



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEURE ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEM

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Computationnelle

Par :

Mlle BOUAYED AGHA Hidayet

Sur le thème

**Modélisation et simulation électrique des cellules solaires
organiques
(Influence des paramètres électriques sur les performances de
la cellule P3HT : PCBM)**

Soutenu publiquement le 03 juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr Abdalkhalaq HADDAM	MCA	Université de Tlemcen	Président
Mme Souhila BENYELLES	MCB	Université de Tlemcen	Encadrante
Mme Nawel BOUAYED	MCB	Université de Tlemcen	Examinatrice

Année Universitaire : 2020 ~ 2021

Dédicaces

Toutes les lettres ne sauraient trouver les mots qu'il faut... tous les mots ne sauraient exprimer la gratitude, l'amour, le respect, la reconnaissance.... Aussi, c'est tout simplement que :

Je dédie ce travail :

A mes très chers parents « Nesr eddine » et « Zakia »

Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour, l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu pour vous. Vous avez su m'inculquer le sens de la responsabilité, de la confiance en soi face aux difficultés de la vie. Vos conseils ont toujours guidé mes pas vers la réussite. Vous n'avez cessé de me soutenir moralement ainsi que matériellement et de m'encourager durant toutes les années de mes études. Je vous dois ce que je suis aujourd'hui et ce que je serais demain et je ferai toujours de mon mieux pour rester votre fierté et ne jamais vous décevoir.

A ma très chère sœur « Hadjer »

Merci d'être toujours à mes côtés, par ta présence et ton amour, merci pour ton courage et ta générosité. Un grand merci pour ton mari **Chakib** aussi.

A mes deux chers Frères « Sidi Mohamed » et « Aboubakr »

Merci pour vos encouragements. J'espère que mon mémoire sera pour vous une source de fierté et qu'il sera un exemple à suivre. Que Dieu vous protège pour moi. Je vous aime plus que tout au monde.

A mon regrettable Grand père « ABA »

Celui qui m'a toujours soutenue et m'a donné le courage même s'il est loin de moi mais il est toujours présent dans mon esprit ... que dieu l'accueille dans son vaste paradis.

A mon petit neveu adoré « Racimou »

Même s'il est encore enfant et qu'il ne comprend rien à tout ceci mais j'ai insisté beaucoup à le citer dans mes dédicace ... Diya qui t'aime.

A mon très cher meilleur ami « Sofiene »

Je te souhaite tant de bonheur dans tout ce que vous entreprendrez.

A toute ma famille

Mes tantes, mes oncles et mes cousin(e)s pour leur confiance en moi.

A tous mes ami(e)s du département... Particulièrement à « **Yasmine** » celle à qui je peux compter. En témoignage de l'amitié qui nous unit.

A mes collègues de travail

A tout ce qui m'ont donné la force de continuer.

Hidayet !

Remerciements

Mon remerciement va en premier lieu à ALLAH le tout-puissant de m'avoir donné la capacité d'écrire et de réfléchir, la force d'y croire, la patience d'aller jusqu'au bout du rêve malgré les moments difficiles que nous avons passés cette année, et enfin le bonheur de lever ma main vers le ciel et de dire « El-Hamdou Li Lah Ya Kayoum ».

Ce travail a été réalisé au sein de l'équipe du Laboratoire Automatique Tlemcen (LAT), Département de Physique, Faculté des sciences, Université Abou Bekr Belkaid Tlemcen.

Je tiens à remercier particulièrement mon Encadrante Madame Boukli Hacène Souhila née Benyelles, Maître de Conférence à l'Université de Tlemcen et membre du Laboratoire Automatique Tlemcen « LAT » avec qui j'ai eu le privilège de travailler parmi son équipe, d'apprécier ses qualités et ses valeurs. Son sérieux, sa compétence m'ont énormément marqué. Veuillez trouver ici l'expression de ma respectueuse considération et ma profonde admiration pour toutes vos qualités scientifiques et humaines. Ce travail est pour moi l'occasion de vous témoigner ma profonde gratitude.

Un profond respect et un remerciement spécial pour Monsieur Brahmi Badr Eddine Nabil Maître de Conférences à l'Université de Tlemcen qui m'a été d'un précieux conseil et de m'avoir offert toute son aide.

Un remerciement particulier pour Monsieur le Chef de Département Monsieur Boufatah Reda pour sa générosité et son soutien moral et pour tous les enseignants de qualité de notre Département de Physique qui nous ont accompagnés durant ces cinq années.

Je remercie vivement Monsieur Haddam Abdelkhalq Maître de Conférence à l'Université de Tlemcen pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être le président de jury.

Je remercie aussi Madame Bouayed Nawel née Kanoun Maître de Conférence à l'Université de Tlemcen qui a accepté d'examiner ces travaux.

Enfin, je voudrais remercier tous les amis et collègues de promotion que j'ai eu le plaisir de côtoyer pendant cette période de formation, qui m'ont apporté conseils et rendu ces années très belles expériences de ma vie exclusivement pour Yasmine Benosman et Yasmine Chalabi.

Bouayed Agha Hidayet

Liste des figures

CHAPITRE I :

Figure 1.1 : structure d'une cellule photovoltaïque.

Figure 1.2 : Des petites molécules accepteuses d'électrons utilisées dans les cellules solaires organiques.

Figure 1.3 : Des petites molécules donneuses d'électrons utilisées dans les cellules solaires organiques.

Figure 1.4 : Exemples de polymères conjugués utilisés dans les cellules PV organique.

Figure 1.5 : Recouvrement des orbitales 2pz dans la molécule de polyéthylène.

Figure 1.6 : Configuration électronique de l'état fondamental et de l'état excité et de la fonction d'onde des orbitales HOMO et LUMO de la molécule d'éthylène.

Figure 1.7: Diagrammes des bandes d'énergie des polymères conjugués et des accepteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques.

Figure 1.8 : principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque organique.

Figure 1.9 : Exciton de Frenkel et de Wannier.

Figure 1.10 : Structure d'une cellule de type Schottky.

Figure 1.11 : représentation des niveaux d'énergie d'un contact ITO/organique/Al.

Figure 1.12 : Structure d'une cellule hétérojonction de type bicouche.

Figure 1.13 : Représentation des niveaux d'énergie d'un contact ITO/donneur/accepteur/Al d'une cellule de structure bicouche.

Figure 1.14 : Structure d'une cellule hétérojonction de type réseaux interpénétrés.

Figure 1.15 : structure d'une cellule solaire organique.

Figure 1.16 : Structures d'une hétérojonction de volume (mélange interpénétré).

Figure 1.17 : Diagramme de bande d'une cellule : ITO/ PEDOT/ P3HT: PCBM Al (dopé par LiF).

Figure 1.18 : Caractéristique I(V) d'une cellule solaire.

Figure 1.19 : Les différents régimes de V_{OC} selon l'éclairement.

CHAPITRE II :

Figure 2.1 : Schéma équivalent d'une cellule solaire idéale

Figure 2.2 : Circuit électrique d'une jonction PN idéale sous illumination (a) connecté à une résistance de charge et (b) son circuit équivalent.

Figure 2.3 : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire connectée à une charge R_C sous illumination dans le cas réel : R_S est la résistance série, R_{Sh} est la résistance parallèle.

Figure 2.4 : caractéristique $I(V)$ sous illumination.

Figure 2.5 : Schéma équivalent d'un modèle à une diode.

Figure 2.6 : Schéma équivalent de modèle à deux diodes

Figure 2.7 : L'influence de la résistance série sur la caractéristique $I(V)$.

Figure 2.8 : L'influence de la résistance shunt sur la caractéristique $I(V)$.

Figure 2.9 : Schéma bloc d'une cellule solaire.

Figure 2.10 : Les trois principaux types de processus de recombinaison (a) Bande à bande radiative ; (b) Auger non radiative ; (c) centres de recombinaison non radiatives (pièges).

Figure 2.11 : L'importance de simulation.

Figure 2.12 : Fenêtre principale du logiciel SCAPS .

Figure 2.13 : Panneau de démarrage de SCAPS.

Figure 2.14 : Définir le problème.

Figure 2.15 : Le point de fonctionnement.

Figure 2.16 : Sélection des caractéristiques à simuler.

Figure 2.17 : Panneau d'affichage des résultats.

CHAPITRE III :

Figure 3.1 : Structure de la cellule P3HT/PCBM.

Figure 3.2 : Caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique P3HT :PCBM.

Figure 3.3 : La réponse spectrale de la cellule solaire organique P3HT/ PCBM.

Figure 3.4 : Effet de la résistance en série R_s sur la caractéristique J - V .

Figure 3.5 : Effet de la résistance en série R_s sur le rendement (η).

Figure 3.6 : Effet de la résistance en série R_s sur la densité de courant de court-circuit (J_{sc}).

Figure 3.7 : Effet de la résistance en série R_s sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}).

Figure 3.8 : Effet de la résistance en série R_s sur le facteur de forme (FF).

Figure 3.9 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la caractéristique J - V .

Figure 3.10 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur le rendement (η)

Figure 3.11 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la densité de courant de court-circuit (J_{sc})

Figure 3.12 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}).

Figure 3.13 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur le facteur de forme (FF).

Figure 3.14 : L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le rendement η .

Figure 3.15: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur la tension de circuit ouvert V_{oc} .

Figure 3.16: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le courant de court-circuit J_{sc} .

Figure 3.17: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le facteur de forme FF .

Liste des symboles

PCBM : phenyl-C61- butyric acid methyl ester

P3HT : poly (3-hexylthiophene)

C₆₀ : le fullerene

HOMO : Highest Occupied Molecular Orbital.

LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbital.

$\vec{F}_{Coulomb}$: La force d'attraction de Coulomb entre deux charge électrique q1 et q2.

I_{sc}: Le courant de court circuit.

V_{oc} : La tension en circuit ouvert.

FF : Le facteur de forme.

η : Le rendement de conversion d'énergie.

S : Surface de la cellule solaire.

(I_m, V_m) : Coordonnées du point de fonctionnement.

R_s: résistance en série

R_{sh} : résistance en parallèle

J-V : *caractéristiques* courant-tension des cellules solaires.

ε₀ : permittivité du vide.

ε_r : permittivité relative

I_{ph} : Photocourant créé par la cellule (proportionnel au rayonnement incident [A])

I_D : Courant de la diode [A].

\mathbf{r}_{DA} : distance entre un électron et un trou immédiatement après le processus de séparation de ces deux charges qui formaient un exciton.

P_{\max} : puissance maximum délivrée par la cellule (W).

V_{\max} : tension correspondant au maximum de la puissance (V).

I_{\max} : courant correspondant au maximum de la puissance (A).

P_{inc} : puissance incidente (puissance de la lumière reçue par la cellule) (W).

A : Facteur d'idéalité de la jonction P-N.

I_S : Courant de saturation de la diode [A].

K : Constant de Boltzmann [$1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K]

T : Température effective de la cellule [K].

q : la charge fondamentale

V : le potentiel électrostatique

n et p : référence aux densités d'électrons et des trous

\vec{J}_n : La densité de courant de dérive des électrons.

\vec{J}_p : La densité de courant de dérive des trous.

\vec{E} : Champ électrique.

$\vec{v}_{d,n}, \vec{v}_{d,p}$: Les vitesses de dérive des électrons et des trous respectivement (la vitesse de trous est positive car elle est dans le même sens que le champ électrique).

N_D^+ et N_A^- : la densité de donneurs et d'accepteurs ionisés.

λ : longueurs d'onde du spectre.

(SRH) : Modèle de Shockley Read Hall

K : le coefficient de recombinaison de Radiative.

τ_n et τ_p les temps de recombinaison moyens des électrons et des trous.

d : épaisseur de la couche active d'une cellule.

SCAPS : Solar Cell Capacitance Simulator one dimension

D_n, D_p : Sont les constantes de diffusion des électrons et des trous.

σ_n : Section efficace de capture d'électrons

σ_p : Section efficace de capture des trous

QE : le rendement quantique

N_t : est la densité totale des pièges

W : fonction de Lambert

SOMMAIRE

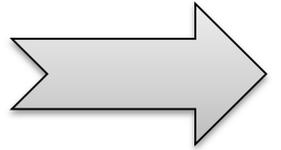


Sommaire

Introduction Générale	1
Chapitre 01 : Etat de l'art des cellules solaires organiques	
1.1 Introduction.....	4
1.2 Qu'est-ce qu'une cellule Photovoltaïque	4
1.3 Principe de la conversion photovoltaïque.....	5
1.3.1 Cellules PV à base de petites molécules	5
1.3.2 Cellules PV à base de polymères conjugués.....	6
1.4 Bandes d'énergie.....	7
1.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire organique.....	10
1.5.1 Absorption des photons et génération des excitons.....	10
1.5.2 Diffusion et dissociation des excitons	11
1.5.3 Transport et collecte des charges par les électrodes	11
1.6 Structure des cellules photovoltaïques organiques	12
1.6.1 Structure monocouche (de type Schottky).....	12
1.6.2 La structure hétérojonction de type bicouche:.....	14
1.6.3 Structure réseau interpénétré	15
1.7 Etude de cellule composée d'un mélange interpénétré (P3HT :PCBM) :.....	16
1.8 Caractéristiques des cellules photovoltaïques.....	18
1.8.1 Courant de court-circuit I_{sc}	19
1.8.2 La tension de circuit ouvert V_{oc}	20
1.8.3 Facteur de remplissage ou facteur de forme (FF)	22
1.8.4 Le rendement de conversion énergétique η	22
1.8.5 Le rendement quantique EQE	23
1.9 Conclusion.....	23
Références bibliographique	24
Chapitre 02 : Modélisation électrique et outil de simulation des cellules	
2.1. Introduction.....	26
2.2. Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire	26
2.2.1. Modèle d'une cellule solaire idéal	26
2.2.2. Modèle d'une cellule solaire réelle.....	28
2.3. Circuit équivalent d'une cellule solaire organique	31
2.3.1. Modèle à une diode	31
2.3.2. Modèle à deux diodes	33
2.4. Influence des résistances série et shunt	34
2.5. Modélisation des cellules solaires	35
2.5.1 Modèle de Drift diffusion	36
2.5.1.1 Courant de dérive	36
2.5.1.2 Courant de diffusion.....	37
2.5.1.3 Densité de courant totale	37
2.5.1.4 Equation de continuité	38

2.5.1.5 Zone de charge d'espace	38
2.5.1.6 Equation de Poisson	38
2.5.2 La recombinaison	39
2.5.2.1 Recombinaison radiative	40
2.5.2.2 La recombinaison Auger	41
2.5.2.3 La recombinaison Shockley-Read-Hall	41
2.6 Outil de simulation	43
2.6.1 Programme de simulation SCAPS	43
2.6.2 Explication du processus de simulation à l'aide de SCAPS.....	44
2.6.3 Structure de dispositif	45
2.7 Conclusion	49
Références Bibliographiques	49
Chapitre 03 : Simulation et résultats obtenus	51
3.1 Introduction	51
3.2 Conception de la simulation	52
3.3 Etude numérique des paramètres de la cellule	53
3.4 Résultats Obtenus	53
3.4.1 Caractéristique J-V de la cellule solaire organique P3HT/PCBM dans le cas idéal et le cas réel	55
3.4.2 Rendement quantique (QE) pour une cellule réel.....	55
3.5 Effet de la résistance en série R_S	56
3.5.1 Effet de la résistance en série R_S sur la caractéristique $J-V$	57
3.5.2 Effet de la résistance en série R_S sur les performances de la cellule....	60
3.6 Effet de la résistance shunt R_{Sh}	60
3.6.1 Effet de la résistance shunt R_{Sh} sur la caractéristique $J-V$	61
3.6.2 Effet de la résistance en série R_{Sh} sur les performances de la cellule...	61
3.7 Effet de la résistance en série R_S et la résistance shunt R_{Sh} simultanément sur les performances de la cellule	64
3.8 Conclusion.....	66
Références Bibliographiques	67
Conclusion Générale	68

INTRODUCTION GENERALE



Introduction générale

La production d'énergie est un défi de grande importance pour les années à venir, les besoins énergétiques des sociétés industrialisées ainsi que les pays en voie de développement ne cessant de se multiplier. Cette production a triplé depuis les années 60 à nos jours. La totalité de la production mondiale d'énergie provient des sources fossiles [1].

Le monde du photovoltaïque est vaste et compte plusieurs technologies. Parmi les technologies qui exploitent l'énergie solaire, le photovoltaïque organique est celui dont le procédé de fabrication produit moins de CO₂.

Afin de lutter contre les émissions de CO₂. Les propositions pour atteindre cet objectif sont les suivants : remplacer les combustibles fossiles par des énergies plus propres, limiter les dommages causés à l'environnement et à l'écosystème, ainsi que des mesures d'incitation pour développer des ressources alternatives.

L'énergie solaire photovoltaïque est actuellement la technologie de production d'énergie qui connaît la croissance la plus rapide en termes d'ajout de capacité. Plus de 500 gigawatts (GW) de capacité ont été installés à la fin de 2018, et par la suite, il y aura très probablement une capacité mondiale totale installés de plus de 600 gigawatts (GW)[2].

Les cellules photovoltaïques organiques les plus prometteuses sont conçues sur l'association des fullerènes et des polymères donneurs d'électrons dans des réseaux interpénétrés. Dans ces structures de réseaux interpénétrés, l'interface entre le semi-conducteur de type p et le semiconducteur de type n est distribuée dans tous le volume de la couche active, ce qui permet d'obtenir une bonne efficacité de séparation des charges à partir d'excitons photo-générés, très peu mobiles dans les matériaux organiques. La dissociation des excitons est améliorée lorsque les sites de photogénération sont distribués en volume. Une telle configuration n'est obtenue que si nous organisons les matériaux de type donneur/accepteur dans des réseaux interpénétrés qui augmentent la surface de la jonction.

A l'échelle atomique, les matériaux constituant les cellules photovoltaïques doivent avoir certaines caractéristiques pour pouvoir absorber la lumière du soleil. Parmi ces matériaux, nous citons par exemple celle qui améliore les performances des cellules photovoltaïques, il s'agit des matériaux organiques. Ces derniers ont attiré une forte attention, en raison des avantages de la flexibilité, de la minceur et de la simplicité du processus de fabrication, cela

justifier notre choix qui est basé sur un mélange interpénétré de type conjugué P3HT : PCBM, un matériau semi-conducteur donneur (P3HT) et accepteur (PCBM).

Dans ce travail de recherche, nous allons modéliser et étudier les structures des cellules solaires organiques à base d'un mélange interpénétré P3HT : PCBM. Par la suite nous allons simuler la cellule et voir l'influence des différents paramètres sur le rendement et les caractéristiques qui définissent la cellule, cette simulation se fait grâce au simulateur SCAPS.

L'objectif visé dans le cadre de ce mémoire a porté sur la modélisation, la simulation et l'optimisation des cellules solaires organiques. Pour ce faire nous avons présenté ce manuscrit de la façon suivante :

Un premier chapitre, contenant un état d'art sur les cellules solaires organiques, nous décrivons les matériaux organiques actifs pour la conversion photovoltaïque. Ensuite nous citons les structures des cellules solaires organiques, notamment en développant leur évolution chronologique. En particulier nous présentons la principale stratégie développée dans ce mémoire qui concerne les structures hétérojonction en volume à base de P3HT : PCBM.

Un second chapitre, consacré à la modélisation électrique et outil de simulation des cellules solaires organiques utilisé. En premier lieu, nous présentons les différents circuits électriques équivalents d'une cellule solaire, en précisant les modèles convenables employés pour la modélisation, à savoir le modèle de Drift diffusion, aussi les modèles physiques comme la recombinaison. En dernier lieu, nous d'écrivant l'outil utilisé pour le concept de simulation, il s'agit du simulateur SCAPS.

Enfin, le troisième chapitre de ce manuscrit décrit, dans une première étape, la conception de simulation et l'étude des paramètres du dispositif étudié pour les besoins de la simulation. D'autre part, nous présentons et discutons les résultats obtenus dans ce travail. Au cours de cette simulation nous avons étudié la caractéristique J-V de la cellule solaire organique dans le cas idéal et le cas réel ainsi que l'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} sur les performances de la cellule solaire organique P3HT : PCBM.

On terminera notre travail par une conclusion générale qui englobe tous ce qu'on a fait durant ce mémoire de fin d'étude.

Références bibliographiques

- [1] R.Hernanz et al. , 'Modelling of Photovoltaic Module. ', vol. 1,no. 8, pp. 1186-1190,2010.
- [2] W.van Sark, G. Nemet, G. J. Schaeffer, and E. Alsema, Photovoltaic solar energy. INC,2020.

Etat de l'art des cellules solaires organiques



CHAPITRE

I

1. Etat de l'art des cellules solaires organiques.

1.1 Introduction :

Suite aux résultats spectaculaires obtenus dans le domaine des diodes organiques électroluminescentes, diodes qui commencent à pénétrer le marché, la recherche concernant les photopiles organiques a connus un nouvel intérêt, Ce regain d'activité a très rapidement débouché sur la réalisation de cellules solaires organiques dont les performances, si elle reste faible par rapport aux autres filières n'en est pas moins fait des progrès spectaculaires atteignant quelque pour cent de rendement [1].

1.2 Qu'est-ce qu'une cellule Photovoltaïque :

Une cellule photovoltaïque, ou cellule solaire, est un composant électronique qui est exposé à la lumière, produit de l'électricité grâce à l'effet photovoltaïque. La puissance électrique obtenue est proportionnelle à la puissance lumineuse incidente et elle dépend du rendement de la cellule. Celle-ci délivre une tension continue et un courant la traverse dès qu'elle est connectée à une charge électrique (en général un onduleur et parfois une simple batterie électrique) [2].



Figure 1.1 : structure d'un panneau photovoltaïque [2].

1.3 Matériaux organiques actifs pour la conversion photovoltaïque

L'élément de base dans les configurations des semi-conducteurs organiques est le carbone avec l'alternance des liaisons simples et doubles, à partir de ces propriétés les matériaux organiques sont classés en deux formes énergétiques, les petites molécules et les polymères conjugués [3].

1.3.1 Cellules PV à base de petites molécules :

Si les toutes premières cellules solaires organiques développées en 1958, à la fin des années 70, des recherches ont été élaborées avec des petites molécules. Les résultats obtenus avec ces familles sont très faibles. On peut citer deux catégories : les petites molécules donneuses et accepteuses d'électrons [4].

- En électronique organique les petites molécules accepteuses souvent utilisés sont : la molécule C60 est appelée fullerène qui est composée de 60 atomes de carbone et ses dérivés comme le PCBM dont la structure chimique a été modifiée pour le rendre soluble.
- Il y a aussi des petites molécules donneuses d'électrons utilisées comme le pentacène (P5) et le phtalocyanines de métal (MPC).

La figure suivante représente la structure moléculaire des petites molécules les plus utilisées dans les cellules photovoltaïques organiques :

- Les molécules accepteuses d'électrons de type n :

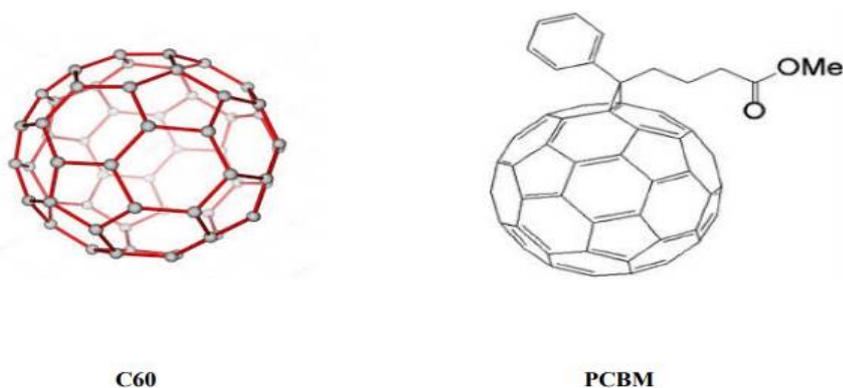


Figure 1.2 : Des petites molécules accepteuses d'électrons utilisées dans les cellules solaires organiques [5]

- Les molécules donneuses d'électrons de type p :

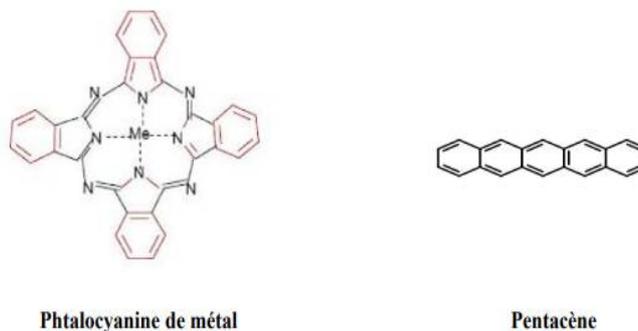


Figure 1.3 : Des petites molécules donneuses d'électrons utilisées dans les cellules solaires organiques [5].

1.3.2 Cellules PV à base de polymères conjugués :

Les cellules solaires organiques produisant l'électricité à partir de la lumière à l'aide des polymères semi-conducteurs, un polymère est caractérisé par l'alternance de liaisons simples et doubles entre atome de carbone le long d'une chaîne. La majorité des polymères conjugués sont des donneurs d'électrons

On distingue trois familles des polymères conjugués :

➤ **Les poly (p-phenylene vinylene) (PPV) :**

Ces molécules ont été d'abord utilisées pour la fabrication des diodes organiques électroluminescentes. Par la suite, des études à l'aide du PPV sur les photovoltaïques organiques ont montré des propriétés photovoltaïques mais sont très faibles. Les faibles performances obtenues avec la structure ITO/PPV/Al sont principalement dues à la faible mobilité des trous dans le PPV. Les dérivés les plus connus sont (MEH-PPV, MDMO-PPV).

➤ **Les polythiophènes (PT) :**

Qui sont résultants de la réaction de polymérisation du thiophène et qui sont des hétérocycles de soufre. Donc les dérivés les plus connus sont le poly (3- hexylthiophene) (P3HT) et le poly (α -sexithiophene) [6].

➤ **Les polyfluorènes :**

Un polymère composé d'unités de fluorène très étudié pour ces propriétés électroluminescentes organiques, parmi lequel le poly [2,7-(9,9-dioctylfluorene)-alt-5,5-(4,8,7,8-di-2-thienyl-2,8,18,38-benzothiadiazole)] (PFDTBT) est un dérivé.

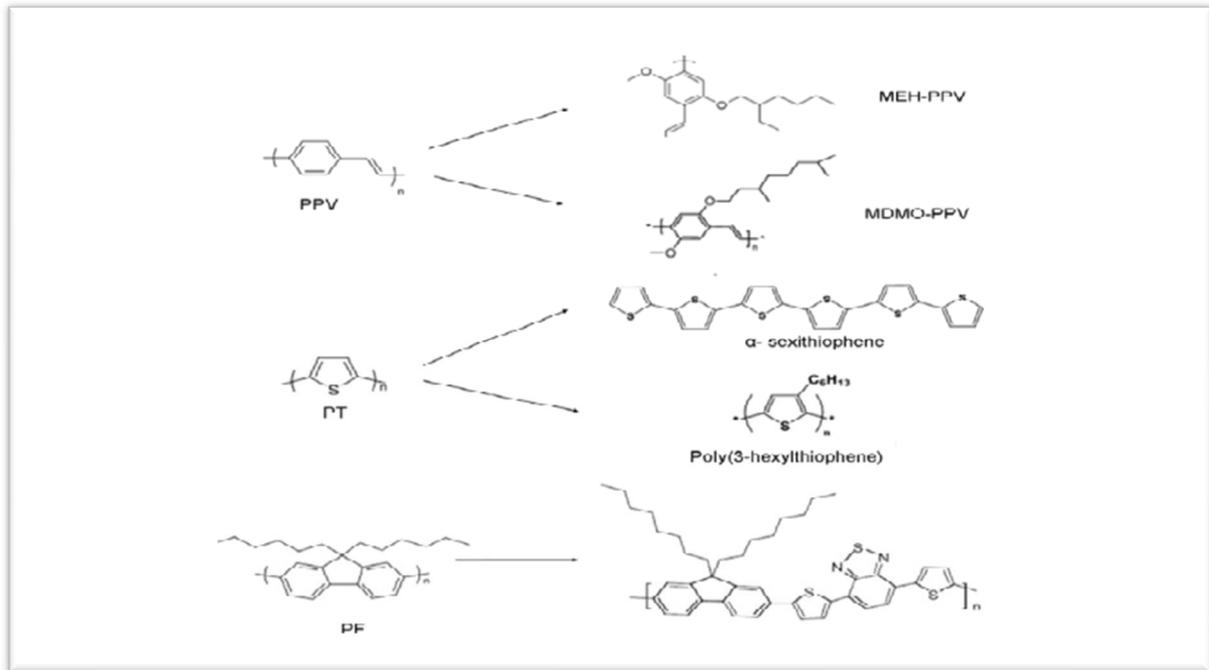


Figure 1.4 : Exemples de polymères conjugués utilisés dans les cellules PV organique [6].

1.4 Bandes d'énergie :

Le comportement des semi-conducteurs, comme celui des métaux et des isolants est décrit via la théorie des bandes d'énergies

Dans cette partie, nous allons décrire la formation des bandes d'énergie dans les semiconducteurs organique.

On définit l'orbitale atomique comme une zone de l'espace où la probabilité de trouver un électron autour du noyau est de 95%. Les orbitales atomiques dépendent de la fonction d'onde de l'électron qui est déterminée par l'équation de Schrödinger. Pour une molécule, les états électroniques moléculaires sont développés en combinaisons linéaires des produits antisymétriques des fonctions à un électron. Les composantes spatiales de ces fonctions à un électron sont appelées orbitales moléculaires et sont exprimées sous forme de combinaisons

linéaires d'orbitales atomiques, comme si chaque atome était isolé et qu'on sommait leurs orbitales. [7]

Prenons l'exemple de la molécule de **l'éthylène** Figure 1.5 constitué de deux atomes de carbone et quatre atomes d'hydrogène. Chaque atome de carbone possède quatre électrons de valence dont l'un forme une liaison σ avec l'autre atome de carbone, deux autres forment des liaisons sp^2 avec les atomes d'hydrogènes et le quatrième électron est disponible pour participer à la liaison π . La formation de la liaison π est assurée par les électrons des orbitales atomiques de type $2p_z$ centrées sur les atomes de carbone. Le recouvrement partiel de deux orbitales $2p_z$ dans la molécule d'éthylène est schématisé sur la Figure 1.5. Ce recouvrement d'orbitales de même énergie mène à la création de deux orbitales moléculaires, en termes d'énergie on parle de phénomène d'hybridation des niveaux énergétiques [7].

L'orbitale moléculaire la plus stable sera peuplée par les deux électrons partagés par les deux atomes de carbone et l'autre sera vide. Les fonctions d'ondes et la configuration électronique de l'orbitale atomique π liante et anti liante occupées par les électrons dans la molécule de polyéthylène sont schématisées sur la Figure 1.6 [7].

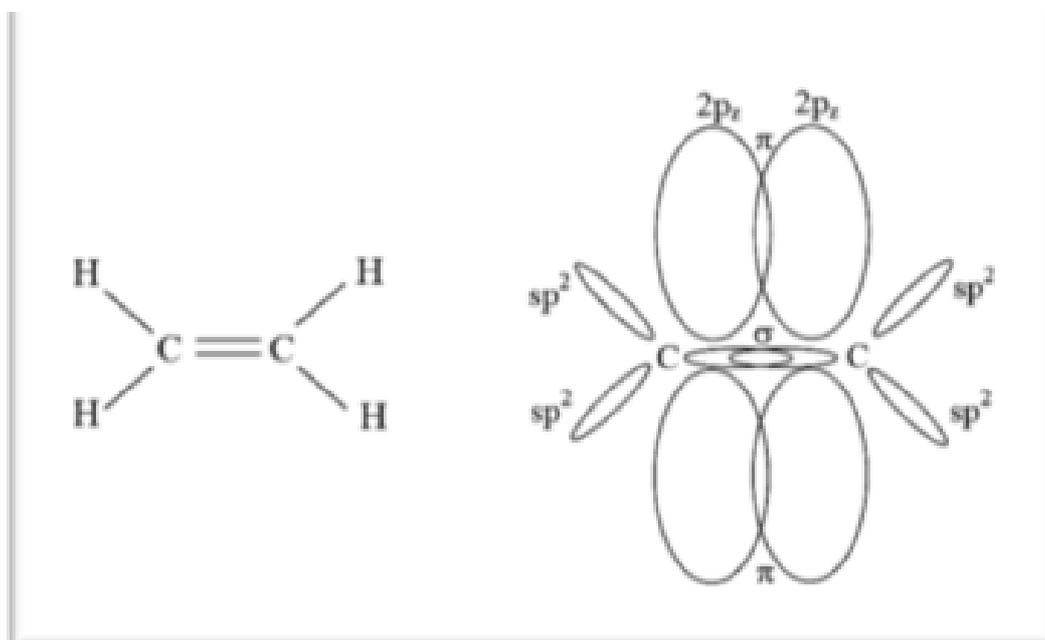


Figure 1.5 : Recouvrement des orbitales $2p_z$ dans la molécule de polyéthylène [8]

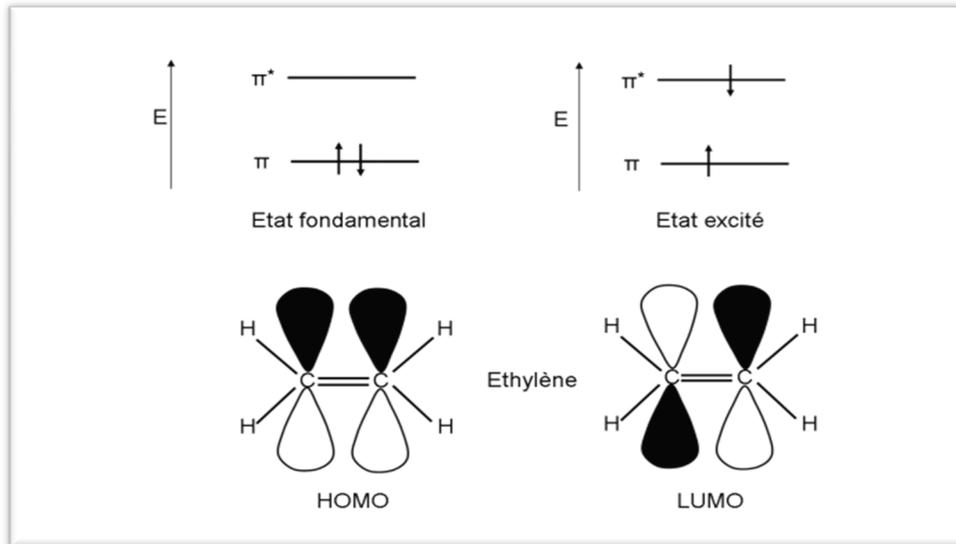


Figure 1.6 : Configuration électronique de l'état fondamental et de l'état excité et de la fonction d'onde des orbitales HOMO et LUMO de la molécule d'éthylène [8]

Ensuite, Les polymères peuvent être décrits par un modèle de bandes analogue à celui des semi-conducteurs classiques. En effet, les orbitales moléculaires, issues de l'association de deux orbitales atomiques, peuvent avoir deux niveaux d'énergie. La bande la plus élevée en énergie est appelée bande de valence, ou **HOMO** (Highest Occupied Molecular Orbital). La première bande au-delà de la bande interdite est appelée bande de conduction, ou **LUMO** (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). L'énergie nécessaire pour amener un électron du haut de la bande **HOMO** vers le bas de la bande **LUMO** est appelée gap du polymère Figure 1.7.

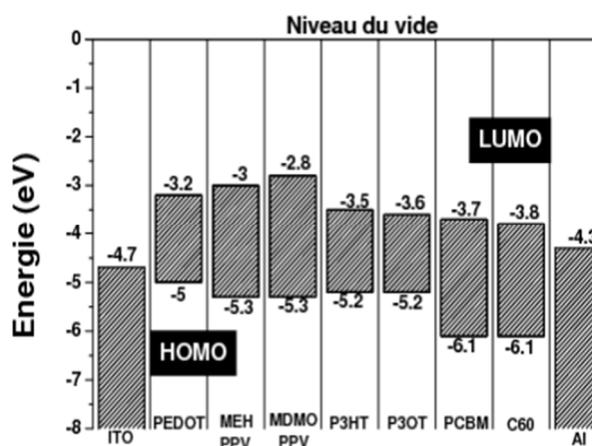


Figure 1.7: Diagrammes des bandes d'énergie des polymères conjugués et des accepteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques [8].

Le gap d'un polymère conducteur est typiquement compris entre 1,5 et 3 eV. Ceci implique qu'un polymère conjugué absorbe de la lumière dans le domaine du visible.

1.5 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire organique :

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques se base sur la conversion des photons en courant électrique. Dans les semiconducteurs organiques cela se fait sur plusieurs étapes qui sont schématisés dans la Figure 1.8 et que nous allons décrire une par une.

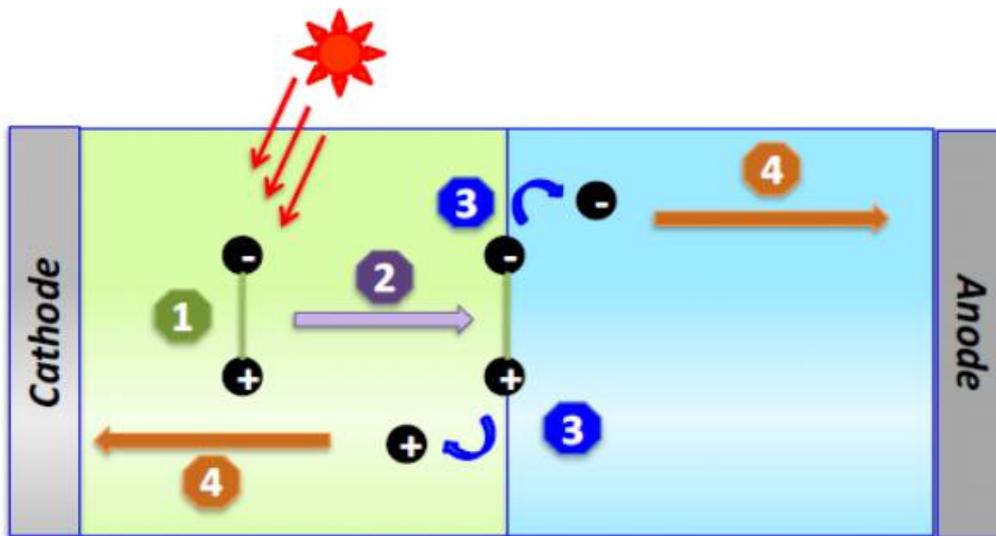


Figure 1.8 : principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque organique[9]

1.5.1 Absorption des photons et génération des excitons

L'absorption d'un photon dans un semi-conducteur organique induit la transition d'un électron du niveau **HOMO** vers le niveau **LUMO** et la création d'un trou dans le niveau **HOMO** qui est lié à l'électron à cause de la forte interaction coulombienne, on appelle ce couple électron-trou : **exciton**, cela implique que les charges électriques créées ne sont pas libres. Il existe deux types d'excitons : les excitons de type **Frenkel** où le couple électron-trou est confiné dans la même unité moléculaire et les excitons de type **Mott Wannier** où le couple électron-trou est séparé par une distance plus grande que la distance moléculaire [10] comme le montre la Figure 1.9.

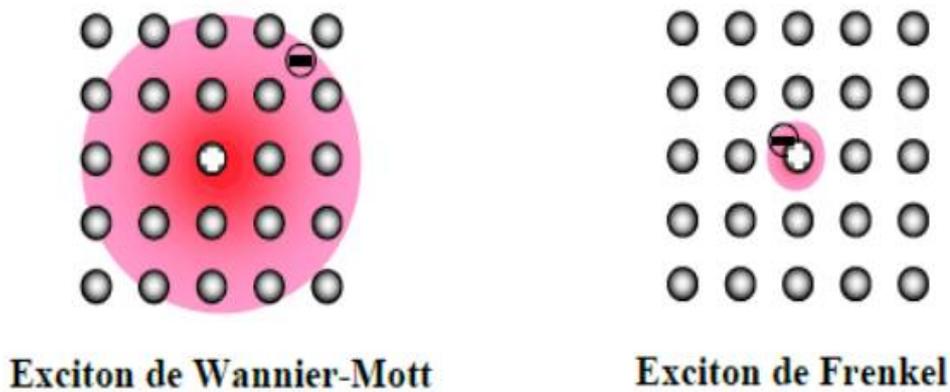


Figure 1.9 : Exciton de Frenkel et de Wannier [10]

1.5.2 Diffusion et dissociation des excitons :

Les excitons créés sont électriquement neutres, les excitons diffusent par saut d'une molécule à une autre vers un contact ou une interface entre un matériau « donneur d'électrons » et un autre « accepteur d'électrons » où ces deux matériaux possèdent des niveaux énergétiques différents, induisant un champ électrique local, de ce fait la dissociation de l'exciton s'effectue à l'interface de ces deux matériaux [11].

1.5.3 Transport et collecte des charges par les électrodes :

Le transport des porteurs des charges jusqu'aux électrodes est assuré par le donneur d'électrons pour les trous et par l'accepteur d'électrons pour les électrons [12], cette disposition particulière atténue considérablement les phénomènes de recombinaisons. Les mobilités des trous et des électrons respectivement dans le matériau donneur et dans le matériau accepteur doivent être élevées et proche l'une de l'autre afin d'assurer un bon transport et une bonne balance des charges. Parmi les facteurs pouvant influencer sur la mobilité des porteurs de charges, on peut citer l'organisation moléculaire qui contribue à l'augmentation de la mobilité et les impuretés qui au contraire influent négativement sur les valeurs de la mobilité [13].

1.6 Structure des cellules photovoltaïques organiques :

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base des composés organiques connaissant un développement considérable, les cellules photovoltaïques sont des dispositifs électroniques réalisés à l'aide des composants semi-conducteurs qui possèdent la particularité de produire l'électricité [13] [14].

Donc, les cellules organiques peuvent être de plusieurs types :

1.6.1 Structure monocouche (de type Schottky) :

Appelées aussi structure de monocouche, ce type de cellule utilise un semi-conducteur de type p (ou n) pris en sandwich entre deux électrodes de métal, la zone active pour la conversion photovoltaïque se situe à l'interface entre une des électrodes métalliques et le semi-conducteur. [14]

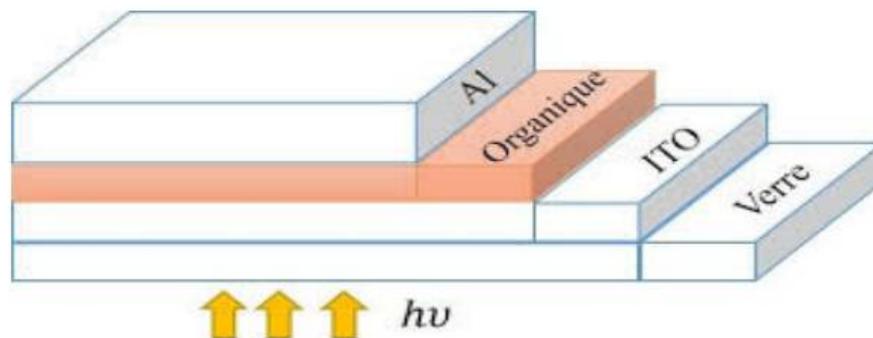


Figure1.10 : Structure d'une cellule de type Schottky [15].

La première génération de dispositifs photovoltaïques à base de matériaux organiques utilisait ce type de structure. En général, les cellules photovoltaïques organiques décrites comme étant de type Schottky se présentent sous la forme métal/matériaux organiques/métal ou ITO (Indium Tin Oxide) /matériau organique/métal. Les propriétés photovoltaïques dépendent fortement de la nature des électrodes.

Le choix des métaux est déterminé pour réaliser un contact ohmique d'un côté et non ohmique de l'autre. Les rendements publiés pour ces structures sont inférieurs à 0,1% sauf celui de la cellule obtenue par K. Glosh et al [16].

L'introduction de la structure à hétérojonction a permis d'améliorer les rendements des cellules organiques.

L'avantage de ce type de structural consiste dans la simplicité de fabrication, mais les rendements demeurent très faibles, cela est dû à la faible énergie de liaison et à la longueur de diffusion des excitons, en effet seuls les excitons générés près de la zone de déplétion peuvent participer à la conversion photovoltaïque puisque c'est le champ électrique créé à l'interface polymère/électrode qui est responsable de la dissociation des excitons. Figure 1.11.

Si un exciton est créé près de l'interface ohmique, il doit traverser toute l'épaisseur du matériau pour atteindre le site de dissociation, or la longueur de diffusion excitonique est faible de l'ordre de 5 à 30 nm.

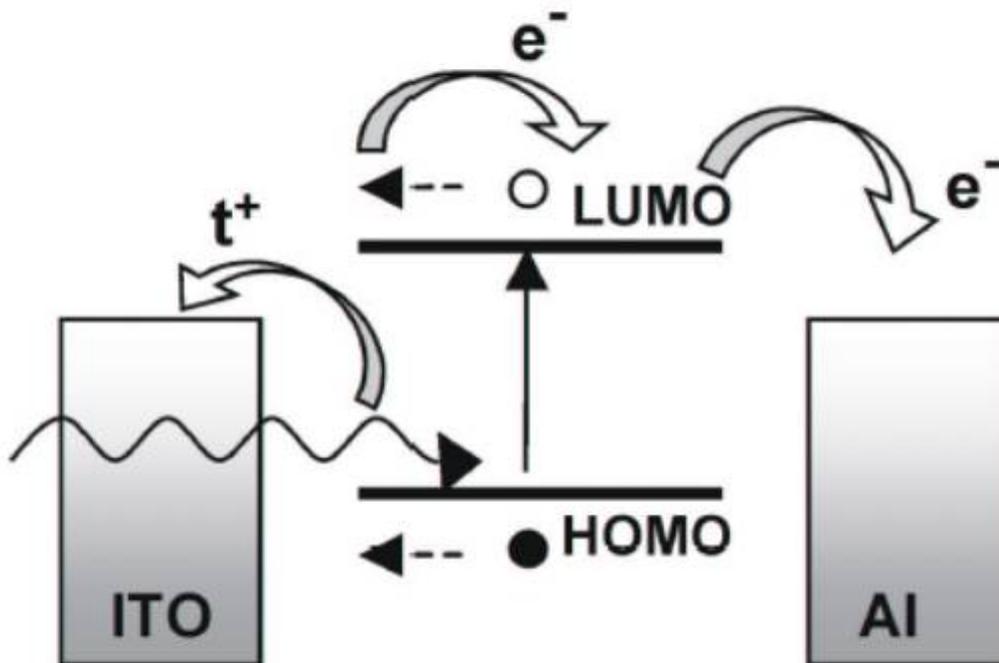


Figure 1.11 : représentation des niveaux d'énergie d'un contact ITO/organique/Al [17]

1.6.2 La structure hétérojonction de type bicouche :

Cette structure se compose de deux semiconducteurs organiques de nature différente. L'un d'entre eux est un accepteur d'électrons et l'autre est un donneur d'électrons, en empilant ces deux matériaux entre deux électrodes où l'anode est en contact avec le donneur d'électrons et la cathode avec l'accepteur d'électrons, on obtient une cellule de structure bicouche appelé aussi hétérojonction ou PN [14].

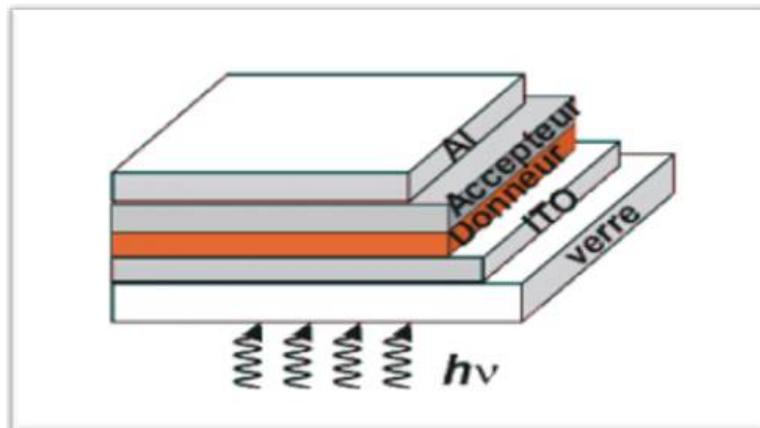


Figure 1.12 : Structure d'une cellule hétérojonction de type bicouche [18].

La différence entre le potentiel d'ionisation du donneur et l'affinité électronique de l'accepteur crée un champ électrique à l'interface donneur/accepteur qui permet la dissociation des excitons qui atteignent ce site. Ainsi, les charges libres vont migrer séparément vers leurs électrodes respectives, les électrons par l'accepteur vers la cathode et les trous par le donneur vers l'anode.

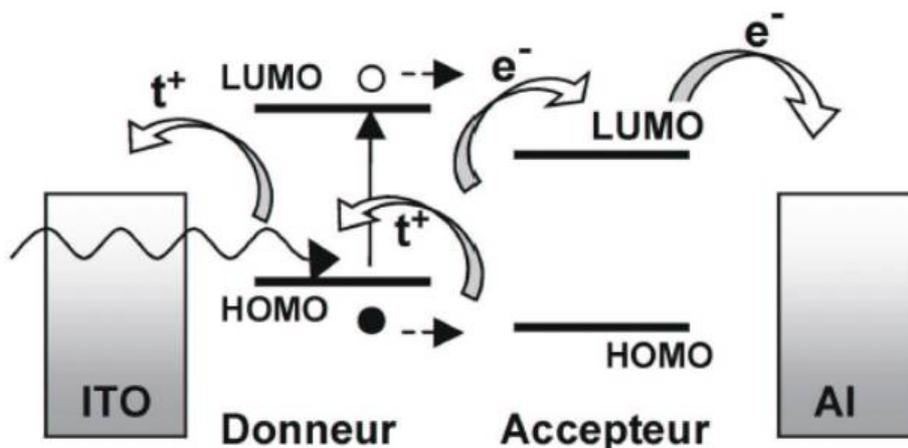


Figure 1.13 : Représentation des niveaux d'énergie d'un contact ITO/donneur/accepteur/Al d'une cellule de structure bicouche [17].

1.6.3 Structure réseau interpénétré :

Appelée aussi structure hétérojonction en volume, il s'agit d'un mélange en volume de deux semi-conducteurs organiques de nature différente entre deux électrodes, le principale avantage de cette structure est que le mélange des deux matériaux (p : n) permet de multiplier les zones interfaciales entre eux et de réduire ainsi les problèmes de pertes par recombinaison des excitons photogénèses loin de l'interface [17].

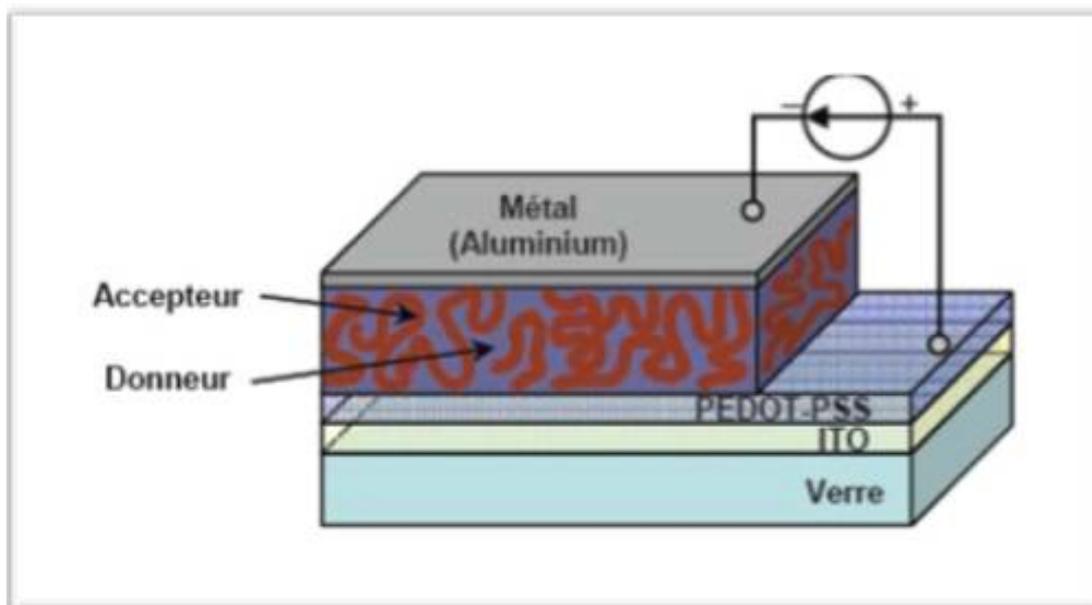


Figure 1.14 : Structure d'une cellule hétérojonction de type réseaux interpénétrés [19].

1.7 Etude de cellule composée d'un mélange interpénétré (P3HT :PCBM) :

On définit les mélanges interpénétrés comme le mélange en volume de deux semi-conducteurs plus ou moins imbriqués l'un dans l'autre. Cette configuration a été initiée par des chercheurs de Linz qui ont eu l'idée de mélanger deux semi-conducteurs pour augmenter le nombre d'interfaces [20]. Il faut toutefois signaler que cette découverte est directement corrélée à la mise en solution du PCBM.

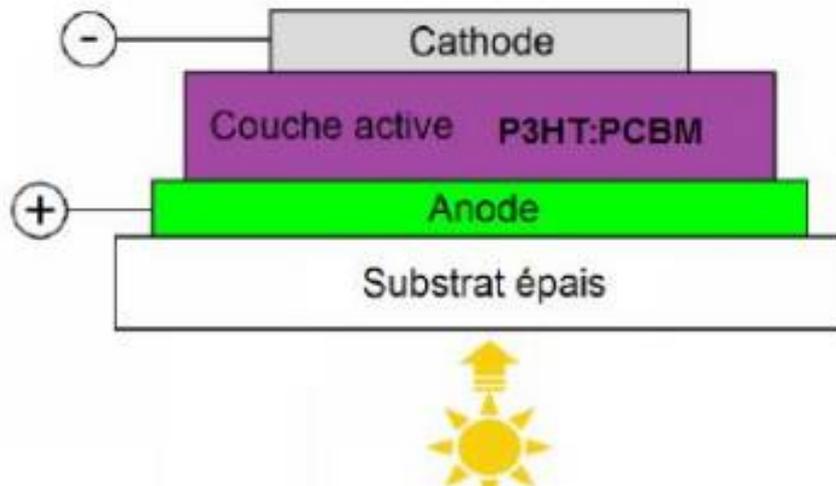


Figure 1.15 : structure d'une cellule solaire organique [21].

La différence principale avec les jonctions bicouches est que le nombre d'interfaces donneur/accepteur est beaucoup plus important dans les couches de mélange interpénétré car les interfaces occupent la totalité du volume de la couche.

En pratique ces hétérojonctions en volume sont réalisées par mélange en solution de Deux types de semi-conducteurs : un donneur et un accepteur. Puis le mélange est déposé par spin coating ou par covaporation. La couche produite est composée d'un mélange des nano phases de type p et n réparties aléatoirement dans le volume de la couche. Le schéma à deux dimensions d'un mélange interpénétré donneur/accepteur est donné en Figure 1.15. On distingue clairement les domaines de type p noyés dans la matrice du semi-conducteur accepteur de type n. Les phases des semi-conducteurs donneurs de type p forment des chemins de percolation qui sont reliés à l'anode.

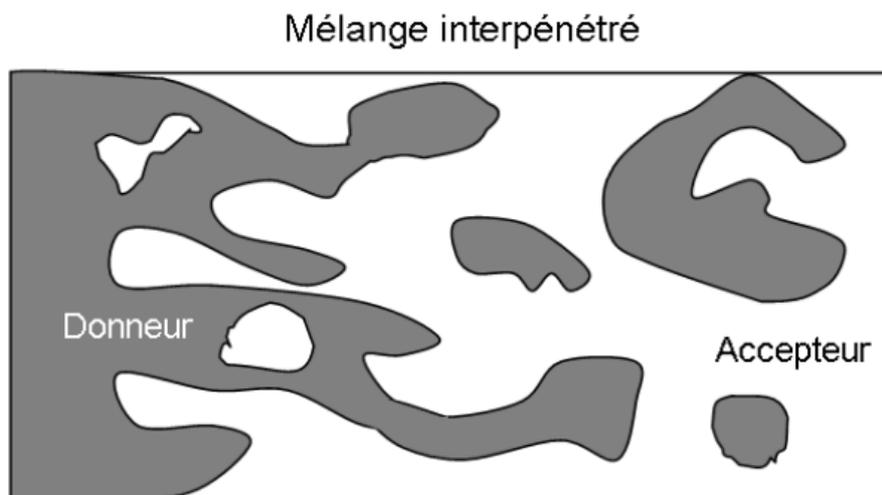


Figure 1.16 : Structures d'une hétérojonction de volume (mélange interpénétré) [8].

Ainsi, le mélange interpénétré idéal est composé des domaines des phases dont la largeur (L) est inférieure au double de la longueur de diffusion. En effet si on a $L < 2 L_{diff}$ tous les excitons photo générés dans l'une des phases vont pouvoir diffuser sans se recombiner jusqu'à une interface donneur/accepteur et se dissocier quelle que soit la position du site de création de l'exciton. Cette structure permet de s'affranchir de la limitation des épaisseurs par la longueur de diffusion des excitons. La Figure 1.17 présente le diagramme de bande de la cellule : ITO/ PEDOT/ P3HT: PCBM/LiF/ Al.

Les énergies des orbitales HOMO et LUMO du P3HT et du PCBM, les travaux des sorties de l'anode (W_a) et de la cathode sont indiqués (W_c). La couche de mélange interpénétré P3HT: PCBM est représentée par deux niveaux HOMO et deux niveaux LUMO correspondant au donneur et à l'accepteur. On remarque que les différences des potentiels à l'interface électrode / couche organique sont faibles. De plus la relation $E_{exc} > E_{TC}$ avec $E_{TC} = I_D - X_A$ est vérifiée, ce qui garantit la possibilité du transfert des charges à l'interface donneur / accepteur. On considère que le transport des charges dans les hétérojonctions en volume s'effectue via les chemins de percolation à travers les phases. Le simple fait de limiter la taille des domaines à quelques dizaines des nanomètres ($L < 2 L_{diff}$) implique que la longueur des chemins des percolations seront du même ordre des grandeurs. La morphologie des mélanges interpénétrés doit donc être parfaitement maîtrisée, si l'on veut éviter les recombinaisons des charges suite à la rupture d'un chemin de percolation [22,23]. Cependant, même si l'efficacité du transport de charge est moins

élevée que dans les hétérojonctions bicouches le rendement des cellules composées d'un mélange interpénétré reste tout de même meilleur.

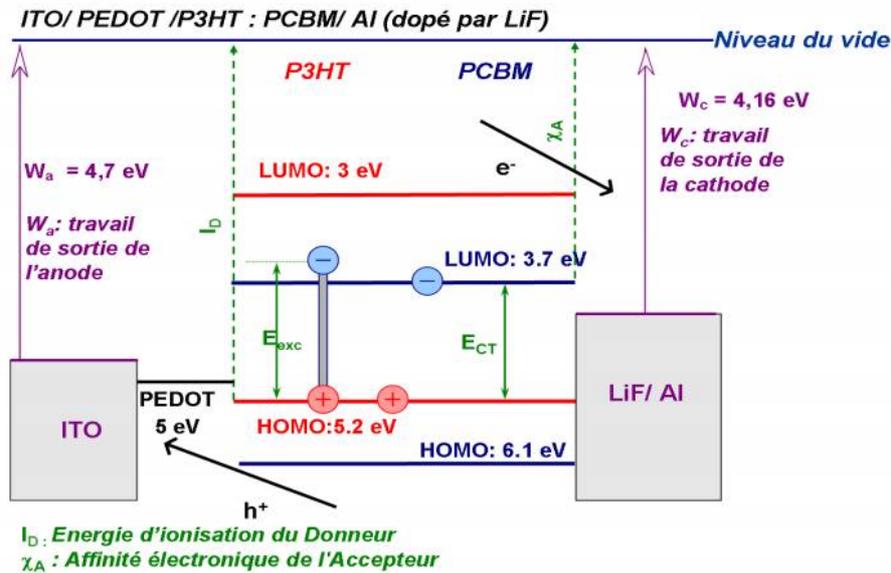


Figure 1.17 : Diagramme de bande d'une cellule : ITO/ PEDOT/ P3HT: PCBM Al (dopé par LiF) [8].

1.8 Caractéristiques des cellules photovoltaïques :

La capacité d'une cellule à produire de l'énergie est mesurée grâce à sa caractéristique courant-tension (Figure 1.18).

On peut facilement obtenir à partir de cette caractéristique certains paramètres qui vont nous renseigner sur les phénomènes physiques mis en jeu dans la cellule [13].

V_{oc} : tension de circuit-ouvert.

I_{sc} : courant de court-circuit.

V_m : tension correspondant au maximum de la cellule délivrée par la cellule.

I_m : courant correspondant au maximum de la cellule délivrée par la cellule.

R_s : résistance série. R_p : résistance parallèle.

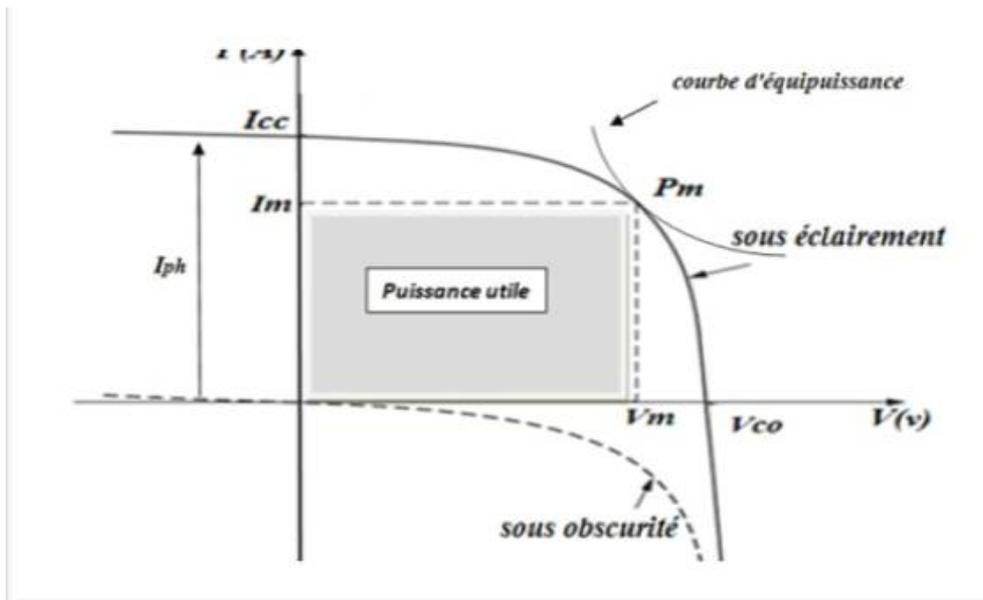


Figure 1.18 : Caractéristique I(V) d'une cellule solaire [24].

Si on place une charge non nulle et non infinie aux bornes de la cellule PV sous éclairement, cette dernière fonctionne dans le cas intermédiaire entre le court-circuit (générateur de courant), et le circuit ouvert (générateur de tension). Le point de fonctionnement optimal de la cellule est celui qui donne une puissance maximale ; c'est-à dire un courant et une tension maximums.

1.8.1 Courant de court-circuit I_{sc} :

Il s'agit du courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule est nul. C'est le plus grand courant que la cellule peut fournir. Celui-ci est fonction de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule et de la mobilité des porteurs, A partir de l'expression générale du courant, le courant de court-circuit s'écrit pour $V=0$ [13].

$$I_{SC} = \frac{R_p}{R_s + R_p} \left[I_s \left[\exp\left(-\frac{qIR_s}{nKT}\right) - 1 \right] - I_{ph} \right] \quad (1)$$

1.8.2 La tension de circuit ouvert V_{oc} :

Exprimée en volts ou Il s'agit du potentiel maximum que la cellule peut fournir, lorsque le courant est nul. Cette tension, comme son nom l'indique, est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge de résistance infinie. Elle apparait pour créer un courant qui s'oppose au photo-courant (en circuit ouvert $I=0$)

Cette tension dépend du photo-courant (I_{ph}) de la manière suivante (équation du courant avec $I=0$).

$$V_{OC} = \frac{nKT}{q} \ln \left[\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 - \frac{V_{oc}}{I_s R_p} \right] \quad (2)$$

Si nous considérons que $I_s R_p \gg V_{OC}$ (valable en général), deux régimes peuvent se présenter mais suivant l'éclairement :

- Régime linéaire (dans le cas des faibles éclairagements) :

$$I_{ph} \ll I_s$$

$$\ln \left(1 + \frac{I_{ph}}{I_s} \right) \approx \frac{I_{ph}}{I_s} \quad (3)$$

D'où :

$$V_{OC} = \frac{KT}{q} \ln \frac{I_{ph}}{I_s} \quad (4)$$

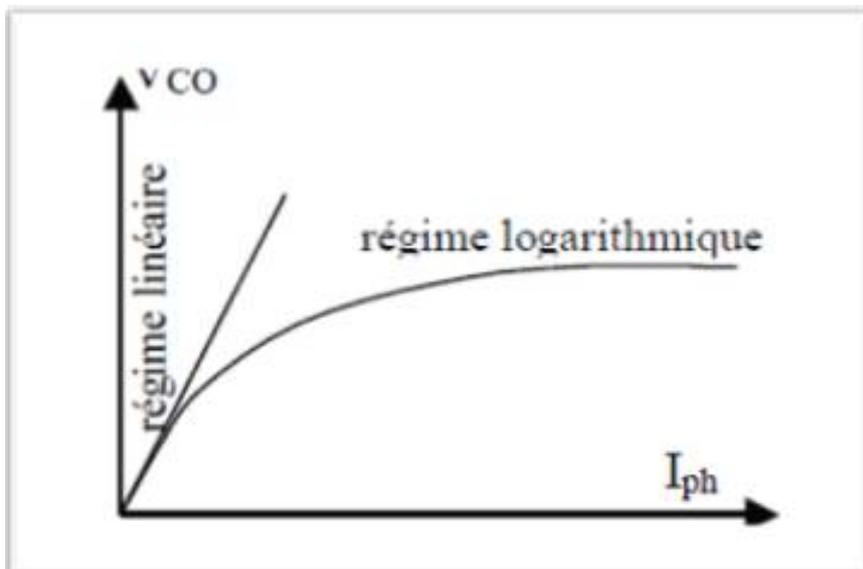


Figure 1.19 : Les différents régimes de V_{OC} selon l'éclairement [25].

Dans le cas des cellules photovoltaïques organiques, le V_{OC} est fonction du niveau HOMO du matériau donneur d'électron du niveau LUMO et du matériau accepteur d'électron [26].

La tension de circuit-ouvert est maximale lorsque les quasi-niveaux de Fermi du Donneur et de l'accepteur sont proches de leur maxima [27]. Si on tient compte des excitons, la tension de

circuit ouvert intrinsèque qui correspond à la tension de circuit ouvert maximale ($V_{oc\ max}$) de la cellule est obtenue par la relation :

$$q V_{OC} = E_{HOMO,D} - E_{LUMO,A} - \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r_{DA}} \quad (5)$$

ϵ_0 : permittivité du vide.

ϵ_r : permittivité relative.

r_{DA} : distance entre un électron et un trou immédiatement après le processus de séparation de ces deux charges qui formaient un exciton.

Le troisième terme de la relation ci-dessus correspond à l'énergie de liaison entre un électron et un trou immédiatement après le processus de séparation de ces deux charges qui formaient un exciton.

1.8.3 Facteur de remplissage ou facteur de forme (FF) :

La notation FF vient de fill factor (facteur de remplissage). Il s'agit d'un rapport qui rend compte de la qualité de la forme de la caractéristique courant-tension. Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc}I_{sc}} \quad \text{avec:} \quad P_{max} = V_{max} \cdot I_{max} \quad (6)$$

P_{max} : puissance maximum délivrée par la cellule (W).

V_{max} : tension correspondant au maximum de la puissance (V).

I_{max} : courant correspondant au maximum de la puissance (A).

Ce paramètre est lié au nombre de porteurs de charge collecter aux électrodes au point de fonctionnement correspondant au maximum de la puissance, il dépend donc de la mobilité des porteurs et de la qualité des interfaces.

1.8.4 Le rendement de conversion énergétique η

Le rendement de conversion est le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente et s'exprime selon l'équation suivante :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{inc}} \quad (7)$$

P_{max} : puissance délivrée par la cellule (W).

P_{inc} : puissance incidente (puissance de la lumière reçue par la cellule) (W).

En introduisant les paramètres photovoltaïques dans cette relation, on obtient :

$$\eta = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{sc}}{P_{inc}} \quad (8)$$

Cette expression montre que les valeurs du facteur de forme (FF), de la tension de circuit ouvert (V_{co}) et du courant de court-circuit (I_{cc}) déterminent le rendement.

1.8.5 Le rendement quantique EQE :

On définit le rendement quantique comme le rapport entre le nombre d'électrons collectés et le nombre de photons monochromatiques. Si on ne prend pas en compte les photons perdus par réflexion et ceux qui sont transmis, on parlera alors de rendement quantique interne **IQE** (Internal Quantum Efficiency). L'expression du rendement quantique externe **EQE** (External Quantum Efficiency) est donnée comme ceci :

$$EQE = \frac{J_{sc}(\lambda)}{\phi(\lambda)} \cdot \frac{E_{ph}(\lambda)}{e} = \frac{J_{sc}}{\phi(\lambda)} \cdot \frac{hc}{e\lambda} \quad (9)$$

J_{cc} est la densité du courant de court-circuit, ϕ est le flux lumineux incident, e la charge de l'électron et E_{ph} l'énergie du photon avec $E_{ph} = hc/\lambda$ où h la constante de Planck, c la vitesse de la lumière dans le vide et λ la longueur d'onde.

Le rapport $J_{sc}(\lambda)/\phi(\lambda)$ est appelé « réponse spectrale » de la cellule, elle est noté **SR**(λ) et représente la sensibilité de la cellule pour chaque longueur d'onde. On peut donc réécrire l'expression du rendement quantique externe comme suit :

$$EQE = SR(\lambda) \cdot \frac{hc}{e\lambda} \quad (10)$$

Le rendement quantique est mesuré en fonction de la longueur d'onde émise par une source monochromatique, il dépend principalement du coefficient d'absorption des matériaux utilisés, du potentiel d'ionisation et de l'efficacité de la collecte.

1.9 Conclusion

Les cellules solaires à base de matériaux organiques peuvent, avec les développements des technologies d'élaboration microélectronique et de la chimie organique, constituer des dispositifs prometteurs dans le domaine de la conversion photovoltaïque.

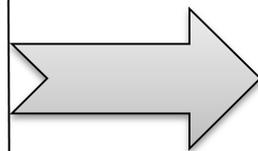
Dans ce chapitre, nous avons donné quelques généralités sur les cellules solaires organiques, leurs paramètres électriques, leurs différentes structures ainsi nous nous intéressons aux cellules solaires organiques en réseaux interpénétrés.

Références bibliographiques

- [1] **A.Mohammad Bagher**, « Types of Solar Cells and Application,» Am.J.Opt.Photonics,vol.3, no.5,p.94,2015.
- [2] Le photovolt Le photovoltaïque–Module 3 – Fonctionnement et Technologies Novembre 2010 page 3,4,5,6/10.
- [3] **A. MAHFOUD** 18/02/2015 , modélisation des cellules solaires tandem à couche minces et à haut rendement
- [4] **François Baert**, 2 octobre 2015, Molécules conjuguées pour le photovoltaïque organique : impact de la rigidification sur les propriétés des matériaux. Chimie organique, 78148
- [5] [https:// www.ossila.com/products/pentacène](https://www.ossila.com/products/pentacène).
- [6] [https:// www.wikipédia](https://www.wikipédia.com). com polythiophènes .
- [7] **M. Florent**, Amélioration de l'absorption photonique dans les cellules photovoltaïques organiques, Thèse doctorat à Université Paul cézanne Aix-Marseille,france (2008).
- [8] **S. Boukli Hacène** , Modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT :PCBM, Thèse doctorat Abou bakr Belkaid Telmecen (2014).
- [9] **Dang Minh Trung**, Thèse de doctorat, Elaboration de Cellules Solaires Photovoltaïques à base de Polymères Conjugués, Etudes des Systèmes Réticulables, Université Bordeaux 1, (2009)
- [10] **G.H.Wannier**, Physical Review 52,191(1937).
- [11] **G.Safoula, G.Suresh, K.Napo**, Growth and properties of amorphous films of pure, chlorine- and arsenic-doped selenium , Journal of Non Crystalline Solids. 169, 126 - 132,(1994).
- [12] **E. Gautier, A. Lorin, J.-M. Nunzi, A. Schalchli, J.-J. Benattar, and D. Vital**, Applied Physics Letters 69, 1071-1073 (1996).
- [13] **Debili Narimene** 2014/2015, Etude et optimisation en environnement Matlab/Simulink d'un système de pompage Photovoltaïque. Magister en électronique.
- [14] **Quentin Bricaud** 22/10/2008, Nouveaux polymères π -conjugués pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire, 920.
- [15] <http://www.researchgate.net/figure/structured'unecelluledetype-Schottky-figure2-323384804>
- [16] **A. K. Ghosh, T. J. Feng**, Merocyanine organic solar cells, J. Appl. Phys. 49, (1978) 5982.

- [17] **Bejbouji, Habiba.** Optimisation des matériaux d'électrodes dans les diodes électroluminescentes organiques et les cellules solaires organiques. [Thèse de doctorat] Settat : Université Hassan Premier, 2009.
- [18] <https://www.researchgate.net/figure/structured'unecelluledetype-bicouche-fig3-32338408>
- [19] **Mohra Djawida** 23/05/2012, Modélisation et caractérisation des semi-conducteurs organiques.
- [20] **H. Hoppe, T. Glatzel, M. Niggemann, W. Schwinger, F. Schaefer, A.Hinsch, M. Ch. LuxSteiner, and N.S. Sariciftci.** Efficiency limiting morphological factors of mdmoppv: pcbm plastic solar cells , Thin Solid Films, 511-587, (2006).
- [21] **Djedid.S,** Modélisation et simulation des performances des cellules solaires à base de différents matériaux, 24/06/2020.
- [22] **L. Sicot,** Etude et réalisation des cellules photovoltaïques en polymère , Thèse doctorat à Université Pari XI Orsay (1999).
- [23] **H. Houili,** Approche numérique du transport de charge dans les semi-conducteurs organiques, Thèse doctorat à l'école polytechnique fédérale de Lausanne (2006).
- [24] **Amer Hamzaoui,** MAGISTER, Effet de l'illumination sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires au silicium polycristallin, UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF,(2012).
- [25] **Mme TCHOUAR (née Malti) Ilhem,** Thèse Doctorat, Etude, Modélisation, Simulation de cellule solaire organique. UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAÏD – TLEMCEN,
- [26] **R. Kroon, M. Lenes, J. C. Hummelen, P. W. M. Blom, and B. de Boer,** Polymer Reviews 48,531 - 582 (2008).
- [27] **M. Lenes, G.-J. A. H. Wetzelaer, F. B. Kooistra, S. C. Veenstra, J. C. Hummelen, and P. W. M. Blom,** Advanced Materials 20, 2116-2119 (2008).

**Modélisation électrique et
outil de simulation des
cellules solaires organiques**



CHAPITRE

II

2. Modélisation électrique et outil de simulation des cellules solaires organiques

2.1 Introduction :

Après avoir donné un état d'art des cellules solaires organique dans le premier chapitre, nous nous concentrons sur la modélisation électrique et l'outil de simulation des cellules solaires organiques.

La conversion photovoltaïque est la transformation de l'énergie provenant des photons comprise dans le rayonnement solaire en énergie électrique. Les dispositifs capables d'effectuer cette transformation sont appelés cellules solaires. Les cellules solaires sont formées à base des semi-conducteurs dont le modèle mathématique reste toujours basé sur un circuit électrique avec différents paramètres.

Dans ce chapitre, nous présenterons les différents modèles qui existent dans la littérature correspondant aux cellules photovoltaïques.

2.2 Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire :

2.2.1 Modèle d'une cellule solaire idéal :

La réflexion précédente nous permet d'aboutir au modèle électrique équivalent de la cellule photovoltaïque représentée dans la **Figure 2.1**, appelé le modèle idéal. C'est le modèle le plus simple pour représenter la cellule solaire, car il ne tient compte que du phénomène de diffusion. Le circuit équivalent simplifié d'une cellule solaire se compose d'une diode et d'une source de courant montés en parallèle [1].

La source du courant produit le photocourant I_{ph} qui est directement proportionnel à l'éclairement solaire.

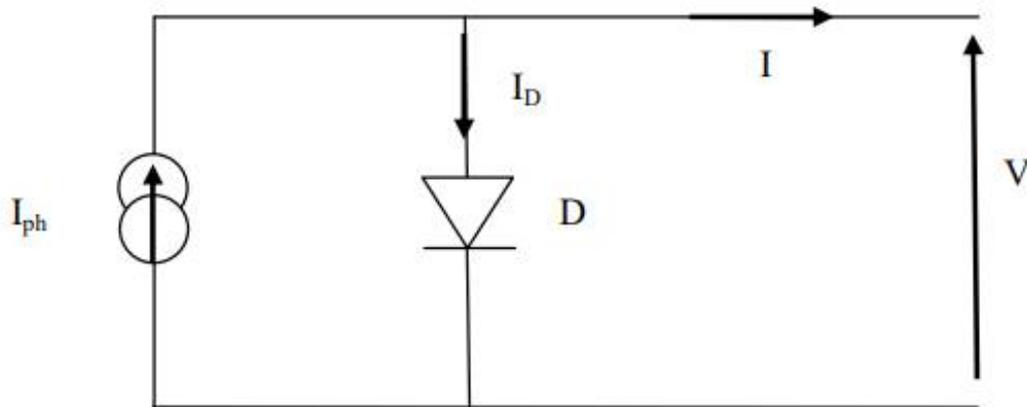


Figure 2.1 : Schéma équivalent d'une cellule solaire idéale [1].

Le courant de la diode sous illumination est donné par l'application de la loi des nœuds sur le circuit :

$$I = I_{ph} - I_D \quad (1)$$

$$I = I_{ph} - I_S \left(\exp\left(\frac{qV}{AKT}\right) - 1 \right) \quad (2)$$

Avec :

I : Courant fourni par la cellule [A].

I_{ph} : Photocourant créé par la cellule (proportionnel au rayonnement incident [A])

I_D : Courant de la diode [A].

V : Tension aux bornes de la cellule [V].

A : Facteur d'idéalité de la jonction P-N.

I_S : Courant de saturation de la diode [A].

q : Charge de l'électron [$1,6 \cdot 10^{-19}$ C]

K : Constant de Boltzmann [$1,38 \cdot 10^{-23}$ J/K]

T : Température effective de la cellule [K].

Nous obtenons ainsi le circuit équivalent d'une cellule solaire idéale, présenté sur la **Figure 2.2**.

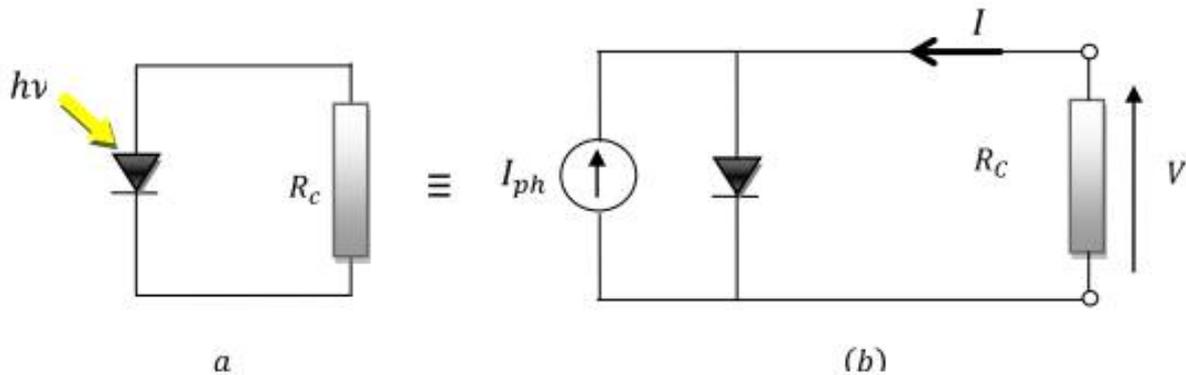


Figure 2.2 : Circuit électrique d'une jonction PN idéale sous illumination (a) connecté à une résistance de charge et (b) son circuit équivalent [1].

Lorsque la jonction est reliée à une résistance de charge R_C , le passage du courant à travers R_C fait apparaître une chute de tension (en circuit ouvert, $R_C \rightarrow \infty$ et $V = V_{CO}$).

2.2.2 Modèle d'une cellule solaire réelle :

Dans les cellules réelles, il faut tenir compte des résistances de contacts entre les électrodes et la couche active et des pertes ohmiques dues à la résistivité des matériaux. Ces résistances sont représentées sous la forme d'une résistance R_S placée en série avant la résistance de charge R_C du circuit externe. De même, les fuites de courant qui apparaissent à travers la cellule, ainsi que les phénomènes de recombinaison des charges photo-générées dans la cellule, peuvent être modélisés à l'aide d'une résistance parallèle R_{Sh} (résistance shunt) connectée en parallèle avec la diode idéale. Le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque réelle sous éclairage est présenté dans la **Figure 2.3**.

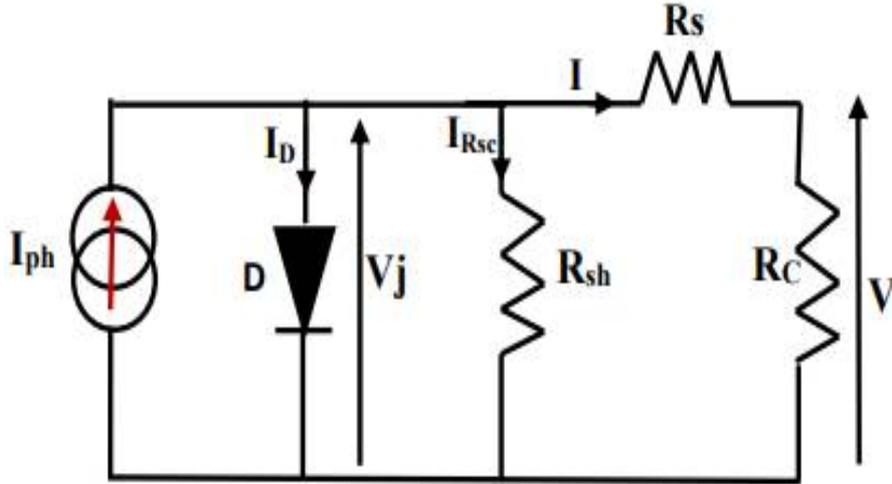


Figure 2.3 : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire connectée à une charge R_c sous illumination dans le cas réel : R_s est la résistance série, R_{sh} est la résistance parallèle [1].

Lorsque les résistances de contacts (résistivité des électrodes et des interfaces métal-matériaux organiques) et les pertes ohmiques (dues à la résistivité des couches organiques) génèrent une résistance non négligeable par rapport à la résistance de charge, nous devons associer au schéma équivalent une résistance série R_s .

Si on note V_j la tension à travers la jonction, la tension à travers la cellule est réduite à :

$$V = V_j + R_s I \quad (3)$$

Dans le premier quadrant nous avons :

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{qV}{KT}\right) - 1 \right] - I_{ph} = I_s \left[\exp\left(q \frac{V - R_s I}{KT}\right) - 1 \right] - I_{ph} \quad (4)$$

De plus, lorsque des courants de fuite apparaissent à travers la cellule, nous pouvons prendre en compte cette nouvelle composante en insérant une résistance parallèle (R_{sh}) [2-3].

Lorsque cette résistance devient très grande ($R_{sh} \rightarrow \infty$), ces courants de fuite deviennent négligeables $I_p \approx 0$.

Nous obtenons ainsi :

$$I = I_s \left[\exp\left(q \frac{V - R_s I}{KT}\right) - 1 \right] - I_{ph} + \frac{V - R_s I}{R_{sh}} \quad (5)$$

Dans le cas d'une cellule idéale nous ne trouvons pas le courant total I_{ph} mais seulement $I = I_d - I_{ph}$. Dans le cas réel cette réduction est bien prononcée, ceci est dû à la résistance shunt R_{sh} qui introduit un courant de fuite I_p et qui est donné par la relation suivante :

$$I = I_d - I_{ph} + I_p \quad (6)$$

Alors que dans le cas idéal on a $R_S \approx 0$ et $R_{sh} \rightarrow \infty$, ces résistances donnent dans le cas réel une évaluation des imperfections de la diode : en considérant que R_S présente une valeur faible et que $R_S \ll R_{sh}$, nous pouvons estimer les valeurs de R_S et R_{sh} à partir de la différenciation de l'expression déduite de la deuxième loi de Kirchhoff

(loi des nœuds) :

$$f(I, V) = I_s \left[\exp\left(q \frac{V - R_S I}{KT}\right) - 1 \right] - I_{ph} + \frac{V - R_S I}{R_{sh}} - I = 0 \quad (7)$$

Nous déduisant :

$$\left[\frac{dV}{dI} \right] i = 0 = R_S + \frac{R_{sh}}{1 + \frac{R_{sh} I_s}{uT} \exp\left(\frac{V}{uT}\right)} \approx R_S \quad (8)$$

Ou le terme $uT = \frac{KT}{q} \approx 26 \text{ mV}$ à 300K et sachant que pour $I=0$ la tension V est égale à la tension de circuit – ouvert V_{oc} très grande devant le terme uT .

De la même manière, nous trouvons :

$$\left[\frac{dV}{dI} \right] v = 0 = R_S + \frac{R_p}{1 + \frac{R_{sh} I_s}{uT} \exp\left(\frac{R_S I}{uT}\right)} \approx R_S + R_{sh} \approx R_{sh} (R_S \ll R_{sh}) \quad (9)$$

Nous avons aussi :

$$\begin{cases} \frac{1}{R_S} = R_S^{-1} = \left[\frac{dI}{dV} \right] I = 0 \\ \frac{1}{R_{sh}} = R_{sh}^{-1} = \left[\frac{dI}{dV} \right] V = 0 \end{cases} \quad (10)$$

Les pentes de la caractéristique $I(V)$ sous illumination, calculée en $I=0$ (circuit ouvert) et $V=0$

(court-circuit) donnent respectivement les valeurs inverses des résistances série et shunt, **Figure 2.4**.

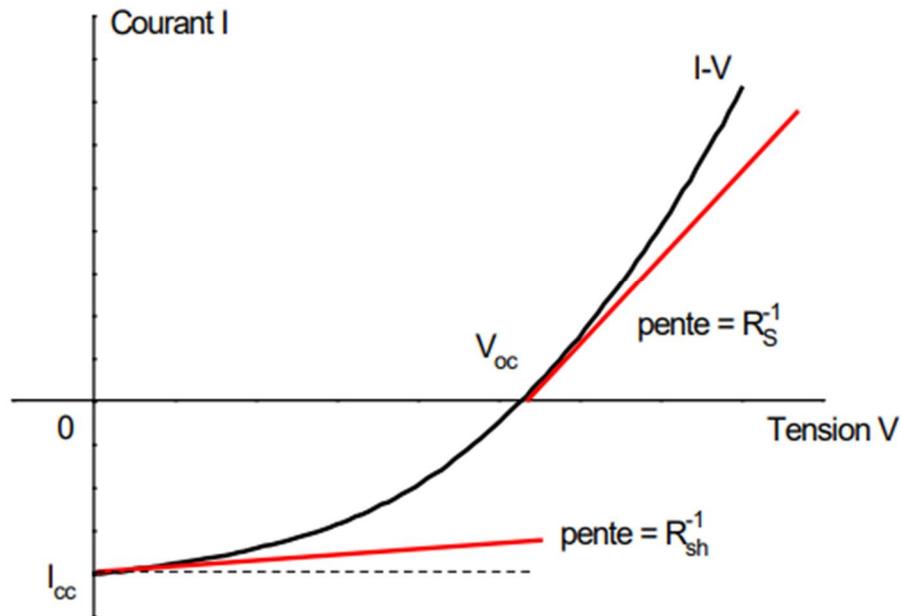


Figure 2.4 : caractéristique I(V) sous illumination [4].

2.3 Circuit équivalent d'une cellule solaire organique

2.3.1 Modèle à une diode

Ce modèle est le plus courant est utilisé par de nombreux auteurs pour obtenir des valeurs de certains paramètres de la caractéristique courant-tension d'une cellule solaire par des méthodes d'approximation [2].

Les propriétés de la jonction **pn** et la réaction du semiconducteur au rayonnement mènent au schéma du circuit équivalent idéal simplifié d'une cellule photovoltaïque représenté sur la **Figure 2.5**

Le modèle à une diode sous éclaircissement est caractérisé par son schéma électrique équivalent

qui se compose d'une source de courant qui modélise la conversion du flux lumineux en énergie électrique, une résistance shunt et une conséquence de l'état le long de la périphérie de la surface de la cellule, une résistance série R_s représentant les diverses résistances de contact et de connexions, une diode en parallèle qui modélise la jonction **pn**.

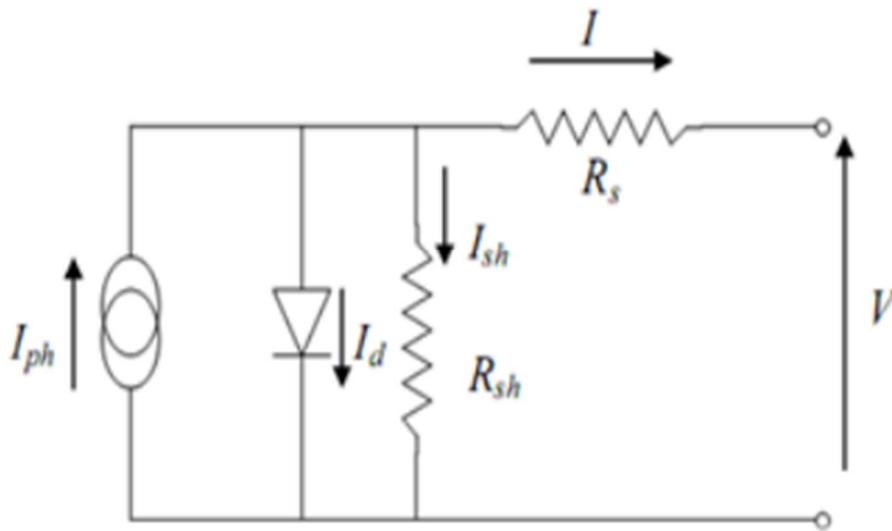


Figure 2.5 : Schéma équivalent d'un modèle à une diode [2].

Le courant généré par le modèle à une diode est donné par loi de Kirchhoff :

$$I = I_{ph} - I_d - I_{sh} \quad (11)$$

$$I = I_{ph} - I_s \left[\exp\left(\frac{V - R_s I}{uT}\right) - 1 \right] + \frac{V - R_s I}{R_{sh}} \quad (12)$$

I : courant fourni par la cellule

V : Tension à la borne de la cellule

I_{ph} : photocourant, proportionnel à l'irradiance ϕ , avec correction selon T

I_s : Courant de saturation de la diode, dépendant de la température T.

R_s : Résistance série.

R_{sh} : Résistance shunt (ou parallèle).

q : Charge de l'électron = $1,602 \cdot 10^{-19}$ Coulomb.

K : Constante de Boltzmann = $1,38 \cdot 10^{-23}$ J /K

T : Température effective de la cellule [Kelvin].

2.3.2 Modèle à deux diodes

Une cellule solaire organique est représentée par son schéma électrique équivalent **Figure 2.6**, qui en plus deux diodes en parallèle se compose d'une source de courant modélisent le flux lumineux, les pertes sont modélisées par deux résistances, une résistance en série R_s et une résistance shunt R_{sh} .

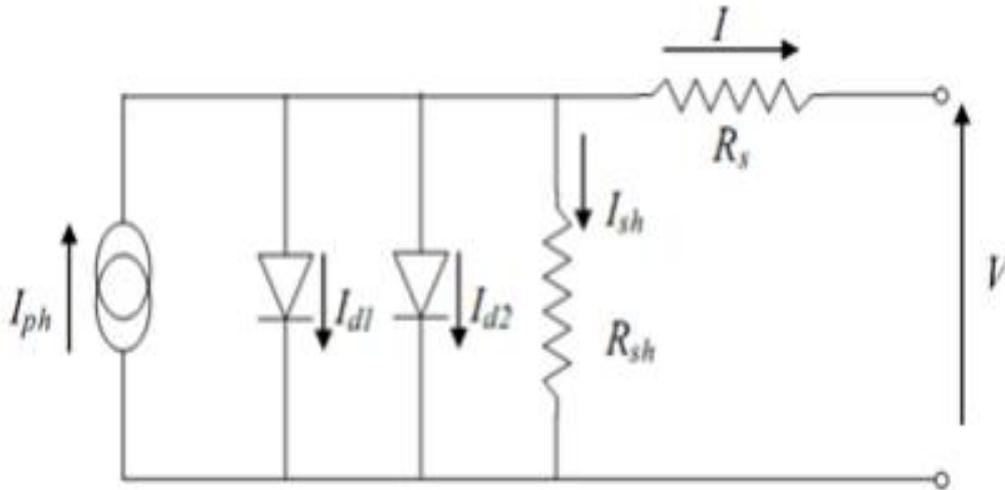


Figure 2.6 : Schéma équivalent de modèle à deux diodes [2].

Le courant généré par le module est donné par la loi de Kirchhoff

$$I = I_{ph} - (I_{d1} + I_{d2}) - I_{sh} \quad (13)$$

Avec :

$$I_{d1} = I_{s1} \left[\exp\left(\frac{V_{app} - R_s I}{n u_T}\right) - 1 \right] \quad (14)$$

$$I_{d2} = I_{s2} \left[\exp\left(\frac{V_{app} - R_s I}{n u_T}\right) - 1 \right] \quad (15)$$

$$I = I_{ph} - I_{s1} \left[\exp\left(\frac{V_{app} - R_s I}{n u_T}\right) - 1 \right] + I_{s2} \left[\exp\left(\frac{V_{app} - R_s I}{n u_T}\right) - 1 \right] \quad (16)$$

2.4 Influence des résistances série et shunt

- La résistance série caractérise les pertes de tension dans le semi-conducteur et à travers les contacts ohmiques de la cellule.
- La résistance shunt caractérise les fuites de courant. Elle est provoquée par les défauts du cristal et les impuretés étrangères dans la région de la jonction PN.
- L'influence de ces résistances parasites sur la caractéristique I(V) de la cellule PV est représentée sur les **Figures (2.6), (2.7)** pour un éclairement $E=1000$ (W/m^2) et une température $T=25$ ($^{\circ}\text{C}$) [4].

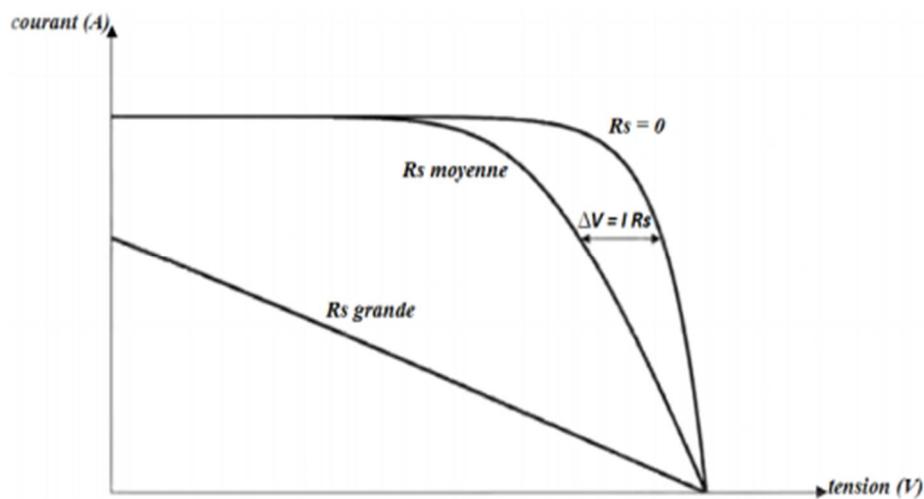


Figure 2.7 : L'influence de la résistance série sur la caractéristique I(V) [4].

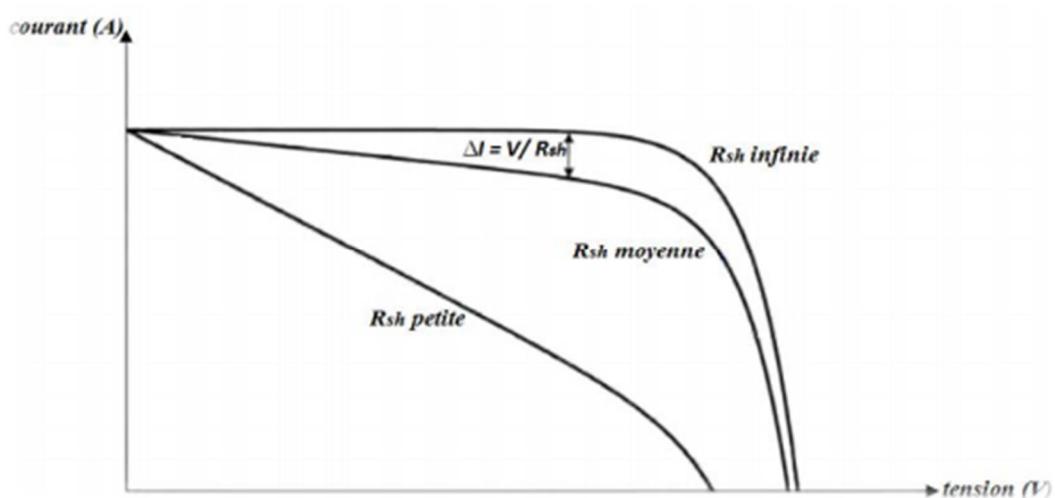


Figure 2.8 : L'influence de la résistance shunt sur la caractéristique I(V) [4].

L'influence de la résistance série R_s s'exprime par une variation de la pente $I(V)$ dans la zone où la cellule PV est assimilable à un générateur de tension. Elle ne modifie pas la tension de circuit ouvert, mais lorsqu'elle est anormalement élevée, elle peut diminuer la valeur du courant de court-circuit. Par contre, l'impact de la résistance shunt R_{sh} se manifeste surtout au sein de la région où la cellule PV se comporte comme un générateur de courant par une modification de la pente. Une résistance shunt trop faible aura un impact sur la tension de circuit ouvert de la photopile ; à cause de cela une photopile dont la résistance shunt est trop faible ne donnera plus de tension sous faible éclairement [3].

2.5 Modélisation des cellules solaires :

La modélisation des cellules solaires passe nécessairement par un choix judicieux des circuits électriques équivalents, de nombreux modèles mathématiques sont développés pour représenter un comportement fortement non linéaire, résultant de celui des jonctions semiconductrices qui sont à la base de leurs réalisations, Ces modèles se différencient entre eux par les procédures mathématiques et le nombre de paramètres intervenants dans le calcul de la tension et du courant de la cellule solaire.

On peut modéliser le circuit électrique équivalent du fonctionnement d'une cellule solaire par le schéma suivant :

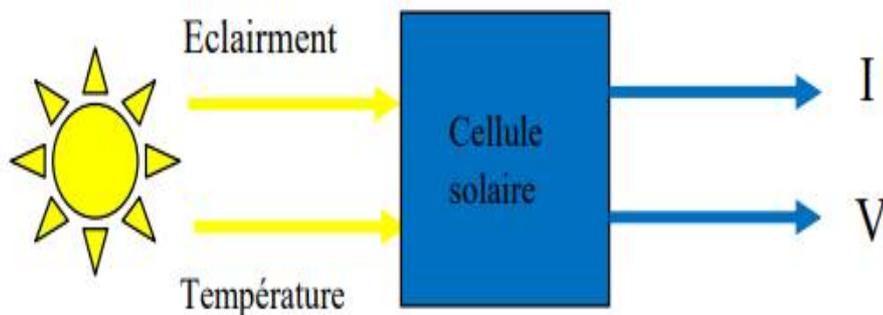


Figure 2.9: Schéma bloc d'une cellule solaire

Dans cette partie, nous présentons le modèle de Drift diffusion, qui est obtenus à partir des équations des densités de courant de dérive et de diffusion des électrons et des trous, ainsi que l'équation de continuité et l'équation de poisson.

2.5.1 Modèle de Drift diffusion :

Pour ce travail, nous effectuons toutes nos simulations de dispositif à l'aide de ce modèle, dans lequel les densités de courant (J_n) d'électrons et de trous (J_p) sont traitées par l'ensemble des équations de conduction.

2.5.1.1 Courant de dérive :

La densité de courant de conduction des électrons \vec{J}_n et des trous \vec{J}_p créé sous l'action d'un champ électrique \vec{E} pour chaque type de porteurs est donnée par :

$$\vec{J}_n = -n \cdot q \cdot \vec{v}_{d,n} = n \cdot q \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \quad (17)$$

Avec : $\vec{v}_{d,n} = -\mu_n \cdot \vec{E}$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \vec{v}_{d,p} = p \cdot q \cdot \mu_p \cdot \vec{E} \quad (18)$$

Avec : $\vec{v}_{d,p} = \mu_p \cdot \vec{E}$

Ou :

\vec{J}_n : La densité de courant de dérive des électrons.

\vec{J}_p : La densité de courant de dérive des trous.

n, p : Les concentrations des porteurs libres (électrons et trous respectivement).

q : La charge élémentaire de l'électron.

μ_n, μ_p : Les mobilités des porteurs de charges (électrons et trous) [$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot S^{-1}$].

\vec{E} : Champ électrique.

$\vec{v}_{d,n}, \vec{v}_{d,p}$: Les vitesses de dérive des électrons et des trous respectivement (la vitesse de trous est positive car elle est dans le même sens que le champ électrique).

2.5.1.2 Courant de diffusion :

Un courant de diffusion est un courant soumis à l'action d'un gradient (une variation spatiale) de la densité des porteurs est donnée par les relations suivantes :

$$\vec{J}_n = q \cdot D_n \cdot \frac{dn}{dx} \cdot \vec{i} \quad (19)$$

$$\vec{J}_p = -q \cdot D_p \cdot \frac{dp}{dx} \cdot \vec{i} \quad (20)$$

Où :

D_n, D_p : Coefficients de diffusion des électrons et des trous, respectivement.

2.5.1.3 Densité de courant totale :

On peut maintenant construire les équations de dérive-diffusion (21) et (22), qui sont obtenues en écrivant la somme du courant de dérive des électrons (17) et du courant de diffusion des électrons (19) ainsi que la somme du courant de dérive des trous (18) et courant de diffusion des trous (20).

$$\vec{J}_n = n \cdot q \cdot \mu_n \vec{E} + q \cdot D_n \cdot \frac{dn}{dx} \cdot \vec{i} \quad (21)$$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \mu_p \vec{E} - q \cdot D_p \cdot \frac{dp}{dx} \cdot \vec{i} \quad (22)$$

On peut encore définir ces équations dans le cas tridimensionnel, ceci est donné par les équations (19) et (20).

$$\vec{J}_n = n \cdot q \cdot \mu_n \vec{E} + q \cdot D_n \cdot \vec{\nabla}_n \quad (23)$$

$$\vec{J}_p = p \cdot q \cdot \mu_p \vec{E} - q \cdot D_p \cdot \vec{\nabla}_p \quad (24)$$

2.5.1.4 Equation de continuité :

Les variations temporelles des densités de charge sont déterminées par les équations de continuité (électrons – trous), et sont données par les équations (25) et (26).

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n + G_n - U_n \quad (25)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p + G_p - U_p \quad (26)$$

Où :

G_n et G_p : Les taux de générations des électrons et des trous.

U_n et U_p : Les taux de recombinaison des électrons et des trous.

2.5.1.5 Zone de charge d'espace :

En supposant tous les donneurs et accepteurs ionisés, la charge d'espace ρ exprimée en [$C \cdot cm^{-3}$] dans chacune des régions de la jonction s'écrit :

$$\rho(\vec{r}) = q[N_D^+ + p - N_A^- - n] \quad (27)$$

Avec :

N_D^+ et N_A^- : la densité de donneurs et d'accepteurs ionisés.

2.5.1.6 Equation de Poisson :

Le simulateur numérique de cellule solaire est un programme informatique qui peut résoudre numériquement « les équation semi-conductrices » d'une structure de cellule solaire donnée.

Les équations des semi-conducteurs en courant continu (en une dimension) sont l'équation de Poisson qui relie le potentiel électrostatique V à la densité de charge totale [5].

L'équation de Poisson relie les populations de porteurs libres, les populations de charges piégées et des populations des dopants ionisés au champ électrostatique présent dans un système matériel [6].

$$\mathit{div}\vec{E} = \frac{\rho(x,y)}{\epsilon_0} \quad (28)$$

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\mathit{grad}} V \quad (29)$$

$$\mathit{div}(\overrightarrow{\mathit{grad}} V) = -\frac{\rho(x,y)}{\epsilon_0} \quad (30)$$

$$\Delta V = \mathit{div}(\overrightarrow{\mathit{grad}} V) = -\frac{\rho(x,y)}{\epsilon_0} \quad (31)$$

Avec :

V : Le potentiel électrostatique.

ϵ_0 : La permittivité du vide.

2.5.2 La recombinaison :

Plusieurs processus entrent en compétition avec la génération dans les matériaux semi-conducteurs où des paires électron-trou sont créés. Cependant, il y a des modèles utilisés pour étudier la modélisation de la recombinaison des charges dans les semi-conducteurs organiques [7]. Les trois types de recombinaison dans un semi-conducteur sont :

- ✓ Recombinaison radiative entraînant l'émission d'un photon : Cette technique est souvent appelée recombinaison de bande à bande
- ✓ Recombinaison non radiative entraînant l'émission d'un photon : C'est ce qu'on appelle souvent la recombinaison assistée par piégeage.
- ✓ Recombinaison de la vis sans fin résultant de l'apport d'énergie cinétique à un troisième porteur. Il s'agit également d'un processus non radiatif.

Chacun de ces processus est illustré dans la **Figure 2.10** et sera examiné en détail ci-dessous.

Parmi les types de recombinaison susmentionnés, les propriétés radiatives et Auger sont une propriété de base des matériaux semi-conducteurs utilisés, tandis que les propriétés non radiatives dépendent de la qualité du matériau grâce à la densité des pièges non radiatifs.

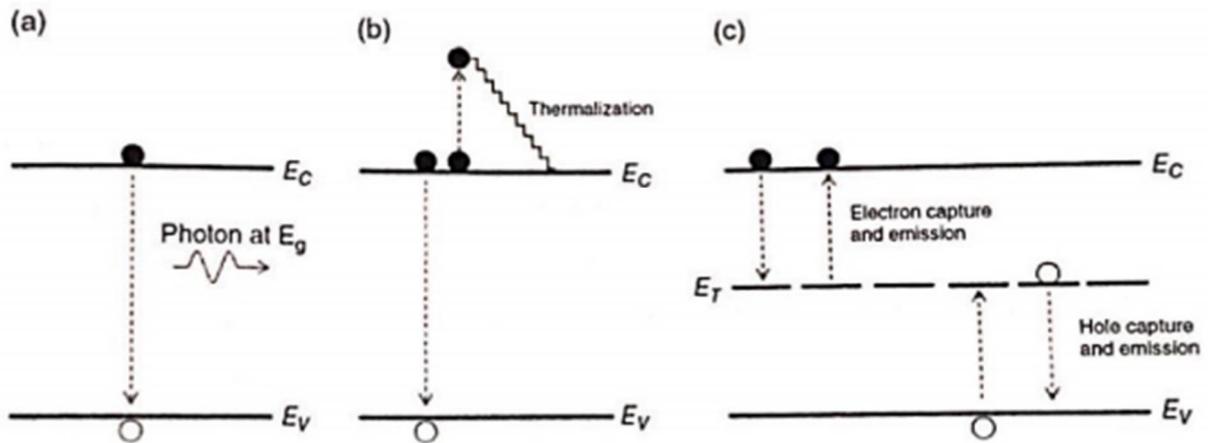


Figure 2.10 : Les trois principaux types de processus de recombinaison [8].

- (a) Bande à bande radiative ; (b) Auger non radiative ; (c) centres de recombinaison non radiatives (pièges).

2.5.2.1 Recombinaison radiative :

La recombinaison radiative correspond à la recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence, ce qui entraîne l'émission d'un photon à l'énergie de la bande interdite, c'est ce qu'on appelle recombinaison biomoléculaire ou de Langevin, par exemple (**Figure 2.10(a)**). Le taux de recombinaison radiative spontanée (recombinaison bande à bande) d'un semi-conducteur dépendra physiquement du flux de photon du matériau (rayonnement du corps noir) ainsi du coefficient d'absorption du matériau. De même le détour sur une jonction pn sert à augmenter le flux de photons provenant du matériau, comme c'est le cas d'une diode électroluminescente.

Une simple expression pour la recombinaison radiative bande à bande pour un semi-conducteur non dégénéré dans des conditions de non-équilibre est donné comme :

$$U_{rad} = K(np - n_i^2) \quad (32)$$

Ou K (cm^3/s) est appelé le coefficient de recombinaison radiative (coefficient de Langevin) est une propriété d'un matériau. Le premier terme de l'expression correspond au trou d'électron en non-équilibre (en raison de l'éclairage ou d'un détour externe), tandis que le second terme contient la population de porteurs thermiques ($n_i^2 = n_0p_0$)

$$K = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (\mu_n + \mu_p) \quad (33)$$

Avec :

n_i : la densité des porteurs de charge intrinsèque.

q : la charge élémentaire de l'électron.

μ_n, μ_p : les mobilités des porteurs de charges (électrons et trous) [$cm^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$].

ϵ_0 : permittivité du vide.

ϵ_r : la permittivité relative du matériau.

2.5.2.2 La recombinaison Auger :

La prise en considération de ce type de recombinaison est nécessaire aux niveaux de dopage ou niveau d'injection élevés.

La recombinaison Auger est une recombinaison à trois particules où l'énergie libérée lors d'une recombinaison d'un électron de la bande de conduction avec un trou de la bande de valence est transférée à un autre électron ou autre trou (Figure 2.10(b)).

Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$R_{Auger} = (C_n n + C_p p)(np - n_i^2) \approx C_n n^2 p + C_p p^2 n \quad (34)$$

2.5.2.3 La recombinaison Shockley-Read-Hall :

Ce modèle a été introduit en 1952, pour décrire les statistiques de recombinaison et de génération des trous et des électrons dans les semi-conducteurs se produisant par le mécanisme de piégeage. La théorie de Shockley Read-Hall utilisée pour la recombinaison par pièges des charges [9], le taux de recombinaison de Shockley Read Hall est donné par :

$$R_{SRH} = \frac{np - n_1 p_1}{\tau_p(n + n_t) + \tau_n(p + p_t)} \quad (35)$$

Avec :

$$n_t = n + N_{LUMO} \exp \frac{-(E_{LUMO} - E_t)}{K_B T} \quad (36)$$

$$p_t = p + N_{HOMO} \exp \frac{-(E_{HOMO} - E_t)}{K_B T} \quad (37)$$

Avec :

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_n N_t v_n} \quad (38)$$

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p N_t v_p} \quad (39)$$

Où : σ_p (σ_n) : la section efficace de capture des électrons (trous)

N_t : la densité totale des pièges.

v_n (v_p) : la vitesse thermique des électrons (trous).

Le terme de recombinaison dans l'ensemble des équations de continuité est supposé être la somme de la recombinaison de Langevin (recombinaison bimoléculaire) et le processus de recombinaison par pièges décrit par les statistiques de Sah-Shockley [9].

$$R_n = \frac{n}{\tau_n} \quad R_p = \frac{p}{\tau_p} \quad (40)$$

Avec : τ_n et τ_p : les temps de recombinaison moyens des électrons et des trous.

Récemment, un taux de recombinaison supérieur à 2 a été rapporté dans le matériau P3HT :PCBM et il est lié au processus de recombinaison retardée des pièges [9].

Un modèle analytique de sauts de porteurs de charges à l'interface séparant deux matériaux organiques, la recombinaison biomoléculaire de Langevin convient parfaitement pour citer des systèmes où les électrons et les trous peuvent se déplacer librement. On prend l'exemple à l'interface entre métal / semi-conducteur, le choix des interfaces est important pour les performances des dispositifs organiques puisqu'il détermine les courants majoritaires et minoritaires et donc le taux de recombinaison et l'efficacité dans les structures [9].

2.6 Outil de simulation :

2.6.1 Programme de simulation SCAPS :

Pour établir la réalité physique, la simulation joue le rôle d'un pont qui relie le monde théorique au monde expérimental, comme il est illustré dans le schéma qui suit.

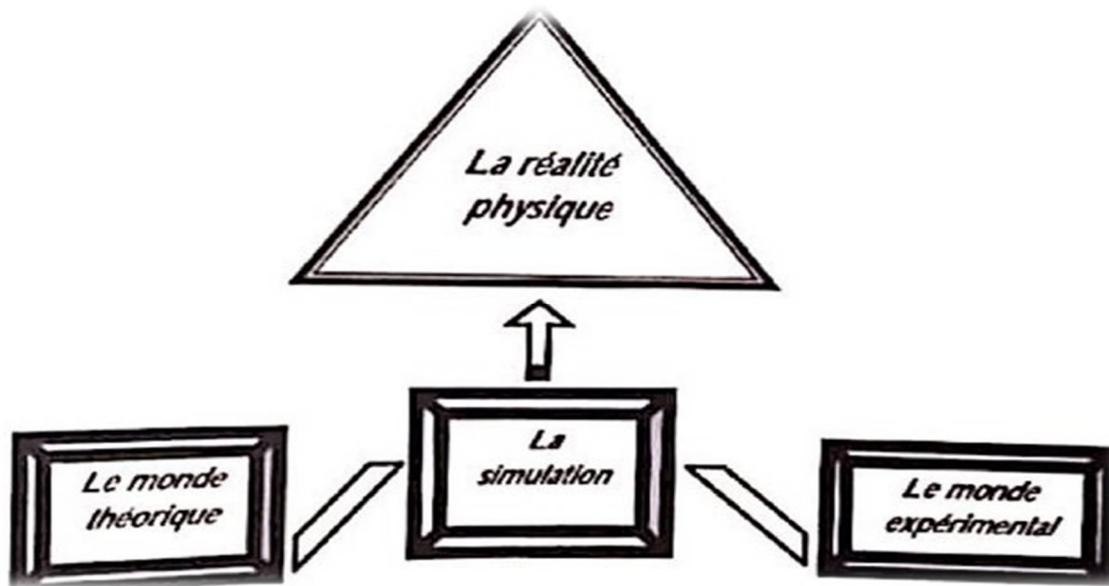


Figure 2.11: L'importance de simulation [7].

Le simulateur SCAPS-1D développé par Marc Burgelman est un programme conçu pour fonctionner sous le système d'exploitation Windows. Il permet la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique. Ceci nous permet d'économiser le temps et le coût de développement et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Il résout les équations différentielles qui régissent le fonctionnement des dispositifs électroniques par des méthodes numériques (éléments finis, moindre carré etc...).

Il a été développé à l'université de Gand avec le LabWindows / CVI de national Instruments. Il a été mis à la disposition des chercheurs universitaires de la communauté photovoltaïque après la deuxième conférence mondiale sur le photovoltaïque à Vienne, en 1998.

Le programme comprend plusieurs panneaux (ou fenêtres). Le panneau principal est « le panneau d'action ». Il autorise de mettre le problème, permet de choisir les calculs exigés, exécuter les calculs, naviguer aux autres panneaux, sauver et mettre en graphe les résultats et quitter le programme.

La fenêtre « Action Panel », la fenêtre principale du logiciel SCAPS 3201 est présentée sur la **Figure 2.12** ci-dessous.

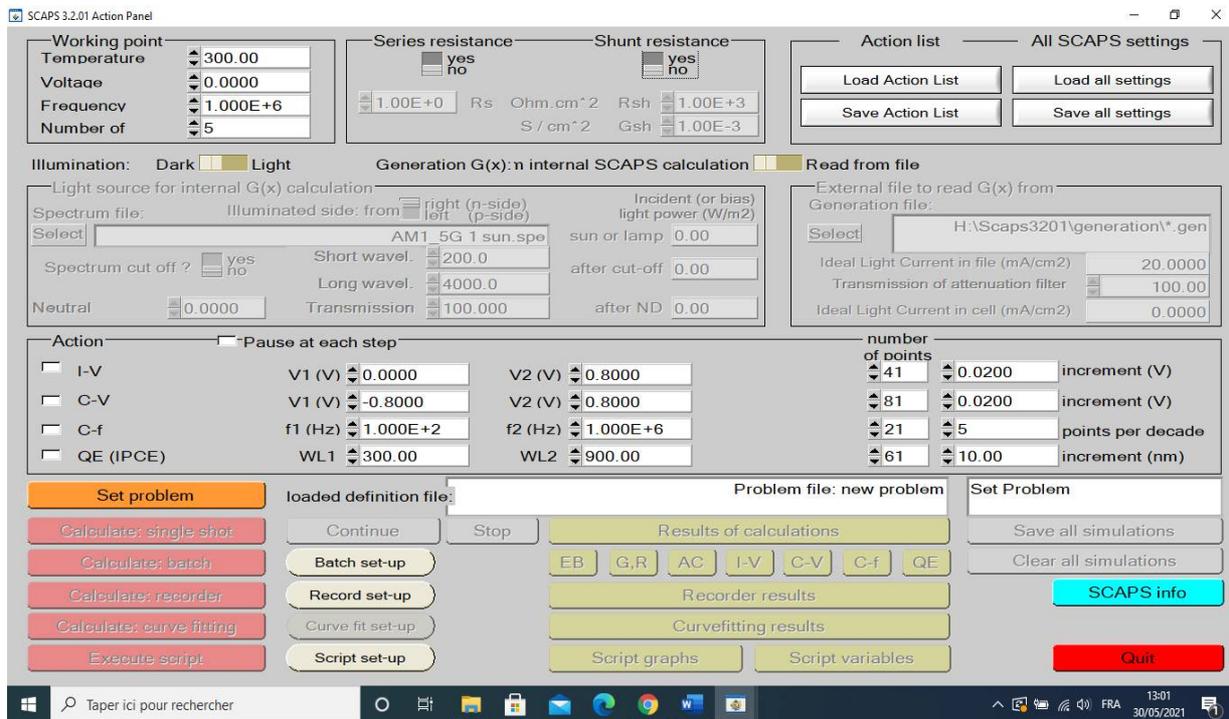


Figure 2.12 : Fenêtre principale du logiciel SCAPS

2.6.2 Explication du processus de simulation à l'aide de SCAPS :

Afin de simuler et contrôler tous les paramètres d'un dispositif photovoltaïque au moyen de Logiciel **SCAPS**, nous devons passer par trois grandes fenêtres : Fenêtre d'exécution (action panel), Fenêtre de conception de dispositif et la définition du problème (Définition panel) et Fenêtre des résultats.

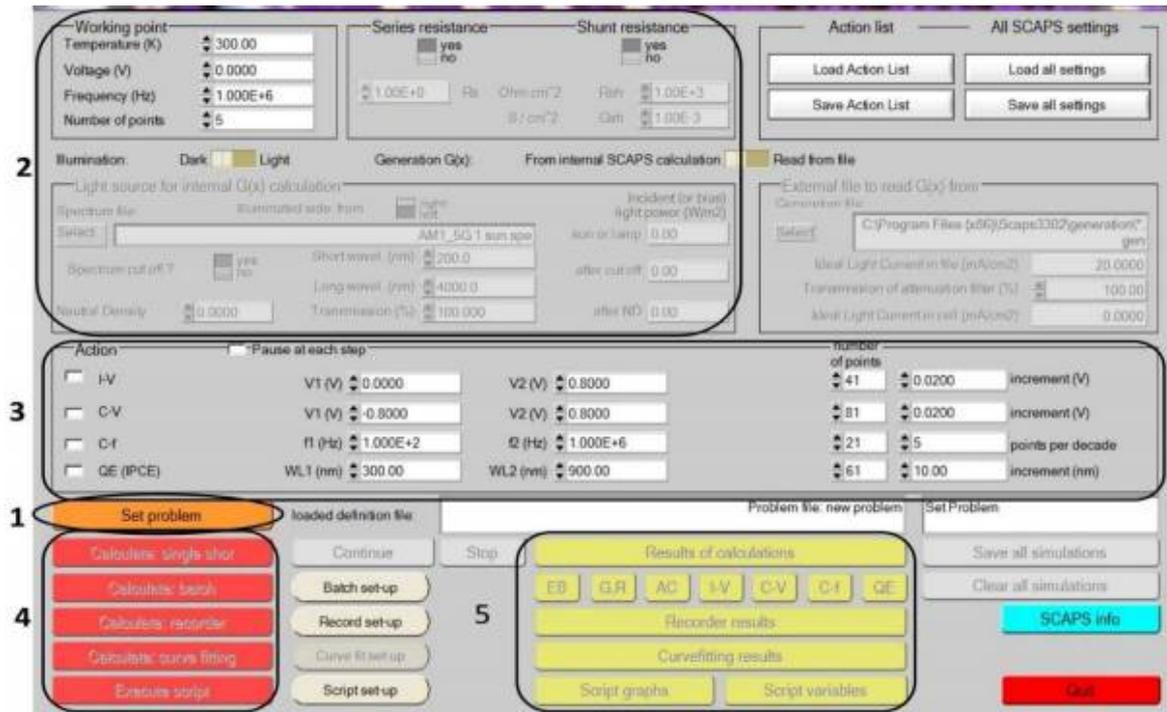


Figure 2.13 : Panneau de démarrage de SCAPS

SCAPS s'ouvre avec la fenêtre « Action Panel ». On peut à n'importe quel moment accéder aux deux autres fenêtres, fenêtre de conception de dispositif et fenêtre des résultats comme le montre la figure ci-dessus. La signification des blocs nommés de 1 à 5 est expliquée comme suivant :

1. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée
2. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de Fonctionnement)
3. Indiquer la mesure (la caractéristique) à simuler
4. Commencer les calculs.
5. Afficher les courbes de simulation.

➤ Définition du problème :

Set Problem

Quand on clique sur le bouton ‘SET PROBLEM’ sur le panneau d’action, le panneau ‘SOLAR CELL DEFINITION’ s’affiche. Ce dernier permettra de créer ou de modifier les structures des cellules solaires et de les enregistrer, ou bien de les charger à partir d’autres fichiers. Ces fichiers de définition sont des fichiers standards ASCII (American Standard Code for Information Interchange) d’extension .def qui peuvent s’ouvrir avec Notepad.exe ou Wordpad.exe. Il est déconseillé de les modifier au risque de les rendre inutilisables par la suite. Les propriétés des couches, des contacts et d’interfaces peuvent être modifiées en cliquant sur le bouton approprié comme le montre la **Figure 2.13**. De la même manière, des couches peuvent être rajoutées en cliquant ‘ADD LAYER’.

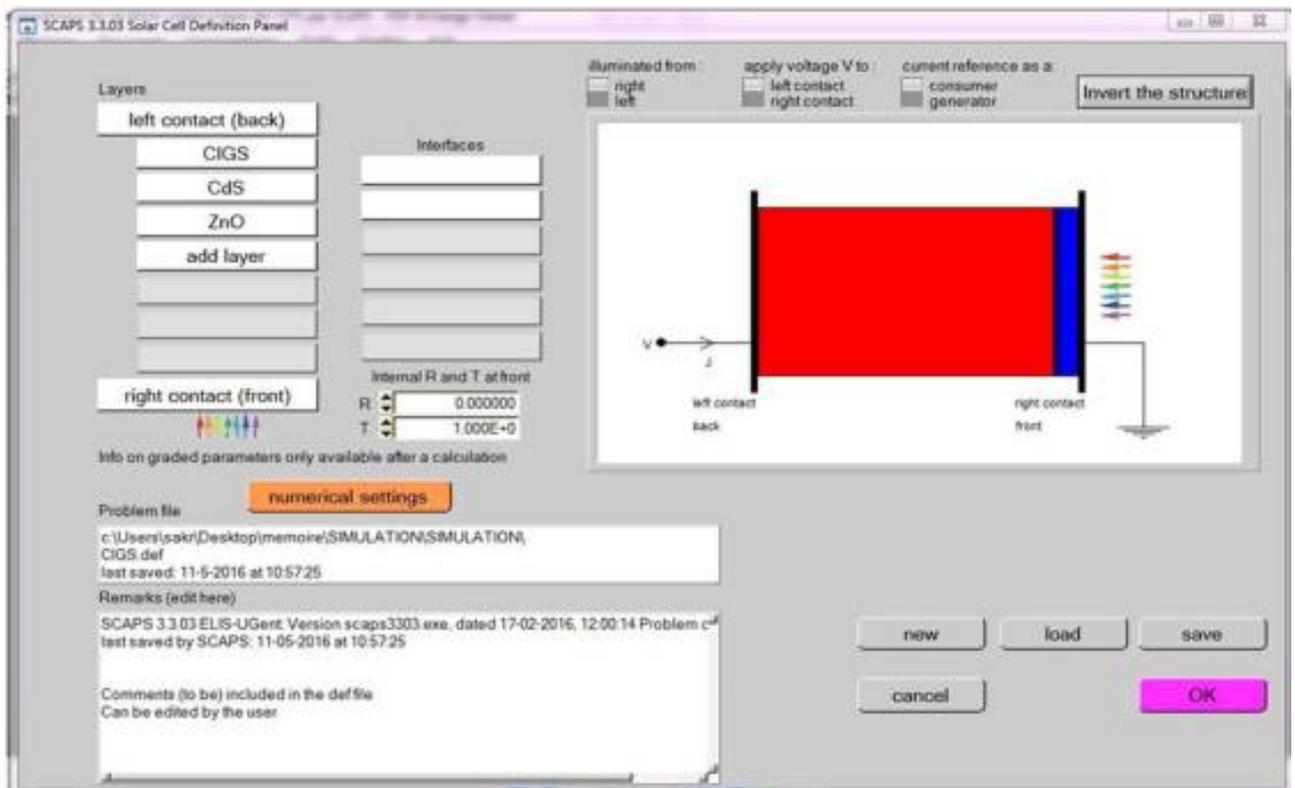


Figure 2.14 : Définir le problème.

➤ **Définition du point de fonctionnement :**

Le point de fonctionnement spécifie les paramètres qui ne sont pas variables dans les mesures de la simulation, et qui sont relatifs à l'opération de mesure. Ceci implique

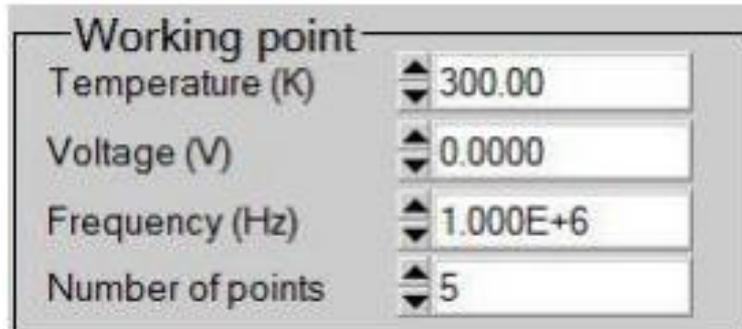


Figure 2.15 : Le point de fonctionnement.

➤ **Sélection des caractéristiques à simuler :**

Dans la partie Action du panneau action, on peut choisir un ou plusieurs mesures à simuler : I-V, C-V, C-f et QE(λ). On peut ajuster également, les valeurs initiales et finales de L'argument, ainsi que le nombre des étapes.

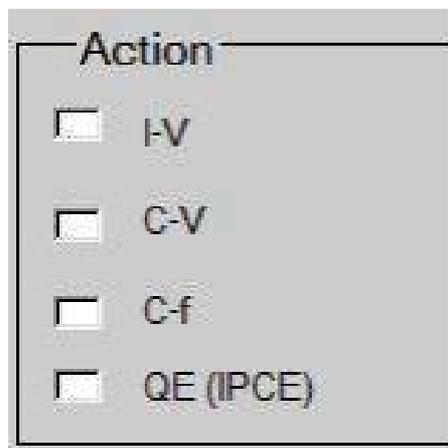


Figure 2.16: Sélection des caractéristiques à simuler.

➤ **Lancer le calcul :**

Calculate : single shot

On clique sur le bouton « Calculate : single shot » pour lancer le calcul après le choix des caractéristiques à simuler.

➤ **Affichage des courbes simulées :**

Après les calculs, SCAPS passe au panneau de bande d'énergie, présenté dans la **Figure 2.16**. Dans ce panneau, on peut voir les diagrammes de bandes, les densités des porteurs libres, la densité du courant. On peut faire apparaître les résultats par les commandes (**plot/legend, save graphs, show data**), et les valeurs s'affichent par la suite à l'écran. Il est possible de faire du copier & coller vers, par exemple, Excel, ou sauvegarder les valeurs dans un fichier de données. Vous pouvez basculer vers un de vos panneaux personnalisés (si vous avez toutefois simulé au moins une seule opération de mesure).

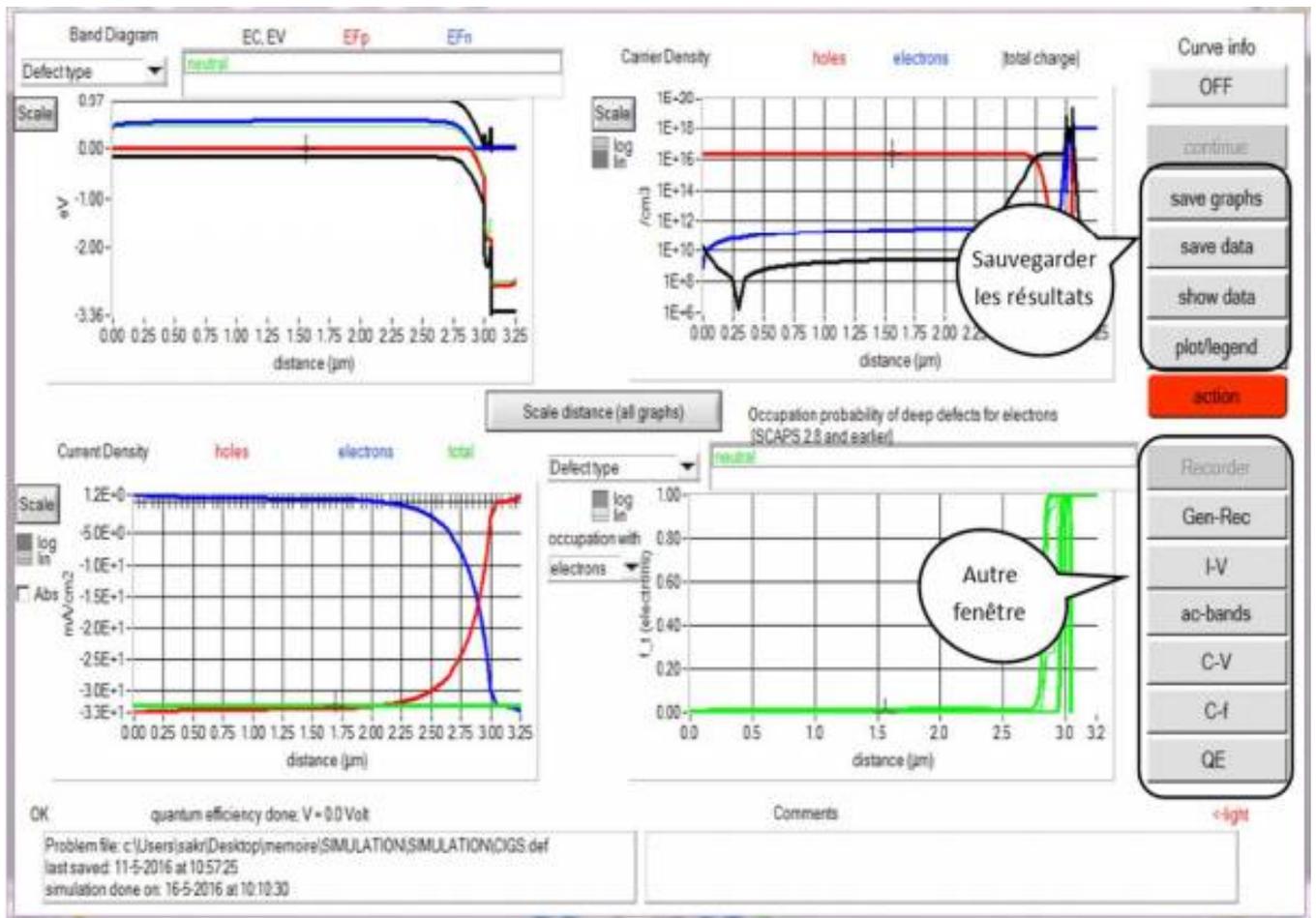


Figure 2.17: Panneau d'affichage des résultats.

2.6.3 Structure de dispositif :

Dans le programme SCAPS, il est possible d'entrer jusqu'à sept couches de semi-conducteurs, à l'exclusion des contacts avant et arrière.

Pour chaque couche, les propriétés des matériaux ont été données en entrée du logiciel SCAPS. Les propriétés de contact ont été prise en compte pour chaque conception. La fonction de travail du métal des contacts varie en conséquence, selon le métal utilisé.

2.7 Conclusion :

Ce chapitre nous a permis de présenter, d'abord, les différents modèles des circuits équivalents des cellules solaires existants dans la littérature en introduisant différents paramètres, ainsi que le modèle de Drift-diffusion utilisé dans ce mémoire pour la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les semi-conducteurs, Ensuite, nous avons pu déterminer les différentes méthodes utilisées actuellement pour optimiser les structures de cellules solaires.

Enfin, la simulation des cellules solaires s'est effectuée à l'aide du programme de simulation SCAPS développé au laboratoire de l'Université de Gand, et les résultats seront donnés dans le chapitre qui suit.

Références bibliographiques

- [1] **Marcelo GradellaVillalva, Jonas Rafael Gazoli, and Ernesto RuppertFilho**, “ Comprehensive Approach to Modeling and Simulation of Photovoltaic Arrays ”, IEEE TRANSACTIONS ON POWER ELECTRONICS, VOL. 24, NO. 5, MAY 2009
- [2] **M. A. Green et al**, Applied photovoltaics; 2 ème edition, ARC Centre for Advanced Silicon Photovoltaics and Photonics, 2007.
- [3] **Mohra.D**, Modélisation et caractérisation électrique des semiconducteurs organiques, 23/05/2018.
- [4] **W. Boursali** Modélisation et simulation de l'influence de la résistance série sur les caractéristiques I(V) d'une cellule photovoltaïque.
- [5] **J. Poortmans** and **V. Arkhipov**, Thin Film Solar Cells Fabrication , Characterization and Applications. ..
- [6] **S. B. In** and **E. T. Al**, SPRINGER BRIEFS IN Introducing CTS Sulphide) as a Solar Cell by Using Solar Cell Capacitance Simulator (SCAPS). .
- [7] **Djedid.S**, Modélisation et simulation des performances des cellules solaires à base de différents matériaux, 24/06/2020.
- [8] Photovoltaic Solar Energy: From Fundamentals to Applications, First Edition. Edited by Angèle Reinders, Pierre Verlinden, Wilfried van Sark, and Alexandre Freundlich. © 2017 John Wiley & Sons, Ltd. Published 2017 by John Wiley & Sons, Ltd.
- [9] **V. G. Caract**, “erisations de mat ´ eriaux et tests de composants des cellules solaires ` a base des nitrures des ´ Vanessa Gorge Caractérisations de matériaux et tests de composants des cellules solaires à base des nitrures des éléments III-V,” 2012.

**Simulation et
Résultats obtenus**



CHAPITRE

III

3. Simulation et résultat obtenus

3.1 Introduction :

Le rendement de conversion des cellules solaires organiques est un critère clé pour l'utilisation des semi-conducteurs organiques dans des applications industrielles. Jusqu'à présent, un rendement de conversion de 17.3% a été atteint en améliorant les paramètres du dispositif. Dans les cellules solaires organiques à base du mélange P3HT poly (3 - hexylthiophène) et le PCBM (phenyl-C61- butyric acid méthyl), un rendement de conversion de [3.5-5 %] [1]

Dans ce chapitre, nous présentons la simulation numérique d'une cellule solaire à base de mélange interpénétré P3HT : PCBM, à l'aide du simulateur des cellules solaire « SCAPS 1D » acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator One Dimension » qui a été présenté en détails dans le chapitre précédent, pour simuler les caractéristiques électriques des cellules solaires organiques [2].

Notre but c'est d'optimiser la cellule solaire organique à base de P3HT : PCBM, pour cela on va étudier l'effet de la résistance en série R_S et la résistance shunt R_{Sh} sur les performances de la cellule.

Les résultats obtenus dans cette opération sont présentés dans la section qui suit.

3.2 Conception de la simulation :

La modélisation numérique des cellules solaires est un outil indispensable dans l'analyse et la conception des composants à semi-conducteurs, est aussi elle a un rôle important pour optimiser les structures des cellules solaires [3].

Dans cette partie, on a utilisé comme cellules solaires celles basé d'un mélange nanométrique du matériau donneur P3HT et d'un autre matériau accepteur PCBM.

Dans cette étude, on a préféré d'utiliser le logiciel de simulation numérique SCAPS (version 3.2.0.1), ce dernier va nous permettre de comprendre ce qui se passe réellement à l'intérieur de la cellule solaire. Il va nous prédire les changements apportés aux performances des cellules solaires organiques.

Ce mémoire englobe l'étude de l'influence de la résistance en série et la résistance shunt de la cellule solaire sur les paramètres photovoltaïque, (le rendement de conversion photovoltaïque (η), la tension de circuit ouvert (V_{oc}), la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) et le facteur de forme (FF)).

3.3 Etude numérique des paramètres de la cellule solaire :

Dans notre simulation on a supposé que la couche active soit dopée de type p, avec $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $N_D^+ = 0$ [4]. Pour les pièges, des défauts accepteurs sont introduit dans la bande interdite de la couche active située près du niveau HOMO avec une distribution gaussienne des états d'énergie à 100 et 50 meV.

Paramètre	Symbole	Valeur	Unit
Epaisseur	d	150	nm
Bande interdite	E_g	1.27	eV
Affinité électronique	χ	3.7	eV
p-travail de sortie	ϕ_p	5.2	eV
n-travail de sortie	ϕ_n	4.3	eV
Densité d'état effective	N_c, N_v	$2 \cdot 10^{18}$	cm^{-3}
Mobilités des électrons	μ_n	10^{-3}	$cm^2/V \cdot s$
Mobilités des trous	μ_p	10^{-4}	$cm^2/V \cdot s$
Constante diélectrique	ϵ	3.5	
Section efficace de capture d'électrons	σ_n	$10^{-17} - 10^{-15}$	cm^2
Section efficace de capture des trous	σ_p	$10^{-20} - 10^{-19}$	cm^2

Tableau 3.1 : Paramètres utilisés pour la simulation de la cellule P3HT : PCBM [4].

On a introduit ces paramètres donnés ci-dessus dans le programme de simulation numérique SCAPS. On obtient la structure suivante.

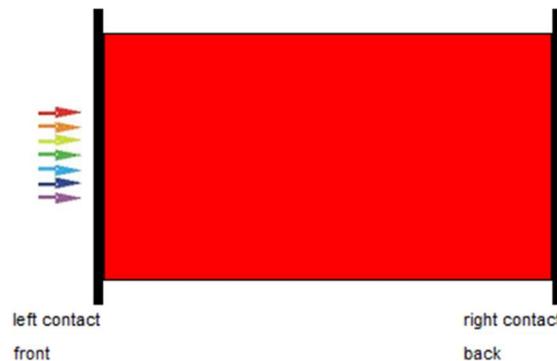


Figure 3.1 : Structure de la cellule P3HT : PCBM.

3.4 Résultats Obtenus :

3.4.1 Caractéristique J-V de la cellule solaire organique P3HT : PCBM dans le cas idéal et le cas réel :

On a fait une étude comparative entre la caractéristique J-V de la cellule solaire organique P3HT : PCBM dans le cas idéal et le cas réel , voir les courbes de la **Figure 3.2**.

On voit que les deux courbes sont presque identiques et varient de la même façon.

Le logiciel nous a fournis les paramètres photovoltaïques de la cellule organique dans le cas idéal et le cas réel , la densité du courant de court-circuit J_{sc} , le facteur de forme FF, la tension en circuit ouvert V_{oc} et le rendement de conversion η qui sont représentés dans le **Tableau 3.2**.

Pour la cellule solaire organique dans le cas idéal c'est-à-dire lorsque $R_s \approx 0$ et $R_{sh} \rightarrow \infty$, on a obtenu un rendement de **6.25%** tandis que pour la cellule dans le cas réel, pour cette simulation on a pris $R_s = 5 \Omega \cdot \text{cm}^2$ et $R_{sh} = 1000 \Omega \cdot \text{cm}^2$, on a obtenu un rendement de **4.18%**, ceci peut être interprété par le fait que dans le cas idéal toutes les pertes sont négligeables qui sont caractérisés par les résistances en série et shunt.

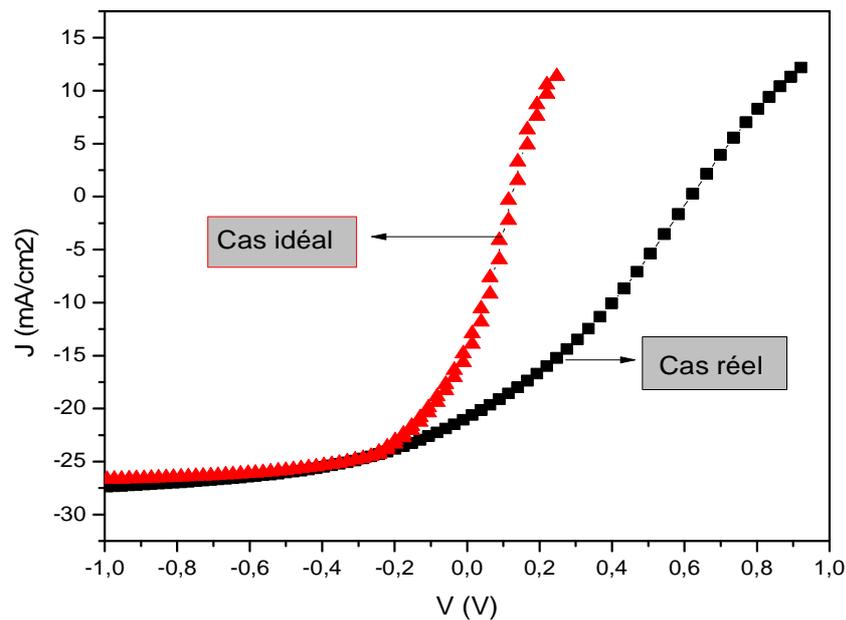


Figure 3.2 :Caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique P3HT :PCBM

Dans le cas idéal et le cas réel.

Les parametres de la cellule organique P3HT :PCBM	Simulation dans le cas idéal	Simulation dans le cas réel
V_{oc}	0.62 V	0.60 V
J_{sc}	24.31 mA/cm ²	20.38 mA/cm ²
FF	41.23%	33.76%
η	6.25%	4.18%

Tableau 3.2 : Les parametres de la cellule solaire P3HT :PCBM déduit de la courbe J-V calculée pour le cas idéal et le cas réel.

3.4.2 Rendement quantique (QE) pour une cellule réel :

la cellule solaire organique est optimisée par un spectre solaire AM1.5 dont l'énergie est de $1000\text{W}/\text{cm}^2$ car il permet de simuler la caractéristique J-V (courant/tension) et par conséquent de calculer le rendement QE de la cellule.

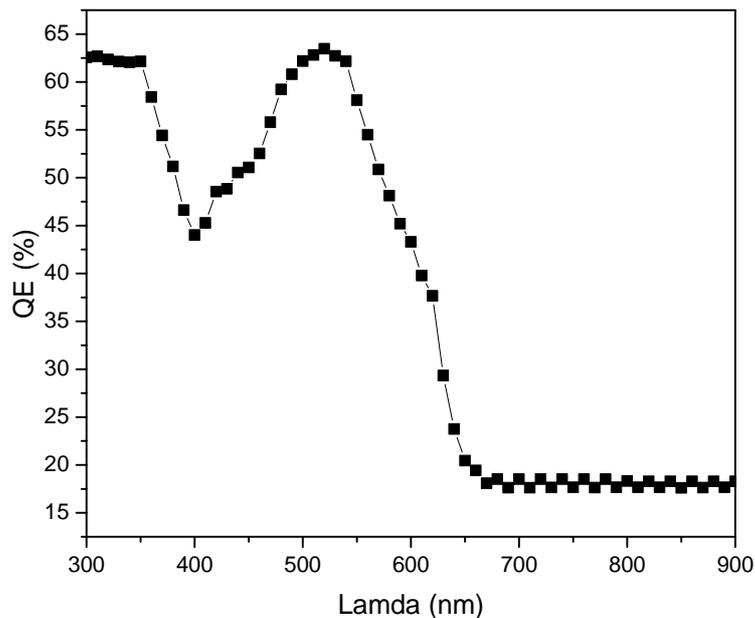


Figure 3.3 : La réponse spectrale de la cellule solaire organique P3HT/PCBM.

Nous avons obtenu la courbe de la **Figure 3.3**, on remarque que la grande partie de l'absorption des photons se trouve dans la bande 420 nm – 580 nm, puis on voit une diminution suivie d'une stabilité du rendement dans l'intervalle 650 nm – 900 nm.

3.5 Effet de la résistance en série R_S :

La résistance en série caractérise les pertes de tension dans le semi-conducteur et à travers les contacts ohmiques de la cellule.

La valeur de R_S dépend de la mobilité des porteurs de charges ainsi que la résistivité de chaque constituant et de la résistance liée aux interfaces [5].

Les semi-conducteurs organiques utilisés en cellules solaires ont plusieurs ordres de grandeur de mobilité plus bas que les semi-conducteurs inorganiques [6,7].

En utilisant de nouveaux matériaux ou des techniques de fabrication [6,8,9], des réductions significatives en valeur de R_S ont été obtenues, par conséquent une augmentation de l'efficacité de la cellule.

La résistance en série R_S d'une cellule solaire est définie par la relation suivante :

$$R_S = \frac{V}{I} - \frac{R_{sh}}{I} (I + I_S + I_{PH}) + \frac{nKT}{Iq} W \left[\frac{I_S q R_{sh}}{nKT} \text{Exp} \left[\frac{q R_{sh} (I + I_S + I_{PH})}{nKT} \right] \right] \quad (1)$$

Avec :

W : fonction de Lambert

n : facteur d'idéalité

I : courant fourni par la cellule

I_{ph} : photocourant créé par la cellule

R_S : résistance en série

R_{sh} : résistance en parallèle

3.5.1 Effet de la résistance en série R_S sur la caractéristique $J-V$

La courbe de la caractéristique $J-V$ montre qu'une cellule solaire est une source de courant constante et de là nous pouvons tirer que lorsqu'on diminue la résistance série, la caractéristique $J-V$ s'approche du cas parfait, ce résultat donne un facteur de forme très important par conséquent un bon rendement.

On a constaté aussi que le point commun de ces différentes courbes représente la tension en circuit ouvert V_{oc} , donc on peut conclure que la résistance en série n'a pas d'influence sur la tension en circuit-ouvert V_{oc} .

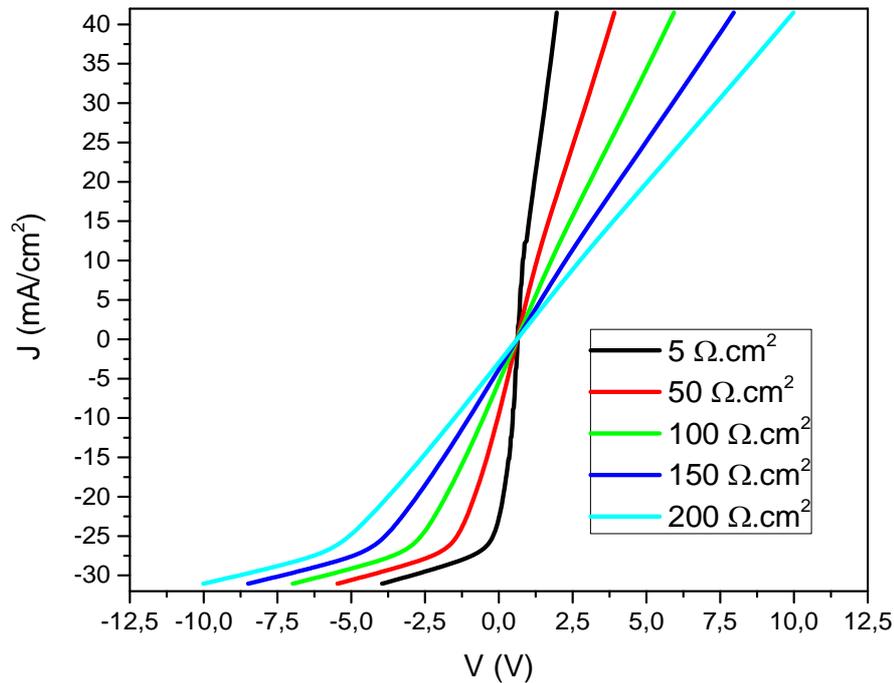


Figure 3.4 : Effet de la résistance en série R_S sur la caractéristique $J-V$

3.5.2 Effet de la résistance en série R_S sur les performances de la cellule

Dans cette partie on a étudié l'effet de la résistance en série R_S sur les performances de la cellule à base d'un mélange interpénétré P3HT : PCBM, avec R_S le seul paramètre variable, la simulation montre comment R_S affecte les principaux paramètres d'exécution.

Cette variation a un effet notable sur le rendement η , le courant en court-circuit J_{SC} ainsi que sur le facteur de forme FF , par contre la tension en circuit ouvert V_{OC} reste presque constante.

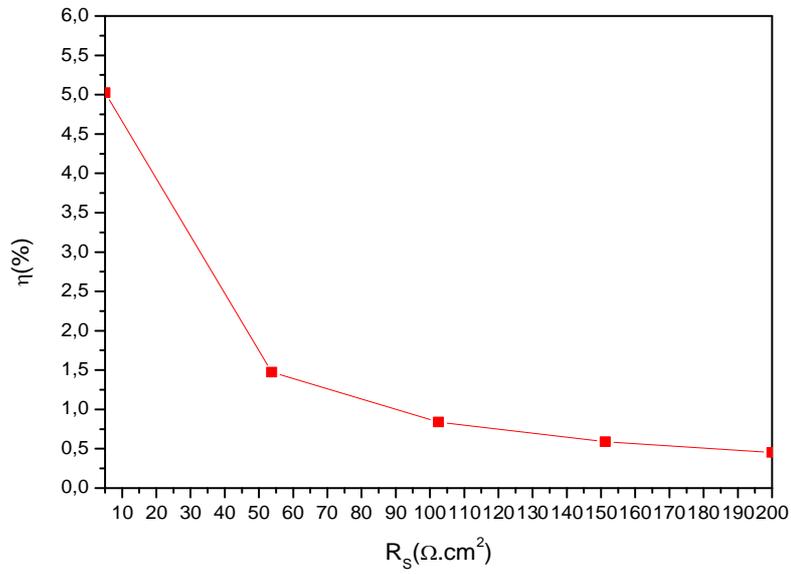


Figure 3.5 : Effet de la résistance en série R_s sur le rendement (η)

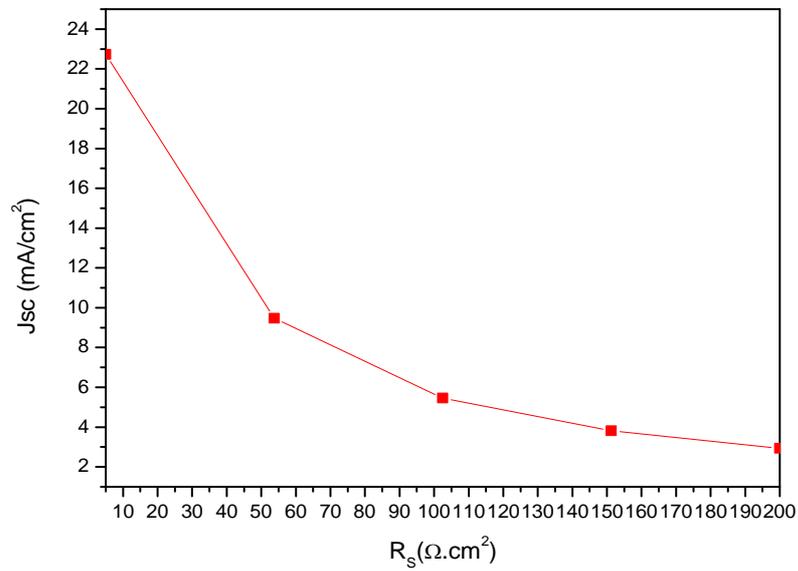


Figure 3.6 : Effet de la résistance en série R_s sur la densité de courant de court-circuit (J_{sc})

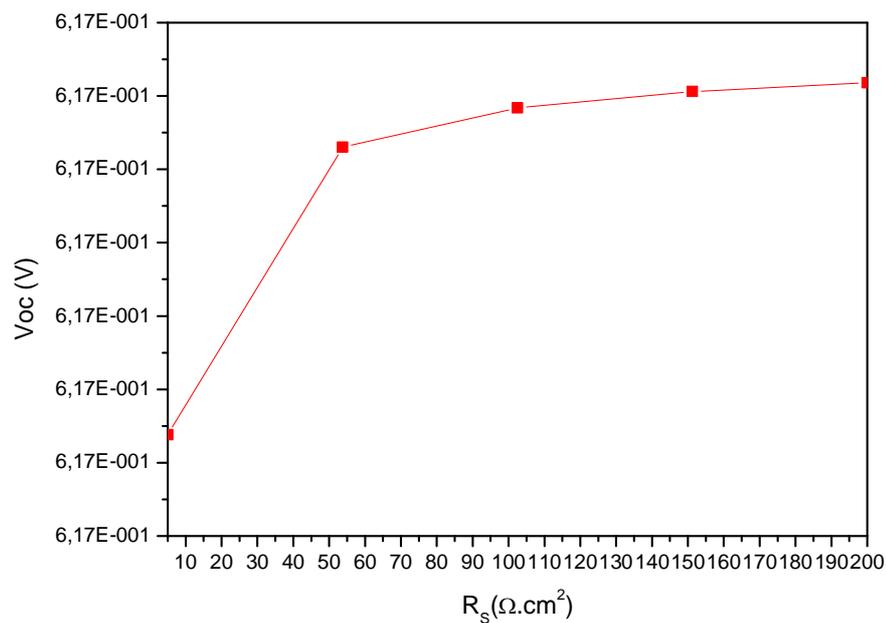


Figure 3.7 : Effet de la résistance en série R_s sur la tension de circuit ouvert (V_{oc})

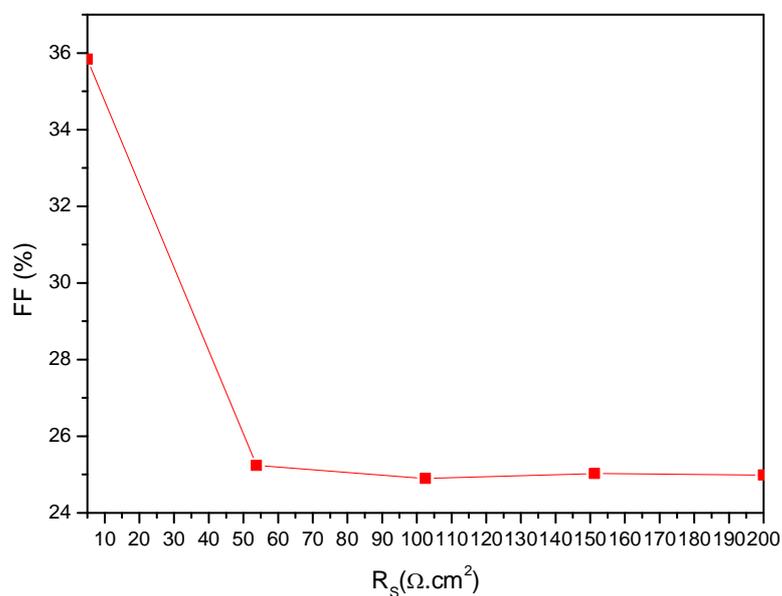


Figure 3.8 : Effet de la résistance en série R_s sur le facteur de forme (FF).

D'après la **Figure 3.7** on remarque que le V_{oc} ne change pas, On a constaté que la résistance série R_s n'a pas beaucoup d'influence sur le paramètre électrique V_{oc} . Tandis que le J_{sc} diminue de 22 mA/cm^2 jusqu'à $3,5 \text{ mA/cm}^2$ pour des valeurs de R_s (entre 50 et $200 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$).

Pour le rendement de conversion η , lorsque la résistance est à $5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ le rendement est à 5% , tandis que le facteur de Forme (FF), il est à environ 36% pour une résistance de $5 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^2$ après il décroît, car il est inversement proportionnel à la tension de circuit ouvert (V_{oc}).

Ce qu'on a pu constater que l'amélioration du rendement η est dû à la réduction de la résistance en série R_s en optimisant le taux de croissance du film, menant à une organisation individuelle et une amélioration moléculaire, et par conséquent la mobilité des trous, car la résistance de la couche active est proportionnelle à l'inverse de la mobilité [10].

3.6 Effet de la résistance shunt R_{sh} :

La résistance shunt caractérise les fuites de courant, elle est provoquée par les défauts du matériau et les impuretés étrangères dans les régions de la jonction PN.

La résistance shunt R_{sh} est due à la recombinaison des porteurs de charges près des sites de dissociation et permet de prendre en compte les courants de fuites au niveau des électrodes.

La résistance parallèle R_{sh} d'une cellule solaire est défini par la relation suivante :

$$R_{sh} = \frac{V - IR_s}{I + I_s \left(1 - \exp\left[\frac{q(V - R_s I)}{nKT}\right] \right) + I_{ph}} \quad (2)$$

3.6.1 Effet de la résistance shunt R_{sh} sur la caractéristique $J-V$

La résistance R_{sh} est une résistance qui prend en compte les fuites inévitables du courant qui intervient entre les bornes d'une photopile. En général la résistance shunt est très élevée. L'influence de la résistance shunt sur la caractéristique $J-V$ se traduit par une augmentation des performances de la caractéristique pour une augmentation de la résistance shunt.

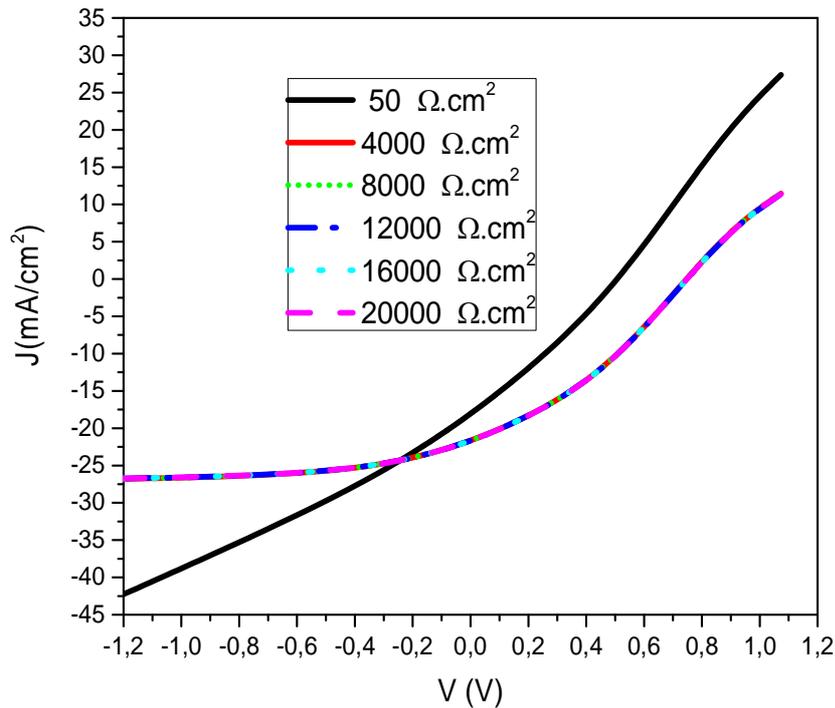


Figure 3.9 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la caractéristique $J-V$

3.6.2 Effet de la résistance en série R_{sh} sur les performances de la cellule

Pour enrichir ce travail, on a étudié aussi l'effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur les performances de la cellule. On observe que la résistance shunt de la cellule photovoltaïque P3HT :PCBM étudiée induit un effet notable sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}) de celle-ci qui augmente lorsque la résistance est d'environ $4000 \Omega.cm^2$, la V_{oc} est de $0.62V$. la même règle s'applique sur le rendement : plus la résistance de la cellule augmente plus le rendement de celle-ci augmente, si la résistance est d'environ $1500 \Omega.cm^2$ et $3000 \Omega.cm^2$, le rendement est d'environ 3% et 4% jusqu'à une résistance de $4000 \Omega.cm^2$ où le rendement devient stable qui est de 4.25%, ainsi que le courant de court-circuit J_{sc} devient stable à partir de $4000 \Omega.cm^2$ d'une valeur de $21 mA/cm^2$, et le facteur de forme FF à 32,5%.

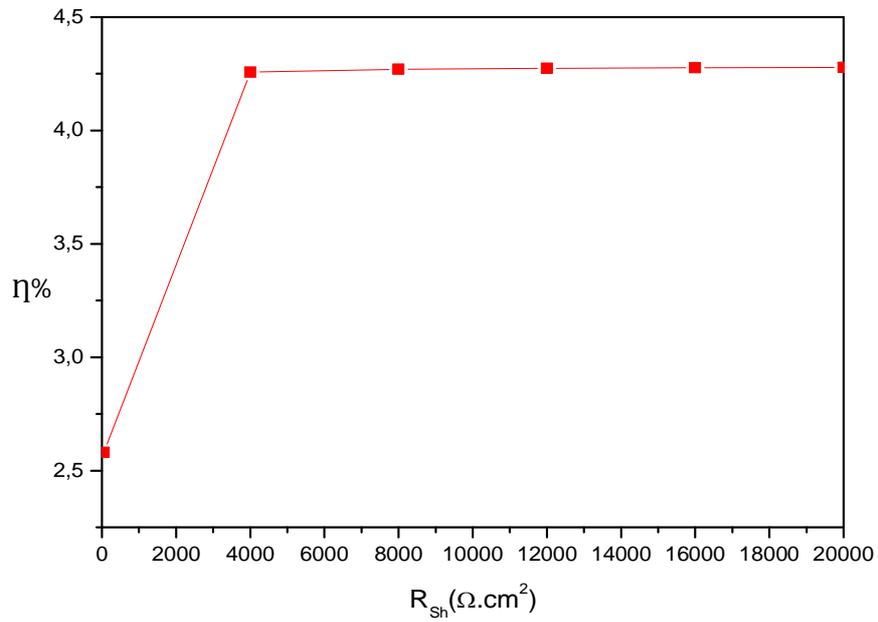


Figure 3.10 : Effet de la résistance en parallèle R_{Sh} sur le rendement (η)

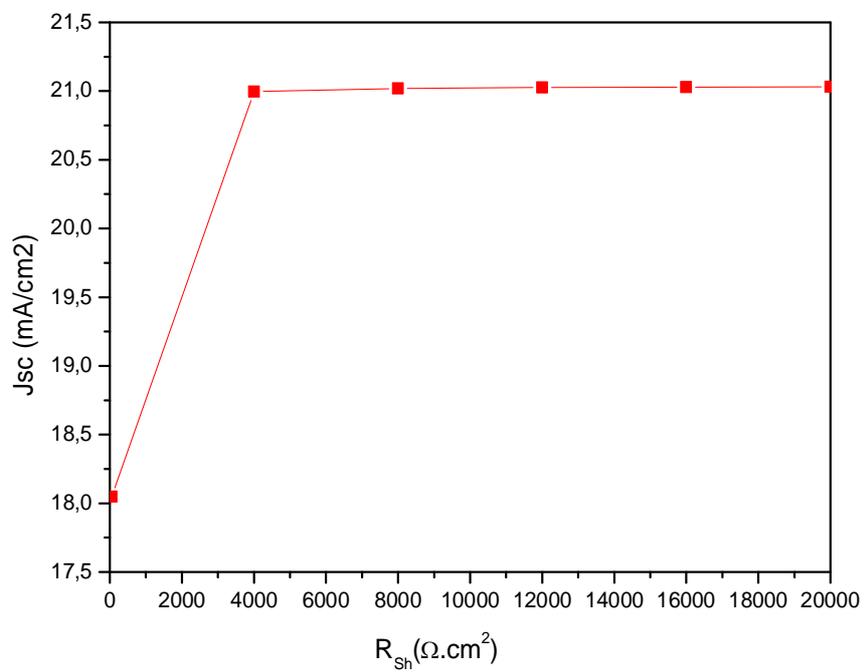


Figure 3.11 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la densité de courant de court-circuit (J_{sc})

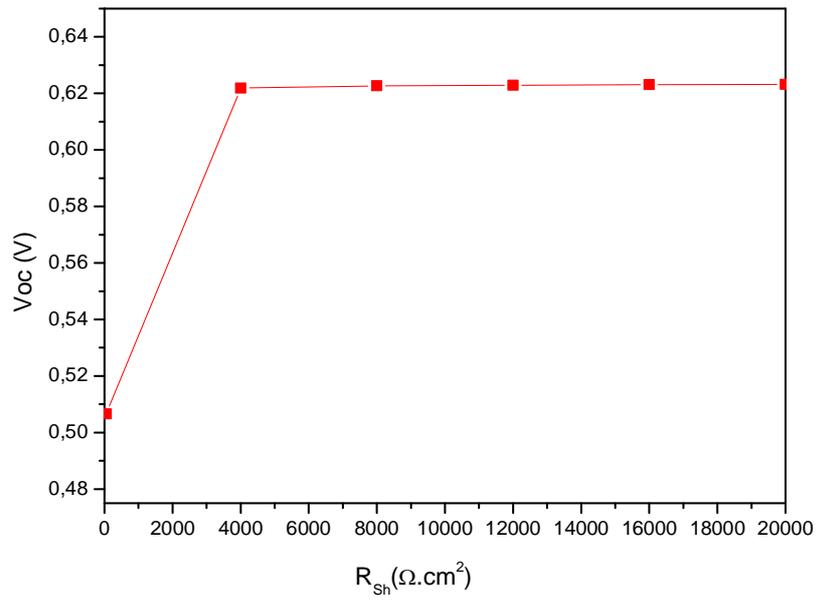


Figure 3.12 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur la tension de circuit ouvert (V_{oc})

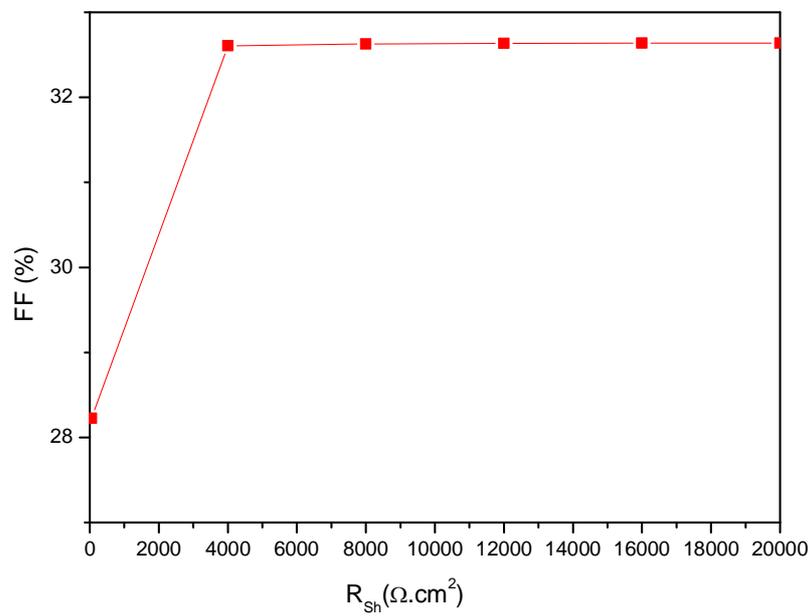


Figure 3.13 : Effet de la résistance en parallèle R_{sh} sur le facteur de forme (FF).

3.7 Effet de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur les performances de la cellule :

On a aussi étudié l'effet de variation de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur les performances de la cellule à base du mélange interpénétré P3HT :PCBM.

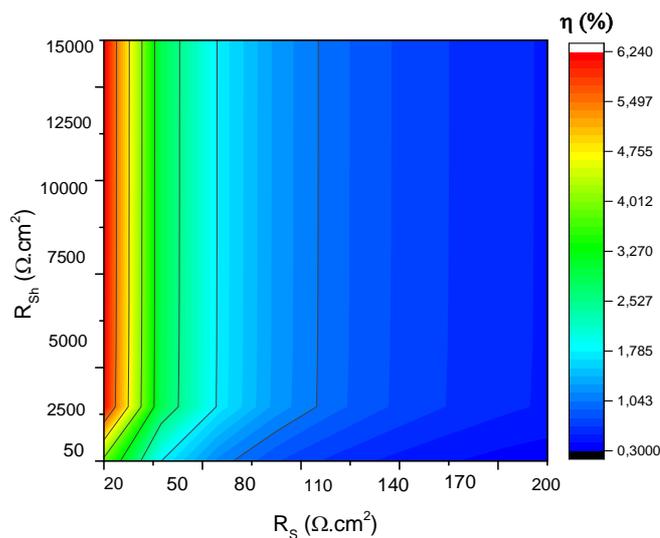


Figure 3.14 : L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le rendement η .

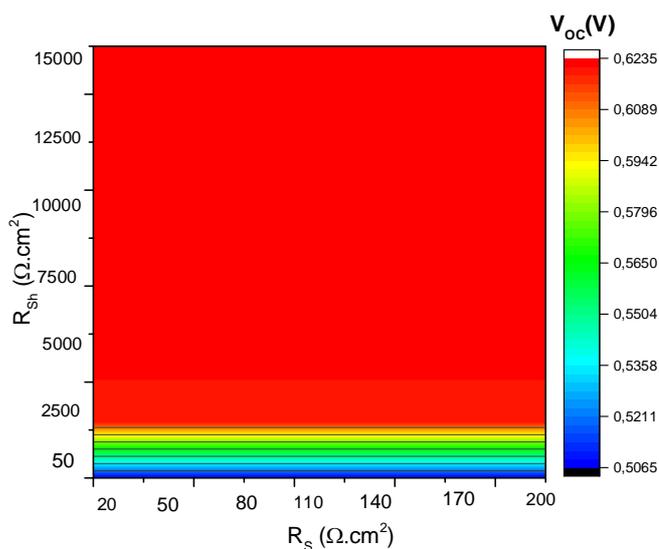


Figure 3.15: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur la tension de circuit ouvert V_{oc} .

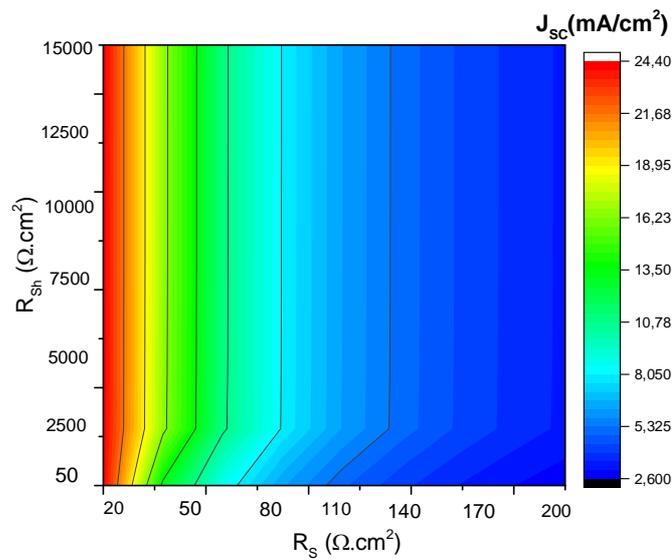


Figure 3.16: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le courant de court-circuit J_{sc} .

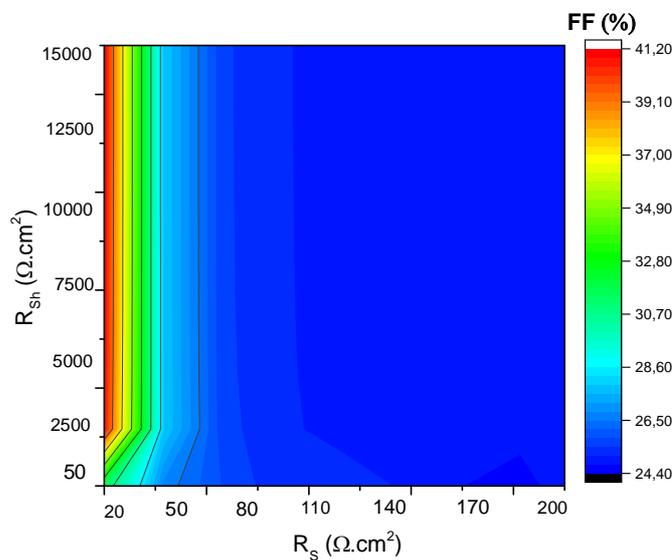


Figure 3.17: L'influence de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur le facteur de forme FF .

On a pu remarquer que la cellule obtient un meilleur rendement η d'environ 6,24 % pour $R_S = 0$ et $R_{sh} = 15000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ c'est-à-dire pour une cellule idéale tandis qu'on peut obtenir un rendement de 5,5% pour $R_S = 10 \Omega \cdot \text{cm}^2$ et $R_{sh} = 2500 \Omega \cdot \text{cm}^2$ qui est un cas réel d'une cellule solaire organique, et pour ces mêmes valeurs des résistances le courant de court-circuit $J_{sc} = 21,68 \text{ mA/cm}^2$ et le facteur de forme $FF = 39,10\%$, par contre pour la tension en circuit-ouvert V_{oc} on remarque que la résistance en série n'a pas d'influence, et pour la résistance shunt la cellule obtient une tension $V_{oc} = 0,6 \text{ V}$ pour un $R_{sh} = 2500 \Omega \cdot \text{cm}^2$

3.8 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons utilisé le logiciel le plus adapté à la conversion photovoltaïque des dispositifs à semiconducteurs, qui est le SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator).

Dans cette section, on a fait une étude comparative de la caractéristique J-V entre les deux cellules organiques à base du mélange interpénétré P3HT : PCBM, la première dans le cas idéal et la seconde dans le cas réel (en prenant en compte les différentes pertes dues aux deux résistances en série R_S et shunt R_{sh}), dont le rendement est plus faible.

Par la suite, nous avons étudié l'effet de la résistance en série R_S sur les caractéristiques de la cellule solaire organique à base de mélange interpénétré P3HT : PCBM, l'effet de la résistance shunt R_{sh} ainsi nous avons étudié l'influence des deux résistances simultanément sur les performances de la cellule, sous les conditions AM1.5 d'éclairement solaire dont l'énergie est de 1000 W/cm^2 en maintenant la température à 300K.

Donc pour conclure cette optimisation, la cellule obtient un meilleur rendement η d'environ 6,24 % pour $R_S = 0$ et $R_{sh} = 15000 \Omega \cdot \text{cm}^2$ c'est-à-dire pour une cellule idéale tandis qu'on peut obtenir un rendement de 5,5% pour $R_S = 10 \Omega \cdot \text{cm}^2$ et $R_{sh} = 2500 \Omega \cdot \text{cm}^2$.

Références bibliographiques

- [1] **Boukli Hacène (née Benyelles) Souhila 2013-2014**, modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT :PCBM (effet de la mobilité et la vitesse de recombinaison en surface). [2] **Taïbi Ibrahim 20/09/2017**, modélisation et simulation des cellules solaires à base des matériaux organiques application à la structure P3HT :PCBM.
- [3] **Ben Abderrazak Ghania 2013/2014**, spécialité physique des photovoltaïque, Mémoire de fin d'étude en master Intitulé : Etude par simulation de la cellules solaire à base de CZTS par SCAPS
- [4] **Abderrahmen Aïcha 26/06/2019**, Modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT :PCBM (effet des pieges et de la température sur les performances de la cellule).
- [5] **Mohra Djawida 25/05/2012**, Modelisation et caractérisation électrique des semi-conducteurs organique.
- [6] G. Li, V. Shrotriya, J. S. Huang, Y. Yao, T. Moriarty, K. Emery, Y. Yang, Nat. Mater. 2005, 4, 864.
- [7] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Wiley-Interscience, New York 1981
- [8] M. D. Irwin, B. Buchholz, A. W. Hains, R. P. H. Chang, T. J. Marks, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 2008, 105, 2783.
- [9] F. Yang, M. Shtein, S. R. Forrest, Nat. Mater. 2005, 4, 37
- [10] Jonathan D. Servaites, Sina Yeganeh, Tobin J. Marks, Mark A. Ratner, Adv. Funct. Mater. 2010, 20, 97–104

CONCLUSION GENERALE



Conclusion générale

Les cellules solaires à base de polymères organiques génèrent une immense perspective d'avenir dans le domaine de l'énergie à conversion photovoltaïque. Cette technologie semble être prometteuse grâce à ces propriétés spécifiques : bas cout, flexibilité ainsi que la simplicité de réalisation sur de grande surface.

Les performances des cellules solaires organiques dépendent de nombreux paramètres tel que : le choix des matériaux, la morphologie de la couche active, l'absorption, le transport de charge, la longueur de diffusion des excitons, les états d'interfaces,...

Compte tenu des faibles performances obtenues au cours de ces vingt dernières années, dans notre manuscrit on a fait une étude sur les cellules solaires organiques à base de P3HT : PCBM.

Le travail de recherche réalisé au cours de ce Mémoire de Master a été guidé par une idée principale qui est la modélisation et la simulation des cellules solaires organiques à base de polymère poly(3-hexylthiophène) mélange à un dérivé de fullerène PCBM. Les principales conclusions de chacune de ces études sont résumées ci-dessous.

Dans un premier temps, pour optimiser ces cellules solaires, nous avons procédé à la modélisation et la simulation à l'aide d'un logiciel très connue dans le domaine photovoltaïque, c'est le simulateur SCAPS. Pour cela on va utiliser les paramètres de la couche active à partir de la littérature, et évaluer numériquement la caractéristique J-V, pour la cellule solaire organique dans le cas idéal c'est-à-dire lorsque $R_S \approx 0$ et $R_{Sh} \rightarrow \infty$, on a obtenu un rendement de **6.25%** tandis que pour la cellule dans le cas réel, pour cette simulation on a pris $R_S = 5 \Omega \cdot \text{cm}^2$ et $R_{Sh} = 1000 \Omega \cdot \text{cm}^2$, on a obtenu un rendement de **4.18%**, ainsi la réponse spectrale *QE*.

Dans un second temps, nous avons fait varier la résistance en série R_S et étudier son influence sur les performances de la cellule, le rendement de conversion électrique (η), la tension de circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (J_{sc}) et le facteur de forme (*FF*).

Nous avons constaté que l'amélioration du rendement η est dû à la réduction de la résistance en série R_S en optimisant le taux de croissance du film, menant à une organisation individuelle et une amélioration moléculaire, et par conséquent la mobilité des trous, car la résistance de la couche active est proportionnelle à l'inverse de la mobilité, pour une résistance de $5 \Omega \cdot \text{cm}^2$ le

rendement η est à 5 % et le facteur de Forme (FF), il est à environ 36%, tandis que la tension en circuit ouvert V_{oc} ne change pas, donc la résistance en série R_s n'a pas beaucoup d'influence sur le paramètre électrique V_{oc} . Le J_{sc} diminue de 22 mA/cm^2 jusqu'à $3,5 \text{ mA/cm}^2$ pour des valeurs de R_s (entre 50 et $200 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$).

En parallèle, nous avons fait varier aussi la résistance shunt R_{sh} et étudié son influence sur les performances de la cellule, nous avons constaté que cette résistance induit un effet notable sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}) de celle-ci qui augmente lorsque la résistance est d'environ $4000 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$, la V_{oc} est de 0.62V . la même chose pour le rendement η où il devient stable à $R_{sh} = 4000 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$, qui est de 4.25%, ainsi que le courant de court-circuit J_{sc} devient stable à partir de $4000 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$ d'une valeur de 21 mA/cm^2 , et le facteur de forme FF à 32,5%. Cette résistance est due à la recombinaison des porteurs de charges près des sites de dissociation et permet de prendre en compte les courants de fuites au niveau des électrodes.

Enfin, nous avons terminé ce travail de recherche par une étude sur l'effet de la résistance en série R_s et la résistance shunt R_{sh} simultanément sur les performances de la cellule organique, l'optimisation nous a mené à obtenir un meilleur rendement de conversion électrique d'environ 6,24%, pour $R_s = 0$ et $R_{sh} = 15000 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$ (pour le cas idéal) tandis qu'on peut obtenir un rendement de 5,5% pour $R_s = 10 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$ et $R_{sh} = 2500 \text{ }\Omega\cdot\text{cm}^2$ qui est un cas réel d'une cellule solaire organique.

Pour conclure, le travail entrepris dans le cadre de ce mémoire ouvre une direction de recherche qui mérite à notre avis d'être approfondi, comme perspectives, nous voulons valoriser notre travail de recherche en parallèle avec l'expérimentation et étudier l'influence des autres paramètres sur cette cellule.

Résumé :

A mesure que les besoins mondiaux en électricité augmentent, l'intérêt pour l'énergie solaire qui est une énergie renouvelable est devenu très important dont la technologie photovoltaïque basée sur les cellules photovoltaïques qui converti l'énergie solaire en électricité devient extrêmement prometteuse.

Notre travail présente une étude de l'influence des deux résistances, la résistance shunt R_{sh} et la résistance en série R_s sur les caractéristiques de la cellule photovoltaïque organique P3HT : PCBM, en étudiant leur effet sur ses différents paramètres comme le courant, le facteur de forme et le rendement.

Ce travail de recherche a été basé sur une modélisation suivie d'une simulation réalisée par le simulateur SCAPS, dans le but de pouvoir optimiser et améliorer les performances de la cellule étudiée.

Mots clés :

Cellule solaire organique, P3HT : PCBM, résistance série R_s , modélisation, simulation, SCAPS.

Abstract:

As global electricity needs increase, interest in solar energy, which is renewable energy, has become very important, and photovoltaic technology based on photovoltaic cells that converts solar energy into electricity has become extremely promising.

Our work presents a study of the influence of the two resistors, the shunt resistance R_{sh} and the resistance in series R_s on the characteristics of the organic photovoltaic cell P3HT :PCBM, by studying their effect on its various parameters such as current, form factor and yield.

This research work was based on a model followed by a simulation carried out by the SCAPS Simulator, in the order to optimize and improve the performance of the studied cell

Keywords :

Organic solar cell, P3HT: PCBM, Serie resistor R_s , shunt resistor, Modeling, Simulation, SCAPS.

ملخص

ومع تزايد الاحتياجات العالمية من الكهرباء، أصبح الاهتمام بالطاقة الشمسية، وهي الطاقة المتجددة، أمراً بالغ الأهمية، وأصبحت التكنولوجيا الكهروضوئية القائمة على الخلايا الكهروضوئية التي تحول الطاقة الشمسية إلى كهرباء واعدة للغاية.

وبقدم عملنا دراسة لتأثير المقاومتين، ومقاومة التحلل R_{sh} والمقاومة المتسلسلة R_s على خصائص الخلية الفوتونية العضوية P3HT: PCBM، من خلال دراسة تأثيرها على مختلف خصائص الخلية مثل التيار، وعامل الشكل و المردود.

وقد استند هذا العمل البحثي إلى نموذج أعقبه محاكاة قام بها جهاز المحاكاة SCAPS من أجل تحسين أداء الخلية المدروسة إلى أقصى حد.

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية العضوية- P3HT: PCBM - مقاومة علي التسلسل - النمذجة والمحاكاة - SCAPS