



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

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID – TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique énergétique et énergies renouvelables

Par :

Bouchikhi Chaïma

Sur le thème

Évaluation et simulation des performances d'une cellule solaire pérovskite pour des différents matériaux en couches de transport d'électrons et de trous

Soutenu publiquement le 04 Juillet 2021 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mme Rahmoun Khadidja	Professeure	Université de Tlemcen	Présidente
Mme Chadel Meryem	Maître de conférences (B)	Université de Tlemcen	Encadrant
Mr Merad laardj	Professeur	Université de Tlemcen	Examineur
Mme Bensmaine Souhila	Maître de conférences (A)	Université de Tlemcen	Examinatrice

Année Universitaire : 2020 ~ 2021

Remerciements

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué à l'Unité de Recherche de Physique Energétique et Energie Renouvelables (URMER) du département de Physique de la faculté des Sciences de l'université Abou-Bekr Belkaïd de Tlemcen.

Mes Remerciements, avant tout à Dieu tout puissant pour la volonté, la santé et la patience qu'il m'a donnée durant ces longues années d'études afin que je puisse arriver à ce stade.

Un grand Merci à mes très chers parents qui m'ont toujours encouragé.

Mes Remerciements les plus élogieux vont **Madame Chadel Meryem** Maître de Conférences B à l'université Abou-Bekr Belkaïd de Tlemcen qui m'a encadré, assistée et aidée par ses précieux conseils au cours de la réalisation de ce mémoire et qui m'a mis dans des bonnes conditions de travail.

Je la remercie d'avoir pour suivi ce travail sérieusement et de m'avoir formé à tous les aspects des métiers de la recherche. Je tiens à lui exprimer toute ma reconnaissance.

Mes Remerciements s'adressent également à **Madame Rahmoun Khadidja** Professeur à l'université Abou-Bekr Belkaïd de Tlemcen pour l'honneur qu'elle m'a fait présider le jury de ce mémoire.

Nous adressons nos remerciements à **Monsieur Merad Laardj** Professeur à l'université Abou-Bekr Belkaïd de Tlemcen de m'avoir honoré par sa présence et sa participation à ce jury.

Nous adressons nos remerciements à **Madame bensmaine souhila** Maître de Conférences class A à l'Université Abou-Bakr Belkaïd de Tlemcen d'avoir accepté de s'associer à ce jury.

Je tiens à remercier enfin tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin à réaliser ce travail.

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

A Ma Mère, Mon Père,
Mon grand-père, Ma grande mère.
Mes Chers Frères Tarik et Ahmed
Mon Professeur : Chadel Meryem
Mon Cher ami Mohamed
Ma Chère Sœur Rafika
Mes Chers amis : Karima, Houria
Chahinez , Rihab et Souad ,Razika
Et aussi tous mes Chers.

Sommaire

Liste des Figures.....	I
Liste des Tableaux.....	II
Introduction générale.....	1

Chapitre I : Technologies des cellules photovoltaïques : état de l'art

Liste des Figures.....	6
1 Introduction :.....	7
2 Rayonnement solaire :.....	7
3 Energie solaire :.....	8
4 Cellule photovoltaïque :.....	8
4.1 Historique :.....	8
4.2 Principe de la conversion photovoltaïque :.....	9
5 Les technologies photovoltaïques :.....	10
5.1 1 ^{ère} génération :.....	11
5.2 2 ^{ème} génération : Couches minces	12
5.3 3 ^{ème} génération :.....	15
6 Caractéristiques et modélisation de la cellule photovoltaïque :.....	16
6.1 Modèle électriques d'une cellule photovoltaïque :	16
6.2 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque:.....	18
7 Avantages et Inconvénients de cellule photovoltaïque :.....	20
7.1 Les avantages :	20
7.2 Les inconvénients :.....	20
8 Bibliographies :.....	21

Chapitre II : Les polymères conducteurs

Liste des Figures.....	27
Liste des Tableaux.....	27
1 Introduction :.....	28
2 Les polymères conducteurs :.....	28
2.1 Définition :	28
2.2 Les types de polymères conducteurs :.....	28
2.2.1 Polymères conducteurs extrinsèques (PCE) :.....	28
2.2.2 Polymères conducteurs ioniques	28
2.2.3 Polymères conducteurs intrinsèques (PCI) ou polymère conjugués:	29
3 Polymères semi-conducteurs et les cellules photovoltaïques :	32
4 Les cellules photovoltaïques à base de Pérovskite :	35
4.1 Structure de la pérovskite :.....	35
4.2 Les matériaux pérovskite :	35
4.3 Principe de fonctionnement de la cellule solaire à base de pérovskite :	37
4.4 Elaboration des cellules photovoltaïques pérovskites :.....	38
4.4.1 Electrode de collecte transparente :.....	38
4.4.2 Couche bloqueuse de trous :.....	38
4.4.3 Transporteur d'électrons (ETL) :.....	38
4.4.4 Absorbeur solaire (Pérovskite) :.....	38
4.4.5 Transporteur de trous :.....	39
4.4.6 Contre-électrode :	39
4.5 Architecture des cellules Pérovskites.....	39
5 Conclusion.....	41
6 Bibliographie :.....	41

Chapitre III : Simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Liste des Figures.....	47
Liste des Tableaux.....	48
1 Introduction :.....	48
2 Présentation du logiciel SCAPS :.....	50
2.1 Définition :	50
2.2 Aperçu sur le fonctionnement de SCAPS-1D:.....	51
2.3 Théorie de fonctionnement :	53
3 Cellule pérovskite de référence :.....	54
4 Caractéristique électrique de la cellule solaire :.....	56
5 Résultats et discussion :	57
5.1 Influence de l'épaisseur de la couche absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les performances électriques:.....	57
5.2 Remplacement de la couche ETL TiO_2 par d'autres matériaux.....	58
5.2.1 L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante.....	59
5.2.2 L'effet de l'épaisseur de la couche ETL.....	61
5.3 Remplacement de la couche HTLspiro-OMeTAD par PEDOT : PSS.	65
6 Conclusion :	69
7 Bibliographies.....	69
Conclusion générale.....	72

Liste des symboles

AM : Masse d'air.

θ : L'angle d'incidence .

E_c : L'énergie du bas de la bande de conduction.

E_v : L'énergie du haut de la bande valence est notée.

E_g : Energie de gap.

E : L'énergie d'un photon .

h : Constante de Planck .

C : Vitesse de la lumière .

λ : Longueur d'onde .

I_{ph} : Photo-courant

I_{sat} : Le courant de saturation

R_s : La résistance série .

R_{sh} : La résistance parallèle shunt

I_D : Courant de jonction

I_{Rsh} : Courant dans la résistance parallèle Shunt .

n : Facteur de non idéalité de la jonction

V_t : Tension thermique à la température.

K_i : Constante .

T : Température effective de la cellule .

G : L'ensoleillement .

q : Charge de l'électron .

K : Constante de Boltzmann.

I_{cc} : Courant de court-circuit .

V_{co} : Tension de circuit-ouvert.

P : Puissance fournie par la cellule.

V : Tension ou borne de la cellule .

I : Courant débitée par la cellule .

P_{max} : Puissance maximal fournie par la cellule .

V_{max} : Tension maximal fournie par la cellule .

I_{max} : Courant maximal fournie par la cellule .

P_{inc} : Puissance solaire incidente .

ϕ : Le potentiel.

q : La charge élémentaire.

ε : La permittivité.

n : La densité de l'électron libre.

p : La densité du trou libre.

N_{+D} : La densité de dopage de type donneur ionisé

N_{-A} : La densité de dopage de type accepteur ionisé

p_t : La densité du trou piégé.

n_t : La densité électronique piégée.

G : Le taux de génération optique.

R : Le taux de recombinaison.

D_n : Le coefficient de diffusion des électrons.

D_p : Le coefficient de diffusion des trous.

μ_n : La mobilité des électrons .

μ_p : La mobilité des trous.

E_f : Le niveau de Fermi.

ϕ_m : La fonction de travail.

χ : L'affinité électronique.

N_c : La densité d'état effective pour bande de conduction.

N_i : La densité des porteurs intrinsèques.

A , B : Les constantes d'absorption.

h: La constante de Planck.

v : La vitesse de la lumière.

Abréviation

ETL : La couche de transport d'électron(The electron transport layer).

HTL : La couche de transport de trous(The hole transport layer).

ZCE : Zone de charge d'espace.

CdTe : Tellure de cadmium

CIS :Le sélénure de cuivre et indium.

FTO : l'oxyde d'étain dopé au fluor .

Spiro-OMeTAD : $N^2, N^2, N^{2'}, N^{2'}, N^7, N^7, N^{7'}, N^{7'}$ -octakis(4-methoxyphenyl)-9,9'-spirobi[9H-fluorene]-2,2',7,7'-tetramine .

TiO₂ : Le dioxyde de titane.

PCE : Polymères conducteurs extrinsèques .

PCI : Polymères conducteurs intrinsèques .

BV : Bande valence .

BC : Bande de conduction .

HOMO :Haut orbitale moléculaire occupée .

LUMO : La plus basse orbitale moléculaire occupé .

ITO : L'oxyde d'indium dopé a l'étain.

ZnS : Sulfure de zinc.

CdS : sulfure de cadmium.

PEDOT:PSS : (Poly 3,4-éthylène dioxythiophène : Poly styrène sulfonate).

Liste des Figures

Chapitre I

Figure 1: Les types de rayonnement solaire.	8
Figure 2: Formation des bandes d'énergie et mécanisme d'absorption d'un photon.....	9
Figure 3: La jonction PN de la cellule photovoltaïque... ..	10
Figure 4: Développement du rendement des cellules photovoltaïques.	10
Figure 5: Cellule solaire à base de silicium monocristallin.....	11
Figure 6: Cellule solaire à base de silicium poly cristallin.....	12
Figure 7: Cellule solaire au silicium amorphe.....	12
Figure 8: Cellule solaire au tellure de cadmium.....	14
Figure 9: Cellule solaire au CIS.....	14
Figure 10: Cellule solaire organique.....	15
Figure 11: Cellule solaire à pérovskite.	16
Figure 12: Le circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	17
Figure 13: Caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque.....	18

Chapitre II

Figure 1: Diagramme des orbitales moléculaires (HOMO et LUMO).....	30
Figure 2: Conductivités électriques de polymères conducteurs intrinsèques comparées à celles de polymères isolants et de quelques conducteurs non polymères.....	31
Figure 3: Structure de la pérovskite.	35
Figure 4: Les structures trigonométriques optimisées MAgEX.	36
Figure 5: Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les Cellules solaires à base de pérovskite.	37
Figure 6: Structure moléculaire du Spiro-OMeTAD.....	39
Figure 7 : Quatre architectures les plus utilisés dans les cellules solaire à base de pérovskite, a) mésoporeux, b) couche de recouvrement c) n-i-p planaire et d) p-i-n planaire.....	40

Chapitre III

Figure 1: Panneau de définition de la structure.	51
--	----

Figure 2: L'algorithme de fonctionnement de SCAPS	53
Figure 3: La structure de la cellule solaire pérovskite de référence.	54
Figure 4: La structure de la cellule solaire pérovskite dans la simulation.....	55
Figure 6 : Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de TiO ₂	63
Figure 7: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de CdS.	64
Figure 8: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de ZnS.....	63
Figure 9: La courbe JV simulée pour différente ETL sur la cellule pérovskite à base de CH ₃ NH ₃ PbI ₃	63
Figure 10: Cellule solaire pérovskite à structure Au/ PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ETL/SnO ₂ /verre.....	64
Figure 11: L'effet de l'épaisseur de PEDOT PSS sur les performances de différentes structures étudiées.	68
Figure 12: La courbe JV simulée pour différente ETL sur la cellule pérovskite à base de CH ₃ NH ₃ PbI ₃ et PEDOT PSS.....	69

Liste des Tableaux

Chapitre II :

Tableau 1: Structures chimiques de quelques familles de polymères conjugués.....	33
Tableau 2: Les matériaux polymères semi-conducteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques.....	34

Chapitre III :

Tableau 1: Paramètres de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	55
Tableau 2: Les paramètres (V_{oc} , J_{cc} , FF, η) d'une cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	56
Tableau 3: Paramètres utilisés pour la simulation des matériaux ETL et HTL.....	58
Tableau 4: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre sur les performances de la cellule solaire.....	59
Tableau 5: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre sur les performances de la cellule solaire.....	59
Tableau 6: L'effet de l'épaisseur de TiO ₂ sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /TiO ₂ /SnO ₂ /verre.....	60
Tableau 7: L'effet de l'épaisseur de la couche CdS sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre.....	61
Tableau 8: L'effet de l'épaisseur de la couche du ZnS sur les performances de la cellule solaire avec une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre.....	61
Tableau 9: L'effet de l'épaisseur de la couche du PEDOT : PSS sur les performances de la cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ / TiO ₂ /SnO ₂ /verre .	65
Tableau 10: L'effet l'épaisseur du PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre.....	65
Tableau 11: L'effet du l'épaisseur PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre....	66

INTRODUCTION

GENERALE

Afin de réduire la consommation mondiale de l'énergie et de minimiser la pollution, la demande de production d'énergie propre et renouvelable a augmenté pour répondre aux futurs besoins énergétiques du monde[1]. Ainsi, les chercheurs essaient de produire une variété de sources d'énergie renouvelable, dont l'énergie photovoltaïque a reçu une grande attention considérable de la part de la communauté scientifique. Les cellules photovoltaïques se sont rapidement développées au cours des dernières décennies. En fait, le développement des nouvelles technologies de cellules solaires rentables et l'augmentation de production ont rendu cette réalisation possible. En revanche, la commercialisation de ces technologies a été bloquée à cause de coût élevé des modules photovoltaïques[2]. Même si les chercheurs ont amélioré au fil des années les performances, réduire le coût et augmenter la fiabilité des systèmes photovoltaïques qui restent une préoccupation majeure. La nécessité de développer des technologies efficaces, en particulier des technologies à couches minces, qui sont encore moins chères et rentables et englobent également des matériaux peu coûteux[2].

Les cellules solaires pérovskite ont aussi attiré l'attention des chercheurs et du monde en 2009[3]. Lorsqu'une efficacité de conversion (23.3%) supérieure à celle du silicium a été atteinte[3], ainsi que pour leurs excellentes propriétés photovoltaïques et leur manipulation facile telles que la bande interdite directe et le coefficient d'absorption supérieur à 10^4cm^{-1} . Ainsi, Les cellules pérovskite à base de plomb suscitent un grand intérêt en raison de leurs méthodes de fabrication à faible coût et leur efficacité de conversion énergétique élevée[4]. Les composants de la cellule solaire pérovskite sont nécessairement deux couches, la couche de transport d'électron (ETL) et la couche de transport de trous (HTL). La conception et la simulation de ces couches de ce type de cellules solaire fait actuellement l'objet d'une attention croissante. En effet, l'utilisation d'outils de simulation joue un rôle important dans l'évaluation et l'optimisation de dispositifs électroniques et technologiques. Grâce à ces méthodes, nous pouvons réduire le temps et les coûts.

Notre travail consiste une étude numérique sur l'évaluation des performances d'une cellule solaire pérovskite pour des différents matériaux en couches de transport

d'électrons et de trous. Premièrement, nous allons présenter la cellule de référence et la simuler. Puis, Une comparaison dans les paramètres technologique est introduite. Deuxièmement, le remplacement de la couche HTL et ETL avec d'autre matériaux est étudié. Ainsi, l'effet de l'épaisseur de ces couches est traité afin d'optimiser les épaisseurs de ces matériaux. La simulation des performances de ces cellules solaires a été effectuée à l'aide du logiciel SCAPS-1D. L'objectif de notre travail est principalement concentré sur l'évaluation et l'amélioration de l'efficacité énergétique d'une cellule solaire pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Ce mémoire est divisé en trois chapitres.

- **Le premier chapitre :** offre une introduction sur le rayonnement solaire et ses caractéristiques, ainsi que la description et l'évolution cellules photovoltaïques au fil du temps. Nous mentionnerons en particulier le développement technologique des différentes générations.
- **Le deuxième chapitre :** présent les différents matériaux polymère photovoltaïques. Ainsi, nous monterons leurs différentes architectures, leurs structures et méthode de fabrication.
- **Le troisième chapitre :** comprend les résultats et les discussions de la simulation réalisée. Où, nous donnons un aperçu sur le logiciel de simulation SCAPS-1D.

Nous terminons ce manuscrit par une conclusion générale.

Bibliographies:

- [1] « S. Chu and A. Majumdar, "Opportunities and challenges for a sustainable energy future," *nature*, vol. 488, no. 7411, p. 294, 2012. »
- [2] «P. C. Alonso, "Recherches d'optimums d'énergies pour charge/décharge d'une batterie à technologie avancée dédiée à des applications photovoltaïques ", p. 243,2011. »
- [3] «A. Husainat, W. Ali, P. Cofie, J. Attia, et J. Fuller, "Simulation and Analysis of Methylammonium Lead Iodide Perovskite Solar Cell with Au Contact Using SCAPS 1D Simulator ", *Am. J. Opt. Photonics*, vol. 7, n° 2, p. 33, 2019».
- [4] « Johann BOUCLÉ "Pérovskites Halogénées pour l'électronique" N° 596 2019».

Chapitre I

**Technologies des cellules photovoltaïques :
état de l'art**

Table des matières :

1	Introduction :	7
2	Rayonnement solaire :	7
3	Energie solaire :	8
4	Cellule photovoltaïque :	8
4.1	Historique :	8
4.2	Principe de la conversion photovoltaïque :	9
5	Les technologies photovoltaïques :	10
5.1	1 ^{ère} génération :	11
5.2	2 ^{ème} génération : Couches minces	12
5.3	3 ^{ème} génération :	15
6	Caractéristiques et modélisation de la cellule photovoltaïque :	16
6.1	Modèle électriques d'une cellule photovoltaïque :	16
6.2	Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque:	18
7	Avantages et Inconvénients de cellule photovoltaïque :	20
7.1	Les avantages :	20
7.2	Les inconvénients :	20
8	Bibliographies :	21

Liste des figures :

Figure 1: Les types de rayonnement solaire.....	8
Figure 2: Formation des bandes d'énergie et mécanisme d'absorption d'un photon.....	9
Figure 3: La jonction PN de la cellule photovoltaïque.....	10
Figure 4: Développement du rendement des cellules photovoltaïques.	10
Figure 5: Cellule solaire à base de silicium monocristallin.	11
Figure 6: Cellule solaire à base de silicium poly cristallin.	12
Figure 7: Cellule solaire au silicium amorphe.	12
Figure 8: Cellule solaire au tellure de cadmium.	13
Figure 9: Cellule solaire au CIS.....	14
Figure 10: Cellule solaire organique.....	15
Figure 11: Cellule solaire à pérovskite.	16
Figure 12: Le circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	16
Figure 13: Caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque.....	18

1 Introduction :

Les énergies renouvelables sont apparues pour réduire la pollution et le réchauffement climatique qui sont principalement causés par l'énergie non renouvelable telle que le pétrole, le gaz nature et le charbon.

Le soleil est l'une des ressources renouvelables les plus abondantes en convertissant l'énergie solaire en énergie électrique ou énergie thermique grâce à des panneaux solaires.

En ce premier chapitre, nous présenterons le principe de fonctionnement d'une conversion photovoltaïque, où nous définissons, les paramètres essentiels caractérisant une cellule solaire et sa caractéristique I-V. Ensuite, le rayonnement solaire sera défini par rapport à ses principales caractéristiques et ses normes. Ainsi, les différentes technologies ont présenté dans ce premier chapitre. A la fin, nous déterminons les avantages et les inconvénients des cellules photovoltaïques.

2 Rayonnement solaire :

Le soleil est une étoile. Sa température à la surface est estimée à environ 5800K, la distance entre le soleil et la terre est d'environ 149 597 890km[1]. Le soleil émet une énorme quantité d'énergie radiante qui est le rayonnement solaire. Il existe trois types [1] :

Rayonnement direct : il atteint le sol sans perde d'énergie.

Rayonnement diffus : il atteint le sol après s'être répandu dans l'atmosphère et les nuages.

Rayonnement réfléchi : c'est le rayonnement incident réfléchi par la surface de terre.

Le rayonnement solaire est un rayonnement électromagnétique [2]qui s'étend sur une longueur d'onde ultraviolet (0.2 μm), l'infrarouge (2.5 μm), le visible (0.3 μm violet ,0.8 μm rouge).L'atmosphère atteint environ 1360W/m² de ce rayonnement[3].La distance traversée par le rayonnement solaire dans l'atmosphère est appelée masse d'air AM. Elle est en fonction de l'angle d'incidence θ par rapport au zénith. Elle vaut ;

$$AM = 1 / \cos \theta \quad (1)$$

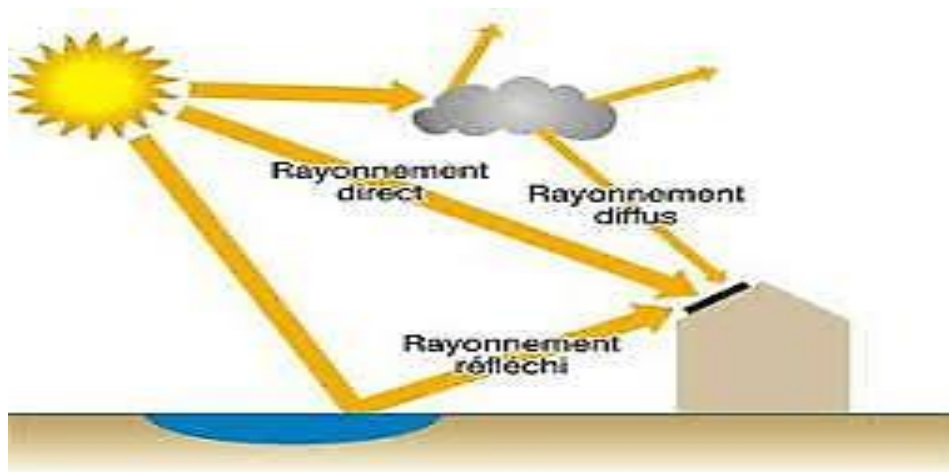


Figure 1: Les types de rayonnement solaire[4].

3 Energie solaire :

L'énergie solaire est une énergie naturelle obtenue à partir du rayonnement solaire et elle est renouvelable, propre, gratuite et disponible dans la plupart des endroits sur terre. Il existe deux types : L'énergie solaire thermique et l'énergie solaire photovoltaïque[5].

4 Cellule photovoltaïque :

4.1 Historique :

L'effet photovoltaïque est la production d'électricité par rayonnement solaire a été découverte par le physicien Alexandre Edmond Becquerel dans le laboratoire de son père, en appliquant une solution conductrice exposée à la lumière et l'observant en 1839[6]. En 1876 Adam et son élève Richard ont observé l'effet photovoltaïque dans la solidification du sélénium [7]. En 1883 la première cellule solaire à base de sélénium avec une efficacité de 1% ont été développées par l'inventeur américain Charles Frittes[8], et le 25 avril 1954 les laboratoires Bell ont annoncé la première cellule à base de silicium avec une efficacité allant jusqu'à 6%[9].

4.2 Principe de la conversion photovoltaïque :

La première étape de la conversion photovoltaïque nécessite une cellule en matériau semi-conducteur (Si, GaAs, InP, Cds, CdTe.....etc.) afin d'absorber le photon dans le rayonnement solaire[10].

Il existe deux bandes continues d'énergie (la bande de conduction BC et la bande de valence BV) et que ces bandes sont séparées par une bande interdite. Cette bande interdite est appelée « gap » et sa largeur E_g , E_g est une caractéristique du matériau. Notons que l'énergie du bas de la bande de conduction est notée E_C et que celle du haut de la bande de valence est notée E_V ainsi nous avons l'égalité $E_g = E_C - E_V$ [11].

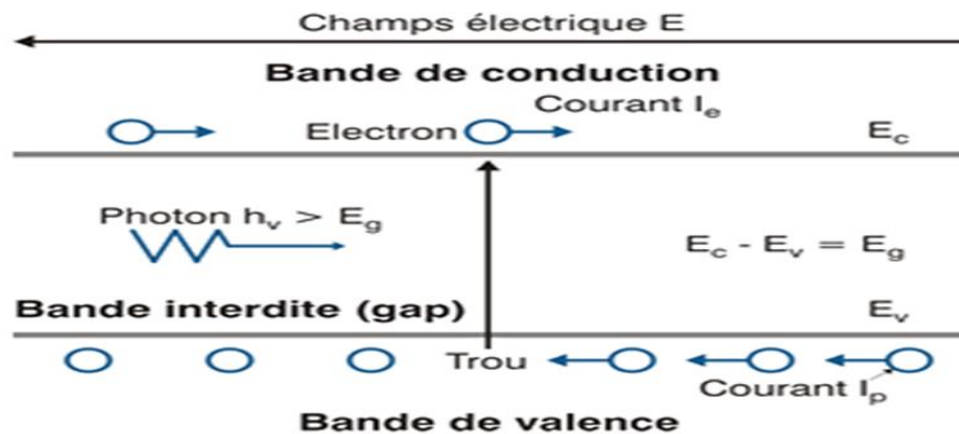


Figure 2: Formation des bandes d'énergie et mécanisme d'absorption d'un photon [12].

Les cellules photovoltaïques sont composées de deux couches de semi-conducteur, une couche dopée N et une autre couche dopée P formant une jonction p-n[3]. Dans la couche N, les électrons diffusent vers la partie P, et les trous diffusent vers la partie N. Il en résulte une zone proche de l'interface qui est constituée de charges fixes et désertée en porteurs de charge. Cette zone est appelée Zone de Charge d'Espace (ZCE) ou zone de déplétion. Dans la ZCE, la neutralité électrique n'est plus respectée et il se crée un champ électrique.

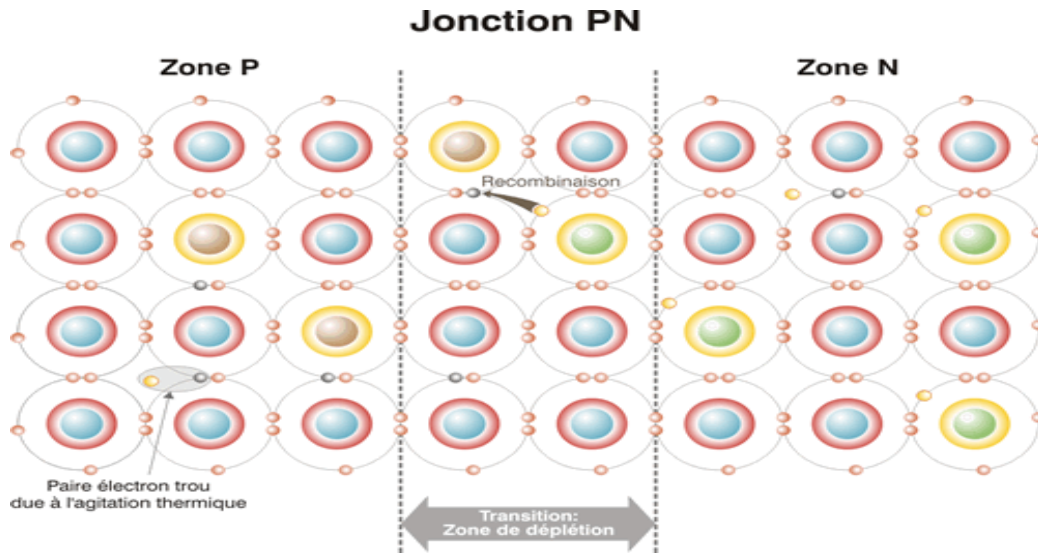


Figure 3: La jonction PN de la cellule photovoltaïque: [12].

5 Les technologies photovoltaïques :

Afin d'avoir une comparaison de ces technologies principales et de leur progression passée et actuelle, la figure 4 illustre l'évolution de leur rendement en fonction des améliorations apportées.

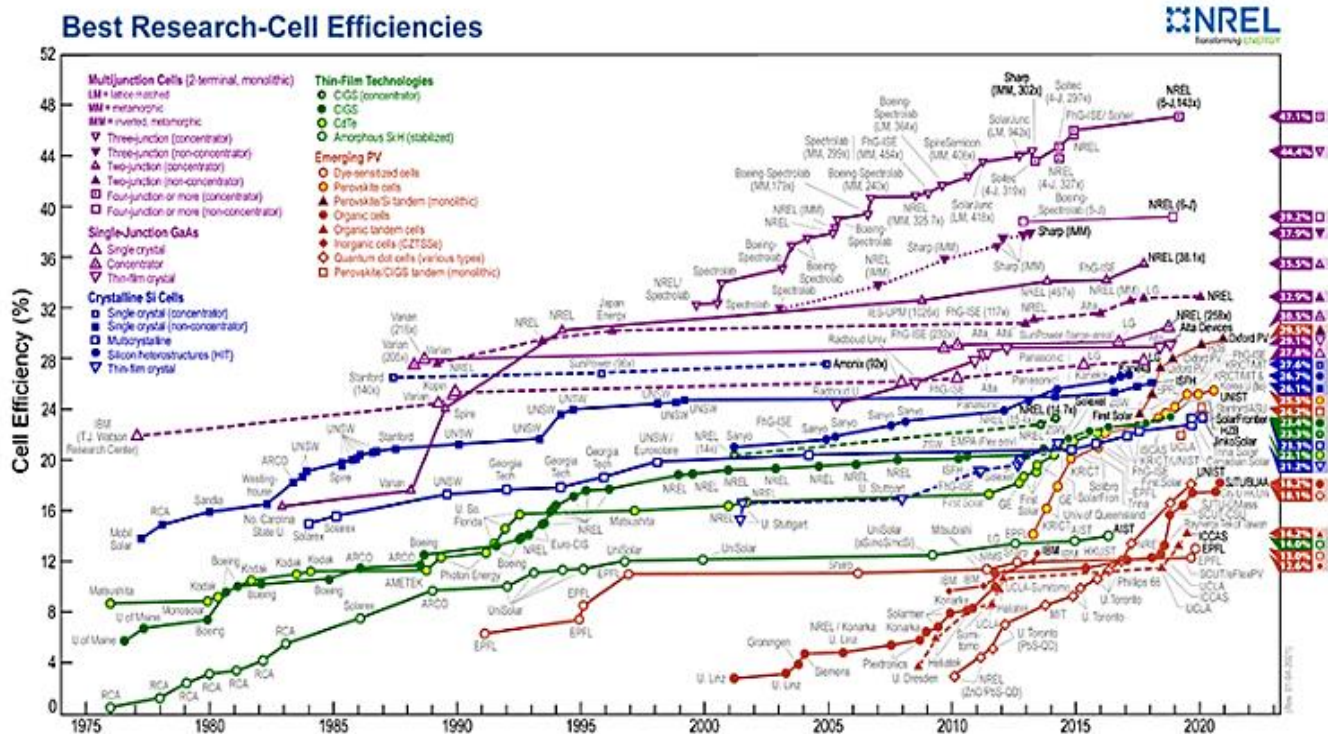


Figure 4: Développement du rendement des cellules photovoltaïques[13].

5.1 1^{ère} génération :

Silicium monocristallin :

Ce type de cellule est le plus utilisé Grâce à l'élément clés, le silicium est le plus abondant dans la croute terrestre après l'oxygène, il a l'avantage de pouvoir être produit à partir d'une ressource naturelle quasi inépuisable, la silice, un composant de granit, de sable et des grès [11]. Le silicium monocristallin ou mono Si est obtenu par la méthode de « Czochralski » en faisant fondre du silicium dans un creuset[14].

Les avantages :

- Haut rendement 18% et 27% en laboratoire.
- Durée de vie 25 ans
- Très rentable.

Les inconvénients :

- Le coût est trop élevé.
- Il faut beaucoup d'énergie et d'efforts pour obtenir un cristal pur.

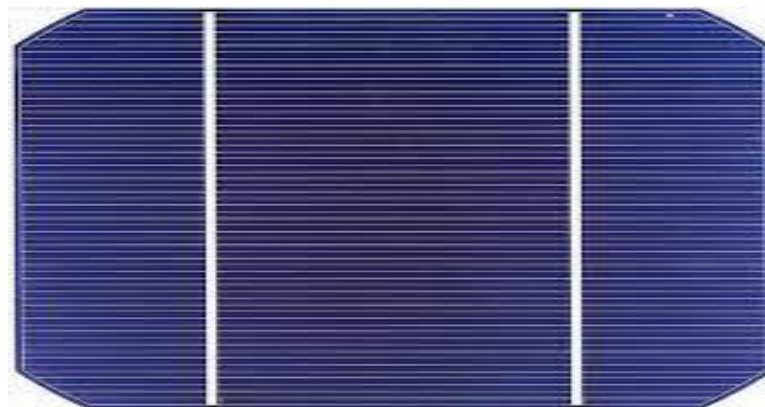


Figure 5: Cellule solaire à base de silicium monocristallin[15].

Silicium poly cristallin :

Le silicium polycristallin, ou poly-Si est une forme particulière du silicium, qui se différencie du silicium monocristallin. Contrairement au mono Si qui est composé d'un seul cristal, le silicium polycristallin est constitué de multiples petits cristaux de tailles et de formes variées, qui lui confèrent des propriétés différentes[16], [17].

Caractéristiques [17]:

- Le coût de production est plus bas.
- Nécessite moins d'énergie.
- Le rendement entre 13% et 20%.



Figure 6: Cellule solaire à base de silicium poly cristallin[18].

5.2 2^{ème} génération : Couches minces

Silicium amorphe :

On obtient en évaporant du gaz silicium sur support en verre plastique souple ou métal[19]. Ces cellules sont apparues en 1976, elle est de couleur gris foncé. Les cellules de silicium amorphes, ses atomes sont turbulents, elle absorbe donc plus de lumière que les cellules monocristallines. Elles sont utilisées dans les petites machines comme les calculatrices et les montres.



Figure 7:Cellule solaire au silicium amorphe[20].

Les avantages :

- Ce type de silicium est moins coûteux à fabriquer.
- Absorbe les rayons du soleil même les jours nuageux.
- Rentable.

Les inconvénients :

- Son rendement est faible entre 8% et 10,7%.
- Ses performances diminuent dans le temps.

Tellure de cadmium (CdTe) :

Tellure de cadmium est un semi-conducteur de type P qui a besoin d'un autre matériau de type N (CdS ,SnO₂....) pour créer une jonction p-n[21].Il a été étudié en 1960 et développé en 1972[22].

Les cellules solaires CdS/CdTe sont produites en évaporant une fine couche de CdS sur une couche de verre conducteur suivie d'une autre évaporation d'une couche épaisse de CdTe. Ensuite, la cellule est traitée pendant une courte période à 450°C[23].

Les avantages :

- Son rendement élevé est de 22.1% en 2015[24].
- Le coefficient d'absorption est élevé.
- La bande interdite est parfaite 1.45eV[23].

Les inconvénients :

- Toxique, pollué
- rareté du tellure.
- Sensibilité à la vapeur d'eau.

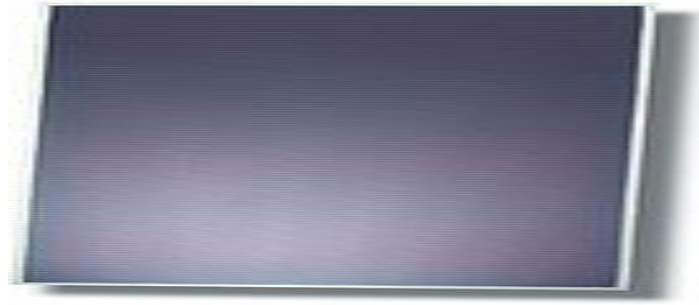


Figure 8:Cellule solaire au tellure de cadmium[25].

Le séléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS) :

Le CIGS est un semi-conducteur. Il a besoin d'un matériau de type N pour créer une jonction p-n. Les cellules CIGS de type hétérojonction, il contient un absorbant fait de cuivre, de gallium, d'indium et de sélénium, il a été réalisé en 1975 par « S. Wagner et coll de Bell Téléphone »[26].

Les avantages :

- La bande interdite est jusqu'à 1.6eV donc une capacité d'absorption élevée.
- Le rendement de 23.4% en 2019[27].

L'inconvénient :

- La rareté de gallium et de l'indium.
- Il faut beaucoup d'espace pour réaliser une bonne production.



Figure 9:Cellule solaire au CIS[28].

5.3 3^{ème} génération :

La filière des cellules organiques :

Les cellules organiques sont constituées d'un semi-conducteur organique. Il a été développé en 1970 afin de réduire le coût de l'électricité photovoltaïque[9].

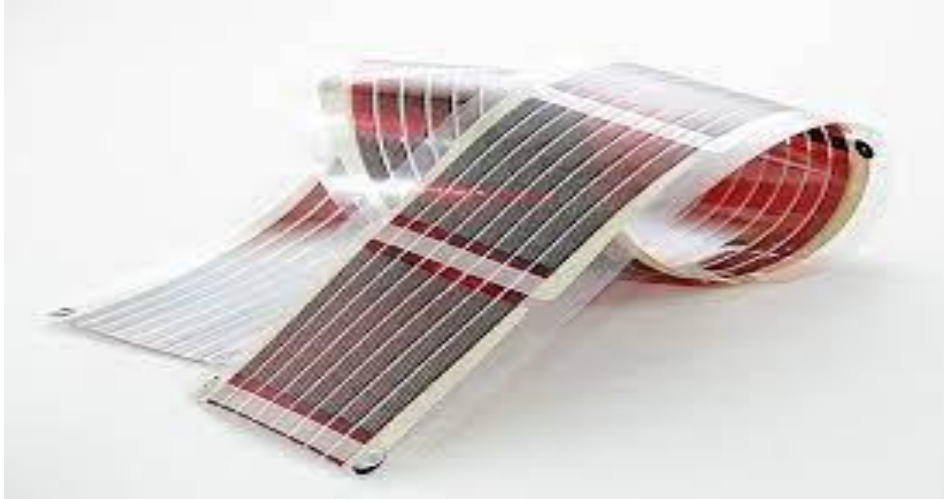


Figure 10: Cellule solaire organique[29].

Les avantages :

- Le coût est faible.
- Abondance de matériaux utilisés.
- Facilité d'utilisation.
- Appareils flexibles.
- Le rendement de conversion est d'environ de 20%[30].

Les inconvénients :

- Sa croissance ralentit car elle est amorphe entraînant une diminution de la production.
- Duré de vie est faible.

La filière des pérovskites :

Les premières cellules de pérovskites ont été décrites en 1830 par Gustave rose[31]. Son nom provient de minéralogiste russe Lev Aleksevich von Perovski. Il était composé de calcium et de titane sa formule chimique CaTiO_3 [32]. Les cellules

pérovskites utilisent des semi-conducteurs de type P inorganiques et organiques. Ce type de cellule se compose d'un substrat en verre FTO sur lequel est déposé l'oxyde d'étain dopé au fluor FTO, et sur FTO est déposé le dioxyde de titane TiO_3 . Pour améliorer le transport des trous, une couche de spiro-OMeTAD est déposée entre l'électrode en Or et la couche active[33].



Figure 11: Cellule solaire à pérovskite[34].

Des semi-conducteur organiques peuvent être utilisés $(CH_3NH_3)PbX_3$ et le X peut être (I, Br, Cl)[35]. Les cellules pérovskites sont devenues une rivale des cellules silicium et peut les remplacer. Il a pris une grande importance en raison du coefficient d'absorption et du mouvement de porteur de charge élevé, du faible coût de fabrication et son rendement est atteint environ 29% [36] après 2.2% en 2006[26]

Cependant il reste quelques problèmes qui entravent son développement car il n'est pas très durable, l'humidité et la température le font se décomposer[37], la durée de vie des cellules est très courte par rapport aux cellules en silicium[38].

6 Caractéristiques et modélisation de la cellule photovoltaïque :

6.1 Modèle électriques d'une cellule photovoltaïque :

La figure 12 présente le circuit électrique d'une cellule photovoltaïque à diode sous éclairage.

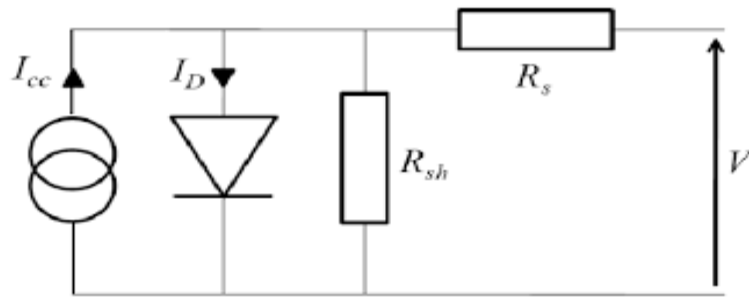


Figure 12: Le circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque [39].

R_s : représente la résistance de contacte et de connexion[39].

R_{sh} : la résistance shunt sa présence correspond au courant de fuite[39].

Le courant est exprimé par la loi de Kirchhoff :

$$I_{ph} = I_D + I_{R_{sh}} + I \text{ Donc } I = I_{ph} - I_D - I_{R_{sh}} \quad (2)$$

L'expression résultante à une caractéristique courant-tension (I-V) :

$$I = I_{ph} - I_{sat} \left[e^{\frac{V+(I.R_s)}{n.V_t}} - 1 \right] - \frac{V+(I.R_s)}{R_{sh}} \quad (3)$$

Les expressions de (I_{ph}) et de (I_{sat}) :

$$I_{ph} = [I_{sc} + (K_i \cdot (T - 298))] \cdot \frac{G}{1000} \quad (4)$$

$$I_{sat} = (I_{sc} \cdot e^{\left[\frac{V_{co}}{n.V_t}\right]} - 1) \cdot \left(\frac{T}{298}\right)^3 \cdot e^{\left[\frac{q.E_g \cdot \left(\frac{1}{298} - \frac{1}{T}\right)}{n.k}\right]} \quad (5)$$

Avec :

I_{ph} : Photo-courant.

I_{sat} : Le courant de saturation

I_D : Courant de jonction

$I_{R_{sh}}$: Courant dans la résistance parallèle Shunt

n : Facteur de non idéalité de la jonction

$V_t = \frac{KT}{q}$ Tension thermique à la température.

q : Charge de l'électron ($1.602 \cdot 10^{-19}C$)

K : Constante de Boltzmann ($1.381 \cdot 10^{-23} J/k$)

Ki : Constante ($1.2A/cm^2K^3$)

T : Température effective de la cellule

G : L'ensoleillement et E_g : L'énergie de gap

6.2 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque:

La courbe représente la variation du courant produit par une fonction de la tension aux bornes de la cellule solaire.

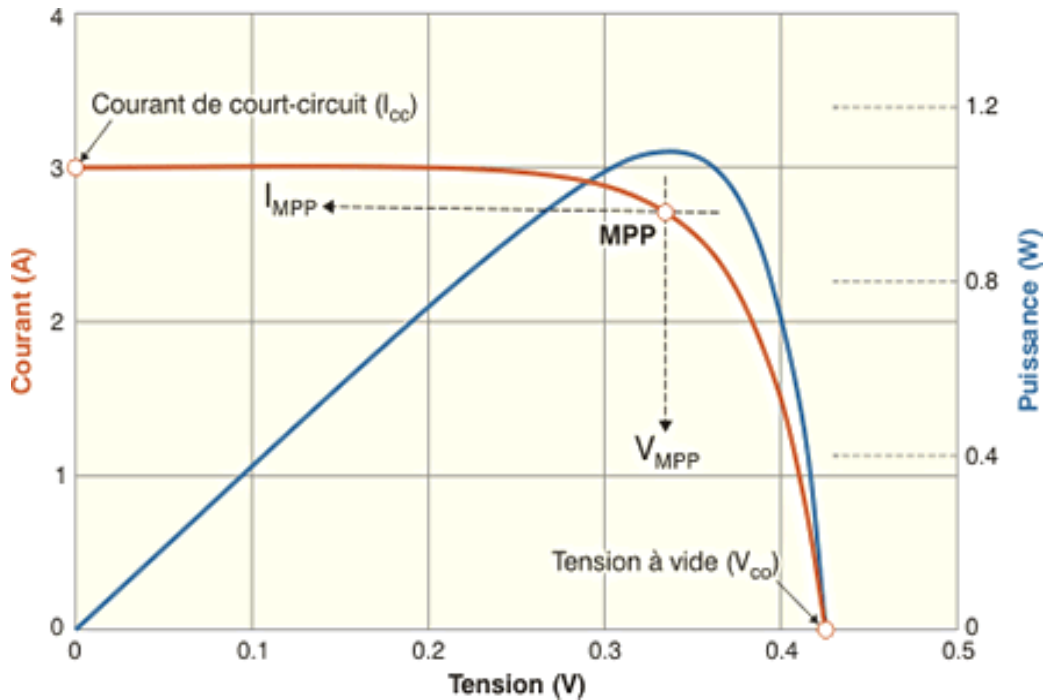


Figure 13:Caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque[40].

Les performances d'une cellule photovoltaïque sont caractérisées par un certain nombre de paramètres [22];[41]:

Tension de circuit ouvert(V_{oc}):

La tension en circuit ouvert, V_{OC} , est la tension maximale produite par une cellule solaire, ce qui se résulte à zéro courant $I=0$.

Courant court-circuit(I_{cc}):

Le courant de court-circuit est la valeur obtenue lorsqu'on branche un ampèremètre aux bornes de la cellule. Ceci correspond à la tension nul $V=0$.

La puissance(P) :

La puissance disponible aux bornes de la cellule est égale au produit de courant continue I et de tension continue V .

$$P=V.I \quad (6)$$

P_{\max} idéal :

Il représente le point où le produit de tension et de l'intensité de courant sont élevés. Dans une cellule idéale, le P_{\max} est le produit du courant de court-circuit et de la tension de circuit ouvert.

$$P_{\max \text{ idéal}} = V_{oc} \cdot I_{cc} \quad (7)$$

Facteur de forme (FF) :

Le rapport entre la puissance maximum et le produit de courant de court-circuit par la tension de circuit ouvert. Le facteur de forme est un paramètre qui détermine la puissance maximale d'une cellule solaire et met en évidence son vieillissement.

$$FF = \frac{P_{\max}}{I_{cc} V_{oc}} = \frac{I_{\max} V_{\max}}{I_{cc} V_{oc}} \quad (8)$$

Rendement η :

Le rendement est le paramètre le plus couramment utilisé pour comparer les performances d'une cellule solaire à une autre. Le rendement est le rapport entre la puissance maximale de la cellule et la puissance lumineuse incidente.

$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{\text{inc}}} = \frac{I_{\max} \cdot V_{\max}}{P_{\text{inc}}} \quad (9)$$

7 Avantages et Inconvénients de cellule photovoltaïque :

7.1 Les avantages :

- Energie solaire est propre et illimitée.
- Faibles coûts d'exploitation et de maintenance[42].
- Convient à toutes les tailles[42].
- Pas de bruit et de pollution.
- ses matériaux sont disponibles.

7.2 Les inconvénients :

- Le coût d'installation est élevé de certains systèmes photovoltaïques.
- Les batteries sont nécessaires pour stocker l'énergie ce qui affecte sur le coût et les performances.
- Le rendement de cellule est faible de l'ordre de 40% [26].

8 Bibliographies :

- [1] « The Solar Radiation Spectr_ThanhTran -Introduction to Solar Radiation p 17 ».
- [2] « M. Dankassoua, S. Madougou, et A. Aboubacar, « Etude du rayonnement solaire global à Niamey de la période de pré-mousson et de la mousson de l'année 2013 (mai à octobre) », p. 16, *Vol. 20 N°1*, 2017 » .
- [3] « La conversion photovoltaïque de l'énergie solaire D É C O U V E R T E N ° 3 4 4 - 3 4 5 J A N V I E R - F É V R I E R 2 0 0 7 » . .
- [4] « Ensoleillement disponible sur -<https://energieplus.lesite.be/theories/climat8/ensoleillement-d8> /consulté le 22 septembre, 2010 » .
- [5] « Rafia KIHAL "Préparation par électrodéposition de semi-conducteurs en couche minces à base d'étain pour des cellules photovoltaïques ", p. 121, 2018. »
- [6] « A.E. Becquerel, *Compt. Rend. Acad. Sci.* 9 (1839) 145. » .
- [7] « W.G. Adams, R.E. Day, *Proc. R. Soc. London* 25 (1876) 113. » .
- [8] « C.E. Fritts, *J. Franklin I.*, 119 (1885) 221. » .
- [9] « P. C. Dastoor et W. J. Belcher, "How the West was Won? A History of Organic Photovoltaics" , p. 99-110 Pages, nov. 2019, »
- [10] « D. K. A. Khan, S. Paul, A. Zobayer, et S. S. Hossain, " A Study on Solar Photovoltaic Conversion ", vol. 4, p. 5, 2013. »
- [11] « K.A. Khan & M. Abu Salek " Solar Photovoltaic (SPV) Conversion: A Brief Study" Vol-5 Issue-5 2019 ».
- [12] « Effets photoélectrique et électroluminescent -disponible sur <https://energieplus.lesite.be/theories/photovoltaique6/effets-photoelectrique-et-electroluminescent/>.consulté le 9 août, 2010 » . .

- [13] « National Renewable Energy Laboratory (NREL) Home Page | NREL.» [Online]. Available: <https://www.nrel.gov/>. [Accessed: 07-Mar-2019]. » .
- [14] «B. Amor, " Etude et simulations numériques des contraintes thermo mécaniques dans le silicium photovoltaïque , p. 123. 2010»
- [15] « Cellule au silicium monocristallin disponible sur <http://fr.solarpedia.net/wiki/index.php?title> consulté le 17 septembre 2014 » . .
- [16] « Les principes de l'énergie solaire photovoltaïque disponible sur "www.editionsdumoniteur.com" COMPLÉMENT TECHNIQUE > Mars/Avril 2008 ».
- [17] « NAIM_Houcine "Etude de gestion d'une mini-centrale solaire et mise au point d'un dispositif automatique de mesures, contrôles et régulation de l'énergie électrique" page 151,2016».
- [18] « Le panneau solaire polycristallin disponible sur <https://www.jade-technologie.com> consulté le 3 mars 2021 ».
- [19] « P. Rappaport, "The photovoltaic effect and its utilization," Sol. Energy, vol. 3, no. 4, pp. 8–18, 1959. » .
- [20] « Les différents types de cellules photovoltaïques - disponible sur <https://www.ecosources.info/dossiers/> consulté le 22 juin 2017 » . .
- [21] « "www.futurasciences.com/magazines /environnement/ infos/ dossiers/d /developpementdurablecellules- photovoltaïques-coeur-panneaux-solaires-1688/." ».
- [22] «A. Bouraiou, "Élaboration et Caractérisation des Couches Minces CuInSe₂ par Électrodéposition" , p. 165,2009. »
- [23] «V. V. Tyagi, N. A. A. Rahim, N. A. Rahim, et J. A. /L. Selvaraj," Progress in solar PV technology: Research and achievement ", vol. 20, p. 443-461, avr. 2013»
- [24] « Pv Magazine. First Solar raises bar for CdTe with 21.5% efficiency record. <http://www.pv-magazine.com/news/details/beitrag/first-solar-raises-bar-forcdte- with-215-efficiency-record100018069/>, 2015 » . .

- [25] « Cellule au tellure de cadmium — disponible sur <http://fr.solarpedia.net/wiki/index.php> consulté le 17 septembre 2014 ».
- [26] « KANOUN Ahmed-Ali "Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques" ,p238,2019 »
- [27] « Z. El Jouad, “Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques,” PhDThesis, Université d’Angers, p108,2016 ». .
- [28] « Module photovoltaïque CIGS - 75 - 95 Wp disponible sur <https://www.directindustry.fr/prod/q-cells-ag/product-54769-714159.html> ». .
- [29] « Le photovoltaïque organique disponible sur <https://mrmondialisation.org/le-photovoltaïque-organique-fait-un-bon-de-geant-grace-a-une-decouverte/> le 10 mars 2016 ». .
- [30] « Des cellules photovoltaïques organiques atteignent un rendement de conversion de 25 % – disponible sur <https://www.pv-magazine.fr> consulté le /2020/03/23/ ». .
- [31] « C. B. Jurca "Synthèse et caractérisation de pérovskites doubles magnéto-résistives dérivées de $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ " ,p. 148 »
- [32] « Omar Ben Mya "Synthèse et Caractérisation de la pérovskite $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Fe}_{0.7}\text{Ni}_{0.3}\text{O}_3$ " ,p136 ,2015».
- [33] « O. Ourahmoun "Les cellules solaires à base de matériaux" , Vol. 21 N°4, p. 6, 2018. »
- [34] « Cellule solaire à pérovskitee disponible sur [https://www.lechodu solaire.fr/cellule-solaire-a-perovskite-solliance-atteint-rendement-de-135-substrat-souple/consulté le 22/ 11 /2017](https://www.lechodu solaire.fr/cellule-solaire-a-perovskite-solliance-atteint-rendement-de-135-substrat-souple/consulté%20le%2022%2F11%2F2017) ». .
- [35] « P. G. V. Sampaio et M. O. A. González, "Photovoltaic solar energy: Conceptual framework" .vol. 74, p. 590-601. 2017».

[36] « L'EPFL allonge la durée de vie des cellules solaires à pérovskites -disponible sur <https://www.heidi.news/sciences/>consulté le 13 octobre 2020 ». .

[37] « <https://www.enerzine.com/nouveau-procede-de-production-de-cellules-photovoltaiques-a-perovskites/31041-2020-04> ». .

[38] « <https://www.futura-sciences.com/sciences/actualites/physique-cellules-photovoltaiques-dopees> consulté le 11/11/2016 ». .

[39] « DANG Minh Trung "ELABORATION DE CELLULES SOLAIRES PHOTOVOLTAQUE SABASE DE POLYMERES CONJUGUES-ETUDES DES SYSTEMES RETICULABLES "N ° : 3892 page 194 ,2009».

[40] « Caractéristiques électriques des cellules et des modules photovoltaïques disponible sur <https://energieplus-lesite.be/theories/photovoltaique6>consulté le 2021 ». .

[41] «V. Foncrose, " Nanocristaux, films et cellules photovoltaïques de $Cu_2ZnSn(SSe)_4$ par impression d'encre ", p. 145,2016. »

[42] «M. F. Samir," Contrôle de la Puissance d'un Générateur Photovoltaïque pour le Pompage Solaire" , p. 140,2009. »

Chapitre II

Les polymères conducteurs

Table des matières :

1	Introduction :	28
2	Les polymères conducteurs :	28
2.1	Définition :	28
2.2	Les types de polymères conducteurs :	28
2.2.1	Polymères conducteurs extrinsèques (PCE) :	28
2.2.2	Polymères conducteurs ioniques	28
2.2.3	Polymères conducteurs intrinsèques (PCI) ou polymère conjugués:	29
3	Polymères semi-conducteurs et les cellules photovoltaïques :	32
4	Les cellules photovoltaïques à base de Pérovskite :	35
4.1	Structure de la pérovskite :	35
4.2	Les matériaux pérovskite :	35
4.3	Principe de fonctionnement de la cellule solaire à base de pérovskite :	37
4.4	Elaboration des cellules photovoltaïques pérovskites :	38
4.4.1	Electrode de collecte transparente :	38
4.4.2	Couche bloqueuse de trous :	38
4.4.3	Transporteur d'électrons (ETL) :	38
4.4.4	Absorbeur solaire (Pérovskite) :	38
4.4.5	Transporteur de trous :	39
4.4.6	Contre-électrode :	39
4.5	Architecture des cellules Pérovskites	39
5	Conclusion.....	40
6	Bibliographie :	41

Liste des figures :

Figure 1: Diagramme des orbitales moléculaires (HOMO et LUMO).....	30
Figure 2: Conductivités électriques de polymères conducteurs intrinsèques comparées à celles de polymères isolants et de quelques conducteurs non polymères.....	31
Figure 3: Structure de la pérovskite.....	35
Figure 4: Les structures trigonométriques optimisées MAgEX.....	36
Figure 5: Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les Cellules solaires à base de pérovskite.....	37
Figure 6: Structure moléculaire du Spiro-OMeTAD.....	39
Figure 7 : Quatre architectures les plus utilisés dans les cellules solaire à base de pérovskite, a) mésoporeux, b) couche de recouvrement c) n-i-p planaire et d) p-i-n planaire.....	40

Liste des tableaux :

Tableau 1: Structures chimiques de quelques familles de polymères conjugués.....	33
Tableau 2: Les matériaux polymères semi-conducteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques.....	34

1 Introduction

La modélisation des cellules solaires nécessite la connaissance des propriétés physiques et électroniques des matériaux constituant ces dispositifs. Dans ce chapitre nous allons décrire les différents matériaux polymères solaires ainsi que leurs différentes propriétés et les méthodes de l'élaboration de cellules solaires à base de pérovskites. A la fin, les différentes architectures de ce type de cellules ont été présentées.

2 Les polymères conducteurs :

2.1 Définition :

Les polymères conducteurs sont des matériaux prometteurs qui combinent les propriétés mécaniques des polymères classiques avec les propriétés électriques des conducteurs.

Les professeurs Mac Diarmid, Heeger et Shirakawa découvrent qu'il était possible pour le polyacétylène d'atteindre une conductivité électrique en faisant passer le polymère d'un état isolant à un état conducteur en 1977[1]. Ils ont remporté le prix Nobel en 2000[2]. Ces polymères conducteurs sont utilisés dans des applications technologiques telles que le stockage d'énergie, la protection antistatique et la cellule photovoltaïque organique[3].

2.2 Les types de polymères conducteurs :

2.2.1 Polymères conducteurs extrinsèques (PCE) :

PCE est constitué d'une matrice polymère isolante mélangée à des charges conductrices. Dans laquelle, ces charges conductrices sont dispersées en une poudre métallique ou de carbone noir. La conductivité est assurée en filtrant les particules introduites. Ce type de matériau existe sous forme de peintures, de matériaux réfractaires.[4].

2.2.2 Polymères conducteurs ioniques:

Les polymères conducteurs ioniques sont des complexes polymère/sel, La présence d'hétéroatomes, O, P, N, S dans une macromolécule permet des interactions

avec cations[5]. Afin d'obtenir un bon système de conducteur ionique des oxydes de polyéthylène sont utilisés dans lesquels le sel de lithium est dissous. L'intérêt des polymères conducteurs ioniques réside dans la production d'électrolytes solides ayant les propriétés mécaniques du polymère[6].

2.2.3 Polymères conducteurs intrinsèques (PCI) ou polymère conjugués:

Les PCI sont des polymères organiques qui combinent les propriétés électriques, électroniques, magnétiques et optiques d'un métal avec les propriétés mécaniques et mise en œuvre des polymères conventionnels. Il est synthétisé en liant aux autres par des liaisons chimiques covalentes. les polymères conducteurs intrinsèques on retrouve la polyacétylène (PA), le polypyrrole (PPy), le polythiophène (PT), le polyphénylène vinylène (PPV), le polyparaphénylène (PPP), la polyaniline (PANI) et leurs dérivés[7], [8].

Les PCI sont formés d'une chaîne linéaire présentant une alternance régulière de simples liaisons σ et de doubles liaisons π . Les unités constitutive sont des cycles conjugués ou hétérocycles aromatique, Cette alternance conduit par recouvrement des orbitales p à la formation d'une super orbitale continue où circulent l'électron. La conjugaison propage les effets électriques le long de squelette entraînant une polarisation importance, la délocalisation de l'électron π conduit à la rigidité d'une partie de la molécule[9]. Par ailleurs, tout écart de planéité entraîne une diminution de la conjugaison. Aux limites de la chaîne infinie, les orbitales liantes π ne peuvent plus être distinguées et le concept de bande valence (BV) et de bande de conduction (BC) est invoqué, appelé le plus haut orbitale moléculaire occupée HOMO et de la plus basse orbitale moléculaire occupé LUMO. Ils sont séparés par une bande interdite. Selon la théorie des bandes : c'est la valeur de cette dernière qui détermine les propriétés électriques du matériau[10].

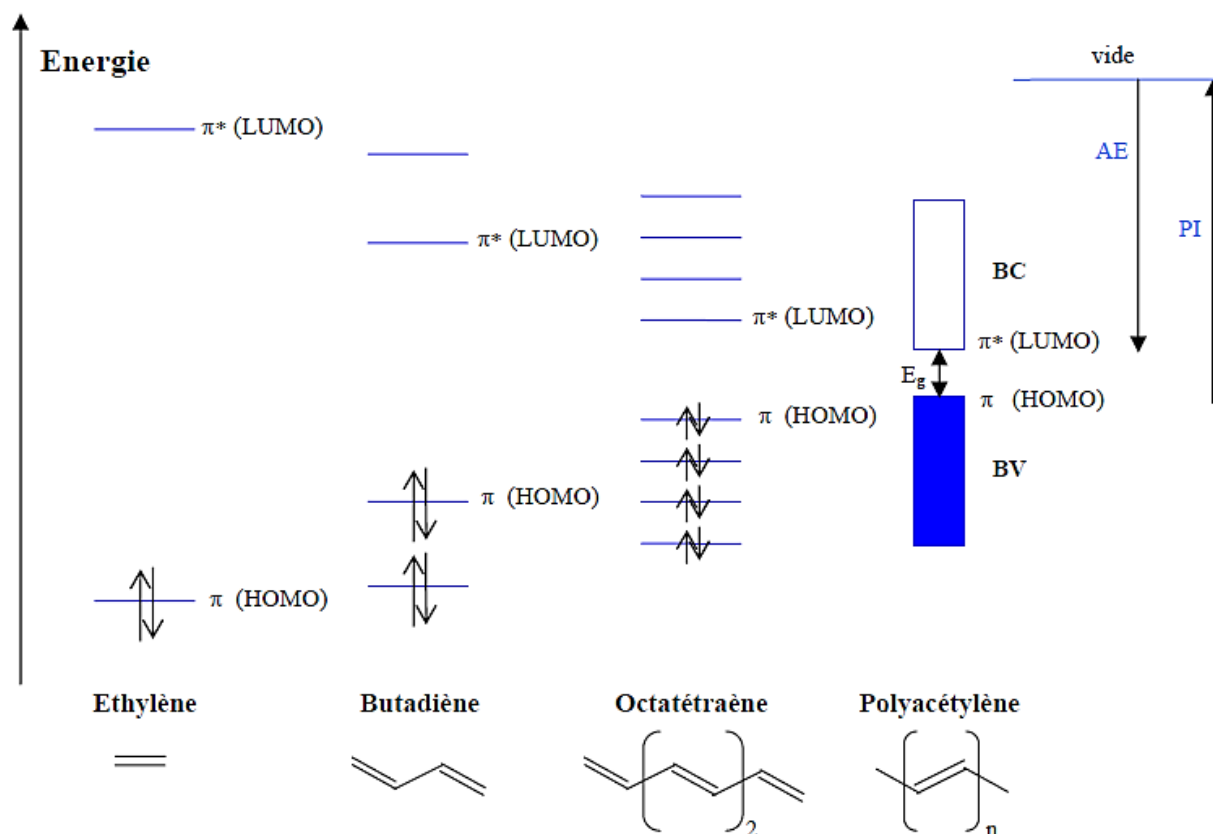


Figure 1: Diagramme des orbitales moléculaires (HOMO et LUMO)[11].

Pour les isolant possèdent une bande interdite trop importance supérieure à 4 eV et les semi-conducteurs ont une bande interdite suffisamment petite comprise entre 0 et 3eV[12].

a- Méthode de dopage :

Ces dopages sont réalisés par une réaction d'oxydo réduction(dopage de type p par oxydation ou dopage de type n par réduction) près des chaînes où la conductivité augmente fortement pour atteindre des valeurs proches des valeurs métalliques.

Il existe deux principales méthodes de dopage de polymères conducteurs intrinsèque : dopage chimique et dopage électrochimique.

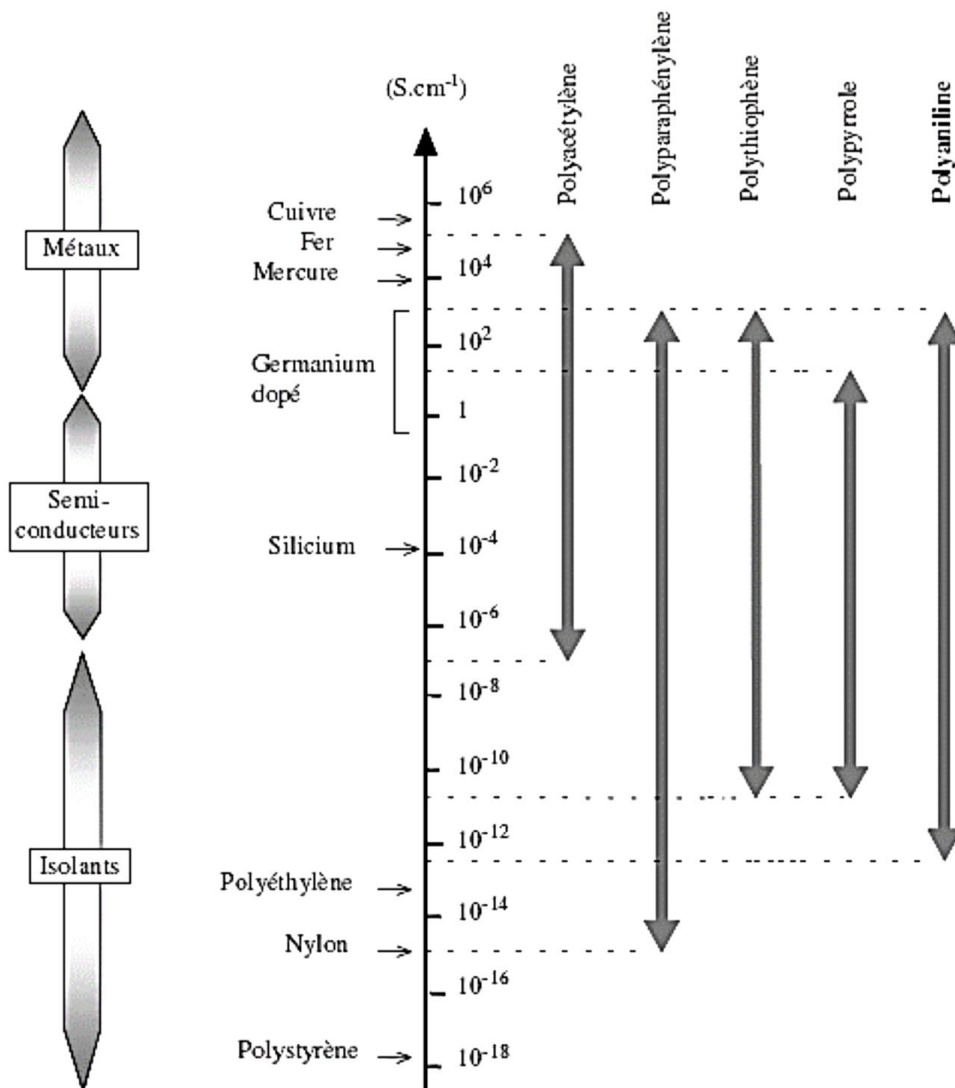


Figure 2: Conductivités électriques de polymères conducteurs intrinsèques comparées à celles de polymères isolants et de quelques conducteurs non polymères[13].

a-1 Dopage chimique :

Cela se fait en transportant des charges entre les chaînes de polymères conjuguées et le dopant. D'une autre part, cette réaction d'oxydoréduction conduit l'activateur à conserver la neutralité de la charge en jouant le rôle de contre ions[14] ;[15].

a-2 Dopage électrochimique :

L'électrode injecte la charge redox dans le polymère conducteur où les ions diffusent à travers la structure polymère de l'électrolyte pour compenser la charge

électronique .Il est utilisé pour réaliser un dopage homogène et fractionne de polymère conducteur[16].

b-Porteur de charge :

Il existe trois classes de défauts chargés localement la déformation d'une chaîne, cela est dû à la capacité de la chaîne conjugués à s'adapter à tout perturbation π .

b-1 Le soliton :

Il apparait comme un défaut séparant deux parties de la chaîne, le siliton ont deux phases opposées et en prenant du dopage pour les systèmes à l'état fondamental dégradé[17].

b-2 Les polarons :

Cela se fait par analogie avec des matériaux cristallins où l'ion racine détermine un fort couplage entre la charge et le photon c'est la charge positive ou négative associée au polymère[18] ;[19].

b-3 Les bipolarons :

Lorsqu'il y a un polaron sur la chaîne polymère, l'électron est éliminé ou rétréci, il y a deux cas soit la création d'un deuxième polaron de même signe ou la suppression d'un électron supplémentaire au polaron existant. Dans le second cas une nouvelle quasi-particule est créé[19].

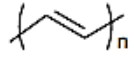
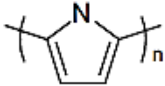

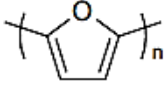
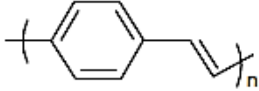
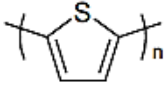
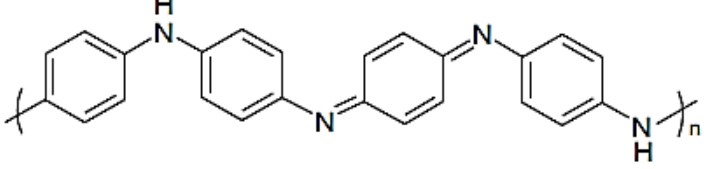
3 Polymères semi-conducteurs et les cellules photovoltaïques :

Les polymères conjugués sont des polymères semi-conducteurs qui se caractérisent par l'alternance régulière de liaisons simples σ et de doubles liaisons π , les charges électriques sont transférées pour séparer les liaisons π le long de la chaîne polymère.

Les polymères conjugués donnent des propriétés originales par rapport aux systèmes saturés grâce à leurs propriétés étant à l'origine de la conductivité[20].

Chapitre II : les polymères conducteurs

Tableau 1: Structures chimiques de quelques familles de polymères conjugués[21].

<i>Famille des polymères</i>	<i>Exemple</i>
Poly(acétylène)	
Poly(pyrrole)	
Poly(p-phénylène)	
Poly(furane)	
Poly(p-phénylène vinylène)	
Poly(thiophène)	
Polyaniline	

L'utilisation de polymères conjugués est d'une grande importance en raison de la technique de mise en œuvre utilisée pour produire des dispositifs photovoltaïques, cela permet le développement de systèmes photovoltaïque polymères peu couteux, faciles à fabriquer, légers et flexibles[22] ;[23].

Les films polymères conjugués sont créés par la méthode humide, avec des techniques peu couteuses : isolation ou sérigraphie, le poly (paraphénylènevinylène) PPV a d'abord été utilisé dans l'éclairage électrique organique avant d'être étudié pour la conversion de l'énergie solaire[22] ;[24]. Le polymère étant soluble, une fine couche de dépôt peut être appliquée sur un support solide. Les poly (alkyl thiophènes) (PAT) et leurs dérivés sont largement utilisés[24].

Chapitre II : les polymères conducteurs

Tableau 2: Les matériaux polymères semi-conducteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques [25]; [26]; [27]; [28]; [29].

Nom de polymère	P3HT poly(3-hexylthiophène)	MDMO-PPV poly [2-méthoxy-5-(3,7-diméthyl-oxy)-1,4-phénylène- <i>e</i> -vinylène]	MEH-PPV poly [2-méthoxy-5--1,4-phénylène- <i>e</i> -vinylène]	PEDOT : PSS un mélange de deux polymères, le poly (3,4-éthylènedioxythiophène) (PEDOT) et le poly (styrène sulfonate) de sodium (PSS)	PCNEPV poly[oxa-1,4-phénylène-(1-cyano-1,2-vinylène) – (2-méthoxy-5-(3,7-diméthyl-oxy)-1,4-phénylène)-1,2-(2-cyanovinylène)-1,4-phénylène]	PCBM phényle-C ₆₁ -butanoate de méthyle
propriétés						
Formule	(C ₄ H ₂ S) _n	(C ₁₉ H ₂₈ O ₂) _n	(C ₁₇ H ₂₄ O ₂) _n	(C ₈ H ₈ O ₃ S) _x (C ₆ H ₆ O ₂ S) _n	(C ₃₅ H ₃₆ N ₂ O ₃) _n	C ₇₂ H ₁₄ O ₂
Type de semi-conducteur	type p	type p	type p	type p	Type n	Type n
Masse molaire g/mol	170,315 ± 0.014	288.424 ± 0.017	260.371 ± 0.015	173.177 ± 0.012	532.6719 ± 0.00318	910.8804 ± 0.0592
mobilité des trous (cm ² /V.S)	0.0186	0.00005	0.0001	10	0.002	0.002
Mobilité des électrons (cm ² /V.S)	0.0018	0.00006	0.001	10	0.0002	0.001
Bande interdite (eV)	1.7	2.48	2.48	2.2	2.5	2.1

4 Les cellules photovoltaïques à base de Pérovskite :

4.1 Structure de la pérovskite :

La formule générale de pérovskite est ABX_3 où il existe deux types :

sous forme d'oxydes qui sont inorganiques, il est symbolisé par ABO_3 où A représente un cation divalent tels que $Mg^{2+}, Ca^{2+}, Sr^{2+}, Ba^{2+}, \dots$ et B est un cation métallique tétravalent tels que Ti^{4+}, Si^{4+} et Sn^{4+}, \dots ,

des pérovskites halogénées sa forme générale est ABX_3 , A peut représenter un métal alcalin monovalent tels que Li^+, Na^+, K^+, Rb^+ ou Cs^+ , B représente un métal ionique divalent tel que Pb, Sn ou Ge, et le X est un atome d'halogène, Cl-, Br- ou I - [30] ;[31].

La première pérovskite halogénée hybrides a été fabriquée en 1978[32] utilisant le méthylammonium ($CH_3NH_3 = MA$) et le formamidinium ($HC[NH_2]_2 = FA$).

La pérovskite hybride a suscité un grand intérêt dans le domaine de la pérovskite[33] ;[34].

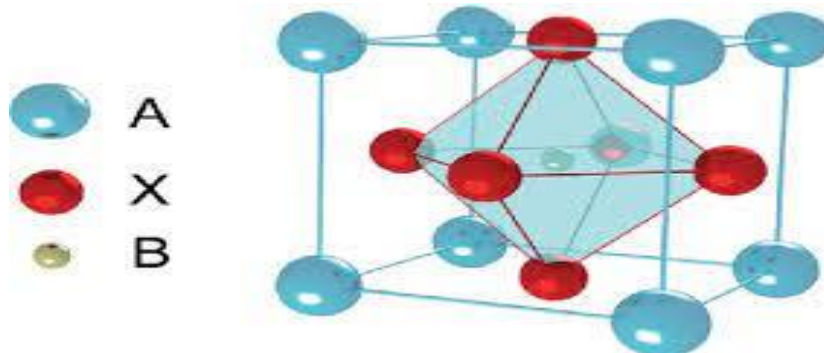


Figure 3 :Structure de la pérovskite[35].

4.2 Les matériaux pérovskite :

4.2.1 Matériau pérovskite à base de plomb(Pb) :

La pérovskite halogénée de plomb organique et inorganique ($MAPbX_3$, X= Cl, I, Br) est le matériau semi-conducteur le plus probable en raison de ses propriétés électroniques uniques. La température varie d'un type à l'autre car ils n'ont pas la même composition[36].

MAPbI₃ :

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

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

MAPbBr₃ :

- Plus stable à température ambiante grâce à la structure cubique et une grande compression en raison de la taille plus petite[37].
- Plus résistant à l'eau.
- Haut performance par rapport à MAPbI₃.
- L'utilisation d'une transparence optique supérieure.
- La conductivité électrique du mouvement de charge est élevée.

MAPbI₃ :

- Sensibilité aux rayons ultraviolets (UV)[38].
- Appareils électriques limites en raison de faible cristallinité[38].

4.2.2 Matériau pérovskite à base de germanium (Ge) :

Les liaisons Ge-X dans les triangles MGeX₃ sont divisées en deux types : une liaison courte avec une forte interaction covalente et une liaison longue avec une interaction faible[39].

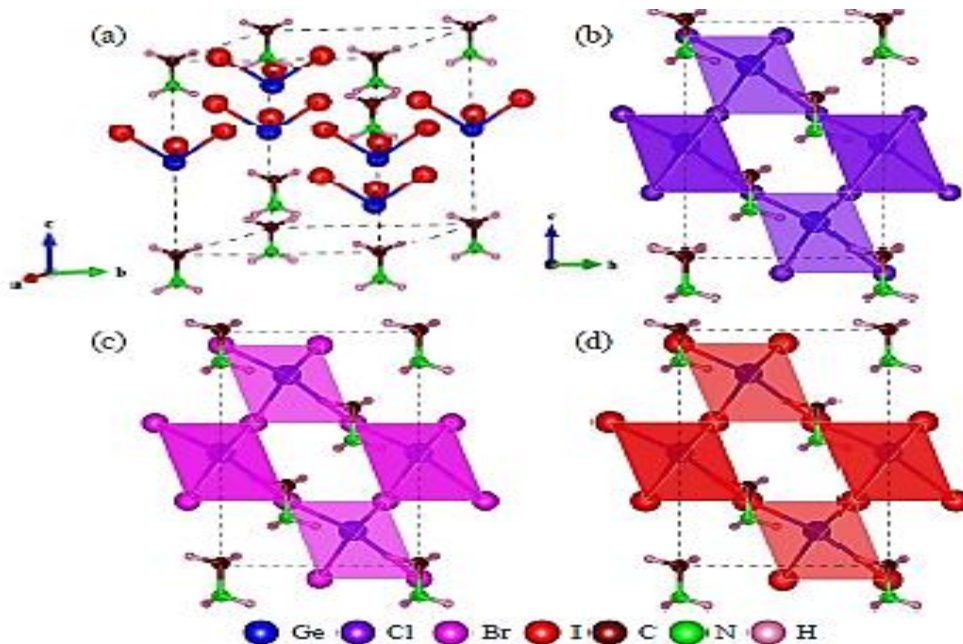


Figure 4: Les structures trigonométriques optimisées MGeX [39].

Les structures de bandes de MAGeX_3 ($X = \text{Cl}^-$, Br^- et I^-) sont similaires, dans les quelles maximum de bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés à la même position le Zone de Brillouin[39].

4.3 Principe de fonctionnement de la cellule solaire à base de pérovskite :

La cellule photovoltaïque en pérovskite est un groupe de couches qui sont généralement déposées sur du verre. Son principe est que la lumière est absorbés par les pérovskites qui produisent des charges gratuites, la lumière permet aux électrons de la bande de valence d'atteindre la bande de conduction résultant en des trous.

Il n'est pas nécessaire que les pérovskites aient un bon transport car les caractéristiques interfaces déterminent bien les performances [40]. La figure 5 présente le Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les Cellules solaires à base de pérovskite où les processus souhaités sont : photo-excitation dans la pérovskite (flèche 1), le transfert d'électrons dans l'ETL (flèche 2) et transfert de trous en HTL (flèche 3). Ainsi, Les processus indésirables (flèche verte) consistent en: Une recombinaison des espèces photo-générées (4), Un transfert de charge arrière aux interfaces de HTL et de TiO_2 avec de la pérovskite (5, 6) , et Un contact direct entre HTL et TiO_2 (7).

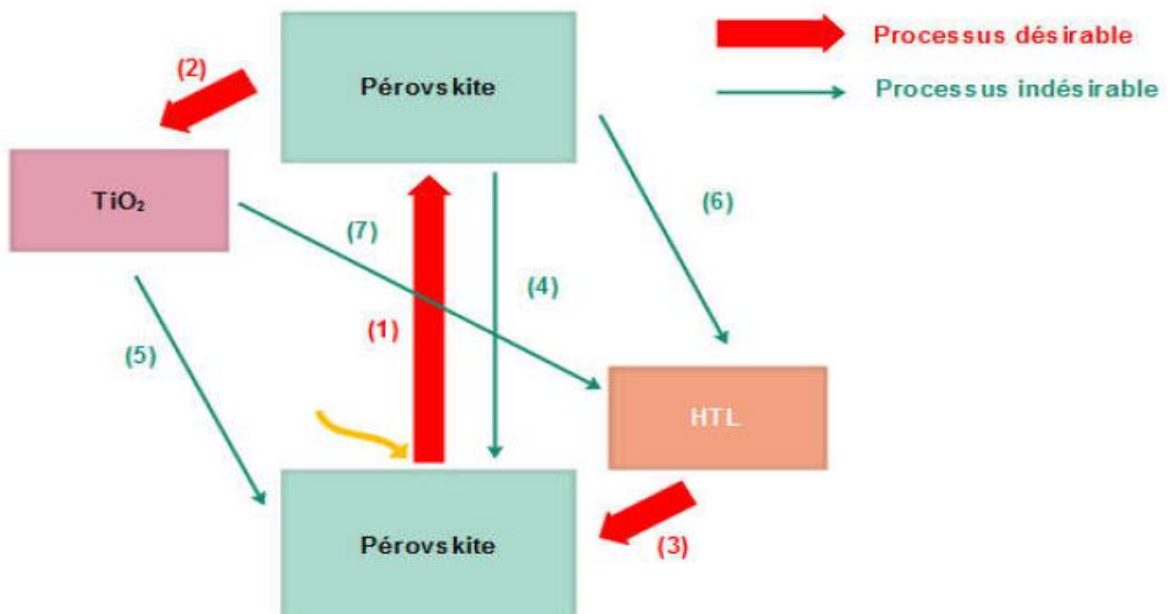


Figure 5 :Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les Cellules solaires à base de pérovskite[40].

4.4 Elaboration des cellules photovoltaïques pérovskites :

4.4.1 Electrode de collecte transparente

La première couche de la cellule solaire est une électrode transparente, les deux matériaux les plus répandés sont le dioxyde d'étain dopé au fluor (FTO) et l'oxyde d'indium dopé à l'étain (ITO), Le FTO est plus stable thermiquement et le prix plus bas que ITO[41].

La première étape consiste à percer le substrat une bande de FTO est éliminée par l'acide chlorhydrique en présence de poudre de zinc, les substrats sont protégés de scotch ne laissant apparaître que la bande de FTO à retirer[41].

4.4.2 Couche bloqueuse de trous :

La deuxième couche est une mince film de TiO_2 , il aide à transférer des électrons vers le FTO, le TiO_2 évite un contact direct entre le FTO et la pérovskite[41].

4.4.3 Transporteur d'électrons (ETL) :

La couche médiane poreuse qui transfère l'électron est produite à partir des nanoparticules TiO_2 et TiO_2 /graphène.

Un colle est préparé au la poudre de nanoparticule est dispersée dans l'éthanol absolu est ajoutée l'éthyle-cellule afin d'augmenter la viscosité de la solution et créés des pores tout en formant la fine couche, l'épaisseur de la couche dépend des paramètres de spin-coating et également la formation de solution[42].

L'échantillon sont frittés pour éliminer les composés organiques de la solution de dépôt et créer un réseau de percolant entre les nanoparticules TiO_2 . Ceci se fait sous une certaine température afin que le graphène dans les couches ne se décompose pas, et cela se fait progressivement afin d'éviter l'apparition de pressions[41].

4.4.4 Absorbeur solaire (Pérovskite) :

Le dépôt de pérovskite sur la poreuse de TiO_2 est l'étape la plus sensible du dépôt dans l'élaboration des cellules. Il existe plusieurs types de pérovskite et plusieurs méthodes de dépôt ce qui conduit à différentes propriétés et formes[43].

4.4.5 Transporteur de trous

Le matériau transporteur de trous HTL doit être précipité peu de temps après la préparation de la pérovskite afin de le protéger de l'exposition de l'humidité qui est l'une des causes de la dégradation de pérovskite[44].

Exemple de matériau utilisé comme HTL :

Spiro-OMeTAD parmi ses caractéristiques :

- Mise en œuvre facile.
- Il peut être facilement précipité.
- Il offre des perspectives d'utilisation de technique bas cout sur de plus grande surfaces.

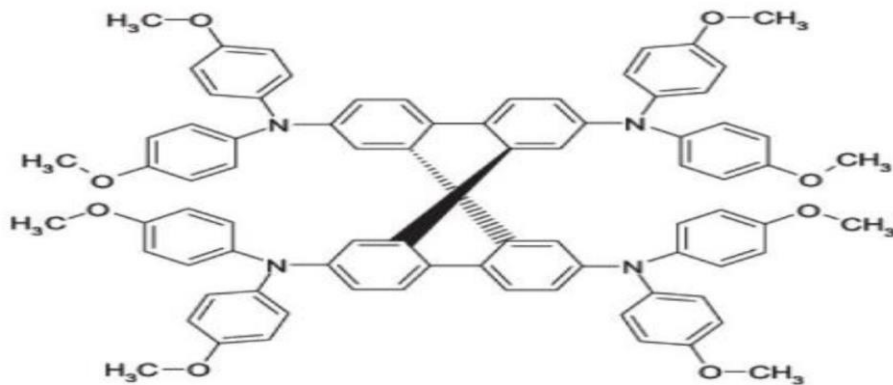


Figure 6 :Structure moléculaire du Spiro-OMeTAD[45].

4.4.6 Contre-électrode :

La contre-électrode d'or est déposée par évaporation sous vide, c'est la dernière couche à former la cellule solaire. Le matériau est déposé et évaporé sous vide secondaire et il se dépose sur toutes les surfaces disponibles[41].

4.5 Architecture des cellules Pérovskites

Il existe plusieurs architectures des cellules pérovskites. Les quatre principales sont appelées mésoporeux, couche de recouvrement, n-i-p planaire et p-i-n planaire, comme illustrée sur la Figure 7. Pour la modélisation et la simulation numérique, il sera préférable d'utiliser la configuration d'une cellule solaire à couche mince type p-i-n ou n-i-p planaire à hétérojonction. Ces dernières caractérisent : les cellules solaires

à base de pérovskite, d'une manière similaire à la structure de cellules solaires à semi-conducteurs composites à couche mince, telles que CIGS[46].

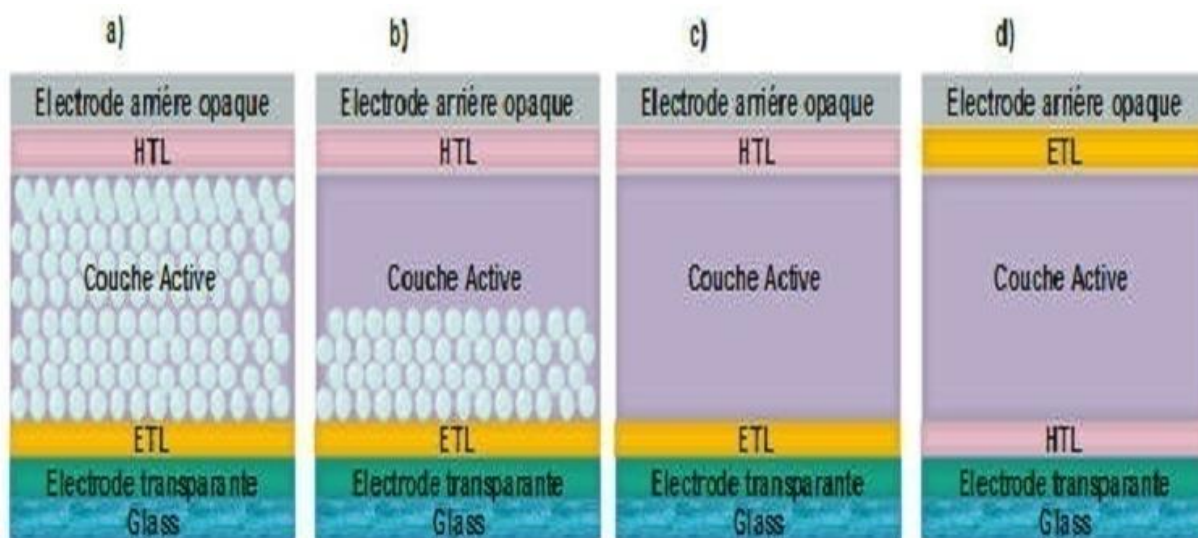


Figure 7 : Quatre architectures les plus utilisés dans les cellules solaires à base de pérovskite, a) mésoporeux, b) couche de recouvrement c) n-i-p planaire et d) p-i-n planaire.

5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mené une étude bibliographique approfondie sur les propriétés des matériaux polymères utilisés dans les cellules solaires. Ainsi, on a discuté les méthodes de l'élaboration des cellules photovoltaïques pérovskites. Puis une description de différentes architectures d'une cellule solaire à base de pérovskite.

La modélisation des dispositifs photovoltaïques est complexe car elle dépend extrêmement de plusieurs facteurs tels que les propriétés optoélectroniques du matériau qui regroupent la recombinaison, la durée de vie et la mobilité des porteurs de charge, la longueur de diffusion, la réflexion et le coefficient d'absorption. Cette diversité de paramètres complique la résolution des équations analytiques. Pour cela on opte souvent pour la résolution numérique qui apporte des solutions proches des caractéristiques expérimentales. D'après cette étude, on peut dire qu'il est souhaitable d'utiliser la configuration d'une couche mince type p-i-n ou n-i-p planaire à hétérojonction pour modéliser et simuler numériquement une cellule solaire à base de pérovskite.

6 Bibliographies :

- [1] « HIDEKSI HIRAKAWA, EDWINJ. LOUIS, A LANG . MACDIARMID, C*H WAN K. CHIANG, ? and ALANJ . HEEGERt chem soc chem cummum1977 ».
- [2] « C. K. Chiang, C. B. Fincher, Jr., Y. W. Park, and A. J. Heeger H. Shirakawa, ' " E. J. Louis, S. C. Gau, and Alan G. MacDiarmid phys.Rev let 1977 39(17),1098 ».
- [3] « Polymères Conducteurs disponible sur <https://www.univ-tlemcen.dz/> consulté le 30/11/2016 ».
- [4] « François - MESURES DE BRUIT EN 1f SUR DES COMPOSITES POLYAN.pdf ».
- [5] « S. Etienne et L. David, 'introduction à la physique des polymères', Dunod, Paris (2002) »;
- [6] « M. Armand; Solid States Ionics,9-10, 745 (1983). »
- [7] « paniplast-un-polymere-qui-conduit-leelectricite.pdf ».
- [8] « Thèse de Noureddine El Kamchi, Lille 1, 2012 ».
- [9] « A. J. Attias, " Polymères conjugués et polymères conducteurs électroniques, Techniques de l'ingénieur, traité d'électronique", E1 862-1, pp1-20.2002 »
- [10] « _LIANG_Chenghua"Caractérisations électriques de polymères conducteurs intrinsèques Polyaniline / Polyuréthane dans une large gamme de fréquence (DC à 20 GHz) ",p153,2010 ».
- [11] S. Martins, « Tétra- et Poly(aniline) Dopées par des Acides n-Alcane sulfoniques : Structures et Propriétés Electroniques », p. 201.
- [12] « Jihane Ismaili "Synthèse de nouveaux polymères pour l'élaboration d'un papier semi-conducteur "p189, 2017 ».
- [13] «P. Nadra "ÉCOLE DOCTORALE DES SCIENCES PHYSIQUES ET DE L'INGÉNIEUR ", p. 138. »

- [14] « Balint R., Cassidy N.J, Cartmell S.H," Conductive polymers: Towards a smart biomaterial for tissue engineering. Acta Biomaterialia", 10 : 2341-2353 2014».
- [15] «A. Raies," Elaboration de films minces électroluminescents à base de polymère conducteur électronique et de nanotubes de carbone" , p. 207,2016. »
- [16] « M. Bouziane, "Élaboration d'un composite Polyaniline/polystyrène destiné à l'emballage antistatique", 2015. »
- [17] « FRANCOIS Arnaud "MESURES DE BRUIT EN 1/f SUR DES COMPOSITES : POLYANILINE / POLYMETHACRYLATE DE METHYLE" p142,2003 ».
- [18] «F. Genoud, M. Guglielmi, M. Nechtschein, E. Genies, et M. Salmon," ESR study of electrochemical doping in the conducting polymer polypyrrole"vol. 55, n° 1, p. 118-121, 1985, ».
- [19] «J. L. Brédas, J. C. Scott, K. Yakushi, et G. B. Street," Polarons and bipolarons in polypyrrole: Evolution of the band structure and optical spectrum upon doing ", vol. 30, n° 2, p. 1023-1025, 1984. »
- [20] «H. Cherfouh" Synthèse et caractérisation de nanoparticules semi-conductrices d'InP pour application dans un dispositif polymère électroluminescent "p. 162,2009.»
- [21] « HATTAB Youcef "étude de l'évolution des propriétés électriques et thermiques de nanocomposites polymères- Argiles en milieux agressifs ",p220».
- [22] « J.H. Burroughes, D.D.C. Bradley, A.R. Brown, R.N. Marks, K. Mackey, R.H. Friend, P.L. Burn, A.B. Holmes, "Light-emitting diodes based on conjugated polymers", 347, 539,1990. »
- [23] «S. Karg, W. Riess, V. Dyakonov, et M. Schwoerer" Electrical and optical characterization of poly(phenylene-vinylene) light emitting diodes" . vol. 54, n° 1-3, p. 427-433, 1993. »

- [24] « R. Radbeh, "Réalisation et caractérisation de cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbones", p. 193. »
- [25] « <https://fr.wikipedia.org> ».
- [26]« <https://www.sigmaaldrich.com/catalog/product/aldrich/546461?lang=en®ion=DZ> ».
- [27] «M. M. Mandoc *et al.*," Charge transport in MDMO-PPV:PCNEPV all-polymer solar cells " , vol. 101, n° 10, p. 104512 ,2007».
- [28] «U. Mandadapu, "Simulation and Analysis of Lead based Perovskite Solar Cell using SCAPS-1D " vol. 10, n° 1, p. 1-8. 2017.»
- [29] «M. S. Chowdhury *et al.*," Effect of deep-level defect density of the absorber layer and n/i interface in perovskite solar cells by SCAPS-1D " vol. 16, p. 102839, 2020».
- [30] «D. Bi *et al.*," Polymer-templated nucleation and crystal growth of perovskite films for solar cells with efficiency greater than 21%"vol. 1, n° 10, p. 16142, oct. 2016. »
- [31] « Liang Chu, Waqar Ahmad, Wei Liu, Jian Yang, Rui Zhang, Yan Sun, Jianping Yang, Xing'ao Li" Lead-Free Halide Double Perovskite Materials: A New Superstar Toward Green and Stable Optoelectronic Applications" p19,2019 ».
- [32] « D. Weber, "CH₃NH₃PbX₃, ein Pb (II)-system mit kubischer perowskitstruktur/CH₃NH₃PbX₃, a Pb (II)-system with cubic perovskite structure," Zeitschrift für Naturforschung B, vol. 33, no. 12, pp. 1443–1445, 1978. »
- [33] «L. K. Ono, E. J. Juarez-Perez, et Y. Qi, "Progress on Perovskite Materials and Solar Cells with Mixed Cations and Halide Anions " , vol. 9, n° 36, p. 30197-30246, 2017. »

- [34] «J.-W. Lee, D.-J. Seol, A.-N. Cho, et N.-G. Park," High-Efficiency Perovskite Solar Cells Based on the Black Polymorph of $\text{HC}(\text{NH}_2)_2\text{PbI}_3$ " vol. 26, n° 29, p. 4991-4998, t 2014. »
- [35] « https://www.researchgate.net/figure/ABX-3-perovskite-structure_fig2_ ».
- [36] M. Spalla, « Stabilité intrinsèque des cellules solaires pérovskites: impact de la formulation de la couche active et des couches de transport de charges », p. 226.
- [37] «K. Wu *et al.*"Temperature-dependent excitonic photoluminescence of hybrid organometal halide perovskite films " vol. 16, n° 41, p. 22476-22481, sept. 2014, »
- [38] « Zhishuai Yuana , Wei Huangb , Shoutao Maa, Wei Hu and Wei Zhanga "High Performance Preovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ Single Crystal Photodetector: Benefiting From Evolutionary Preparation Process "p10».
- [39] «X. Lu *et al* "First-principles insight into the photoelectronic properties of Ge-based perovskites " vol. 6, n° 90, p. 86976-86981, 2016. »
- [40] «M. A. Green, A. Ho-Baillie, et H. J. Snaith," The emergence of perovskite solar cells "vol. 8, n° 7, p. 506-514.2014 »
- [41] «R. Belchi, " Architectures à base de nanostructures de carbone et TiO_2 pour le photovoltaïque ", p. 297.»
- [42] «S. Ito *et al* " Fabrication of thin film dye sensitized solar cells with solar to electric power conversion efficiency over 10% ", vol. 516, n° 14, p. 4613-4619, 2008.»
- [43] «J.-W. Lee et N.-G. Park, "Two-step deposition method for high-efficiency perovskite solar cells "vol. 40, n° 8, p. 654-659,2015. »
- [44] «D. Wang, M. Wright, N. K. Elumalai, et A. Uddin," Stability of perovskite solar cells "vol. 147, p. 255-275, avr. 2016.»

[45] « https://www.researchgate.net/figure/Molecular-structure-of-spiro-OMeTAD-This-figure-has-been-adapted-from-ref-82-with_fig_325381969 ».

[46] « T. Minemoto and M. Murata, “Device modeling of perovskite solar cells based on structural similarity with thin film inorganic semiconductor solar cells,” vol. 116, no. 5, p. 054505, 2014. »

Chapitre III

**Simulation de la couche ETL et HTL dans
la cellule solaire pérovskite**

Table des matières :

1	Introduction :	50
2	Présentation du logiciel SCAPS :	50
2.1	Définition :	50
2.2	Aperçu sur le fonctionnement de SCAPS-1D:	51
2.3	Théorie de fonctionnement :	53
3	Cellule pérovskite de référence :	54
4	Caractéristique électrique de la cellule solaire :	56
5	Résultats et discussion :	56
5.1	Influence de l'épaisseur de la couche absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les performances électriques:	56
5.2	Remplacement de la couche ETL TiO_2 par d'autres matériaux.....	57
5.2.1	L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante.....	58
5.2.2	L'effet de l'épaisseur de la couche ETL.....	60
5.3	Remplacement de la couche HTLspiro-OMeTAD par PEDOT : PSS.	64
6	Conclusion :	69
7	Bibliographie :	70

Liste des figures :

Figure 1: Panneau de définition de la structure.....	51
Figure 2: L'algorithme de fonctionnement de SCAPS	53
Figure 3: La structure de la cellule solaire pérovskite de référence.	54
Figure 4: La structure de la cellule solaire pérovskite dans la simulation.....	55
Figure 6 : Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de TiO ₂	62
Figure 7: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de CdS.	62
Figure 8: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de ZnS.....	63
Figure 9: La courbe JV simulée pour différente ETL sur la cellule pérovskite à base de CH ₃ NH ₃ PbI ₃	63
Figure 10: Cellule solaire pérovskite à structure Au/ PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ETL/SnO ₂ /verre.....	64
Figure 11: L'effet de l'épaisseur de PEDOT PSS sur les performances de différentes structures étudiées.....	67
Figure 12: La courbe JV simulée pour différente ETL sur la cellule pérovskite à base de CH ₃ NH ₃ PbI ₃ et PEDOT :PSS.....	68

Liste des tableaux :

Tableau 1: Paramètres de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	55
Tableau 2: Les paramètres (V_{oc} , J_{cc} , FF, η) d'une cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$).	56
Tableau 3: Paramètres utilisés pour la simulation des matériaux ETL et HTL.....	58
Tableau 4: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre sur les performances de la cellule solaire.....	59
Tableau 5: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre sur les performances de la cellule solaire	59
Tableau 6: l'effet de l'épaisseur de TiO ₂ sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /TiO ₂ /SnO ₂ /verre.....	60
Tableau 7: L'effet de l'épaisseur de la couche CdS sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre.....	61
Tableau 8: L'effet de l'épaisseur de la couche ZnS sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre	61
Tableau 9: L'effet de l'épaisseur de la couche du PEDOT : PSS sur les performances de la cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ / TiO ₂ /SnO ₂ /verre	65
Tableau 10: L'effet du l'épaisseur PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO ₂ /verre	66
Tableau 11: L'effet du l'épaisseur PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO ₂ /verre	66

1 Introduction :

La pérovskite halogène au plomb est une technologie émergente dans les cellules solaire en raison de ses multiples caractéristiques : haut rendement, la mobilité des charges et la durée de vie est très élevée. La structure de la cellule solaire pérovskite se compose de plusieurs couches et chacune de ces couches a son propre effet.

Afin d'améliorer les performances de la cellule nous présentons, dans ce dernier chapitre, l'influence et l'effet de la couche ETL et HTL sur les performances de la cellule solaire étudiée.

2 Présentation du logiciel SCAPS :

2.1 Définition :

La simulation des cellules en couches minces est devenue plus utilisée ces dernières années, ainsi, plusieurs logiciels de calcul ont été développés par les chercheurs dans ce domaine. On peut citer quelques logiciels comme ; AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO

SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator is one dimensional) est un logiciel de simulation des cellules solaire en couche mince unidimensionnelles[1]. Le panneau d'affichage de SCAPS-1D est présenté sur la figure 1. SCAPS a été développé par l'équipe de chercheurs (Alex Niemegeers, Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Stefaan Degraeve)[2] : [3] à l'université de Gent en Belgique, il s'agit de simuler les caractéristiques électriques de différentes cellules solaire (CdTe, CIGS,etc.) en résolvant les équations des structures contenant un certain nombre de couches de semi-conducteur pour que la simulation ait lieu les paramètres d'entrée de base doivent être définis et saisis correctement[4]. Comparé à un autre programme, SCAPS a une fenêtre de fonctionnement très intuitive et des fonctionnalités qui peuvent être définies en 7 couches semi-conducteur, il existe 5 types de défauts et distributions et ensembles de propriétés liés aux cellules solaires[5].

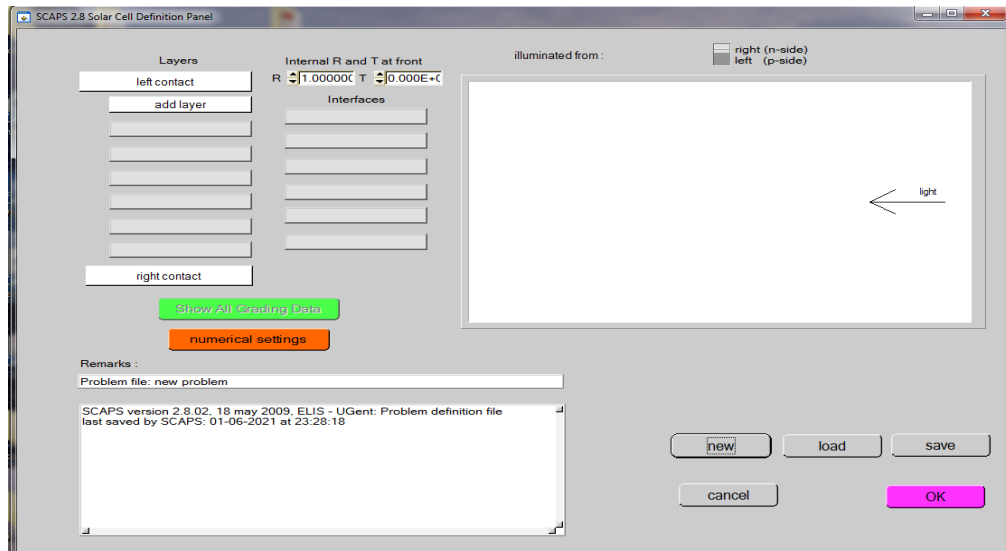


Figure 1: Panneau de définition de la structure.

2.2 Aperçu sur le fonctionnement de SCAPS-1D:

Pour modéliser précisément les propriétés électriques de sorties dans la plupart des types de cellules solaires, il suffit de résoudre les équations de base des semi-conducteurs avec des conditions aux limites appropriées.

Equation de base :

L'équation de Poisson est utilisée pour décrire la relation entre les charges potentielles et l'espace, comme le montre l'Eq.1.

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}(x) = \frac{q}{\epsilon} [n(x) - p(x) - N_D^+(x) + N_A^-(x) - p_t(x) + n_t(x)] \quad (1)$$

Où, ϕ est le potentiel, q est la charge élémentaire, ϵ est la permittivité, n est la densité de l'électron libre, p est la densité du trou libre, N_D^+ est la densité de dopage de type donneur ionisé, N_A^- est la densité de dopage de type accepteur ionisé, p_t est la densité du trou piégé, n_t est la densité électronique piégée.

Equations de continuité pour électrons et trous sont représentés en 2,3,4 et 5:

$$q \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial J_n}{\partial x} + qG - qR \quad (2)$$

$$q \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial J_p}{\partial x} + qG - qR \quad (3)$$

$$J_n = qn\mu_n \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (4)$$

$$J_p = -qn\mu_p \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (5)$$

Où, G est le taux de génération optique, R est le taux de recombinaison, D_n est le coefficient de diffusion des électrons, D_p est le coefficient de diffusion des trous, μ_n est la mobilité des électrons et μ_p est la mobilité des trous.

Concentration d'électrons et de trous:

A l'équilibre thermique, les concentrations en porteurs libres sont exprimées par l'Eq.6-7.

$$n = N_c \exp\left(\frac{E_f - E_c}{k_B T}\right) \quad (6)$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_v - E_f}{k_B T}\right) \quad (7)$$

Où, E_f est le niveau de Fermi, k_B est la constante de Boltzmann, T est la température, E_c et E_v sont l'énergie niveaux sous un état d'équilibre.

Fonction de travail des contacts:

C'est la quantité minimale d'énergie requise pour éliminer un électron de la surface d'un solide, généralement du métal[6]. La fonction de travail peut être attribuée par l'utilisateur ou elle peut être calculée à l'aide des équations suivantes :

Contact de type n:

$$\phi_m = \chi + k_B T \ln\left(\frac{N_c}{N_D - N_A}\right) \quad (8)$$

Contact de type p:

$$\phi_m = \chi + E_{\text{gap}} - k_B T \ln\left(\frac{N_c}{N_A - N_D}\right) \quad (9)$$

Contact intrinsèque:

$$\phi_m = \chi + k_B T \ln\left(\frac{N_c}{n_i}\right) \quad (10)$$

Où, ϕ_m est la fonction de travail, χ est l'affinité électronique, N_c est la densité d'état effective pour bande de conduction, N_A et N_D sont des densités de dopant accepteur et donneur. N_i est des porteurs intrinsèques »densités.

Coefficient d'absorption:

C'est la mesure dans laquelle une substance absorbe de l'énergie[6], l'équation d'absorption dans SCAPS est la suivante :

$$\alpha(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_{\text{gap}}} \quad (11)$$

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

2.3 Théorie de fonctionnement :

SCAPS-1D utilise la théorie de la résolution des équations mentionnées précédemment chaque calcul commence à partir de son point de départ. La figure2 représente l'algorithme de fonctionnement de SCAPS[6].

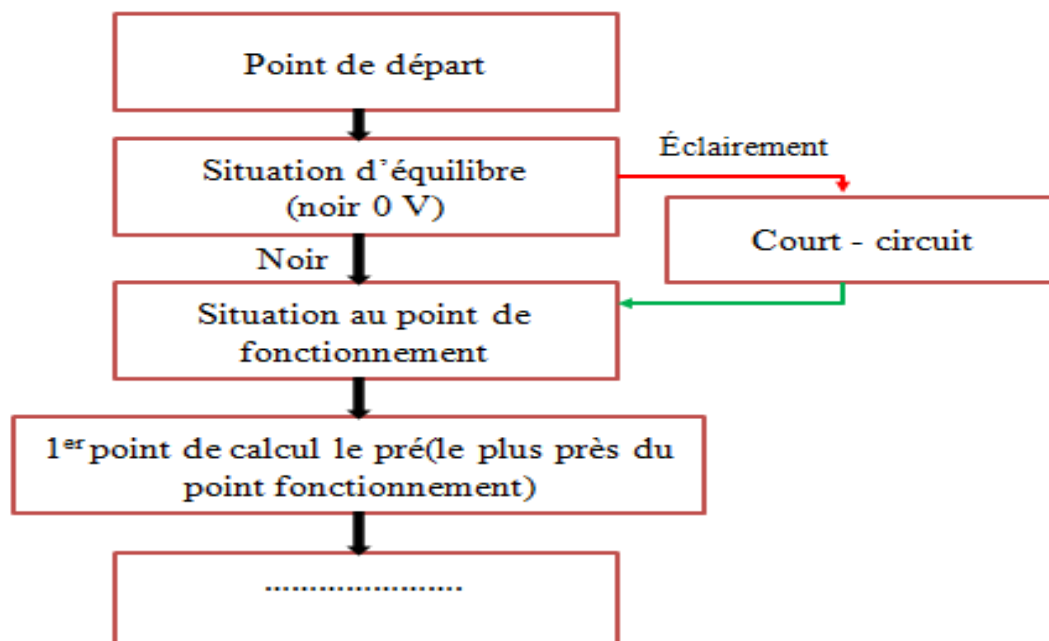


Figure 2:L'algorithme de fonctionnement de SCAPS [7].

Lorsque les conditions du point d'action sont dans l'obscurité, l'équilibre est utilisé comme première estimation, dans le cas de l'éclairage la condition de court-circuit est calculée dans une étape intermédiaire pour servir de première estimation.

SCAPS-1D présente des positions intermédiaires entre l'équilibre /le point de travail, équilibre/court –circuit, court –circuit /point de travail.

3 Cellule pérovskite de référence :

Dans cette étude nous appuyons sur une cellule solaire pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en raison de ses multiples caractéristiques : son coefficient d'absorption élevé, son mécanisme de transmission élevé, sa facilité de fabrication.....etc.

Nous avons pris comme référence la structure développée par Ali Husaina et John Fuller[8]. Le schéma simplifié de la structure de référence est représenté sur la figure 3. Et aussi la figure 4 présente la structure de référence en logiciel SCAPS-1D.

La figure 3 montre les couches de cellules solaires de la couche de contact en Or (Au) avec une fonction de travail de 5.1eV, Spiro-OMeTAD comme couche de transfert de trous HTL de type p, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ la couche absorbante de type n est le cœur de la cellule et le TiO_2 couche de transfert d'électrons ETL de type n. Le dioxyde d'étain dopé au fluor ($\text{SnO}_2:\text{F}$) représente la couche d'oxyde transparent et conducteurs (Transparent Conductive Oxides:TCO) comme le FTO.

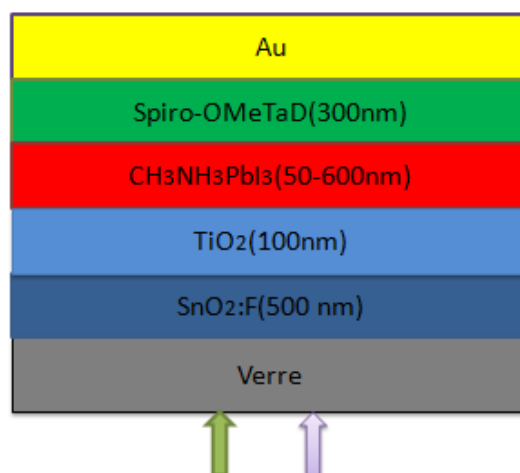


Figure 3: La structure de la cellule solaire pérovskite de référence.

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

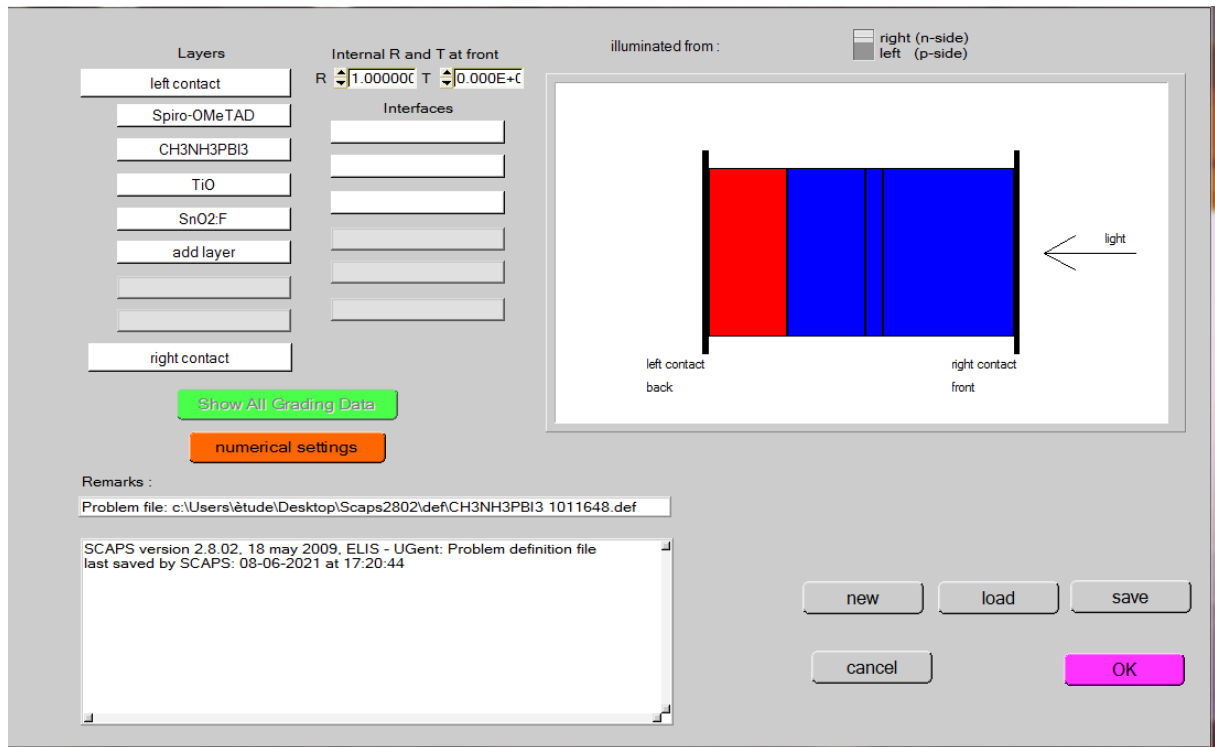


Figure 4: La structure de la cellule solaire pérovskite dans la simulation.

Les paramètres et les caractéristiques des matériaux utilisés dans l'article ont été résumés dans le tableau 1, la simulation a été réalisée à 25°C et une masse d'air AM1.5G, éclairage de 1000W/m².

Tableau 1: Paramètres de la cellule solaire à base de CH₃NH₃PbI₃.

Couche / Propriété	SnO ₂ : F	TiO ₂	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	Spiro-OMeTAD
Épaisseur (nm)	500	100	50-600	300
Bande interdite (eV)	3.5	3.2	1.55	2.9
Affinité électronique (eV)	4	4.26	3.9	2.2
Permittivité diélectrique	9	38-108	30	3
CB densité effective d'états (cm ⁻³)	2.20X10 ¹⁷	2.00X10 ¹⁸	2.20X10 ¹⁸	2.5X10 ¹⁸
VB densité d'états effective (cm ⁻³)	2.20X10 ¹⁶	1.80X10 ¹⁹	1.00X10 ¹⁸	1.80X10 ¹⁹
Vitesse thermique désélections (cm / S)	1X10 ⁷	1X10 ⁷	1X10 ⁷	1X10 ⁷
Trou vitesse thermique (cm/ S)	1X10 ⁷	1X10 ⁷	1X10 ⁷	1X10 ⁷

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Mobilité des électrons (cm ² / V.S.)	20	2X10 ⁴	2.20	2.00X10 ⁻⁴
Trou de la mobilité (cm ² / V.S.)	10	1X10 ³	2.20	2.00X10 ⁻⁴
densité de donneur Nd (cm ⁻³)	1X10 ¹⁵	6X10 ¹⁹	9X10 ²⁰	0
densité d'accepteur Na (cm ⁻³)	0	0	0	1X10 ²²
Défaut Nt (cm ⁻³)	1X10 ¹⁵	1X10 ¹⁵	8.5X10 ¹³	1X10 ¹⁵

4 Caractéristique électrique de la cellule solaire :

Nous avons simulé la cellule solaire de référence avec des propriétés électroniques données dans le tableau -1- précédent. Les performances électirques de la cellule simulé sont résumées dans le tableau -2-. OÙ nous allons comparé par la suite nos résultats avec les résultats de référence.

Tableau 2: Les paramètres (Voc, Jcc, FF, η) d'une cellule solaire à base de CH₃NH₃PbI₃.

	Simulation	Référence
Voc (volt)	1.50	1.48
Jcc (mA/cm ²)	14.80	15.16
FF (%)	91.20	90.91
η (%)	20.13	20.34

Les paramètres de la cellule solaire de référence [8] et de simulation sont représentés dans le tableau 2. Les paramètres (J_{cc}, V_{oc}, FF et η) que nous avons obtenus par simulation sont en très bon accord avec ceux trouvés dans la cellule référence[8]. A cet effet, nous allons essayer d'améliorer le rendement on optimisant les paramètres technologique (épaisseur, nature de matériaux en HTL et ETL) de la cellule solaire.

5 Résultats et discussion :

5.1 Influence de l'épaisseur de la couche absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les performances électriques:

L'influence de l'épaisseur de la couche absorbante $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ de 50 nm à 600 nm sur le rendement et le facteur de forme est illustré sur la figure 5 pour un coefficient d'absorption égale à 10^5cm^{-1} . La figure 5 montre que le rendement augmente lorsque l'épaisseur de la couche absorbante $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ augmente et pareil pour la tension de circuit ouvert. Nos résultats sont identiques aux résultats de la cellule référence[8]. Pour les épaisseurs de 50nm à 300 nm le rendement augmente et aussi la couche de déplétion augment. Par contre, quand la couche absorbante dépasse les 300 nm le rendement de la cellule diminue. Cette diminution de rendement est provoquée par le nombre élevé de recombinaison. Cette phénomène se produit en raison du nombre croissant de pièges et parce que de plus en plus de porteurs en excès ne peuvent pas atteindre les électrodes.

La figure 5 montre que l'épaisseur de la couche absorbante optimale est de 300nm.

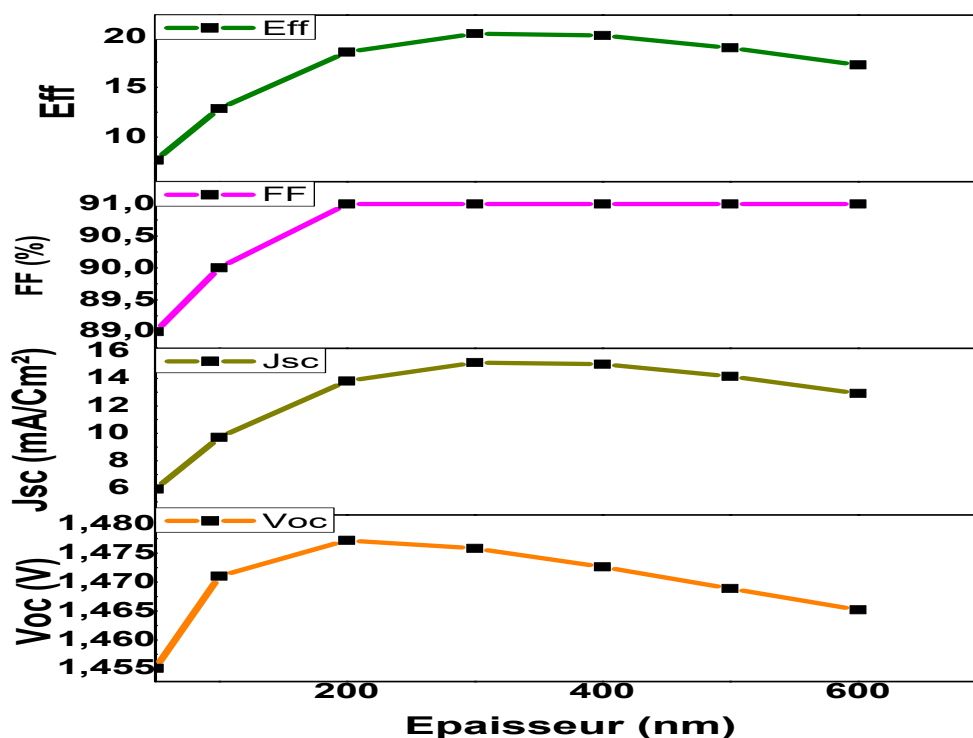


Figure 5: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de CH₃NH₃PbI₃.

5.2 Remplacement de la couche ETL TiO₂ par d'autres matériaux:

Dans notre étude, nous allons remplacer le TiO₂ par une couche de CdS et une autre fois par ZnS. Tout d'abords, nous allons démontrer l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante lorsqu'on changeant le TiO₂.

Le tableau 3 présente les différents paramètres du CdS et ZnS utilisé en couche ETL. Et aussi, les paramètres de PEDOT : PSS utilisé en couche HTL.

Tableau 3: Paramètres utilisés pour la simulation des matériaux ETL et HTL.

Couche	CdS	ZnS	PEDOT : PSS
Propriétés			
Épaisseur (nm)	100	100	300
Bande interdite (eV)	2.4	3.6	2.2
Affinité électronique (eV)	4.18	3.9	2.9
Permittivité diélectrique	10	9	3
CB densité effective d'états (cm ⁻³)	2.2X10 ¹⁸	1X10 ¹⁹	2.2X10 ¹⁵

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

VB densité d'états effective (cm^{-3})	1.9×10^{19}	1×10^{19}	1.8×10^{18}
Vitesse thermique des électrons (cm/S)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Trou vitesse thermique (cm/ S)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Mobilité des électrons ($cm^2/V.S.$)	1×10^2	1×10^2	1×10^1
Trou de la mobilité ($cm^2/ V.S.$)	2.5×10	2.5×10	1×10^1
densité de donneur Nd (cm^{-3})	1×10^{18}	1×10^{18}	
densité d'accepteur Na (cm^{-3})			3.17×10^{14}
Défaut Nt (cm^{-3})	1×10^{15}	1×10^{15}	1×10^{14}

5.2.1 L'effet de l'épaisseur de la couche absorbante:

Premièrement, nous allons étudier l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD/CH₃NH₃PbI₃/CdS/ SnO₂ /verre. et la cellule Au/Spiro-OMeTAD/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/SnO₂/verre. Les tableaux 4. et 5. montrent les résultats de la simulation des deux structures.

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Tableau 4: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /CdS/SnO₂/verre sur les performances de la cellule solaire.

Épaisseur (nm) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	V_{oc} (volt)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
50	1.4880	4.761349	91.01	6.45
100	1.4949	8.149462	90.09	11.08
200	1.4948	12.309089	91.02	16.75
300	1.4869	14.73041	91.12	19.96
400	1.4911	14.206195	91.09	19.41
500	1.4827	14.369664	91.08	19.30
600	1.4784	13.52433	91.01	18.20

Tableau 5: L'effet de l'épaisseur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ pour une structure Au/Spiro-OMeTAD / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/SnO₂/verre sur les performances de la cellule solaire

Épaisseur (nm) ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$)	V_{oc} (volt)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
50	1.5239	6.194944	91.39	8.63
100	1.5203	10.566330	91.37	14.68
200	1.5067	18.342716	91.33	25.24
300	1.5016	19.226126	91.26	26.35
400	1.4966	19.153015	91.17	26.13
500	1.4919	18.501845	91.13	25.16
600	1.5128	15.857031	91.29	21.90

On remarque bien que, pour des épaisseurs supérieures à 300 nm le rendement est faible pour les deux structures étudiées. Par contre, quand l'épaisseur augmente de 50nm à 300 nm le rendement aussi augmente. On peut conclure que, l'épaisseur optimale de la couche absorbante pour les deux structures est égale à 300 nm.

5.2.2 L'effet de l'épaisseur de la couche ETL:

Afin de connaître l'effet de la couche de transfert des trous et des électrons, nous effectuons une simulation de deux structures de cellule solaire où l'épaisseur de la couche absorbante optimale est égale à 300 nm mais on remplaçant la couche de transport d'électrons par d'autres matériaux qui convient.

Les performances des cellules solaires dépendent de divers paramètres de conception tels que l'épaisseur de la couche du matériau, la structure de dispositif et la concentration de dopant.

Certains rapports[9]ont montrés que la couche ETL affecte sur les performances de la cellule solaire[9]. Nous remplaçons le matériau TiO_2 une fois par Cds et une autre fois par ZnS .Nous utilisons SCAPS pour faire une étude comparative entre les deux structures et on note les différents paramètres électriques ; le courant de court-circuit J_{cc} , la tension de circuit ouvert V_{oc} , le facteur de forme FF et le rendement η .

Par la suite, Nous présentons les performances de la structure Au/Spiro-OMeTAD / $CH_3NH_3PbI_3$ /CdS/ SnO_2 /verre et la structure Au/Spiro-OMeTAD / $CH_3NH_3PbI_3$ / ZnS/ SnO_2 /verre étudié par SCAPS dans les tableaux 6,7 et 8 .Où nous allons montrer l'effet de l'épaisseur de la couche ETL de chaque matériau présenté en ETL.

Tableau 6: l'effet de l'épaisseur de TiO_2 sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD/ $CH_3NH_3PbI_3$ / TiO_2 / SnO_2 /verre.

Épaisseur (nm) (TiO_2)	V_{oc} (volt)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF (%)	η (%)
10	1.4996	14.848400	91.20	20.21
20	1.4996	14.848439	91.20	20.20
40	1.4995	14.836491	91.20	20.19
50	1.4995	14.823713	91.20	20.17
70	1.4994	14.786961	91.20	20.14
100	1.4994	14.796840	91.20	20.13

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Tableau 7: L'effet de l'épaisseur de la couche CdS sur les performances de la cellule solaire Au/Spiro-OMeTAD /CH₃NH₃PbI₃/CdS/SnO₂/verre

Épaisseur (nm) (CdS)	Voc (volt)	Jcc (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
10	1.4968	17.378410	91.03	22.80
20	1.4957	16.725265	91.01	22.77
40	1.4942	15.836310	91.04	21.54
50	1.4935	15.478800	91.06	21.05
70	1.4924	14.881318	91.07	20.23
100	1.4869	14.730410	91.12	19.96

Tableau 8: L'effet de l'épaisseur de la couche du ZnS sur les performances de la cellule solaire avec une structure Au/Spiro-OMeTAD /CH₃NH₃PbI₃/ZnS/SnO₂/verre.

Épaisseur (nm) (ZnS)	Voc (volt)	Jcc (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
10	1.5016	19.228130	91.26	26.36
20	1.5016	19.228608	91.26	26.36
40	1.5016	19.227070	91.26	26.36
50	1.5016	19.228500	91.26	26.34
70	1.5016	19.225533	91.26	26.34
100	1.5016	19.210055	91.26	26.33

D'après les résultats présentés dans le tableau 6. On note que les performances de la cellule restent pratiquement stables à 20.15% lorsqu'on utilise le TiO₂ en ETL. Donc on peut dire que l'épaisseur optimale de cette couche est environ de 20 nm.

Et pour les résultats de la couche CdS présentés dans le tableau 7, on remarque que l'épaisseur optimale de cette couche est environ de 20 nm.

Afin de déterminer l'épaisseur optimale de la couche de ZnS, nous analysons les résultats présentés dans le tableau 8 et nous remarquons que le rendement de la cellule reste pratiquement constant à 26.33%.

En revanche, le rendement le plus élevé est obtenu par la structure Au/Spiro-OMeTAD /CH₃NH₃PbI₃/ZnS/SnO₂/verre. Cette différence de rendement est obtenue grâce aux différentes caractéristiques du ZnS : non toxique, la bande interdite élargie et donc plus d'absorption de la lumière, énergie de liaison relativement élevée, indice de

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

réfraction élevé[10]. Les résultats sont représentés dans les figures 6,7 et 8 où nous allons résumer la variation des paramètres photovoltaïques en fonction de différents épaisseurs de TiO_2 , CdS et ZnS.

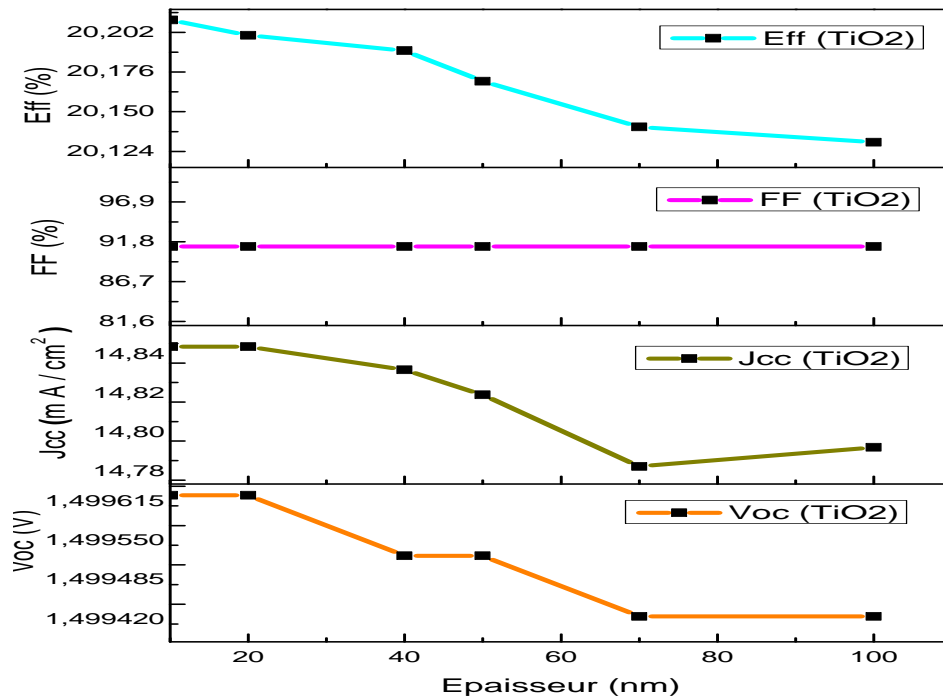


Figure 6 :Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de TiO_2 .

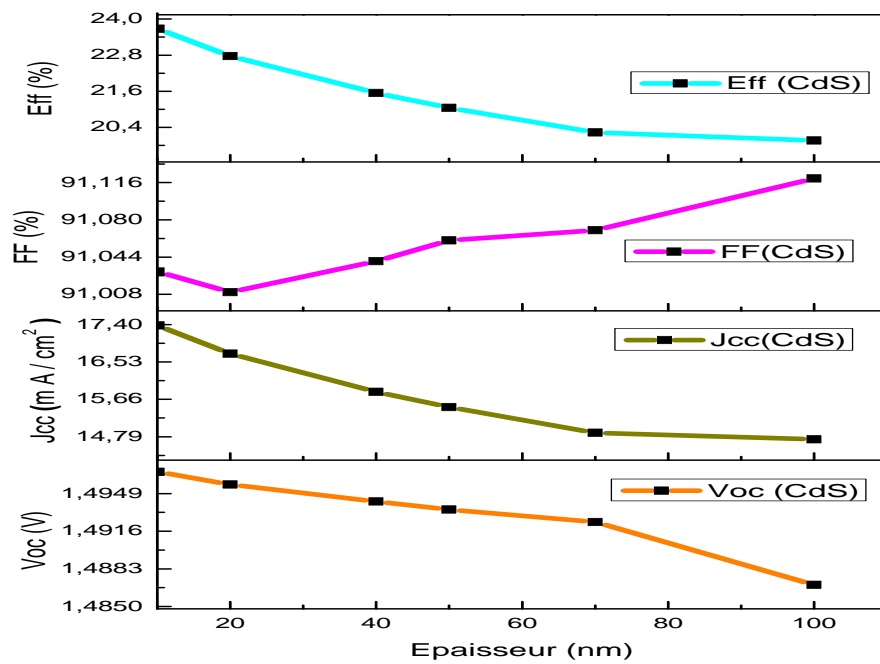


Figure 7: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de CdS.

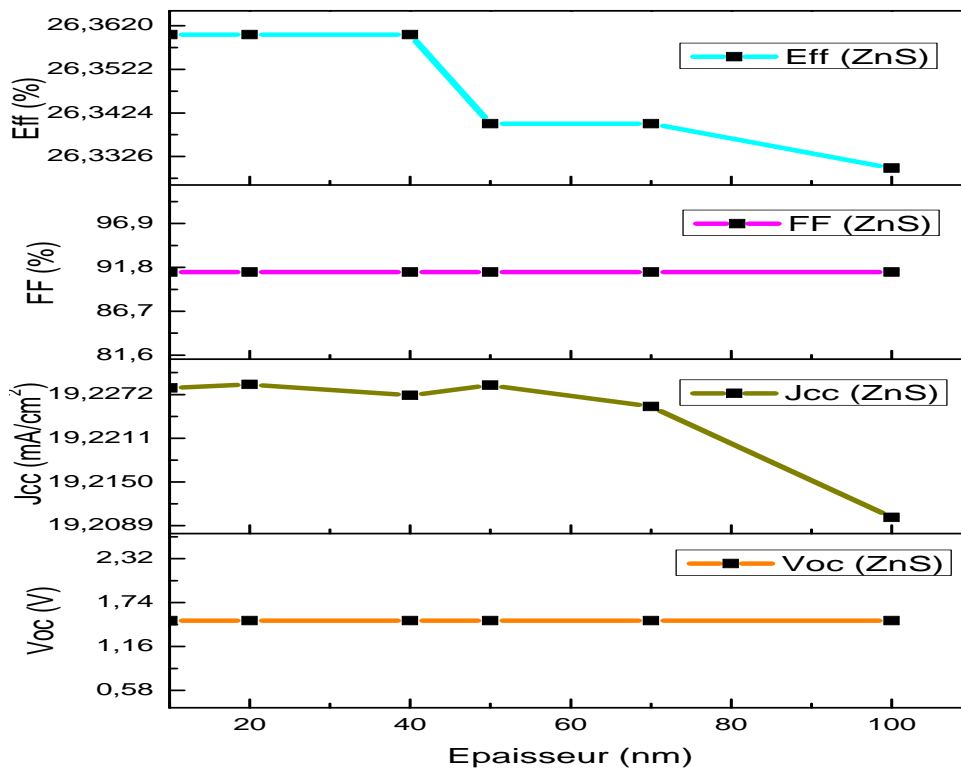


Figure 8: Variation des paramètres PV par changement d'épaisseur de ZnS.

Les résultats de la simulation de différents matériaux des caractéristiques J-V est illustré dans la Figure 9.

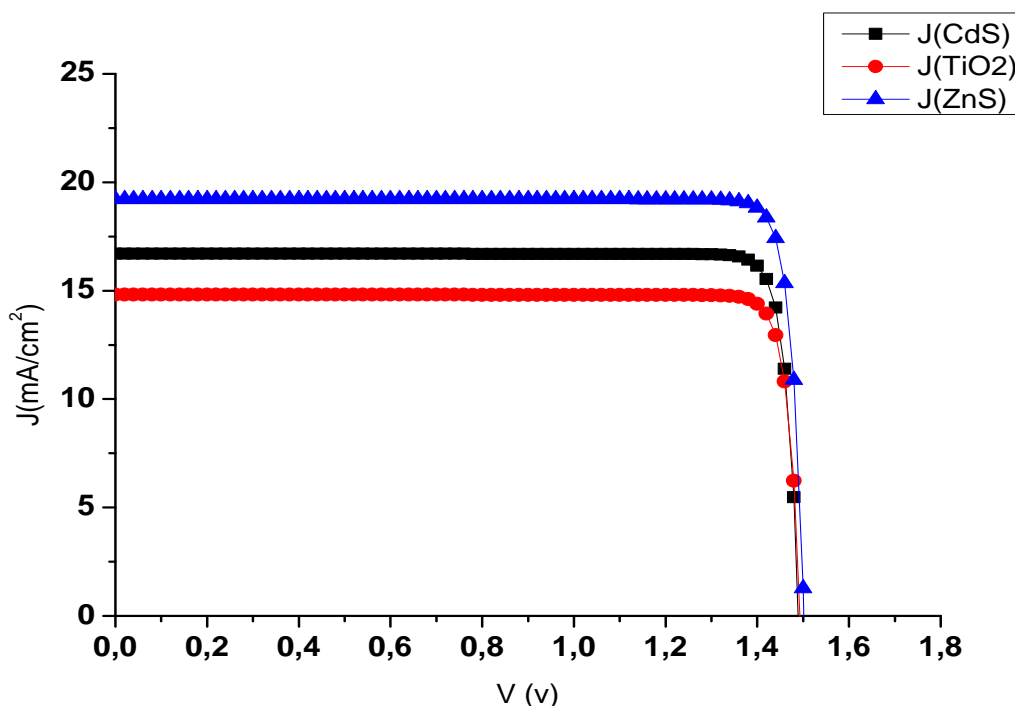


Figure 9: La courbe JV simulée pour différente ETL sur la cellule pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

5.3 Remplacement de la couche HTL spiro-OMeTAD par PEDOT : PSS:

Pour connaître l'effet du transfert des trous sur les performances de la cellule, nous remplaçons le spiro-OMeTAD par PEDOT:PSS (Poly (3,4-éthylène dioxythiophène) : Poly (styrène sulfonate)) comme indique la figure 10. Ainsi, nous allons comparer les résultats entre les deux structures de la cellule solaire. Les paramètres de ce matériau sont présentés précédemment dans le tableau 3.

Le choix de ce matériaux est basé sur ses avantages, comme, on peut citer qu'il possède une grande stabilité, une excellente transparence dans le spectre visible et une bonne conductivité électrique.

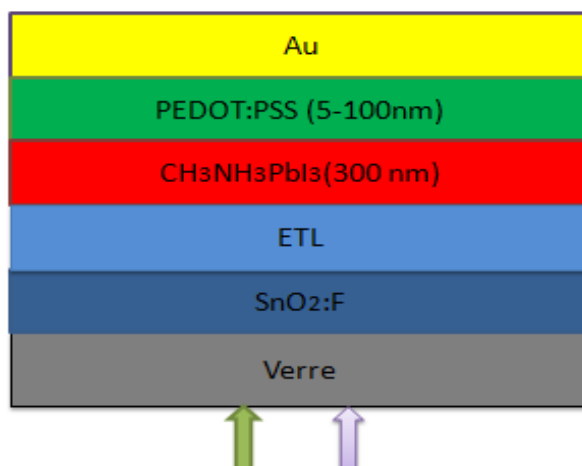


Figure 10: Cellule solaire pérovskite à structure Au/ PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/ETL/SnO₂/verre.

Le tableau 9 représente les résultats de la simulation en utilisant comme matériau de transfert de trous le PEDOT:PSS d'épaisseur variable de 5 nm à 100 nm et comme couche de ETL le TiO₂ d'épaisseur optimale égal à 20 nm. On a pris cet intervalle d'épaisseur de PEDOT : PSS parce que la couche PEDOT:PSS introduite dans ces cellules permet de lisser la surface, d'assurer une meilleure collecte des porteurs de charge à l'électrode ITO et aussi ainsi d'être un bon matériau transporteur de trous. le PEDOT :PSS [11].

Tableau 9: L'effet de l'épaisseur de la couche du PEDOT : PSS sur les performances de la cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/TiO₂/SnO₂/verre.

Épaisseur (nm) PEDOT : PSS	Voc (volt)	Jcc (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
5	1.4996	14.816357	91.30	20.19
10	1.4996	14.837695	91.28	21.21
20	1.4996	14.878874	91.25	21.26
30	1.4996	14.917617	91.21	21.30
50	1.4996	14.988438	91.14	20.38
70	1.4996	15.051230	91.09	20.05
100	1.4997	15.221389	90.85	19.62

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Le tableau 10 représente les résultats de la simulation en utilisant comme matériau de transfert de trous le PEDOT:PSS d'épaisseur variable de 5 nm à 100 nm et comme couche de ETL le CdS d'épaisseur optimale égal à 20 nm

Tableau10:L'effet l'épaisseur du PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/CdS/SnO₂/verre.

Épaisseur (nm) PEDOT : PSS	Voc (volt)	Jcc (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
5	1.4931	15.227974	91.17	20.73
10	1.4931	15.243883	91.16	20.75
20	1.4931	15.274747	91.14	20.79
30	1.4931	15.303947	91.12	20.82
50	1.4932	15.357570	91.08	20.79
70	1.4932	15.405464	91.04	19.74
100	1.4932	15.467984	90.99	19.01

Le tableau 11 représente les résultats de la simulation en utilisant comme matériau de transfert de trous le PEDOT:PSS d'épaisseur variable de 5 nm à 100 nm et comme couche de ETL le ZnS d'épaisseur optimale égal à 20 nm.

Tableau 11:L'effet du l'épaisseur PEDOT : PSS sur les paramètres de cellule solaire avec une structure Au/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/SnO₂/verre.

Épaisseur (nm) PEDOT : PSS	Voc (volt)	Jcc (mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
5	1.5016	19.206006	91.38	26.05
10	1.5016	19.215158	91.37	26.26
20	1.5016	19.233114	91.36	26.38
30	1.5017	19.250129	91.34	26.60
50	1.5068	18.509120	91.24	26.45
70	1.5068	18.573808	91.19	25.02
100	1.5068	18.655350	91.10	24.61

D'après ces résultats, nous remarquons qu'il y a une augmentation de rendement pour les trois structures. Où la structure de la cellule solaire à base de ZnS a le meilleur rendement de 26.6% pour une épaisseur de 30 nm de PEDOT : PSS.

Chapitre III : simulation de la couche ETL et HTL dans la cellule solaire pérovskite

Et aussi on remarque que l'épaisseur optimale de la couche PEDOT : PSS est égale à 30 nm pour les différentes structures étudiées.

la figure 11 présente les courbes de la variation des performances en fonction de l'épaisseur de PEDOT:PSS en chaque structure étudiées.

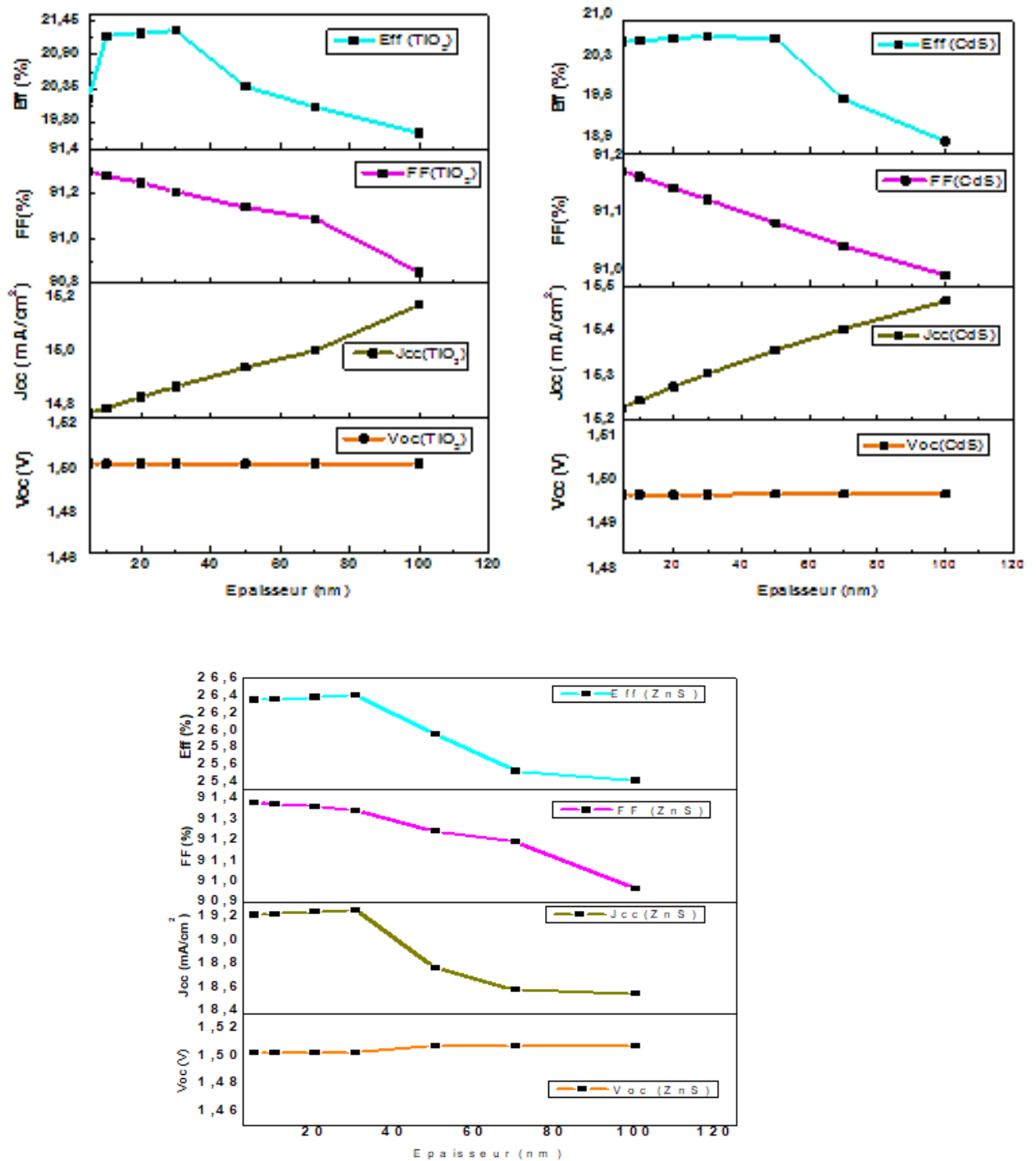


Figure 11: L'effet de l'épaisseur de PEDOT PSS sur les performances de différentes structures étudiées.

Le résultat de la simulation des caractéristiques J-V est illustré à la Figure 12.

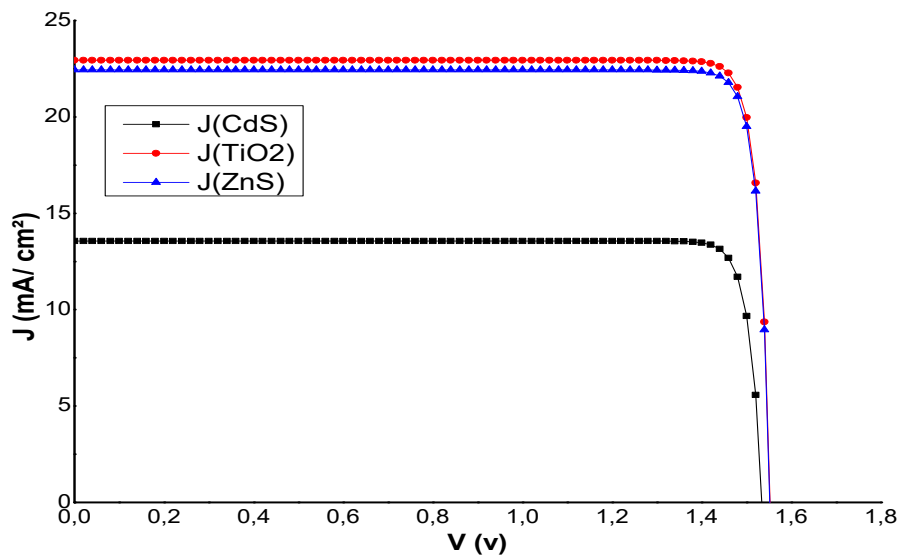


Figure 12: La courbe JV simulée pour différente HTL sur la cellule pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ et PEDOT PSS.

6 Conclusion :

Ce chapitre présente les résultats de la simulation de la cellule solaire pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. Où nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche absorbeur, et de la couche HTL et la couche ETL en utilisant des différents matériaux en HTL et ETL à l'aide du logiciel de simulation SCAPS-1D.

L'effet de l'épaisseur de l'absorbeur sur les propriétés de la cellule montre qu'il existe une épaisseur optimale environ 300 nm. De plus, la meilleure performance, dépassant 26%, a été atteinte pour une cellule solaire pérovskite en utilisant le ZnS en ETL et le PEDOT :PSS en HTL. En effet, Les simulations effectuées devraient être utiles pour l'amélioration du rendement des cellules solaires pérovskite.

7 Bibliographies :

- [1] « S. Khelifi et A. Belghachi "Le Rôle de la Couche Fenêtre dans les Performances d'une Cellule Solaire GaAs". Vol.7 ,2014 ».
- [2] « M. Burgelman, P. Nollet, and S. Degrave, "Modelling polycrystalline semiconductor solar cells," Thin Solid Films, vol. 361, pp. 527–532, 2000. »
- [3] « S. Degrave, M. Burgelman, and P. Nollet, "Modelling of polycrystalline thin film solar cells: new features in scaps version 2.3," in 3rd World Conference on Photovoltaic Energy Conversion, 2003. Proceedings of, vol. 1, pp. 487– 490. 2003»
- [4] « A. Meftah "Design of Perovskite Solar Cells" , p. 78. 2019»
- [5] «R. Wei " Modelling of Perovskite Solar Cells" p. 81.2018 »
- [6] « SCAPS manual most recent Marc Burgelman Koen Decock, Alex Niemegeers, Johan Verschraegen, Stefaan Degrave Version: 18-12-2020 ».
- [7] « KANOUN Ahmed-Ali "Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques "p237,2019».
- [8] «A. Husainat, W. Ali, P. Cofie, J. Attia, et J. Fuller," Simulation and Analysis of Methylammonium Lead Iodide", vol. 7, n° 2, p. 33, 2019»
- [9] « Tulay Aygan AtesinSajid BashirJingbo Louise Liu "EditorsNanostructured Materials for Next-Generation Energy Storage and ConversionPhotovoltaic and Solar Energy "p 229,2019. »
- [10] « Zaabar Amina "Dépôt de couches mince de ZnS dopées Al par la méthode de croissance en solution (SGT)"2013 ».
- [11] «Syham Kadri et Baboulla Nadia, "L'effet de l'épaisseur de la couche PEDOT:PSS sur le rendement d'une cellule solaire organique à base de P3HT/PCBM" , 2019. »

CONCLUSION GENERALE

Conclusion générale

Le travail présenté dans ce mémoire porte sur la modélisation des performances de cellules solaires pérovskite. Ces études ont été menées en simulation avec le logiciel SCAPS- 1D. Pour cela, nous avons commencé par présenter les différentes technologies des cellules PV et aussi les polymères conducteurs qui contribuent à la fabrication des cellules solaires, leur principe de fonctionnement et leur structure pour faciliter le processus de simulation. Puis, nous avons étudiés les performances de la cellule pérovskite en fonction de l'épaisseur de chaque couche de la cellule. Nous avons simulé, analysé et discuté le comportement des différentes structures de cellules solaires Au/ HTL / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ETL/ SnO_2 /verre où notre objectif était d'évaluer les performances de la cellule solaire en fonction de ETL et du HTL.

Alors que, dans un premier temps les performances de la cellule solaire ont été améliorées en remplaçant ETL (TiO_2 par du CdS puis par du ZnS). Tout d'abord, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante où nous avons montré que l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante est considérable, le rendement atteint sa valeur maximale pour une épaisseur de 300 nm. Dans la deuxième partie de cette simulation nous avons changé les épaisseurs de TiO_2 , CdS, ZnS en conservant l'épaisseur optimale de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (couche absorbante) et HTL (Spiro-OMeTAD) où nous avons obtenu les performances les plus élevées environ 26% pour la structure Au/Spiro-OMeTAD/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/ SnO_2 /verre. Dans la troisième partie de la simulation, nous avons présenté l'effet de la couche de trou où nous avons remplacé Spiro-OMeTAD (HTL) en PEDOT : PSS afin d'étudier l'effet de HTL sur la cellule, où nous avons constaté que l'épaisseur optimale de PEDOT : PSS est de 30 nm.

Résumé :

Dans ce mémoire nous évaluons et simulons les performances d'une cellule solaire pérovskite à base de plomb $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en remplaçant la couche de transport d'électron ETL et de trous HTL par d'autres matériaux en utilisant le logiciel SCAPS-1D.

Nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche d'absorption de pérovskite pour différentes structure tel que $\text{Au}/\text{HTL} / \text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{ETL}/\text{SnO}_2/\text{verre}$, où nous avons étudié l'effet de différents matériaux en ETL (CdS et ZnS et TiO_2) et l'effet de différents matériaux en HTL (PEDOT : PSS et Spiro-OMeTAD) sur les performances de la cellule solaire. Puis, nous avons présenté les résultats obtenus où le rendement le plus élevé est environ de 26%.

Mots clés : Cellule solaire pérovskite, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, Couche de transport d'électron, Couche de transport de trou, SCAPS-1D.

Abstract:

In this study, we evaluate and simulate the performance of a $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ lead-based perovskite solar cell through different materials in electron transport layer and holes transport layer using simulation software SCAPS-1D.

We studied the effect of perovskite adsorption layer thickness using different structure $\text{Au}/\text{HTL} / \text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{ETL}/\text{SnO}_2/\text{glass}$, where we studied the effect of the ETL (CdS, ZnS and TiO_2) and the effect of the HTL (PEDOT: PSS and Spiro-OMeTAD) on the cell performance. The highest performance reached 26%.

Keywords: perovskite solar cell, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, electron transport layer, hole transport layer, SCAPS-1D.

المخلص :

في هذه الدراسة ، نقوم بتقييم ومحاكاة أداء خلية بيروفسكايت الشمسية القائمة على الرصاص $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ من خلال مواد مختلفة في طبقة نقل الإلكترونات ونقل الثقوب باستخدام برنامج SCAPS-1D.

درسنا تأثير سماكة طبقة الامتصاص من البيروفسكايت لهياكل مختلفة $\text{Au} / \text{HTL} / \text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3 / \text{ETL} / \text{SnO}_2 / \text{verre}$ ، حيث درسنا تأثير مختلف مواد ETL (CdS , ZnS و TiO_2) وتأثير مختلف مواد HTL (PEDOT: PSS و Spiro-OMeTAD) على أداء الخلية الشمسية. ثم قدمنا النتائج التي تم الحصول عليها حيث بلغت أعلى مردودية حوالي 26%. الكلمات المفتاحية: خلية شمسية بيروفسكايت ، $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, طبقة نقل الإلكترون ، طبقة نقل الثقوب , SCAPS-1D

