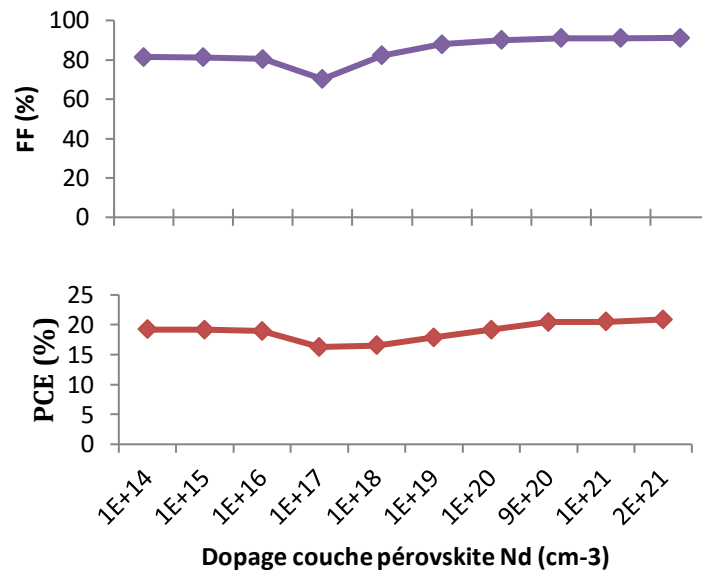


Figure III.23: Variation de Vco, Jsc, FF et du rendement PCE en fonction du dopage de la couche CH₃NH₃PbI₃

On constate une stabilité des valeurs de tous les paramètres photovoltaïques dans l'intervalle $[10^{14}-10^{16}\text{cm}^{-3}]$. A partir de 10^{16}cm^{-3} , on remarque un changement important, la tension Vco croît rapidement et atteint 1.49V pour les forts dopages, par contre la densité du courant de court-circuit décroît rapidement et se stabilise à une valeur minimale de 15 mA/cm² pour les concentrations supérieures à 10^{17}cm^{-3} .

Les deux autres paramètres FF et PCE chutent pour les dopages moyens $[10^{16}-10^{17}\text{cm}^{-3}]$ puis présente une croissance en fonction de la concentration pour les forts dopages au-delà de 10^{17}cm^{-3} . Nous avons obtenu un rendement maximal de 20.89% pour une valeur Nd de 2.10^{21}cm^{-3}

La différence entre les bandes d'énergie la couche absorbante et de la couche HTL augmente avec l'augmentation de la concentration de dopage ; ainsi, le potentiel électrique est amélioré, ce qui signifie que le champ électrique peut accélérer la séparation des porteurs générés par les photons, ce qui, à son tour, réduit le taux de recombinaison et améliore les performances de la cellule. Une concentration de 1.10^{21}cm^{-3} de la couche pérovskite est suffisante pour obtenir les performances souhaitées de la cellule.

III.6.4 Influence de la concentration de défauts Nt de la couche Pérovskite CH₃NH₃PbI₃ sur les paramètres photovoltaïques Vco, Jsc, FF et PCE

Pour étudier la dépendance des caractéristiques du dispositif vis-à-vis de la densité de défauts N_t de la couche absorbante en pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$, nous avons simulé les performances de la cellule solaire pour des concentrations de défauts de 10^{11} cm^{-3} à 10^{16} cm^{-3} . Les résultats sont présentés sur le tableau III.5 et les figures III.24 et III.25

Concentration de défauts N_t (cm^{-3})	V_{co} (V)	J_{sc} (mA / m^2)	FF (%)	PCE (%)
1.10^{11}	1.6646	20.4330	91.85.50	31.24
1.10^{12}	1.6060	20.3596	91.25	29.84
1.10^{13}	1.5405	19.6509	91.02	27.55
$8.5.10^{13}$	1.4743	15.2381	90.97	20.44
1.10^{14}	1.4705	14.5047	90.90	19.39
1.10^{15}	1.4075	5.8195	90.28	7.40
1.10^{16}	1.3411	1.4573	88.34	1.73

Tableau III.5: Effet des défauts N_t dans la couche Pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE

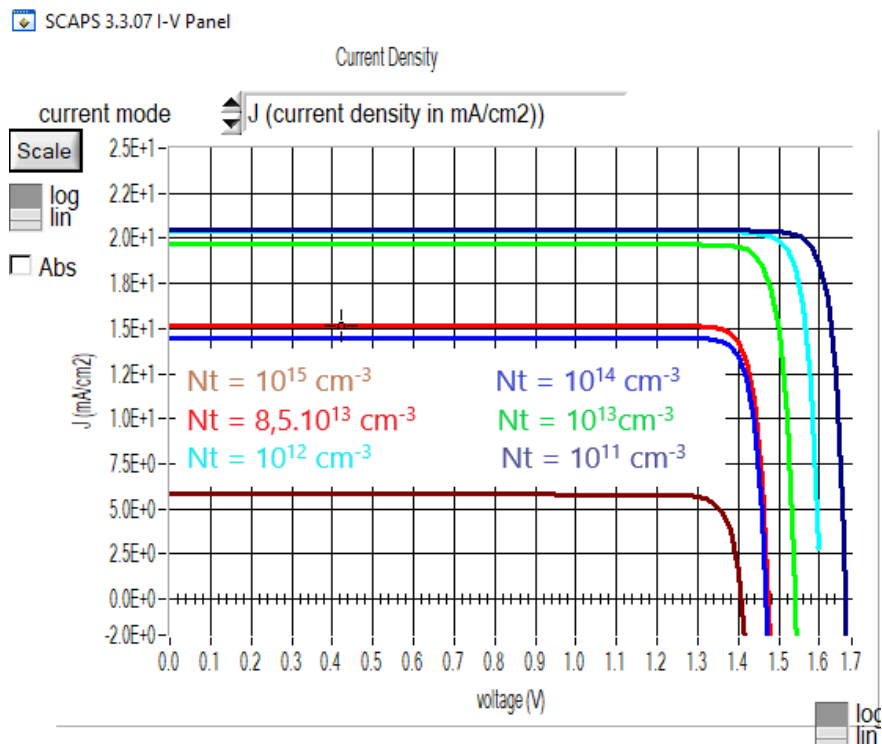


Figure III.24 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $CH_3NH_3PbI_3$ pour différentes densités de défauts N_t dans l'absorbeur

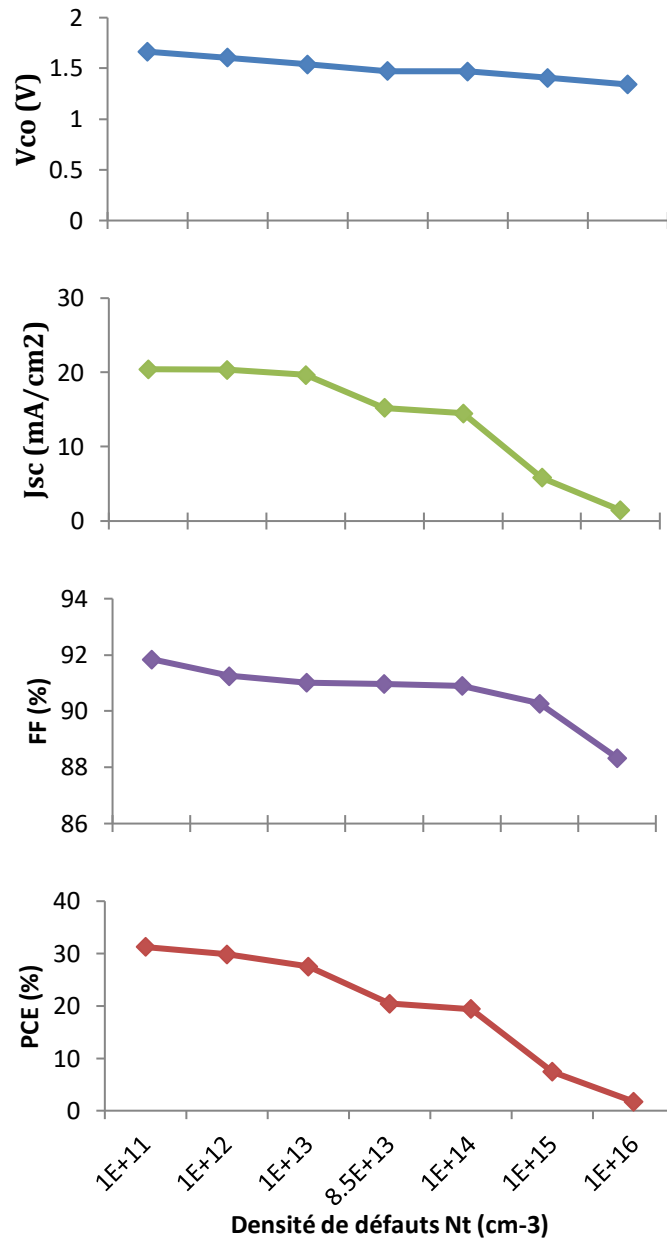


Figure III.25 : Variation des paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE en fonction de défaut N_t de la couche Pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$

Nous pouvons constater que les paramètres photovoltaïques des cellules pérovskite sont sensibles aux densités de défauts élevées dans la couche absorbante, lorsque la densité des défauts augmente les caractéristiques de la cellule diminuent. Ainsi on observe une chute

considérable de tous les paramètres de la cellule pour les hautes densités de défauts. Cette dégradation des performances de la cellule peut être associée à la durée de vie des porteurs. En effet, au fur et à mesure que la densité de défauts augmente, la durée de vie des porteurs sera réduite et la probabilité de capter les porteurs photo-générés augmente ce qui provoque une diminution de la densité de photo-courant généré et réduit l'efficacité de la cellule.

III.6.5 Influence de la température T (K) sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE

En tant que facteur clé affectant directement les performances de la cellule solaire, la température de fonctionnement joue un rôle important pour contrôler les performances des cellules solaires pérovskites. Les figures III.26 et III.27 présentent l'évolution des paramètres photovoltaïques de la cellule pérovskites à base de Pb en variant la température entre 270°K et 330 °K.

Température de la PSC (°K)	V_{co} (V)	J_{sc} (mA /m ²)	FF (%)	PCE(%)
270	1.4910	15.0684	91.74	20.61
280	1.4856	15.1177	91.48	20.55
290	1.4804	15.1745	91.20	20.49
300	1.4743	15.2381	90.97	20.44
310	1.4684	15.3045	90.71	20.39
320	1.4628	15.3884	90.34	20.36
330	1.4568	15.5091	90.18	20.37

Tableau III.6: Effet de la température de la PSC sur les paramètres photovoltaïques V_{co} , J_{sc} , FF et PCE.

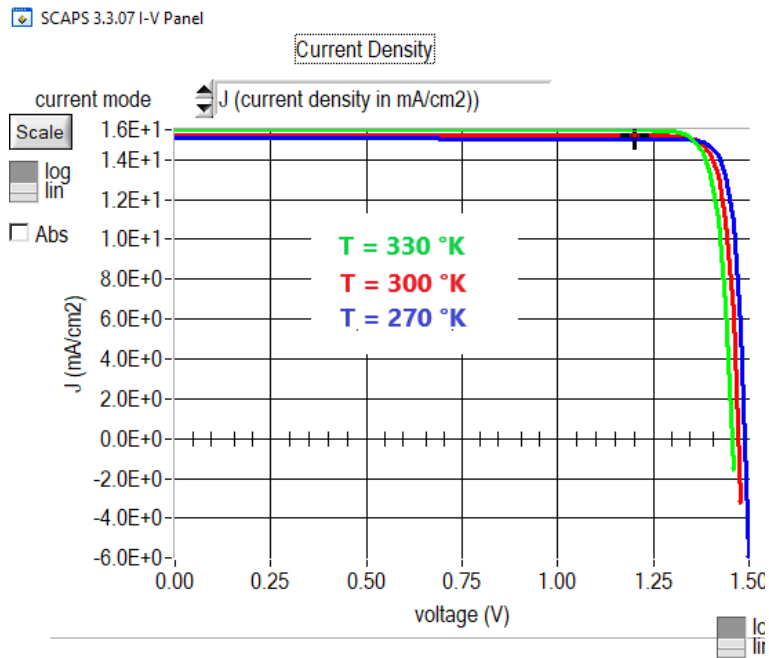


Figure III.26 : Caractéristique J(V) de la cellule solaire $CH_3NH_3PbI_3$ pour différentes températures de la cellule

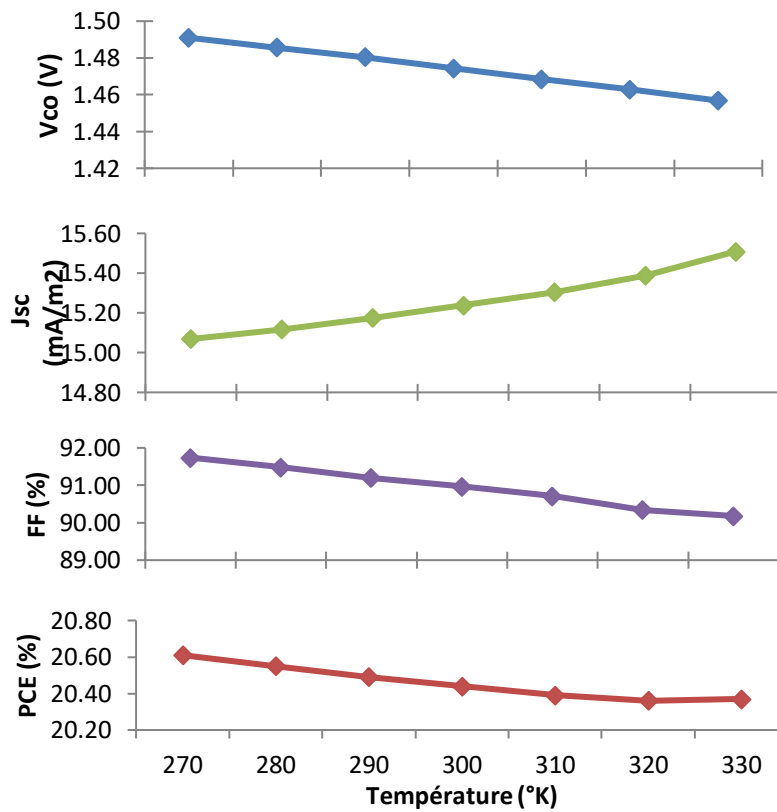


Figure III.27: Variation des paramètres photovoltaïques V_{co}, J_{sc}, FF et PCE en fonction de la température

Les résultats de la simulation montrent une dépendance différente des paramètres photovoltaïques de la température. Comme le montre les figures III.26 et III.27, la tension de court-circuit V_{co} , le facteur de forme FF et le rendement PCE de la cellule diminuent avec l'augmentation de la température. Le courant de court-circuit J_{cc} par contre augmente légèrement en fonction de la température.

D'après les résultats obtenus on remarque que l'augmentation de la température à un effet néfaste sur les performances de la cellule. Lorsque la température de fonctionnement augmente, la largeur de la bande interdite diminue ce qui favorise la génération de plus de porteurs (électron/trou) et augmente le courant J_{cc} . Toutefois le taux de recombinaison des porteurs est également affecté par la température, il augmente avec l'accroissement de la température. C'est pour cette raison on observe une réduction de l'efficacité, du facteur de forme et du rendement pour des températures élevées. Donc pour obtenir une bonne efficacité de la cellule, la température de fonctionnement optimale doit être fixée à des valeurs inférieures à 330 °K.

III.6.6 Courbe des caractéristiques I-V optimisée

La cellule optimisée est obtenue en maintenant tous les paramètres améliorés, elle est composée d'une couche d'absorbant $CH_3NH_3PbI_3$ d'une épaisseur de 350 nm insérée entre une couche ETM de type n d'oxyde transparent TiO_2 d'une épaisseur de 100 nm et une couche HTL de type p de Spiro-OMeTAD présentant une épaisseur de 300 nm. La couche pérovskite présente un dopage de type n de l'ordre de 10^{21} cm^{-3} , et une densité de défaut de 10^{14} cm^{-3} .

La courbe des caractéristiques I-V de la cellule, obtenue à la température $T = 300 \text{ K}$, est représentée sur la figure IV.6. Les paramètres photovoltaïques trouvés sont ($J_{sc} = 16.074 \text{ mA} / \text{cm}^2$, $V_{co} = 1.48 \text{ V}$, $FF = 91 \%$ et $PCE = 21.70 \%$).

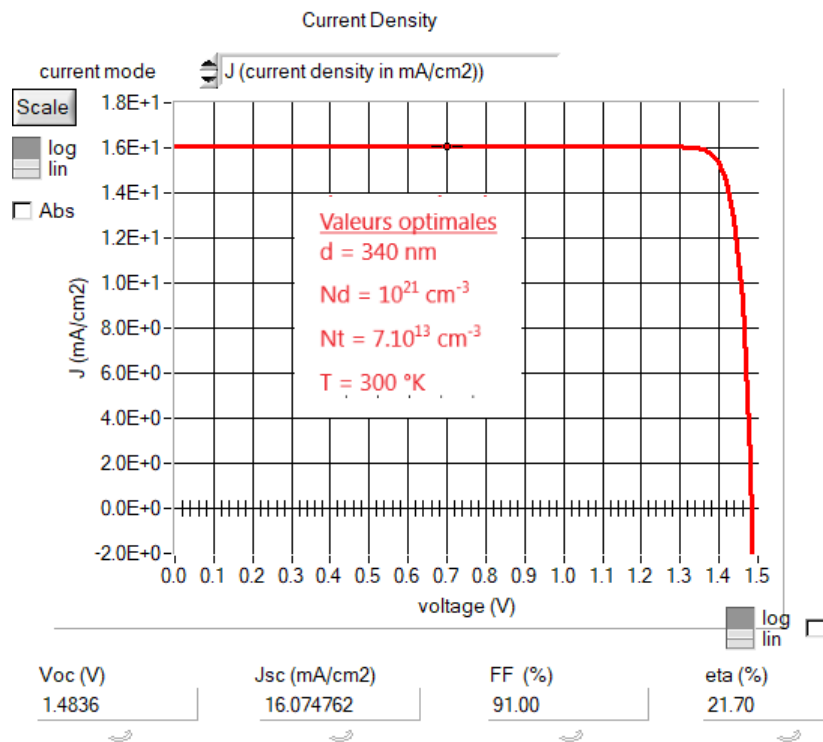


Figure III.28: paramètres photovoltaïques de la structure optimisée

III.7. Conclusion

Dans ce chapitre les performances optimales de la cellule solaire à base de pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ont été déterminées par des simulations à l'aide du logiciel SCAPS. Les résultats de simulation ont clairement montré que l'épaisseur de la couche absorbante de la cellule solaire joue un rôle important dans les performances de la cellule PVS. Les résultats obtenus prévoient un rendement de conversion optimale de 21.70%, un courant de court-circuit l'ordre de 16 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 1.48 V et un facteur de forme de 90%.

Bibliographie de Chapitre III

- [1] TM Daisuke Hironiwa, Masashi Murata, Naoki Ashida et Zeguo Tang, "Simulation of optimum band-gap grading profile of Cu₂ZnSn (S, Se) 4 cellules solaires avec différentes propriétés optiques et de défaut avec différentes propriétés optiques et de défaut" , Jpn J Appl Phys, vol. 53, non. 53, p. 1-9, 2014.
- [2] Khattak YH. Modélisation des cellules solaires de canapé mince à haute efficacité de conversion de puissance 2019.
- [3] K. L. Chopra, P. D. Paulson et V. Dutta, « Cellules solaires à couche mince : un aperçu », Prog. Photovolt. Rés. Appl., Vol. 12, non. 2-3, p. 69-92, 2004.
- [4] Tinoco, C. Rincoón, M. Quintero et G. Sanchez Perez, « Diagramme de phase et écarts d'énergie optique pour les alliages CuInyGal – ySe2 », Phys. Statut Solidi A, vol. 124, non. 124, p. 427, 1991.
- [5] A. Cherouana et R. Labbani, « Etude des cellules solaires CZTS et CZTSSe pour la sélection des couches tampons », Appl. Le surf. Sci., Vol. 424, non. 424, p. 251-255, 2017.
- [6] A. Chihi, M.F. Boujmil et B. Bessais, « Investigation of CIGS / performance using SCAPS software for high efficient solar cells », J Elect Mat, vol. 46, non. 46, pages 5270-5277, 2017.
- [7] K. Kim et al., "Simulations of chalcopyrite/c-Si tandem cells using SCAPS-1D", Sol. Énergie, vol. 145, non. 145, pages 52-58, 2017.
- [8] M.K. Omrani, M. Minbashi, N. Memarian et D-H. Kim, "Améliorer les performances des cellules solaires CZTSSe en appliquant une couche BSF SnS", Solid-State Elect, vol. 141, non. 141, pages 50-57, 2018.
- [9] KANOUN Ahmed-Ali "Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques "p104,2019
- [10] «A. Husainat, W. Ali, P. Cofie, J. Attia, et J. Fuller," Simulation and Analysis of Methylammonium Lead Iodide", vol. 7, no 2, p. 33, 2019»
- [11] K.Abdelli et L.Abdelli , Mémoire Master 2 “Design of perovskite solar cells Université Mohamed khider à Biskra 2020

Conclusion générale

Conclusion Générale

Conclusion générale

Le travail réalisé dans ce mémoire constitue une contribution à l'étude et à la simulation des cellules solaires aux couches minces basées sur les matériaux pérovskite. Notre principal objectif a été de modéliser les caractéristiques électriques des cellules solaires et de prédire leurs comportements en utilisant le simulateur solaire unidimensionnel SCAPS-1D.

On s'intéresse principalement à étudier les cellules solaires à base de matériaux pérovskite hybride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, Le but visé est de faire maximiser leurs rendements en déterminant les paramètres optimaux de fonctionnement.

Notre travail prévoit d'étudier l'effet de l'épaisseur de la couche pérovskite sur le rendement de la cellule solaire, l'effet de la température, l'effet de la densité des défauts et de la concentration de la couche pérovskite sur les caractéristiques de la cellule solaire.

Dans un premier temps nous nous sommes intéressés à étudier l'effet de l'épaisseur de la couche d'absorbant sur les performances de la cellule. Nous avons trouvé que lorsque l'épaisseur de la couche absorbante $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ varie de 100 nm à 350 nm et à cause du plus de matière pérovskite exposé à la lumière par conséquent plus d'énergie absorbé dans cette couche avec plus des paires électrons-trous générés, un rendement maximum de 20.44% est observé pour une épaisseur de PVK d'environ 350 nm. Tandis que à partir de l'épaisseur 350 nm, les paramètres photovoltaïques V_{oc} , J_{sc} , et PCE diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite, cela est due à la recombinaison interne dans la Pérovskite à cause de la courte durée de vie des porteurs de charge, qui n'auront pas de temps suffisant pour d'accéder à la bande de conduction de la pérovskite. Le FF reste presque constant et cela à cause de la saturation des couches ETL (TiO_2) et HTL (Spiro-OMeTAD).

Nous avons étudié l'effet de la concentration de donneur Nd de l'absorbant sur les performances de la cellule. La concentration de donneur de la couche pérovskite a aussi un impact direct sur les performances des deux cellules étudiées. Les résultats obtenus montrent qu'il y a une augmentation du rendement avec une augmentation de la valeur Nd de la couche absorbante. Nous avons étudié par la suite l'effet de la température de fonctionnement sur les performances de cellule solaire. D'après les résultats obtenus on remarque que l'augmentation de la température à un effet néfaste sur les performances de la cellule, c'est pour cette raison on observe une réduction de l'efficacité, du facteur de forme et du rendement pour des températures élevées.

Conclusion Générale

Enfin d'autres simulations ont été effectuées pour étudier l'impact de la variation de la densité des défauts sur les performances de la cellule étudiée. Nous pouvons conclure que la réduction de la densité des défauts est un facteur critique pour améliorer les performances de la cellule. Ainsi pour atteindre des performances photovoltaïques élevées, la densité de défauts dans la pérovskite doit être réduite en améliorant la structure cristalline de la couche absorbante.

La cellule optimisée est obtenue en maintenant tous les paramètres améliorés, elle est composée d'une couche d'absorbant $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ d'une épaisseur de 350 nm insérée entre une couche ETM de type n d'oxyde transparent TiO_2 d'une épaisseur de 100 nm et une couche HTL de type p de Spiro-OMeTAD présentant une épaisseur de 300 nm. La couche pérovskite présente un dopage de type n de l'ordre de 10^{21} cm^{-3} , et une densité de défaut de 10^{14} cm^{-3} .

A la température $T = 300 \text{ K}$, les résultats obtenus prévoient un rendement de conversion optimale de 21.70%, un courant de court-circuit l'ordre de 16 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 1.48 V et un facteur de forme de 91%.

Résumé :

Dans le contexte global de la diversification de l'utilisation des ressources naturelles, le recours aux énergies renouvelables et en particulier le solaire photovoltaïque se fait de plus en plus fort. A ce titre, le développement d'une nouvelle génération de cellules photovoltaïques à base de pérovskite semble prometteur. Dans ce travail, on a étudié les performances photovoltaïques de cellule solaire basée sur le matériau hybride pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en utilisant l'outil de simulation unidimensionnel SCAPS.

L'objectif principal est d'améliorer les performances de cellule solaire en déterminant les paramètres optimaux pour leur fonctionnement. Dans ce contexte, on a étudié l'influence de plusieurs paramètres physiques qui contribuent à améliorer le rendement. On s'est intéressé plus particulièrement à étudier l'effet de l'épaisseur de la couche pérovskite, l'effet de la densité des défauts, de la concentration de la couche pérovskite et de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire.

Mots clés : Cellules solaires, Pérovskite, Simulation, SCAPS

الملخص:

في السياق العالمي لتنويع استخدام الموارد الطبيعية، أصبح استخدام الطاقات المتجددة وخاصة الطاقة الشمسية الضوئية أقوى. على هذا النحو، فإن تطوير جيل جديد من الخلايا الضوئية المستندة إلى البيروفسكايت يبدو واعداً. في هذا العمل، درسنا الأداء الكهروضوئي للخلايا الشمسية بناءً على مواد البيروفسكايت الهجينة $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ باستخدام أداة المحاكاة أحادية البعد SCAPS. الهدف الرئيسي هو تحسين أداء هذه الخلية الشمسية من خلال تحديد المعلمات المثلى لتشغيلها. في هذا السياق، تمت دراسة تأثير العديد من العوامل الفيزيائية التي تساهم على تحسين أدائها. كنا مهتمين بشكل خاص بدراسة تأثير سماكة طبقة البيروفسكايت و تأثير درجة الحرارة و تأثير كثافة العيوب و تركيز طبقة البيروفسكايت على خصائص الخلية الشمسية.

الكلمات المفتاحية : الخلايا الشمسية, البيروفسكايت, المحاكاة, برنامج SCAPS,