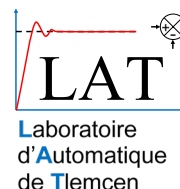




REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEEN



MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Computationnelle

Par :

Melle Abderrahmane Aicha

Sur le thème

**Modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT:PCBM
(Effet des pièges et de la température sur les performances de la cellule)**

Soutenue publiquement le 26/06/2019 devant le jury composé de :

Mr Abdelkrim MERAD	Professeur à l'Université de Tlemcen	Président
Mme Souhila BENYELLES	MCB à l'Université de Tlemcen	Encadreur
Mr Abdalkhalaq HADDAM	MCB à l'Université de Tlemcen	Examineur
Mr Abdelhak CHIKHAOUI	MCA à l'Université de Tlemcen	Examineur

*Laboratoire Automatique Tlemcen(LAT)
Tlemcen - Algérie*

Dédicaces

Je dédie ce travail :

Premièrement à notre défunt professeur Benouaz Tayeb qui

Nous a quitté il ya quelques temps, que Dieu ait son âme

On regrette vraiment Son absence.

Au meilleur homme au monde mon chère père Mohammed.

A la plus belle femme au monde ma chère maman Fatima.

A mes frères Ilyes, Anes

A ma sœur Hafsa

A mon chère et fidèle amie Souhila

A tout ma famille Abderrahmane et ma famille Benabdellah

A tout mes très chers amis

A tout mes camarades de promotion

A tout ce que connaisse et à tous ceux qui m'ont apporté leur aide

Abderrahmane Aicha

Remerciements

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

Avant tout, je remercie très fort mon Dieu ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail.

En préambule à ce mémoire, je souhaitais adresser mes remerciements les plus sincères à Mon Encadreur Madame Benyelles Souhila Maître de conférences à l'Université de Tlemcen, pour avoir accepté d'être l'encadreur de mémoire et pour son soutien ainsi que sa disponibilité et ses encouragements qui m'ont été très utiles pour mener à bien ce travail, je la remercie très profondément.

Je remercie également Monsieur Brahmi Badr eddine Nabil Maître de conférences à l'université de Tlemcen, pour sa grande disponibilité et ses précieux conseils.

Je remercie aussi Monsieur Merad Abdelkrim Professeur à l'université de Tlemcen pour l'honneur qu'il me fait en acceptant la présidence du jury.

Je remercie vivement :

Monsieur Chikhaoui Abdelhak Maître de conférences à l'université de Tlemcen.

Monsieur Abdelkhalaq Haddam Maître de conférences à l'université de Tlemcen.

Pour l'honneur qu'ils me font d'examiner ces travaux,

Je tiens à exprimer ma gratitude à tous mes enseignants et professeurs pour la formation qu'ils m'ont dispensé pendant toute mes années d'études.

Un grand remerciement à mes parents et mes frères et ma sœur pour leur soutien.

Je tiens à remercier tous mes amis qui m'ont aidé de loin ou de près dans la réalisation de ce travail et en particulier Souhila.

Enfin, j'adresse mes vives reconnaissances à tous étudiants de Master de ma promotion

Abderrahmane Aicha

Liste des figures

Figure1.1 : des petites molécules utilisées dans les cellules organiques.

Figure1.2 : des polymères conjugués utilisés dans les cellules organiques.

Figure1.3 : fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

Figure 1.4 : Fonctionnement d'une cellule solaire organique à base de mélange interpénétré.

Figure1. 5 : schéma des orbitales et liaisons de la molécule l'éthylène.

Figure 1.6 : structure de bandes des polymères conducteurs.

Figure1. 7 : structure de schottky.

Figure1. 8 : structure hétérojonction de type bicouche.

Figure1. 9 : structure d'une hétérojonction en volume (réseaux interpénétrés).

Figure1. 10 : Représentation d'une cellule organique ITO/Donneur : Accepteur/Al.

Figure1.11 : Caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque dans l'obscurité et sous éclairage.

Figure 1.12 : processus de dopage d'un polymère conducteur. (a) polymère conjugué non dopé, (b) polymère conjugué dopé.

Figure 2.1 : Schéma du modèle de réseau (NM), un réseau unidimensionnel de cellules unitaires.

Figure 2.2 : Schéma du modèle du milieu effectif (EMM)

Figure 2.3 : phénomène de conduction par saut.

Figure 2.4 : Types de transport par saut : intermoléculaire (flèche noire), intramoléculaire (flèche grise).

Figure 2.5 : Schéma énergétique d'un contact ohmique (a) avant contact. (b) après contact.

Figure 2.6 : paramètres photovoltaïques en fonction des concentrations des pièges.

Figure 2.7 : Le principe du dopage du matériau semi-conducteur.

Figure 2.8 : V_{co} en fonction de température pour différents intensités.

Figure 3.1 : Structure de la cellule solaire organique P3HT/PCBM.

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

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

Figure 3.4 : L'effet des densités des pièges sur la caractéristique $J-V$ de la cellule.

Figure 3.5 : le courant de court circuit en fonction des concentrations des pièges.

Figure 3.6 : La tension de circuit ouvert en fonction des concentrations des pièges.

Figure 3.7: Le rendement en fonction des concentrations des pièges.

Figure 3.8 : Le facteur de forme en fonction des concentrations des pièges.

Figure 3.9 : Le rendement de conversion en fonction de la section efficace de capture d'électrons et des trous.

Figure 3.10 : La tension de circuit ouvert en fonction de la section efficace de capture d'électrons et des trous.

Figure 3.11 : Le courant de court circuit en fonction de la section efficace de capture d'électrons et des trous.

Figure 3.12 : Le facteur de forme en fonction de la section efficace de capture d'électrons et des trous.

Figure 3.13 : Effet de la température sur la caractéristique $J-V$ de la cellule.

Figure 3.14 : La tension de circuit ouvert en fonction de la température.

Figure 3.15 : Le courant de court circuit en fonction de la température.

Figure 3.16 : Le rendement de conversion en fonction de température.

Figure 3.17 : Le facteur de forme en fonction de température.

Liste des symboles

PCBM : phenyl-C61- butyric acid methyl ester

P3HT : poly (3-hexylthiophene)

HOMO : Highest Occupied Molecular Orbital.

LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbital.

OSCs : Cellules solaires organiques.

$\vec{F}_{Coulomb}$: La force d'attraction de Coulomb entre deux charge électrique q_1 et q_2 .

I_{sc} : Le courant de court circuit.

V_{oc} : La tension en circuit ouvert.

FF : Le facteur de forme.

η : Le rendement de conversion d'énergie.

S : Surface de la cellule solaire.

ϕ : Flux incident.

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

μ : la mobilité des porteurs des charges.

SCLC : (Space Charge Limited Current).

(PPV) : Le poly phénylène-vinylène.

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

(EMM) : le modèle du milieu effectif.

(NM) : le modèle de réseau.

χ : l'affinité électronique.

ϵ_s : constante diélectrique.

q : la charge fondamentale

V : le potentiel électrostatique

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

R : le taux de recombinaison net des électrons et des trous.

G : le taux de génération dans la couche active du périphérique.

ϵ_0, ϵ_r : la permittivité du vide et du semi-conducteur.

N_D^+, N_A^- : sont les densités du donneur et accepteur ionisés.

ρ_t : est la densité de charge des défauts.

λ : longueurs d'onde du spectre.

α : la constante d'absorption optique.

ϕ_0 : est le flux de photons incident

(GDM) : Gaussienne Disorder Model.

δ : est la variance de la distribution

(SRH) : Modèle de Shockley Read Hall

K : le coefficient de recombinaison de Lanjevin.

n_i : Est la densité des porteurs de charge intrinsèque

q : la charge élémentaire de l'électron.

(r_c) : le rayon de coulomb

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

P_0, n_0 : Les concentrations des trous et d'électrons dans les semi-conducteurs massifs à l'équilibre.

v_{th} : La vitesse thermique

ϕ_B : La hauteur de barrière au niveau du contact.

H : représente le type de porteurs de charges.

c : représente les porteurs majoritaire ou minoritaire (Maj, Min).

$\phi(x)$: Le flux énergétique.

Q : la charge totale

C : la capacité de cellule

V : tension fournie par la cellule.

J : La densité de courant.

t : Le temps de transit des charges.

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

K : constante de Boltzmann

T : la température

E_g : L'énergie de gap

N_c, N_v : Les densités d'états effectifs pour les électrons et les trous

SCAPS : Solar Cell Capacitance Simulator one dimension

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

J_p, J_n Sont les densités des courants des électrons et des trous.

μ_n, μ_p Sont les mobilités des électrons et des trous.

ϕ_p : p-travail de sortie

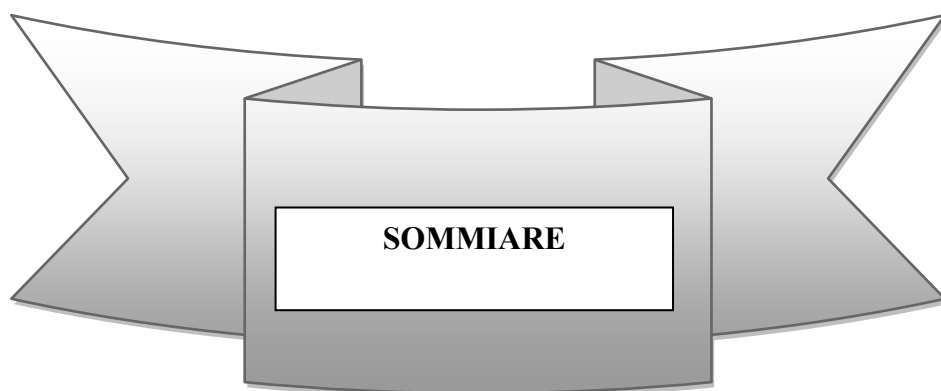
ϕ_n : n-travail de sortie

σ_n : Section efficace de capture d'électrons

σ_p : Section efficace de capture des trous

QE : le rendement quantique

N_t : est la densité totale des pièges



Sommaire

Introduction Générale

1

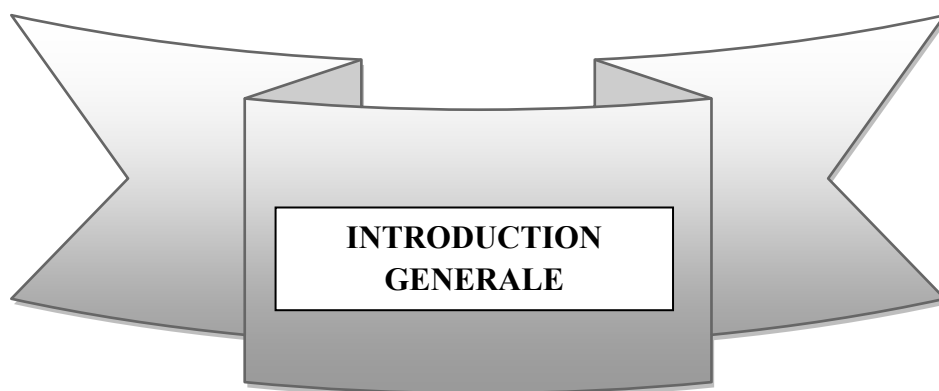
Chapitre 01 : Généralité sur les cellules solaires organiques

1.1 Introduction.....	4
1.2 Matériaux organiques actifs pour la conversion photovoltaïque.....	4
1.2.1 Les cellules PV à base de petites molécules.....	4
1.2.2 Les cellules PV à base de polymères.....	5
1.3 Principe de la conversion photovoltaïque.....	7
1.4 Bandes d'énergie.....	8
1.5 Notion d'exciton.....	10
1.6 Structure des cellules photovoltaïques organiques.....	11
1.6.1 Cellules de type Schottky.....	12
1.6.2 Cellules hétérojonction de type bicouche.....	12
1.6.3 Cellules hétérojonction de type réseaux interpénétrés.....	13
1.7 Etude de cellule composée d'un mélange interpénétré (P3HT/PCBM).....	13
1.8 Caractéristiques des cellules photovoltaïques.....	14
1.9 Transport de charges.....	16
1.9.1 Processus de dopage	16
1.9.2 Notion de mobilité des charges électriques.....	18
1.10 Recombinaison et pièges	18
Conclusion	19

Chapitre 02 : Théorie et modèles choisis pour la résolution du problème

2.1. Introduction.....	21
2.2. Modélisation des cellules solaires nano-structurées.....	21
2.2.1. Modèle de réseau (NM).....	21
2.2.2. Modèle du milieu effectif (EMM).....	22
2.3. Modélisation du transport des charges dans les cellules solaires organiques.....	24
2.3.1. Modèle de Drift-diffusion.....	24
2.3.2. Modèle de conduction par sauts.....	25
2.3.3. Modèle du désordre Gaussien.....	27
2.4. Modélisation de la recombinaison des charges.....	27
2.4.1. Modèle de Langevin.....	27
2.4.2. Modèle de Shockley-Read Hall (SRH).....	28
2.4.3. Recombinaison et injection des porteurs de charges aux interfaces.....	30
2.4.4. Interface métal/organique.....	30
2.5. Les paramètres limitant les performances de la cellule.....	32
2.5.1 Absorption.....	32
2.5.2 Diffusion excitonique.....	33
2.5.3 Recombinaison et piège.....	33
2.5.4 Dopage.....	

2.5.5. Mobilité.....	35
2.5.6 Température.....	37
2.6. Conclusion.....	38
Chapitre 03 : Simulation et résultats obtenus.....	40
3.1. Introduction.....	40
3.2. Simulation numérique des cellules solaires.....	40
3.3. Etude numérique des paramètres de la cellule P3HT :PCBM.....	41
3.4. Résultats obtenus.....	43
3.4.1. Caractéristique J-V de la cellule solaire P3HT/PCBM.	43
3.4.2. La réponse spectrale.....	44
3.4.3. Effet des pièges.....	45
3.4.4. Effet de Température.....	51
3.4.5. Conclusion.....	54
Conclusion Générale.....	56



Introduction générale

L'importance de l'énergie dans notre société est devenue évidente au cours de ces dernières années. Parmi les différentes énergies alternatives, l'énergie solaire a la propriété très souhaitable d'être essentiellement illimitée et de n'être ni polluante ni physiquement dangereuse [1].

L'utilisation de l'énergie solaire comme source d'énergie électrique est la meilleure solution pour obtenir l'énergie libre et sans danger pour l'environnement, la quantité d'énergie du soleil qui atteint la terre par journée ensoleillée est estimée à $100\text{W}/\text{cm}^2$ [2].

Parmi toutes les technologies permettant la production d'énergie renouvelable, notre travail se concentrera sur le domaine du solaire, et plus précisément sur la filière photovoltaïque

La filière photovoltaïque a connue des bonds et rebonds significatives en matière de performances et de coût ces dernières décennies puisqu'elle a profité d'une part des nouvelles connaissances acquises dans le domaine des matériaux, et d'autre part de la stimulation qu'elle provoque chez les chercheurs car elle leur pose un noble défi [3].

Les cellules solaires organiques sont une technologie photovoltaïque de troisième génération qui utilise des matériaux organiques pour récolter l'énergie de la lumière, à l'extérieur comme à l'intérieur.

La stabilité et la dégradation sont des problèmes courants dans les cellules solaires organiques. Cependant, pour résoudre les problèmes liés à la dégradation, nous avons besoin de connaître et comprendre les facteurs limitant le transport de charge dans ces systèmes. Dans ce travail, nous nous intéressons aux principaux paramètres influençant les performances des cellules solaires organiques à base de réseau interpénétré, qui sont généralement les défauts (pièges), le dopage et la température...

C'est dans la poursuite de cet objectif que nous exposons les différentes théories et les modèles qui décrivent les propriétés électriques et le transport de charges dans les matériaux composites à base de polymère. La simulation numérique est un alternatif support pour traiter l'effet de dégradation des cellules solaires, parmi les outils de simulation disponibles, SCAPS est utilisé pour la modélisation des cellules solaires à base des couches minces [3].

Dans le cas des cellules solaires organiques à base de mélange P3HT « poly (3 – hexylthiophène) » et le PCBM « phenyl-C61- butyric acid methyl ester », les rendements de conversion de 3.5 à 5% ont été rapportés [3].

Ce mémoire est divisé en trois chapitres. Le premier chapitre comporte des généralités sur les cellules solaires organiques et puis nous nous sommes intéressés aux matériaux organiques utilisés dans les cellules solaires organiques (OSC_s), ainsi qu'aux différentes structures des (OSC_s) et le principe de fonctionnement de ces dispositifs.

Dans le deuxième chapitre, nous détaillons les différentes théories utilisées pour la modélisation de la caractéristique courant-tension $J-V$ des cellules solaires nano-structurées, et aussi nous présentons les mécanismes de phénomène de transport et recombinaison de charges dans les cellules solaires organiques, et puis nous citons les paramètres limitant les performances de ces derniers.

Finalement dans le troisième chapitre, nous effectuerons des simulations des performances de cellules solaires organiques à base de P3HT/PCBM à l'aide de logiciel SCAPS, nous étudions les effets de la densité des concentrations des pièges et de la température sur les paramètres de la cellule étudié qui sont : le courant de court-circuit (J_{sc}), la tension de circuit-ouvert (V_{oc}), le rendement (η) et le facteur de forme FF .

Ainsi nous terminerons notre travail par une conclusion générale.

CHAPITRE I
GENERALITE SUR LES
CELLULES SOLAIRES
ORGANIQUES

I. Généralités sur les cellules solaires organiques.

I.1 Introduction :

Dans les cellules solaires organiques le processus moléculaires d'excitation, injection, transport de charge et de recombinaison dépassent le cadre de la physique des semi-conducteurs solides classiques.

Dans cette partie nous nous sommes intéressées aux matériaux organiques utilisés dans les cellules solaires organiques (OSC_s), ainsi qu'aux différentes structures des (OSC_s) et le principe de fonctionnement de ces dispositifs.

I.2 Matériaux organiques actifs pour la conversion photovoltaïque :

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

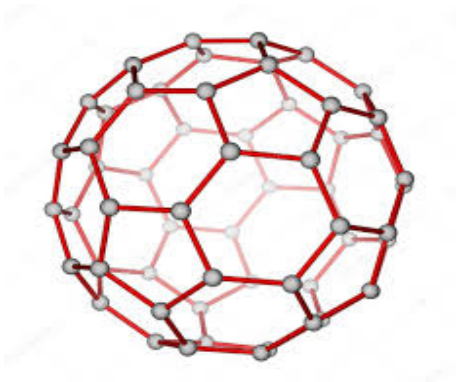
1.2.1 Cellules PV à base de petites molécules :

Si les toutes premières cellules solaires organiques développées en 1958, à la fin des années 70, des recherches ont été élaborées avec des petites molécules. Les résultats obtenus avec ces familles sont très faibles. On peut citer deux catégories : les petites molécules donneuses et accepteuses d'électrons [4] [3] [5].

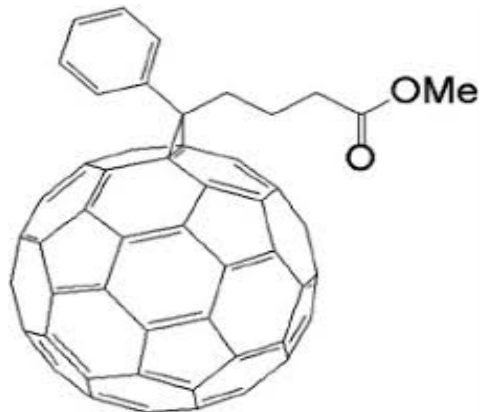
- En électronique organique les petites molécules accepteuses souvent utilisées sont : la molécule C60 est appelée fullerène qui est composée de 60 atomes de carbone et ses dérivés comme le PCBM dont la structure chimique a été modifiée pour le rendre soluble.
- Il ya aussi des petites molécules donneuses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

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

- Les molécules accepteuses d'électrons de type n :

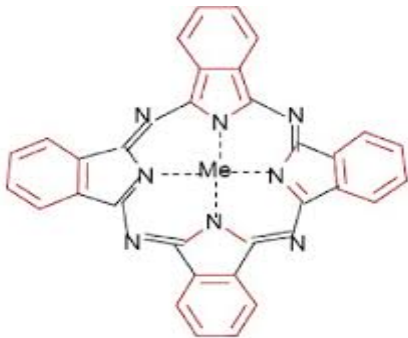


C60

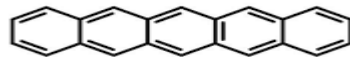


PCBM

- Les molécules donneuses d'électrons de type p :



Phtalocyanine de métal



Pentacène

Figure1.1: des petites molécules utilisées dans les cellules organiques [6].

1.2.2 Cellules à base de polymères conjugués :

Les cellules solaires organiques produisant l'électricité à partir de la lumière à l'aide de polymères semi-conducteurs, un polymère est caractérisé par l'alternance de liaisons simples

et doubles entre atome de carbone le long d'une chaîne. La majorité des polymères conjugués sont des donneurs d'électrons, on distingue trois familles des polymères conjugués [5] :

- **Les poly (p-phenylene vinylene) (PVV)** qui ont acquis un intérêt significatif au cours de ces dernières années, dont les dérivés les plus connus sont le poly [2-methoxy-5-(2'-ethyl-hexyloxy)-1,4-phenylene vinylene] (MEH-PPV) et le poly [2-methoxy-5-(3'7'-dimethyloctyloxy)-1-4phenylene vinylene] (MDMO-PPV) [4].
- **Les polythiophènes (PT)** résultants de la réaction de polymérisation du thiophène et qui sont des hétérocycles de soufre. Donc les dérivés les plus connus sont le **poly (3-hexylthiophene) (P3HT)** et le **poly (α -sexithiophene)** [7].
- **Les polyfluorènes** un polymère composé d'unités de fluorène très étudié pour ces propriétés électroluminescentes organiques, parmi lequel le poly [2,7-(9,9-dioctyl-fluorene)-alt-5,5-(4,8,7,8-di-2-thienyl-2,8, 18,38-benzothiadiazole)] (PFDTBT) est un dérivé.

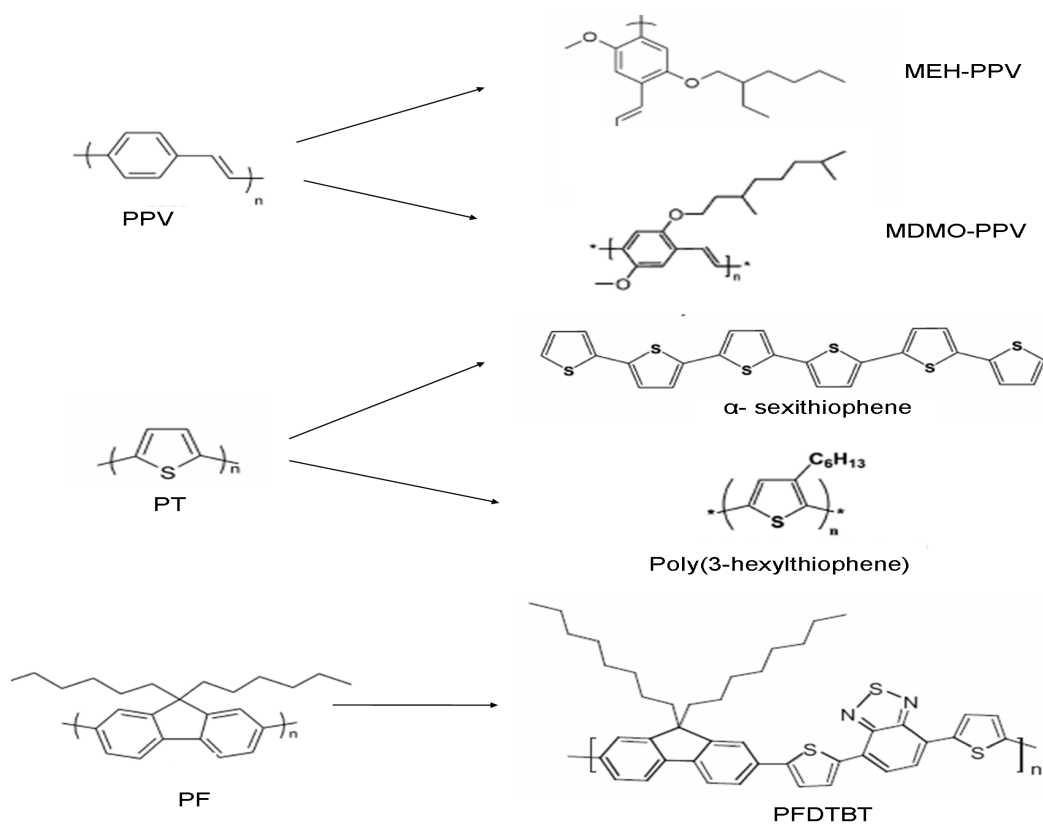


Figure1.2 : des polymères conjugués utilisés dans les cellules organiques [7].

1.3 Principe de la conversion photovoltaïque :

La possibilité de transformer directement l'énergie lumineuse, et en particulier le rayonnement solaire en énergie électrique est apparue en 1954 avec la découverte de l'effet photovoltaïque, à l'aide de dispositif composant de semi-conducteur appelé cellule solaire [8]

Nous détaillons cette transformation ces étapes :

✓ **L'absorption des photons et la création des excitons :**

L'absorption des photons dans un matériau semi-conducteur organique se traduit par l'apport d'énergie aux électrons de niveau HOMO vers le niveau LUMO, et la génération d'un trou dans la HOMO qui est liée à l'électron par l'attraction électrostatique, crée un couple électron-trou appelé : « exciton » [9].

✓ **Diffusion et la dissociation des excitons :**

Les excitons créés sont électriquement neutres, les excitons diffusent par saut d'une molécule à une autre vers un contact ou une interface entre un matériau « donneur d'électrons » et un autre « accepteur d'électrons » où ces deux matériaux possèdent des niveaux énergétiques différents, induisant un champ électrique local, de ce fait la dissociation de l'exciton s'effectue à l'interface de ces deux matériaux [9].

✓ **Transport et collecte des charges par les électrodes :**

La dernière étape de la conversion photovoltaïque consiste à ramener les charges électriques jusqu'aux électrodes (électrons sur la cathode et les trous sur l'anode), ce transport est assuré par le donneur d'électrons pour les trous et par l'accepteur d'électrons pour les électrons, et la collecte des porteurs de charges se fait au niveau des deux électrodes [10].

Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque est détailler dans la Figure 3. La conversion lumière/électricité se produit exclusivement dans la couche active de la cellule solaire.

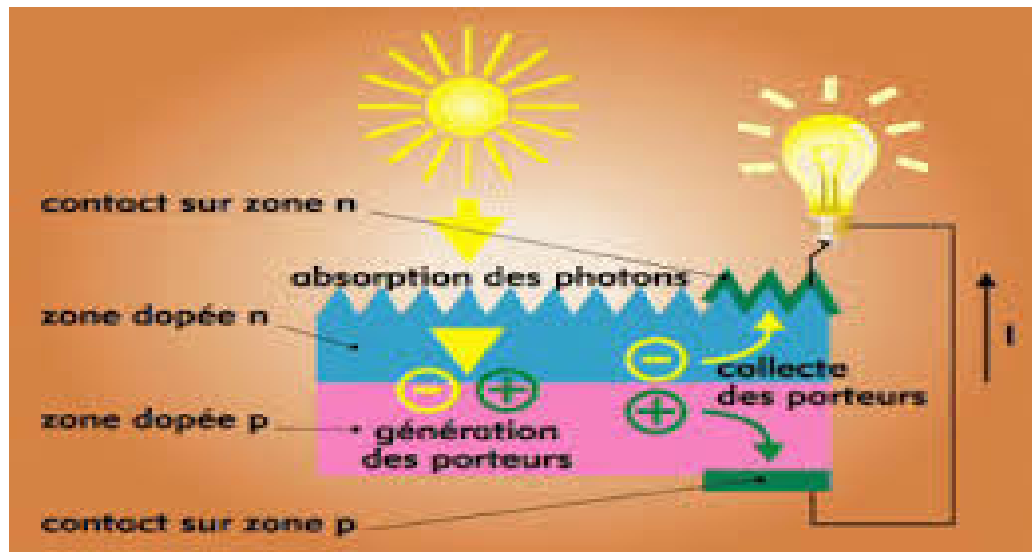


Figure1.3 : fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [8].

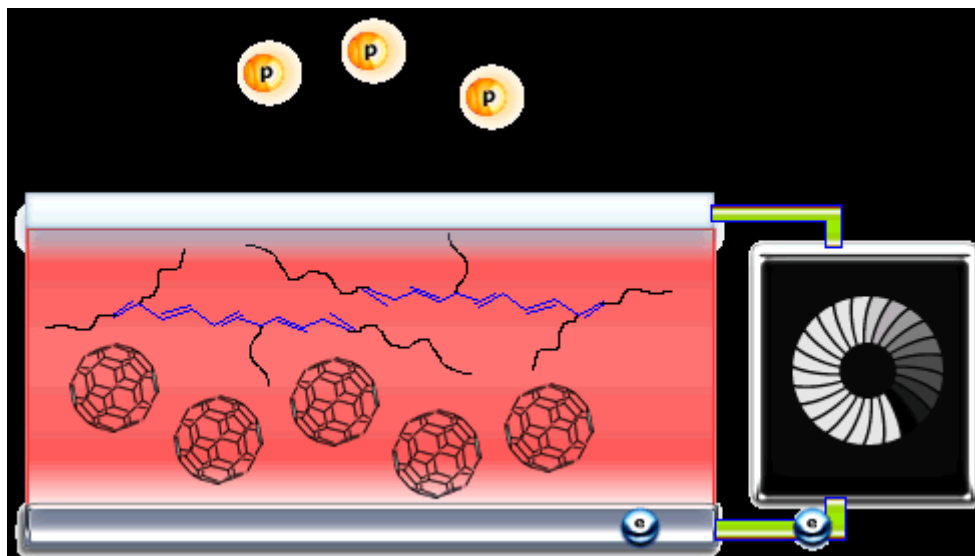


Figure 1.4 : Fonctionnement d'une cellule solaire organique à base de mélange interpénétré [3].

1.4 Bandes d'énergie :

Le comportement électrique des semi-conducteurs est généralement modélisé en physique quantique des solides, à l'aide de la théorie des bandes d'énergie [11].

Dans cette partie, nous allons décrire la formation des bandes d'énergie dans les semi-conducteurs organique [5].

Les semi-conducteurs organiques sont des matériaux essentiellement constitués d'atome de carbone, d'hydrogène, d'oxygène, d'azote et de soufre. En générale, ils peuvent être classés en deux catégories : les petites molécules et les polymères, l'atome de carbone est l'élément de base des semi-conducteurs organique. Il est donc important d'explicitier sa structure électronique. Cet élément, situé dans la colonne IV A du tableau périodique, à l'état fondamental possède une configuration électronique $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^2$. Pour les petites molécules, on prenant l'exemple de la molécule de l'éthylène [12], l'atome de carbone possède quatre électrons de valence, qui se répartissent entre l'orbitale atomique 2s et les trois orbitales atomique 2p. Une liaison simple entre deux atomes de carbone résulte du recouvrement d'une des orbitaux hybrides sp^3 de chaque atome de carbone. Ces liaisons (de type σ) assurent la cohésion du squelette du polymère car elles sont très stables. Par conséquent, les électrons ne peuvent guère se déplacer, et un matériau possédant ce type de liaison est généralement isolant. Lorsque deux atomes de carbone sont reliés par un double liaison, l'atome de carbone est dit d'hybridation sp^2 (carbone trigonal) : il possède 4 électrons de valence, mais n'a que 3 voisins. Ainsi ces électrons appelé électrons π , se situe sur un orbitale atomique p_z qui pointe perpendiculaire aux orbitales hybrides sp . Le recouvrement de deux orbitales p_z des deux carbones voisins, doublement liés, forme une orbitale moléculaire π (liaison π), la figure 1.5 représenter les orbitales et liaisons de cette molécule (l'éthylène) [13].

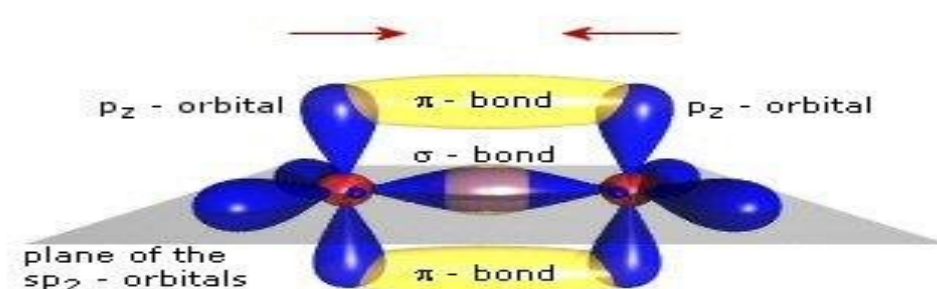


Figure1. 5 : schéma des orbitales et liaisons de la molécule l'éthylène [12].

Ensuite, pour le cas des polymères conjugués sont décrits par un modèle de bandes analogue à celui des semi-conducteurs inorganiques. En effet, les orbitales moléculaires issues de l'association de deux orbitales atomiques, peuvent avoir deux niveaux d'énergie. La bande d'énergie remplie la plus élevée en énergie est appelée bande de valence. Dans ce cas on parle plutôt de l'orbitale moléculaire la plus haute des états de basse énergie appelée HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital). La première bande permise au-delà de la bande interdite est appelée bande de conduction, ou l'orbitale moléculaire la plus basse des états de haute énergie appelée LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital). L'énergie nécessaire pour amener un électron du haut de la HOMO vers le bas de la LUMO est communément appelé gap du polymère. La valeur énergétique de ce gap permet de différencier un isolant d'un conducteur, les polymères conducteurs ont un gap relativement large « par exemple de l'ordre de 3 eV pour le polyfluorène » Ils sont donc naturellement isolant. Mais, comme nous l'avons dit précédemment les orbitales π permettent le déplacement des électrons et des trous entre molécules, cet figure représenter La structure de bandes d'énergie des polymères conducteurs [5].



Figure 1.6 : structure de bandes des polymères conducteurs [3].

1.5 Notion d'exciton :

Le concept d'excitons a été proposé pour la première fois par Yakov Frenkel en 1931, quand il a décrit l'excitation des atomes d'un réseau dans un isolant.

Lorsqu'une molécule organique est soumise à une excitation lumineuse, elle peut absorber un photon. La molécule, initialement dans un état d'énergie électronique fondamentale, passe alors dans un état électronique d'énergie supérieure dit : « excité » par l'absorption d'un photon, une paire électron-trou est générée fortement liée appelé « exciton ». Ce processus d'absorption est efficace lorsque l'énergie d'un photon est proche de l'écart entre les niveaux d'énergie de l'état fondamentale et de l'état excité. Une telle excitation représente le passage d'un électron de l'état fondamentale (HOMO) à un orbital d'énergie supérieure (LUMO) [14].

La particularité des semi-conducteurs organiques est que la force d'attraction de Coulomb entre deux charges électriques q_1 et q_2 est donnée par la relation suivante :

$$\vec{F}_{Coulomb} = \frac{q_2 q_1 \vec{r}}{4\pi\epsilon\epsilon_0 r^3} \quad (1)$$

Or dans les matériaux organiques la valeur de la constante diélectrique ϵ est faible ce qui confirme que la force d'attraction de Coulomb entre les deux charges électriques est élevée [15].

Donc il existe deux types d'excitons [3] :

- Les excitons de G. H. Wannier qui font référence à une paire électron-trou liée par une interaction faible.
- Les excitons de Frenkel : nommé d'après Yakov Frenkel, qui font référence à une paire électron-trou fortement liée

On considère que dans les matériaux organiques les excitons sont de la forme des excitons de Frenkel.

1.6 Structure des cellules photovoltaïques organiques :

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base des composés organiques connaissent un développement considérable, les cellules photovoltaïques sont des dispositifs électroniques réalisées à l'aide des composants semi-conducteurs qui possèdent la particularité de produire l'électricité [16] [17].

Donc, les cellules organiques peuvent être de plusieurs types :

- **Les cellules de type Schottky :**

Appelées aussi structure de monocouche, ce type de cellule utilise un semi-conducteur de type p (ou n) pris en sandwich entre électrodes de métal, la zone active pour la conversion photovoltaïque se situe à l'interface entre une des électrodes métalliques et le semi-conducteur [17].

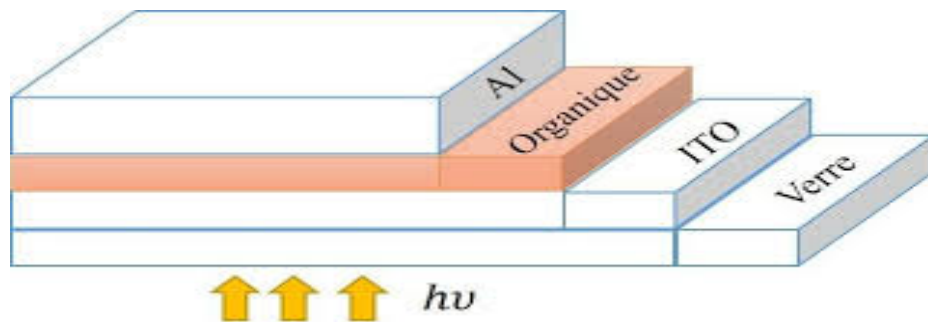


Figure 1.7 : structure de schottky [18].

- **Les cellules hétérojonction de type bicouche :**

Structure bicouche a été étudiée dès les années 1990 avec des rendements inférieurs à 0.05% , cette structure composée de deux semi-conducteurs organiques (donneur (p) et accepteur (n)) [19], sont mis en contact formant une jonction p-n, la zone active se trouve à l'interface entre les semi-conducteurs [17].

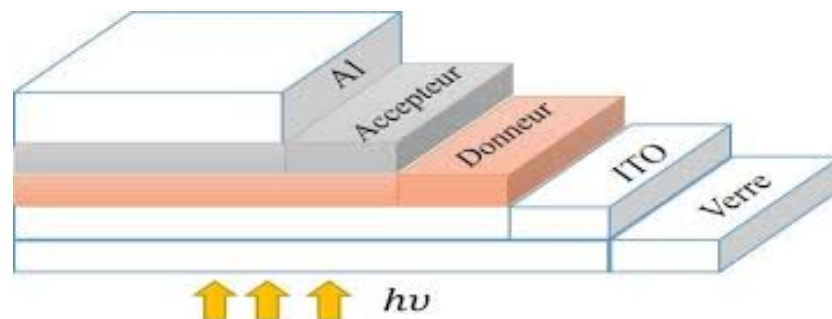


Figure1.8 : structure hétérojonction de type bicouche [20].

- **Les cellules hétérojonction en vrac de type réseaux interpénétrés :**

Appelée aussi structure hétérojonction en volume, il s'agit d'un mélange en volume de deux semi-conducteurs organiques de nature différente entre deux électrodes, le principale avantage de cette structure est que le mélange des deux matériaux (p : n) permet de multiplier les zones interfaciales entre eux et de réduire ainsi les problèmes de pertes par recombinaison des excitons photogénérés loin de l'interface [19].

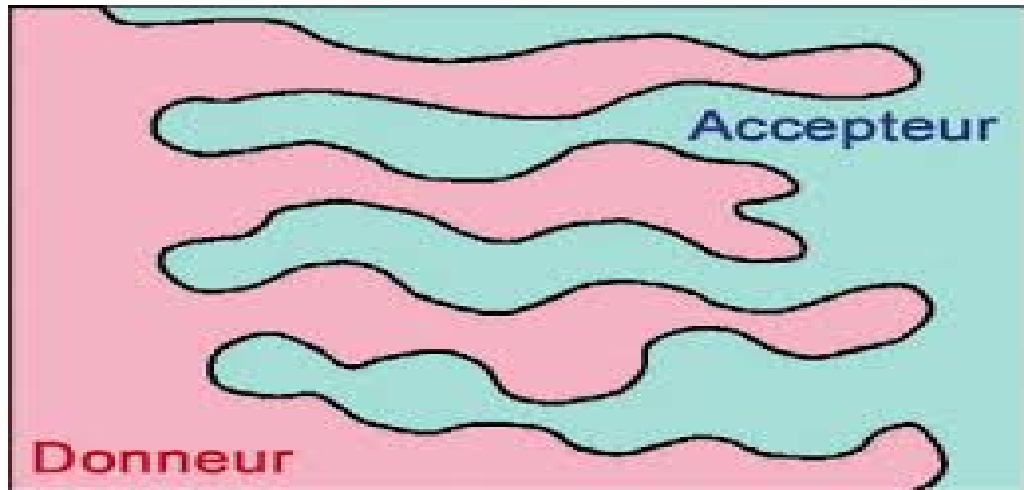


Figure 1.9 : structure d'une hétérojonction en volume (réseaux interpénétrés)

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

En pratique, ces cellules sont réalisées par mélange en solution de deux types de matériaux semi-conducteurs organiques, un donneur d'électrons de type p et un accepteur d'électrons de type n, déposée entre deux électrodes, ce qui permet d'augmenter le nombre d'excitons dissociés, il faut toutefois signaler que cette découverte est directement corrélée à la mise en solution de PCBM [21].

Dans la structure à hétérojonction en volume, la multiplication des interfaces entre le donneur et l'accepteur permet la dissociation des excitons dans l'ensemble du volume de la couche active, alors que dans le cas des structure bicouches une seule interface plane intervient entre le donneur et l'accepteur. L'intérêt majeur de l'utilisation des mélanges est d'augmenter la surface de contact entre les matériaux (donneur et accepteur). L'utilisation d'un film mince

composé d'un mélange (donneur : accepteur) en volume a permis d'améliorer significativement les performances des cellules photovoltaïques organiques [19].

Les cellules à base des petites molécules comme le C60 mélangé avec un polymère ont été réalisées par G. Yu et al. Par la suite de nombreux travaux se sont portés sur les mélanges à base de polymère et fullerène [22].

Le principale avantage de cette structure est que le mélange (donneur : accepteur) permet de réduire les problèmes de pertes par recombinaison des excitons photogénérés [3].

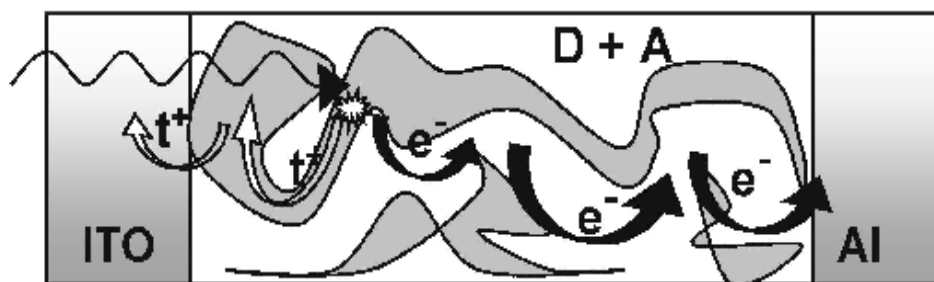


Figure1.10 : Représentation d'une cellule organique ITO/Donneur : Accepteur/Al.

1.8 Caractéristiques des cellules photovoltaïques :

Le comportement de la cellule solaire est examiné à travers les quatre paramètres électriques (I_{sc} , V_{oc} , FF , η) avec : I_{sc} représente le courant de court circuit, V_{oc} est la tension en circuit ouvert, FF le facteur de forme et η le rendement de conversion d'énergie [1], ces paramètres extraits des caractéristiques courant – tension, permettent de comparer différentes cellules éclairées dans les conditions identiques, et aussi sont habituellement employés pour caractériser les performances de la cellule solaire [24].

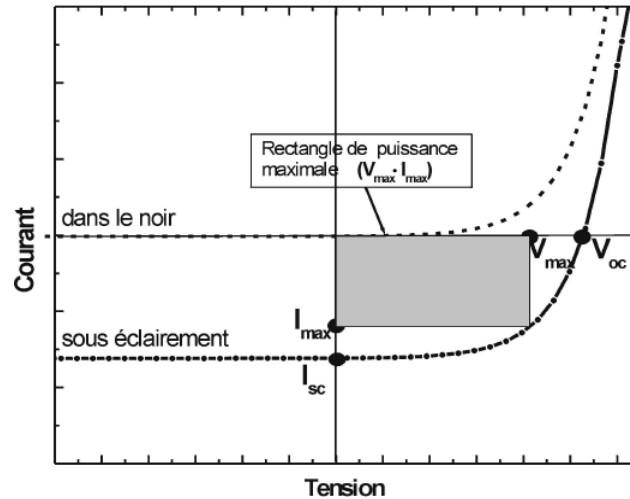


Figure 1.11 : Caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque dans l'obscurité et sous éclairage [3].

- ❖ **Le courant de court circuit (I_{sc}):** exprimé en mA, il s'agit du courant obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule, il est proportionnel à l'éclairement et dépend principalement de la mobilité des porteurs des charges [24].
- ❖ **La tension en circuit ouvert (V_{oc})** exprimé en volts, elle représente le maximum de tension aux bornes de la cellule solaire [1], pour un courant nul, elle dépend de la barrière d'énergie et la température et varie peu avec l'intensité lumineuse [24]. Et aussi dépend de la différence d'énergie entre la HOMO du donneur et la LUMO de l'accepteur [25].
- ❖ **Le facteur de forme (FF) :** il permet de juger la qualité d'une cellule photovoltaïque, il est défini comme le rapport entre le point de puissance maximale et le produit courant de court circuit et la tension en circuit ouvert [24][25], il est défini par la relation suivante [2]:

$$FF = \frac{I_m \cdot V_m}{I_{sc} \cdot V_{oc}} = \frac{P_m}{I_{sc} \cdot V_{oc}} \quad (2)$$

- ❖ **Le rendement de conversion d'énergie (η) :** le rendement de conversion est le paramètre le plus important dans la cellule solaire [23], nous pouvons définir le rendement d'une cellule photovoltaïque comme le quotient de la puissance maximale et de la puissance lumineuse reçue par la cellule [24][25].

$$\eta = \frac{I_m \cdot V_m}{\phi S} \quad (3)$$

Avec :

S : Surface de la cellule solaire.

ϕ : Flux incident.

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

1.9 Transport de charges :

Dans les composants électroniques, la mobilité des porteurs est le paramètre permettant de caractériser le transport de charge, il ya essentiellement deux types de transport de charges : le transport en bandes, et le transport par saut (hopping). Le modèle de transport observé dans les semi-conducteurs inorganiques et les métaux est rarement observé dans les semi-conducteurs organiques du fait des nombreux défauts de conjugaison et du couplage électron-phonon, le transport de charge dans les matériaux semi-conducteurs organiques se fait par saut successif ou hopping, le principe de ce modèle est qu'une charge localisée doit « sauter » d'un site à l'autre, dans ce modèle les porteurs de charge se déplacent par effet tunnel entre les états localisés dans le gap. Ce transport peut se faire le long de la chaîne conjuguée (intramoléculaire) [12] [21] [22] [26].

1.9.1 Processus de dopage :

Le principe du dopage des semi-conducteurs classiques (inorganiques) consiste à introduire des impuretés donneuses (dopage de type n), ou accepteurs (dopage de type p) dans le matériau par substitution des atomes d'origine. On parle de dopage de polymères, par analogie avec le dopage des semi-conducteurs inorganiques, même si le processus chimique et le phénomène physique engendré sont très différents [27].

Le dopage des polymères conjugués est une véritable réaction d'oxydoréduction du polymère, il consiste à introduire, par voie électrochimique ou chimique, des espèces accepteuses (dopage de type p réalisé par des oxydants) ou donneuses d'électrons (dopage de

type n réalisé par des réducteurs) au voisinage des chaînes macromoléculaires conjuguées [28].

L'introduction de contre ions permet d'assurer l'électroneutralité de l'ensemble. Le polymère est ainsi transformé en un sel constitué de la chaîne polymère chargée (positivement ou négativement) et des contre-ions. Ce sont les charges électriques apparues sur la chaîne plus exactement les porteurs de charges libres (électrons ou trous) qui sont à l'origine des propriétés conductrices du polymère. Le dopage de type n est bien moins courant que le dopage de type p. En effet, l'atmosphère terrestre se présente comme un environnement oxydant car riche en oxygène [28].

Le dopage peut s'effectuer de différentes façons, en particulier chimique ou électrochimique.

La figure 12 représente le processus de dopage d'un polymère conducteur (a) polymère conjugué non dopé, (b) polymère conjugué dopé, les valeurs de dopage des polymères conducteurs peuvent aller jusqu'à une impureté dopante pour 3 unités monomères, un tel dopage permet d'augmenter considérablement la conductivité pour atteindre des valeurs comparables à celle des métaux [29].

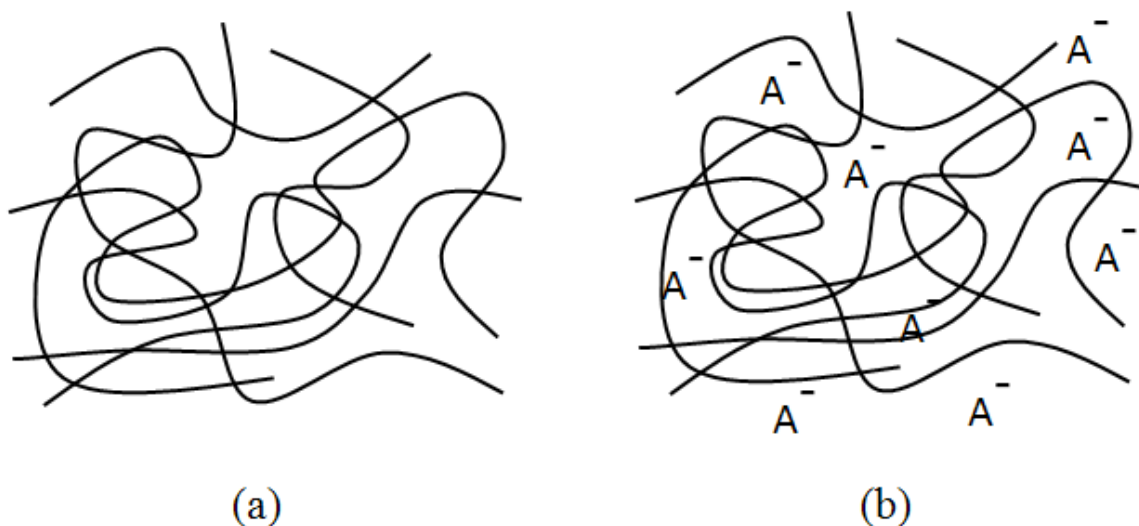


Figure1. 12 : processus de dopage d'un polymère conducteur. (a) polymère conjugué non dopé, (b) polymère conjugué dopé [30].

1.9.2 Notion de mobilité des charges électriques :

Les deux processus de transport, l'extraction et la recombinaison des porteurs des charges sont régis par la mobilité, et aussi les propriétés électriques des matériaux semi-conducteurs organiques dépendent de la mobilité des charges électriques. La mobilité des porteurs des charges notée μ est la vitesse de déplacement des porteurs de charge sous l'action du champ électrique, la mobilité est étroitement liée à la conductivité électrique par la relation $\sigma = ne\mu$ avec : n est la densité de porteurs des charges, e est la charge des porteurs [3]

Les travaux ayant étudié, l'effet de la mobilité des porteurs des charges sur les performances des cellules solaires organiques à base de mélange interpénétré (donneur : accepteur), ont alors montré que la valeur optimale pour la mobilité des électrons et des trous nécessaire pour obtenir une efficacité maximale du dispositif et de l'ordre $10^{-3} - 10^{-1} \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$.

Dans les réseaux interpénétrés, la mobilité des porteurs de charges est affectée par la densité de pièges ou de défauts dans les matériaux et par la taille des domaines formés par le donneur et l'accepteur, la mobilité des trous dans les polymères conjugués est généralement plus faible que celle des électrons dans les fullerènes [5].

1.10 Recombinaison et pièges :

Le processus de recombinaison suppose que le système soit initialement hors d'équilibre, ce qui peut être obtenu soit par excitation par un courant électrique conduisant à un phénomène de claquage pour l'électroluminescence, soit par excitation optique par des photons d'énergie supérieure au gap pour la photoluminescence, soit un faisceau d'électrons pour la cathodoluminescence ou la recombinaison bimoléculaire (un électron d'un exciton se recombine avec un trou appartenant à un autre exciton...) alors que d'autres peuvent se produire pendant le transport de charges (pièges et SCLC (Space Charge Limited Current)) [3].

- **Piégeage :**

Pour le cas des polymères, l'origine des pièges peut être attribuée aux impuretés, aux défauts sur la chaîne des polymères ou à la présence de l'oxygène, dans le poly phénylène-vinylène (PPV) la réaction de l'oxygène avec le groupe vinylène conduit à la formation d'un groupe

carbonyle, ce groupe possède une affinité électronique élevée que le rend favorable à accepter un électron d'un exciton par conséquence entraine une dissociation inefficace de l'exciton.

- **Recombinaison en surface :**

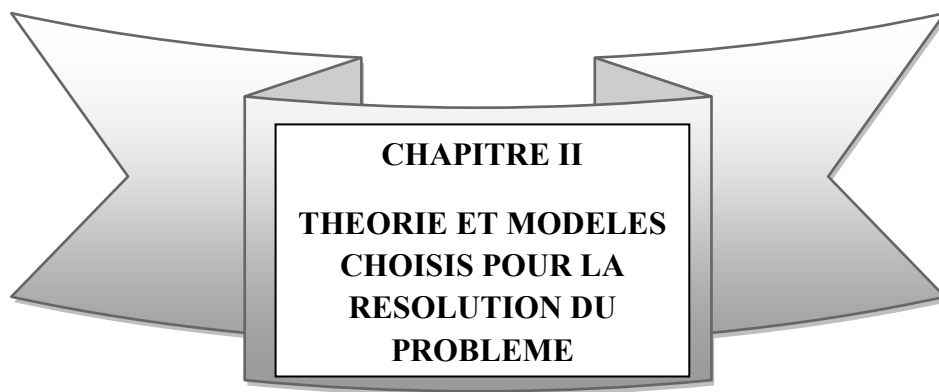
Les défauts ou les impuretés à l'intérieur ou à la surface du matériau semi-conducteur provoquent le processus de recombinaison. Etant donné que la surface de la cellule solaire constitue une sévère perturbation du réseau cristallin, les surfaces de ce dernier sont un site de recombinaison particulièrement élevé, les taux de recombinaison élevé dans le voisinage d'une surface vide cette région de porteurs minoritaires. Par conséquent, le taux de recombinaison en surface est limité par la vitesse à laquelle les porteurs minoritaires se déplacent vers la surface. Un paramètre appelé « vitesse de recombinaison en surface », en unités de **cm/s**, est utilisé pour spécifier la recombinaison à la surface [5].

1.11 Conclusion :

L'utilisation des matériaux semi-conducteurs organiques est d'un potentiel de développement très important dans la recherche de module photovoltaïque à coût relativement bas pour la production d'électricité. Au contraire aux cellules inorganiques.

Dans ce chapitre, nous avons donné quelques généralités sur les cellules solaires organiques, leurs paramètres électriques, leurs différentes structures ainsi nous nous intéressés aux cellules solaire organique en réseau interpénétré.

Dans le prochain chapitre, nous avons présenté les mécanismes de transport de charges ainsi que quelques théorie et modèles choisis pour la résolution du problème.



2. Théorie et modèles choisis pour la résolution du problème

2.1 Introduction :

Les cellules solaires organiques présentent de nombreux avantages, si aujourd'hui les rendements obtenus avec les cellules solaires organiques sont loin de concurrencer les cellules solaires inorganiques, l'accélération des recherches et des innovations pourrait rapidement rendre cette filière viable [5].

Dans ce chapitre, nous détaillons les différentes théories utilisées pour la modélisation de la caractéristique courant-tension $J-V$ des cellules solaires nano-structurées, et aussi nous présentons les mécanismes de phénomène de transport et recombinaison de charges dans les cellules solaires organiques, et puis nous citons les paramètres limitant les performances de ces derniers.

2.2 Modélisation des cellules solaires nano-structurées (organiques) :

Les nanostructures sont caractérisées par des propriétés nouvelles et intéressantes qui peuvent être tout à fait différentes de celles du matériau massif, et aussi une cellule solaire est classiquement constituée d'un semi-conducteur de type n et d'un semi-conducteur de type p un photon est absorbé créant une paire électron-trous (avec ou sans la formation d'un exciton comme une étape intermédiaire). Pour la modélisation des cellules solaires nano-structurées nous présentons des différents modèles. Tout d'abord nous décrivons deux modèles : le modèle de réseau (NM) et le modèle du milieu effectif (EMM) que nous avons choisi dans notre travail, il est montré que les deux modèles peuvent décrire la même structure physique [31].

❖ Modèle de réseau (NM) :

Dans ce modèle, nous découplons les effets à l'échelle microscopique (nm) et macroscopique (μm).

A l'échelle microscopique (nm), la géométrie complexe nanoporeuse en trois dimensions de deux réseaux interpénétrés (accepteur / donneur), est simplifiée en une disposition quasi périodique à l'échelle nanométrique d'un matériau semi-conducteur de type n et un semi-conducteur de type p, formant une « cellule unitaire » [3].

A l'échelle macroscopique (μm), nous simplifions les deux réseaux interpénétrés à un réseau électrique. Dans une vraie cellule solaire nano-structurée à l'état solide, un réseau tridimensionnel de type n établit un contact électrique avec une électrode, le réseau de type p forme un réseau complémentaire qui établit un contact avec l'électrode opposée. Pour que le modèle reste gérable, nous simplifions les deux réseaux à une dimension [32].

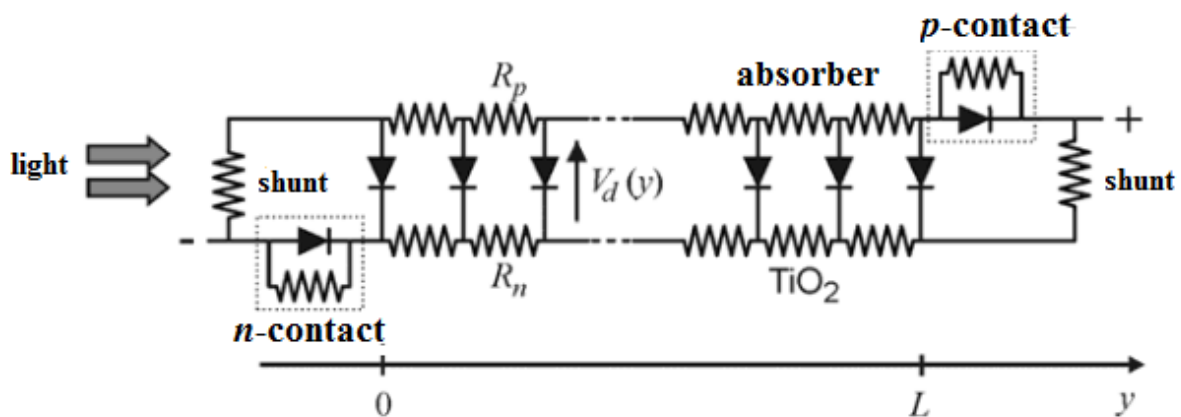


Figure 2.1 Schéma du modèle de réseau (NM), un réseau unidimensionnel de cellules unitaires. [3]

❖ Modèle du milieu effectif (EMM) :

Une autre façon de décrire la structure cellulaire macroscopique d'une cellule solaire nano-structurée avec un EMM. Les théories des milieux effectifs sont des modèles physiques permettant d'estimer les propriétés effectives (i.e. macroscopiques) d'un milieu en fonction des propriétés locales de chaque constituant, et d'un certain nombre d'informations sur la microstructure telle la concentration de chaque phase. Dans ce modèle, la nano-structure p-n entière est représentée par une seule couche de semi-conducteur à milieu effectif. Le milieu effectif (EM) est caractérisé par une "moyenne" des propriétés du matériau de type-n (e.g. PCBM) et du matériau de type-p (e.g. P3HT). Le but de ces modèles est de fournir soit des bornes pour le comportement effectif du milieu à grande échelle, soit des approximations du comportement effectif. Le milieu effectif a une bande de conduction du matériau de type-n ou LUMO de l'accepteur dans une cellule solaire en réseau interpénétré, et une bande de valence

du matériau du type-p ou HOMO du donneur dans la cellule solaire. Dans le milieu effectif, toutes les propriétés sont liées aux porteurs de charges soit n ou p ainsi, les paramètres tels que la mobilité μ_n , l'affinité électronique χ , la constante de diffusion D_n et la densité efficace des états N_c de la bande de conduction ou la LUMO sont ceux de la partie n (par exemple le PCBM dans une cellule solaire organique). Tandis que les propriétés liées aux trous sont ceux de la partie p (le P3HT) tels que μ_p , D_p et N_v . Les propriétés liées aux non-porteurs, tels que la constante diélectrique ϵ_s et la constante d'absorption α sont influencés par les deux matériaux [33].

Pour calculer les caractéristiques du milieu effectif, tous les paramètres sont introduites dans un simulateur de cellule solaire tel que, par exemple SCAPS. De cette façon, on peut aussi faire différentes couches du milieu effectif dans la structure de la cellule [5].

Enfin, notons que l'étape intermédiaire dans les cellules solaires organiques, dans laquelle les excitons sont créés et dissociés, a été perdue dans le milieu effectif.

La figure suivante représente le schéma du modèle du milieu effectif (EMM).

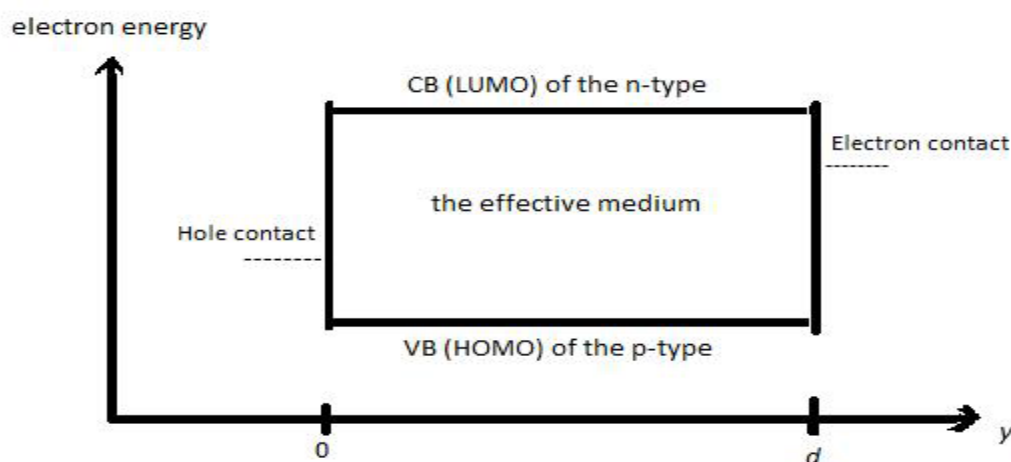


Figure 2.2 Schéma du modèle du milieu effectif (EMM) [34].

2.3 Modélisation de transport de charge dans les cellules solaires organiques :

Les performances des cellules solaires organiques ont augmenté rapidement ces dernières années. Jusqu'à présent, ces progrès sont principalement basés sur des expériences d'essai d'optimisation. Cependant de nombreux modèles ont été développés pour modéliser le phénomène de transport de charge, le plus largement utilisé est le modèle de Drift diffusion. La modélisation du processus de génération de charge est très importante pour comprendre la physique des dispositifs et optimiser l'efficacité de la conversion de puissance des cellules solaires organiques à structure hétérojonction, cette modélisation sera réalisée dans le cas de cellules composées de mélange interpénétrés [35] [36].

2.3.1 Modèle de Drift diffusion :

Pour ce travail, nous effectuons toutes nos simulation de dispositif à l'aide de ce modèle, dans lequel les densités de courant (J_n) d'électrons et de trous (J_p) sont traitées par l'ensemble d'équations de conduction comme suit [37] [38] :

$$J_n = -qn \mu_n \frac{dV}{dx} + K T \mu_n \frac{dn}{dx} \quad (4)$$

$$J_p = -qp \mu_p \frac{dV}{dx} - K T \mu_p \frac{dp}{dx} \quad (5)$$

Avec :

q : la charge fondamentale

V : le potentiel électrostatique

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

μ_n , μ_p : Désignent la mobilité des électrons et des trous

La densité de charge à l'équilibre est calculée en résolvant l'ensemble des équations de Continuité :

$$\frac{\partial n}{\partial x} = \frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} - R + G \quad (6)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} - R + G \quad (7)$$

Avec : R est le taux de recombinaison net des électrons et des trous.

G est le taux de génération dans la couche active du périphérique.

Pour la résoudre de continuité de porteuse, ils doivent être couplés par l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_r \epsilon_0} (p - n - N_A^- + N_D^+ + \frac{\rho_t}{q}) \quad (8)$$

Où ϵ_0 , ϵ_r est respectivement la permittivité du vide et du semi-conducteur, N_D^+ , N_A^- sont les densités du donneur et accepteur ionisés, ρ_t est la densité de charge des défauts.

Nous considérons dans nos calculs que la couche active est dopée de type-p comme il a été signalé dans la plupart des matériaux organiques P3HT: PCBM, avec $N_A = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Dans ce cas, $N_D^+ = 0$ dans l'Eq. (8). Pour les pièges, les défauts accepteurs sont introduits dans la bande interdite de la couche active situés près du niveau HOMO avec une distribution gaussienne des états d'énergie à 100 et 50 meV [3].

Pour le taux de génération G , il suffit de le calculer par $G(\lambda, x)$ donné dans l'Eq. (9), et d'intégrer toutes les longueurs d'onde λ du spectre ainsi calculer la constante d'absorption $\alpha(\lambda)$ qui est la constante d'absorption optique est donnée par: $\alpha = 4\pi k / \lambda$ [3]

Le taux de génération est calculé comme suit:

$$G(\lambda, x) = \phi_0 \alpha(\lambda) \exp[-x\alpha(x)] \quad (9)$$

ϕ_0 est le flux de photons incident, à une épaisseur x , α est le coefficient d'absorption de la couche active.

L'ensemble des équations (4)-(8) constitue la base du modèle de Drift diffusion.

2.3.2 Modèle de conduction par sauts :

Le transport de charge dans les matériaux semi-conducteurs organiques se fait par sauts successifs ou « hopping », le principe de ce modèle est qu'une charge localisée doit « sauter » d'un site à l'autre, que se soit de façon inter ou intramoléculaire [26]. Ce modèle a été proposé

par Conwell et Mott, il permet d'expliquer les dépendances observées de la mobilité avec le champ électrique, la température et la concentration des charges. Ensuite, les porteurs de charge se déplacent par effet tunnel entre les états localisés dans le gap. Ce processus peut être limité par deux facteurs : la distance séparant les deux sites et l'écart énergétique entre les deux [21] [22].

La figure suivante représente le phénomène de conduction par saut

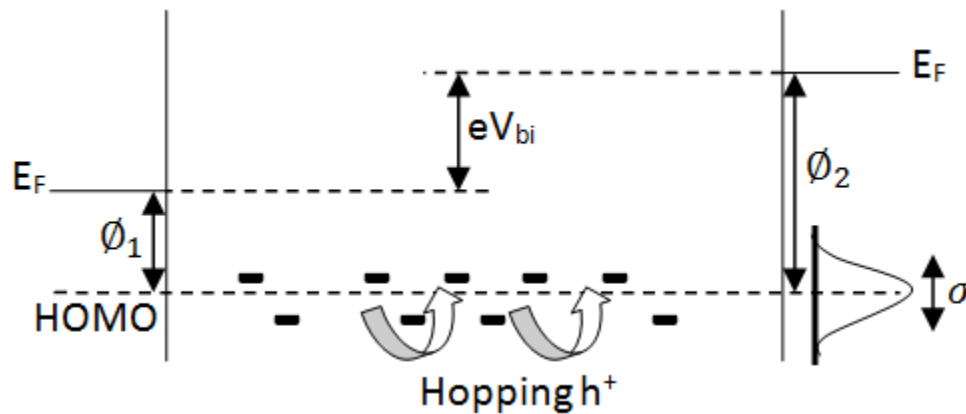


Figure 2.3 phénomène de conduction par saut [39]

On peut aussi distinguer deux types de transfert par saut dans les polymères conjugués : le transport intermoléculaire, et le transport intramoléculaire (Figure 2.4).

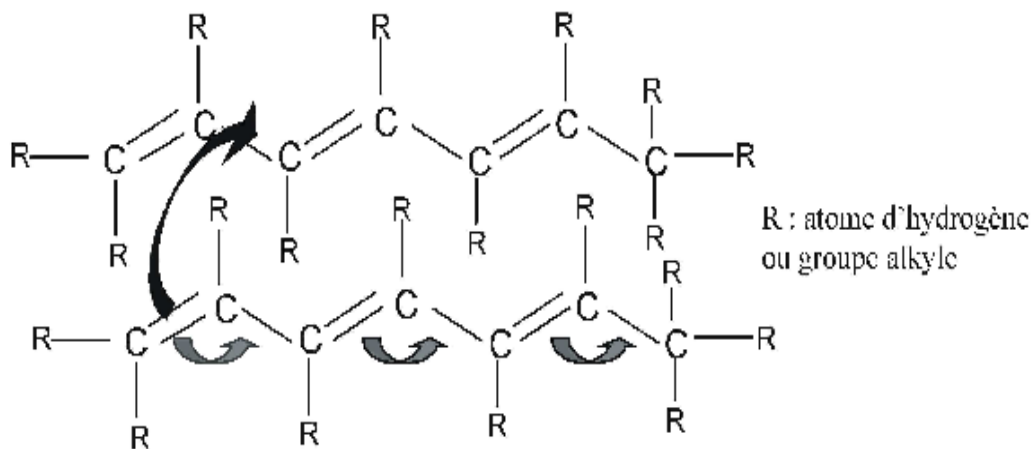


Figure 2.4 Types de transport par saut : intermoléculaire (flèche noire), intramoléculaire (flèche grise) [39].

2.3.3 Modèle du désordre Gaussien :

Le transport de charge est attribué à des sauts entre les molécules, et la distribution d'énergie de ces sites est supposée être gaussienne. Le modèle étendu est le modèle du désordre Gaussien « Gaussienne Disorder Model » (GDM), calcule la mobilité et la diffusion des porteurs dans ces matériaux semi-conducteurs, la densité d'états gaussienne est un modèle alternatif [40] [41]

$$N_t(E, \delta) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi}\delta} \exp\left[-\frac{(E_t - E)^2}{2\delta^2}\right] \quad (10)$$

Avec : N_t est la densité totale des molécules, et δ est la variance de la distribution qu'on utilise pour quantifier l'amplitude du désordre.

2.4 Modélisation de la recombinaison des charges :

Plusieurs processus entrent en compétition avec la génération dans les matériaux semi-conducteurs où des paires électron-trou sont créés. Cependant, il ya des modèles utilisés pour étudier la modélisation de la recombinaison des charges dans les semi-conducteurs organiques [2]. Aujourd'hui il ya deux types de recombinaison :

- ✓ Recombinaison quasi instantanée des charges géminées.
- ✓ Recombinaison des charges non géminées.

Seule la recombinaison des charges non géminées est très importante, il existe deux types différents de cette recombinaison [42] :

La recombinaison des charges biomoléculaire, et la recombinaison par pièges des charges

Il ya des modèles utilisés pour étudier la modélisation de la recombinaison des charges non géminées dans les semi-conducteurs organiques sont le modèle de Langevin, et modèle de Shockley Read Hall (SRH) [2,3].

2.4.1 Modèle de Langevin :

Ce modèle a étudié la recombinaison des particules positives et négatives en considérant une particule de chaque type, les particules sont des électrons et des trous, le modèle de Langevin

suppose que le mouvement des électrons et des trous peut être décrit par des mobilités. Ce modèle est supposé être un processus de recombinaison du second ordre en fonction de la concentration d'électrons libres et les trous, ce modèle utilisé pour la recombinaison des charges biomoléculaire. Dans ce modèle le taux de recombinaison de Langevin est donné par la relation [43] [44] :

$$R_{Langevin} = K (np - n_i^2) \quad (11)$$

Où K le coefficient de recombinaison de Langevin est donné par :

$$K = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (\mu_n + \mu_p) \quad (12)$$

Avec : n_i : est la densité des porteurs de charge intrinsèque q : la charge élémentaire de l'électron, μ_n , μ_p : les mobilités des électrons et les trous, ϵ_0 : Permittivité du vide, ϵ_r la permittivité relative du matériau organique.

La théorie de Langevin est un mécanisme de recombinaison dans les matériaux semi-conducteurs organiques désordonnées à faible mobilité. L'hypothèse principale en utilisant la recombinaison de type Langevin, que le libre parcours moyen des porteurs de charge (ℓ) devrait être plus petit que le rayon de coulomb (r_c), cette recombinaison est une capture directe d'électrons par les trous qui s'attirent par la force de Coulomb, le rayon de Coulomb est défini par : $r_c = \frac{q^2}{4\pi\epsilon KT}$, comme exemple pour mieux comprendre on a le matériau P3HT : PCBM, avec la distance intersites entre états localisés est ~ 1 nm et $r_c \sim 15,8$ nm maintenant on peut dire que l'hypothèse est valable pour les semi-conducteurs organiques désordonnées [45].

2.4.2 Modèle de Shockley Read Hall (SRH):

Ce modèle a été introduit en 1952, pour décrire les statistiques de recombinaison et de génération des trous et des électrons dans les semi-conducteurs se produisant par le

mécanisme de piégeage. La théorie de Shockley Read-Hall utilisée pour la recombinaison par pièges des charges, le taux de recombinaison de Shockley Read Hall est donnée par [46] :

$$R_{SRH} = \frac{np - n_1 p_1}{\tau_p (n + n_t) + \tau_n (p + p_t)} \quad (13)$$

Avec :

$$n_t = n + N_{LUMO} \exp \frac{-(E_{LUMO} - E_t)}{K_B T} \quad (14)$$

$$p_t = p + N_{HOMO} \exp \frac{-(E_{HOMO} - E_t)}{K_B T} \quad (15)$$

Avec :

$$\tau_n = \frac{1}{\sigma_n N_t v_n} \quad (16)$$

$$\tau_p = \frac{1}{\sigma_p N_t v_p} \quad (17)$$

Où σ_n (σ_p) est la section efficace de capture des électrons (trous), N_t la densité totale des pièges et v_n (v_p) la vitesse thermique des électrons (trous).

Le terme de recombinaison dans l'ensemble des équations de continuité est supposé être la somme de la recombinaison de Langevin (recombinaison biomoléculaire) et le processus de recombinaison par pièges décrit par les statistiques de Sah-Shockley [34] [47].

$$R_n = \frac{n}{\tau_n} \quad R_p = \frac{p}{\tau_p} \quad (18)$$

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

Récemment, un taux de recombinaison supérieur à deux a été rapporté dans le matériau P3HT : PCBM et a été lié à un processus de recombinaison par piège retardé [48].

2.4.3 Recombinaison et injection des porteurs de charges aux interfaces :

Un modèle analytique de sauts de porteurs de charges à l'interface séparant deux matériaux organiques, la recombinaison biomoléculaire de Langevin convient parfaitement pour citer des systèmes où les électrons et les trous peuvent se déplacer librement. On prend exemple à l'interface entre métal / semi-conducteur, le choix des interfaces est important pour les performances des dispositifs organiques puisque il détermine les courants majoritaires et minoritaires et donc le taux de recombinaison et l'efficacité dans les structures [4] [49].

2.4.4 Interface métal / organique :

Dans les années 90, le premier modèle utilisé est Mott-Schottky (M-S), validé pour l'interface métal / SC inorganique, pour étudier le contact métal / SCO, lorsque le semi-conducteur est connecté à un métal les porteurs de charges diffusent sous l'effet d'une force de diffusion (due à la différence entre le potentiel d'ionisation du semi-conducteur et la fonction de travail du métal). Il ya différents types de contacts possible entre les deux matériaux : un contact ohmique, et un contact rectifiant [5].

Le contact Métal / semi-conducteur (ou isolant) est dit un contact ohmique si sa résistance (Son impédance) est négligeable devant celle du volume du semi-conducteur lui-même.

Pour un semi-conducteur de type p en contact avec un métal, les électrons du métal diffusent dans la bande de valence du semi-conducteur, si le métal a un travail de sortie supérieur (resp. inférieur) au matériau semi-conducteur, il y aura une accumulation des trous (resp. désertion) à l'interface (métal/organique), donc la différence de travail de sortie entre les deux matériaux, sera alors la valeur de potentiel utilisé comme une condition aux limites à l'état d'équilibre. La concentration des trous à l'interface est donnée par la relation [5] [21] :

$$P(0)_{equi} = P_0 \exp \left(-\frac{\Delta\phi}{KT} \right) \quad (19)$$

La concentration d'électrons est donnée par :

$$n(0)_{equi} = n_0 \exp \left(\frac{\Delta\phi}{KT} \right) \quad (20)$$

Avec :

$$P_0 = N_v \exp \left[e \frac{E_v - E_f}{KT} \right] \quad (21)$$

$$n_0 = N_c \exp \left[e \frac{E_f - E_c}{KT} \right] \quad (22)$$

P_0, n_0 : Les concentrations des trous et d'électrons dans les semi-conducteurs massifs à l'équilibre.

Dans ce cas, donc on peut dire que le contact entre les deux matériaux est ohmique si sa résistance est négligeable devant celle du volume du semi-conducteur lui-même, après le contact, les électrons de la bande de valence du matériau semi-conducteur diffusent dans le métal jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi. Il se forme alors une accumulation des porteurs majoritaires (trous) dans ce semi-conducteur, il n'existe pas une barrière de potentiel entre les deux matériaux [21, 50, 51].

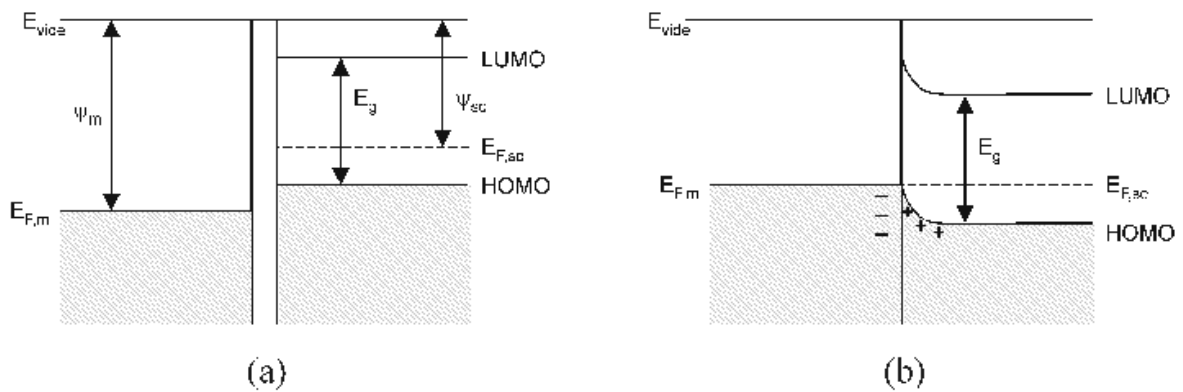


Figure 2.5 Schéma énergétique d'un contact ohmique (a) avant contact. (b) après contact [21].

Pour les conditions aux limites aux contacts, le transport au métal/organique est définis par l'émission thermo-ionique est donnée par l'équation :

$$J_{Maj} = q v_{th} N_{c,v} \exp\left[-\frac{q\phi_B}{KT}\right] \left[\exp\left(\frac{qV}{KT}\right) - 1\right] \quad (23)$$

Avec : $N_{c,v}$: la densité effective d'états à la bande de conduction ou la bande de valence respectivement, et v_{th} : la vitesse thermique, ϕ_B : la hauteur de barrière au niveau du contact.

Le courant de recombinaison au niveau des contacts est définir par [3] :

$$J_c^H = q S_c^H (H - H_0) \quad (24)$$

Dans cette équation l'indice H représenté le type de porteurs de charges $H_0 = n_0$, ou p_0 en fonction du type de porteurs de charges, c représente les porteurs majoritaire ou minoritaire (Maj, Min) donc on peut écrire [3] : $J_c^H = J_{Maj}^{n,p}$ ou $J_{Min}^{n,p}$ et $S_c^H = S_{Maj}^{n,p}$ ou $S_{Min}^{n,p}$

2.5 Les paramètres limitant les performances de la cellule :

Dans les dernières années, les performances des cellules solaires organiques ont augmenté rapidement, donc dans cette partie nous nous intéressons aux paramètres principaux influençant les performances des cellules solaires organiques, ces paramètres sont : l'absorption, diffusion excitonique, recombinaison et piège, dopage, mobilité, et la température [5].

2.5.1 Absorption :

Les cellules photovoltaïques organiques absorbent le maximum de lumière (photons) en induisant la transition d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction, c'est-à-dire créant une paire électron-trou (exciton) sur une épaisseur assez faible [52].

On a un matériau organique d'une épaisseur d , traversé par un flux monochromatique ϕ_0 , le flux énergétique $\phi(x)$, avec x est une épaisseur du film organique, ce flux est définie par la loi de Beer-Lambert [53] :

$$\phi(x) = \phi_0 \cdot \exp(-\alpha x) \quad (25)$$

Avec : α est le coefficient d'absorption du ce matériau, exprimé en cm^{-1} qui est donné par :

$$\alpha = 4\pi k / \lambda \quad (26)$$

Il ya qu'une petite partie de la lumière incidente qui contribue à la génération du photocourant.

2.5.2 Diffusion excitonique :

La longueur de la diffusion excitonique est estimée de 10 nm à 20 nm pour les matériaux polymères conjugués. Le transfert de charges dans ce matériau c'est-à-dire entre le donneur et l'accepteur doit être effectué sur une échelle inférieure à 20 nm. Ceci conduit à une taille des domaines inférieure à 20 nm. La taille des domaines dépend essentiellement de la morphologie des systèmes réseaux interpénètre. La démixture du donneur et de l'accepteur jouer un rôle primordial dans la morphologie du composite. La morphologie de ces systèmes dépend de plusieurs paramètres sont : le choix du solvant, concentration et proportion relative du donneur et de l'accepteur, traitement du substrat, technique de dépôt ... [54].

2.5.3 Recombinaison et piège :

Plusieurs processus entrent en compétition avec la formation de porteurs de charges et contribuent ainsi à la diminution du photocourant. Certain processus peuvent se produire juste après la photoexcitation tels que la photoluminescence ou la recombinaison bimoléculaire c'est-à-dire un électron d'un exciton se recombine avec un trou appartenant à un autre exciton, alors que d'autre peuvent se produire pendant le transfert de charges (Pièges et SCLC).

La plupart des matériaux organiques sont intrinsèques mais malgré tous ces matériaux ne sont pas pure, ils ont des défauts impuretés et chargés. Les défauts chargés peuvent agir comme

dopant affectent le transport de charge dans la couche active d'une cellule solaire organique, donc on distingue deux types des dopages (stimulé et causé par les pièges) jouent un rôle important dans la dégradation de ces cellules [5] [55].

La figure 2.6 représenté les quatre paramètres électriques (la densité de court circuit J_{sc} , la tension en circuit ouvert V_{oc} , le facteur de forme FF et le rendement de conversion η en fonction des concentrations des pièges.

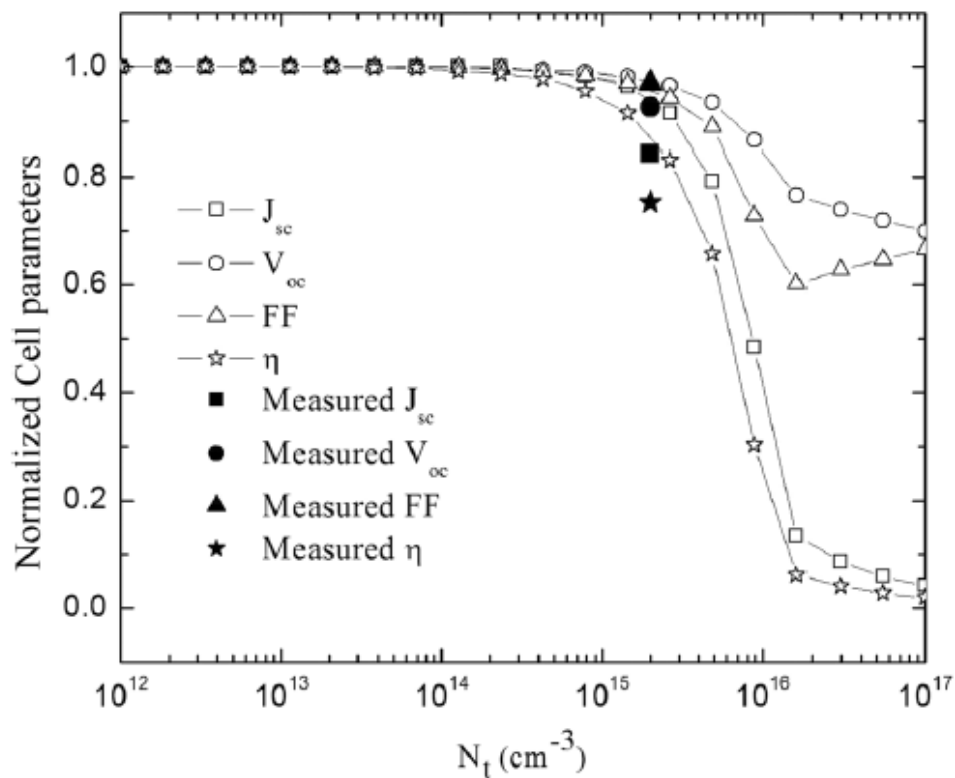


Figure 2.6 paramètres photovoltaïques en fonction des concentrations des pièges [5].

2.5.4 Dopage :

Le dopage des matériaux semi-conducteurs organiques a été peu tenté avant le début des années 2000 pour différentes raisons. En général, les semi-conducteurs sont fabriqués sous leur forme non dopée. Cependant un dopage stable et contrôlé est souvent nécessaire pour la réalisation efficace de nombreux dispositifs à base de ces matériaux, il existe deux types de dopage : de type p et de type n , la conductivité peut être augmentée de plusieurs ordres de

grandeurs, bien au-dessus de la conductivité intrinsèque du matériau pur ou de la conductivité arbitraire causée par les impuretés, on dit un semi-conducteur de type n si on peut injecter les électrons plus facilement que les trous, et un autre de type p pour le cas contraire [56] [57].

Pour ce cas, un matériau est ajouté en faible quantité dans une matrice d'un autre matériau, et va donner soit les électrons à l'état d'énergie LUMO dans cette état on a le dopage de type n , soit retirer des électrons de la HOMO on a un dopage de type p et ainsi générer des trous comme illustré dans la figure 2.7. La position par rapport au vide du niveau haut de la bande de valence (HOMO) de la molécule correspond à l'énergie d'oxydation ou potentiel d'ionisation, la position du bas de valence (LUMO) correspond à l'énergie nécessaire pour que la molécule accepte un électron.

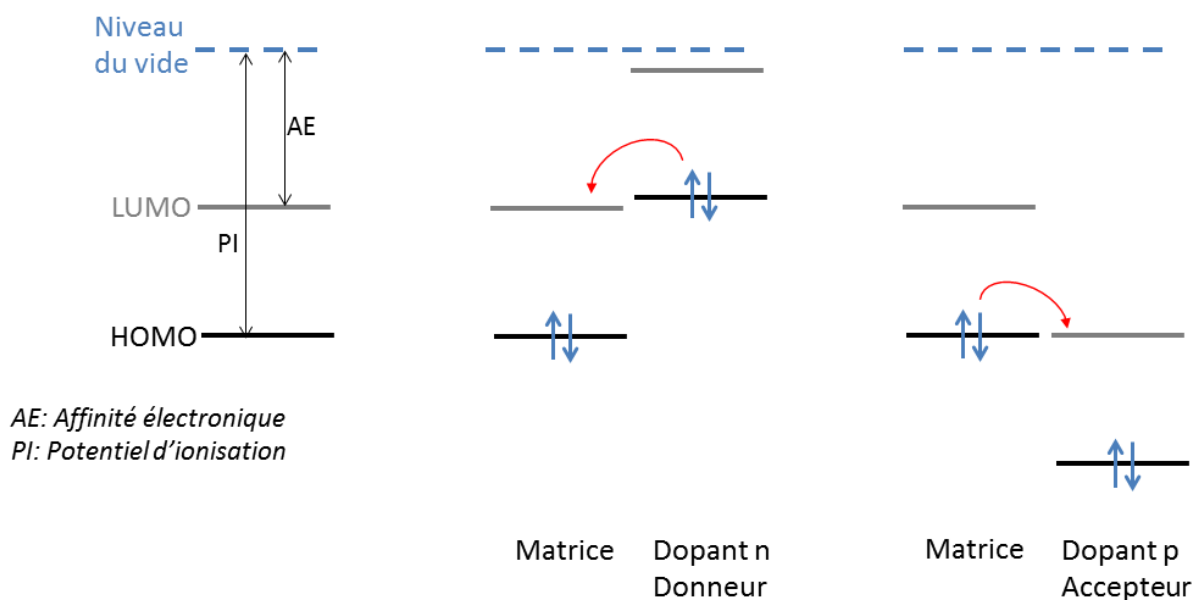


Figure 2.7 Le principe du dopage du matériau semi-conducteur [56].

2.5.5 Mobilité :

La mobilité de charge est une grandeur macroscopique qui caractérise le transport de charge, elle a un rôle important car l'augmentation de sa valeur produit un effet positif sur le transport de charges, mais d'un autre côté la mobilité va augmenter le taux de recombinaison

bimoléculaire, la mobilité μ définie par le rapport entre la vitesse moyenne des charges et le champ électrique appliqué. Dans le cas des réseaux interpénétrés, la mobilité des porteurs de charges est affectée par la densité des pièges ou des défauts dans les matériaux organique et par la taille des domaines formés par le donneur et l'accepteur. Comme un exemple, un défaut sur une chaîne polymère interrompt le transport intramoléculaire en faveur du transport intermoléculaire. Par conséquent, la mobilité des trous dans les polymères conjugués est généralement plus faible que celle des électrons dans les fullerènes, un exemple pour mieux comprendre les mobilités des trous dans MDMO-PPV sont de l'ordre de $5.10^{-7} \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ et des électrons dans PCBM sont de l'ordre de 2.10^{-3} à $1 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ [3].

Une autre possibilité consiste en l'élaboration de molécules avec une bonne mobilité : la mobilité des trous « des électrons » est proportionnelle à la largeur de la bande de valence « la bande de conduction », laquelle est proportionnelle à l'intégrale de recouvrement des orbitales moléculaires. On en déduit que l'augmentation de la valeur de mobilité nécessite une grande concentration d'orbitale π [54].

Afin d'estimer la valeur minimale de la mobilité d'une cellule de 100 nm d'épaisseur (e), donc nous considérons la densité de courant est donné par [54] :

$$J = \frac{Q}{S.t} = \frac{C.V}{S.t} \quad (27)$$

Avec :

Q : la charge totale, S : la surface de cellule, t : le temps que mettent les charges pour traverser une épaisseur, C : la capacité de cellule, V : tension fournie par la cellule.

Le temps de transit des charges est défini par la loi de Langevin :

$$t = \frac{e^2}{2D} \quad (28)$$

Où e : épaisseur de la couche active d'une cellule, D : le coefficient de diffusion est donné par la loi d'Einstein :

$$D = \frac{KT \cdot \mu}{q} \quad (29)$$

K : constante de Boltzmann, T : la température, q : la charge électronique.

C est définie par :

$$C = \frac{\varepsilon \cdot S}{e} \quad (30)$$

En fin l'expression finale de la mobilité est donnée par la relation :

$$\mu = \frac{e^3 \cdot q}{2KT \cdot \varepsilon} \cdot \frac{J}{V} \quad (31)$$

2.5.6. Température :

Ils ya plusieurs études de l'effet de la température sur les performances des cellules solaires organiques, les plupart des chercheurs ont constaté que l'augmentation de la densité de courant de circuit J_{sc} avec l'augmentation de la température T , et tend être saturé. Ceci peut être expliqué par la pile qui est proportionnelle avec le nombre des porteurs de charge. La tension de circuit ouvert V_{oc} est connue et liée aux paramètres thermodynamique tels que les statistiques d'occupation des états de transport de charges et des pièges, pour la détermination de V_{oc} peut être expliqué par la différence entre les trous et les électrons dans la couche active de la cellule est définie par la relation [3] :

$$q V_{co} = E_{fn} - E_{fp} \quad (32)$$

Donc par conséquent la tension de sortie mesurée dans les conditions de spliting de niveau de Fermi peut définir la tension de circuit ouvert V_{co} par :

$$q V_{co} = E_g - KT \left[\ln \left(\frac{N_c N_v}{np} \right) \right] \quad (33)$$

Avec :

E_g : L'énergie de gap

N_c, N_v : Les densités d'états effectifs pour les électrons et les trous.

La figure 2.8 représente la diminution de tension de circuit ouvert V_{oc} en fonction de la température utilisant l'approche analytique et l'intégration des densités des états gaussiens.

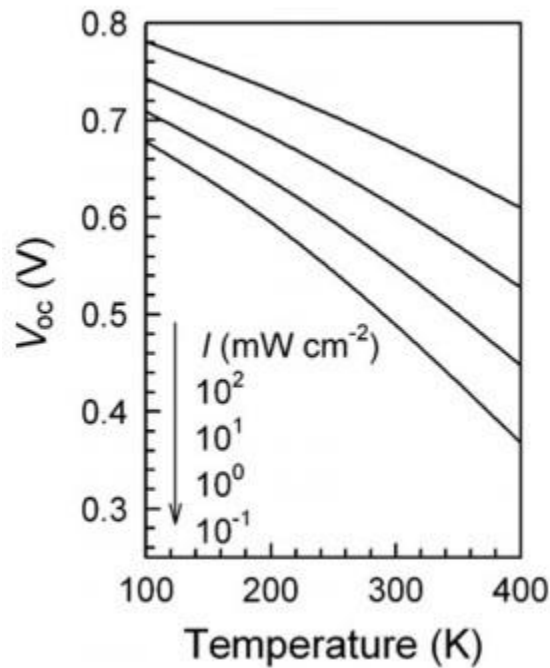


Figure 2.8 V_{oc} en fonction de température pour différents intensités. [5]

2.6 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté des théories pour la résolution des cellules nanostructurées parmi ces théories nous choisissons deux modèles sont: modèle de réseau(NM) et modèle de milieu effectif (EMM). Puis nous traitons les modèles de Drift diffusion et de conduction par sauts et aussi du désordre Gaussien pour la modélisation de transport de charge et Ensuite, nous avons utilisé les mécanismes de Langevin et Shockley Read-Hall pour la modélisation de la recombinaison de charges. Et aussi nous nous citons les paramètres limitant les performances des cellules solaires à base de réseaux interpénétrés, tel que l'absorption, diffusion excitonique, recombinaison et pièges, la mobilité et dopage et aussi la température.



3. Simulation et résultats obtenus

3.1 Introduction :

Les performances de la cellule solaire sont représentées à travers la caractéristique courant-tension I-V, ces cellules sont à base des matériaux semi-conducteurs organiques.

Récemment le rendement de conversion des cellules solaires organiques a atteint 17.3% en améliorant les paramètres du dispositif.

Dans le cas des cellules solaires organiques à base de mélange P3HT « poly (3 – hexylthiophène) » et le PCBM « phenyl-C61- butyric acid methyl ester », les rendements de conversion de 3.5 à 5% [3].

L’objectif de la simulation des cellules solaires est de trouver un lien entre les propriétés des matériaux et les caractéristiques électriques de la cellule solaire.

Dans ce chapitre, nous présentons la simulation numérique d’une cellule solaire à base de mélange interpénétré P3HT : PCBM, à l’aide du simulateur des cellules solaire « SCAPS 1D » acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator one dimension » est développé à l’Université de Gent en Belgique par Marc Burgelman et al. Pour simuler les caractéristiques électriques des dispositifs photoniques tels que les cellules solaires à couches minces [5].

Ensuite, un ensemble de paramètres a été construit qui simule les caractéristiques de la cellule solaire à base de P3HT : PCBM, en variant la température et les paramètres des pièges, puis nous allons étudier l’effet de ces paramètres sur les performances de la cellule [58,59].

3.2 Simulation numérique des cellules solaires :

La modélisation numérique des cellules solaires est un outil indispensable dans l’analyse et la conception des composants à semi-conducteurs, est aussi elle à un rôle important pour optimiser les structures des cellules solaires [58].

En principe, n'importe quel programme numérique capable de résoudre les équations de base des semi-conducteurs peut être employé pour modéliser les cellules solaires à couches minces. Au cours de ces dernières années, plusieurs outils de calcul et de simulation ont été développés par la communauté des chercheurs dans ce domaine, on peut citer en titre d'exemple : PC-1D, ASPIN, AMPS-1D, SCAPS-1D ... [3].

Le SCAPS-1D acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension » est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé à l'Université de Gent en Belgique par Marc Burgelman et al, est aussi orienté Windows. La première version de ce logiciel (version 2.0) a été distribuée en 1998 durant la deuxième conférence internationale en photovoltaïque à Wien, maintenant la version 3.3.07 est disponible [59,3]. Ce logiciel est basé sur un calcul des différences finis. Il est capable de résoudre les équations de base du semi-conducteur telles que l'équation de Poisson et les équations de continuité et de conduction des électrons et des trous [5] :

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_0\epsilon_r} (p - n - N_A^- + N_D^+ + \frac{\rho_t}{q}) \quad (1)$$

$$\frac{1}{q} \frac{dJ_n}{dx} = G - R \quad (2)$$

$$-\frac{1}{q} \frac{dJ_p}{dx} = G - R \quad (3)$$

$$J_n = -D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{d\phi}{dx} \quad (4)$$

$$J_p = -D_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \frac{d\phi}{dx} \quad (5)$$

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

J_p, J_n Sont les densités des courants des électrons et des trous.

μ_n, μ_p Sont les mobilités des électrons et des trous.

3.3 Etude numérique des paramètres de la cellule P3HT : PCBM

Nous avons choisis le modèle du milieu effectif pour calculer les caractéristiques de la cellule solaire P3HT : PCBM, et pour cela un ensemble de paramètres a été construit à partir de la littérature et donné dans le tableau suivant :

Paramètre	Symbole	Valeur	Unit	Réf
Epaisseur	d	150	nm	[5,3]
Bande interdite	E_g	1.27	eV	[5,3]
Affinité électronique	χ	3.7	eV	[5,3]
p-travail de sortie	ϕ_p	5.2	eV	[5,3]
n-travail de sortie	ϕ_n	4.3	eV	[5,3]
Densité d'état effective	N_c, N_v	2.10^{18}	cm^{-3}	[5,3]
Mobilités des électrons	μ_n	10^{-3}	$cm^2/V. s$	[5,3]
Mobilités des trous	μ_p	10^{-4}	$cm^2/V. s$	[5,3]
Constante diélectrique	ε	3.5		[5,3]
Section efficace de capture d'électrons	σ_n	$10^{-17}-10^{-15}$	cm^2	[60]
Section efficace de capture des trous	σ_p	$10^{-20}-10^{-19}$	cm^2	[60]

Tableau 3.1 : Paramètres utilisés pour la simulation de la cellule P3HT/PCBM.

L'ensemble des paramètres donnés dans le tableau 3.1 sont insérés dans le simulateur des cellules solaires SCAPS.

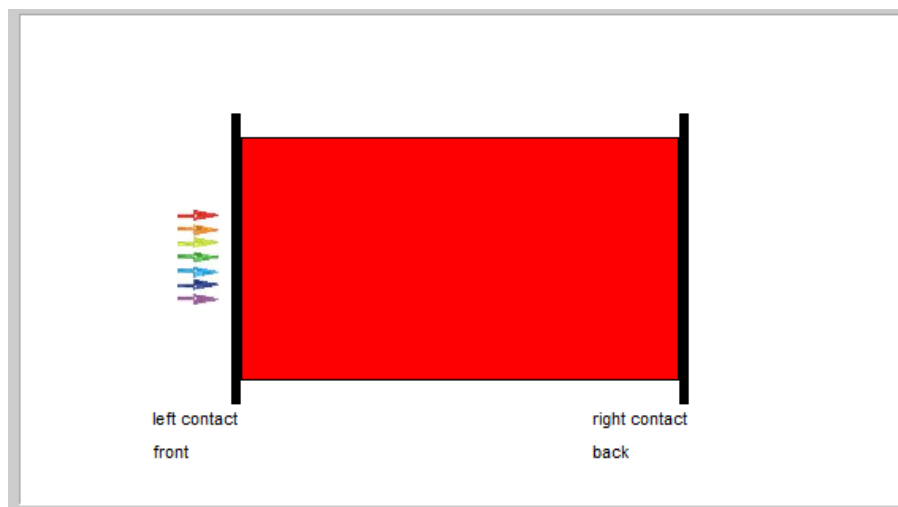


Figure 3.1 : Structure de la cellule P3HT/PCBM

3.4 Résultats obtenus :

Dans notre simulation, on a supposé que la couche active est dopé de type p, avec $N_A = 10^{15} \text{ cm}^3$. Dans ce cas, $N_D^+ = 0$ [2]. Pour les pièges, des défauts accepteurs sont introduits dans la bande interdite de la couche active situés près du niveau HOMO avec une distribution gaussienne des états d'énergie à 100 et 50 meV.

3.4.1 Caractéristique $J-V$ de la cellule solaire P3HT : PCBM :

Nous avons simulé la cellule solaire à base de mélange interpénétré P3HT/PCBM sous illumination avec le spectre AM1.5 [5], maintenue à une température de 300K à l'aide du simulateur « SCAPS ». Nous avons obtenu la courbe suivante qui représente la caractéristique $J-V$.

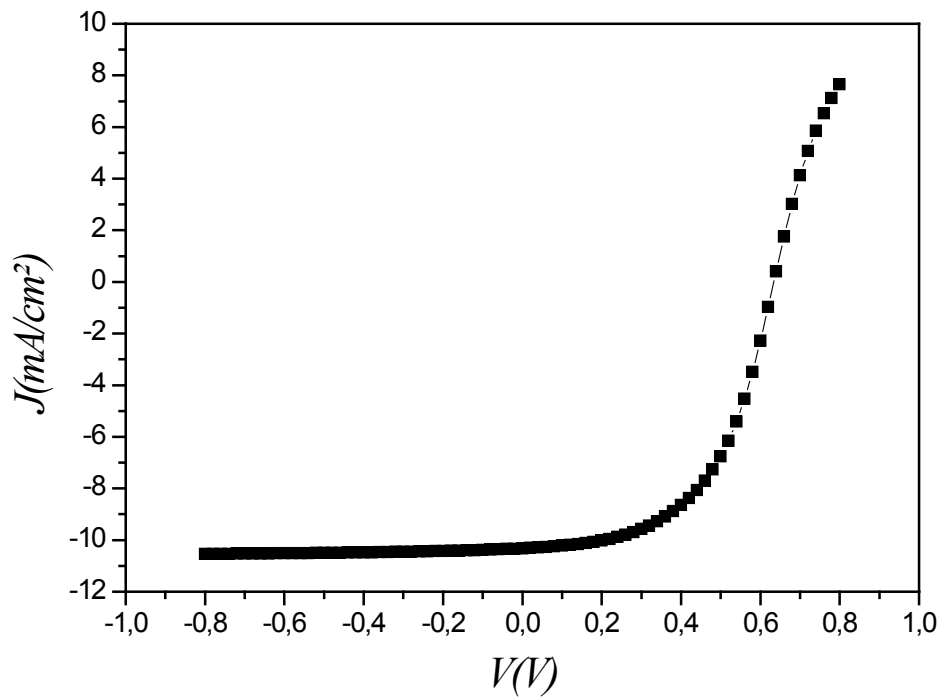


Figure 3.2 : Caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique P3HT/PCBM

En plus de la courbe $J-V$, le logiciel nous a fournis les paramètres photovoltaïques de la cellule organique, la densité du courant de court-circuit J_{sc} , le facteur de forme FF , la tension à circuit ouvert V_{oc} et le rendement de conversion η , qui sont représentés dans le tableau suivant :

Les paramètres de la cellule P3HT/PCBM	Simulation
V_{oc}	0.6343 V
J_{sc}	10.321578 mA/cm ²
FF	54.22 %
η	3.55 %

Tableau 3.2 : Les paramètres de la cellule solaire P3HT/PCBM déduit de la courbe I-V calculée.

3.4.2 La Réponse spectrale :

Nous avons aussi calculé le rendement quantique(QE) en fonction de la longueur d'onde nous avons obtenu la courbe de la figure 3.2, on peut dire que la grande partie de l'absorption des photons se passe dans la petite bande 420 nm-560 nm, après il y a une diminution ensuite une stabilité du rendement entre la bande 650 nm- 900 nm.

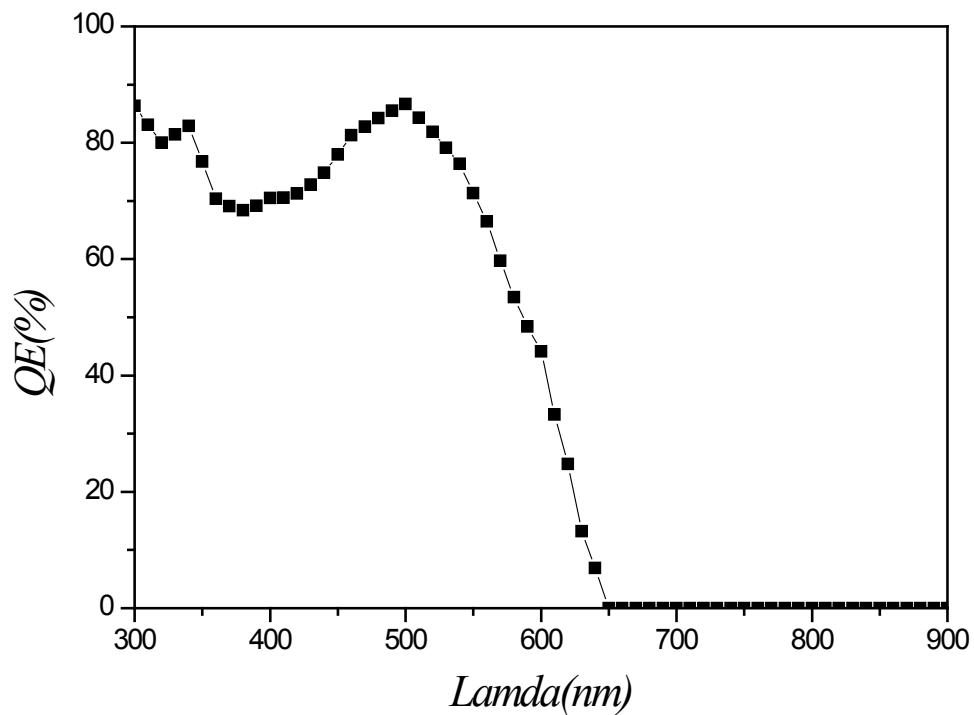


Figure 3.3 : La réponse spectrale de la cellule solaire organique P3HT/PCBM.

3.4.3 Effet des pièges :

Dans cette partie, nous avons étudié l'effet des pièges sur les caractéristiques de la cellule solaire organique P3HT/PCBM, l'origine de ces pièges dans le matériau organique peut être attribuée aux impuretés, aux défauts ou à la présence d'oxygène. La structure désordonnée dans la cellule étudiée, produit un transport de charge régi par un système hopping, avec une densité d'état gaussienne (DOS) est donné par la relation [5] :

$$g(E, \delta) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi}\delta^2} \exp\left(-\frac{(E_t - E)^2}{2\delta^2}\right) \quad (6)$$

Avec : N_t est la densité totale des pièges ($1/cm^3$), E_t est de centre de la DOS, δ est le coefficient de désordre.

Nous avons fait cette simulation avec des positions énergétiques des pièges de 100 et 50 meV.

Dans ce cas le type de recombinaison est supposé être la somme de la recombinaison bimoléculaire décrite par le modèle de Langevin et la recombinaison assistée par les pièges décrite par les statistiques de Sah-Shockley. Pour cela, nous avons fait varier la densité des pièges entre 10^{12} , $10^{17} cm^{-3}$, et on a étudié son effet sur la caractéristique $J-V$ de la cellule présentée dans la figure suivante :

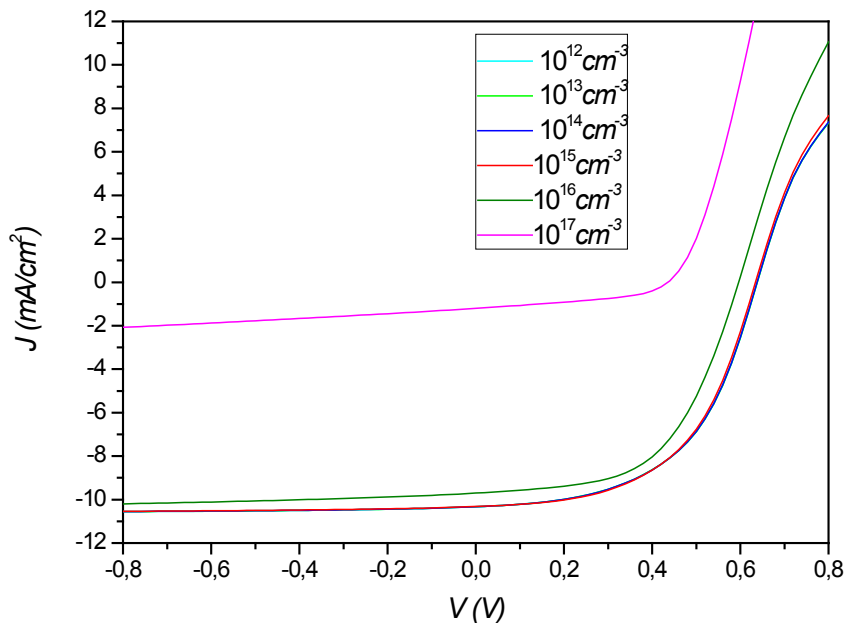


Figure 3.4 : L'effet des densités des pièges sur la caractéristique $J-V$ de la cellule.

On a constaté que jusqu'à 10^{15} cm^{-3} pour la densité des pièges on a obtenue une bonne caractéristique J - V .

Les principaux caractéristiques de cette simulation sont présentés dans les figures 3.5-3.8.

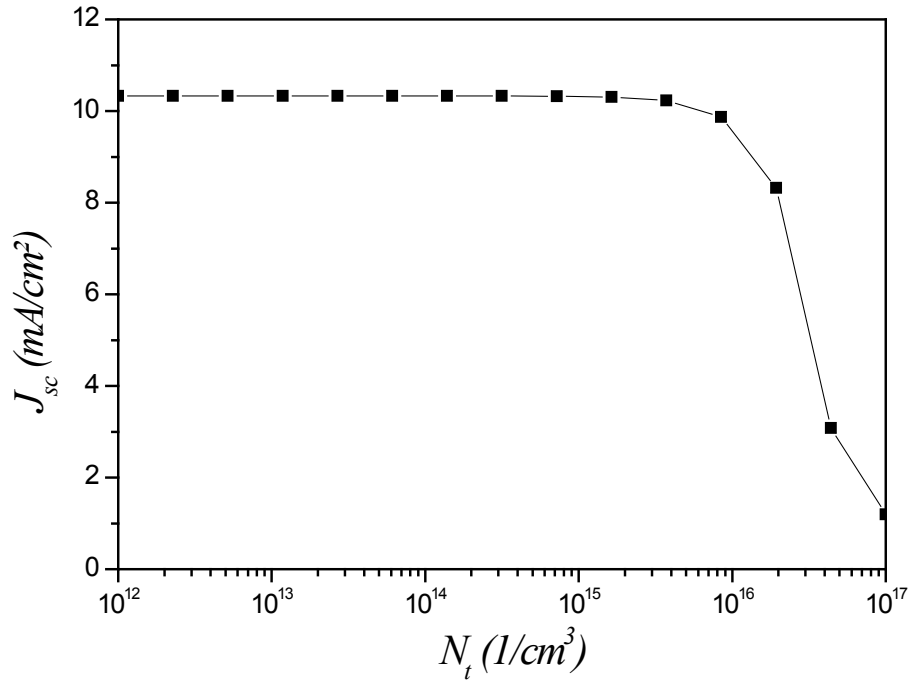


Figure 3.5 : Le courant de court-circuit en fonction des concentrations des pièges.

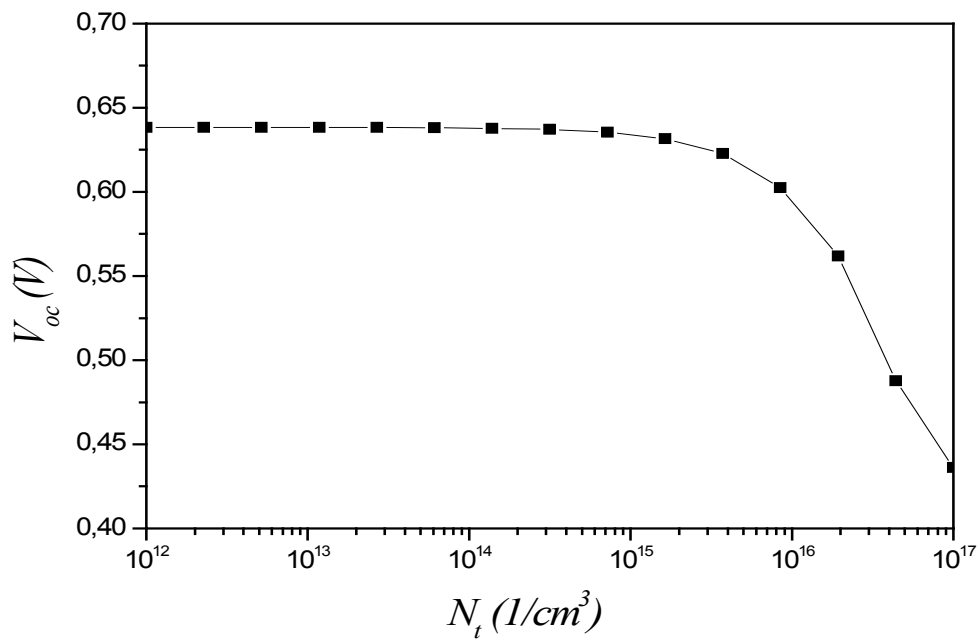


Figure 3.6 : La tension de circuit ouvert en fonction des concentrations des pièges.

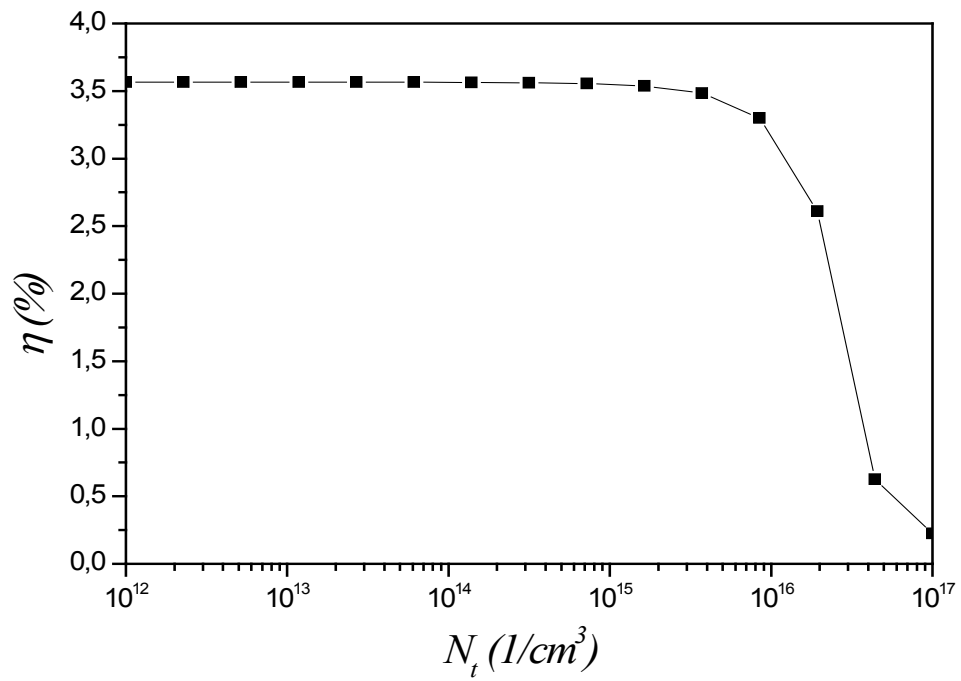


Figure 3.7 : Le rendement en fonction des concentrations des pièges.

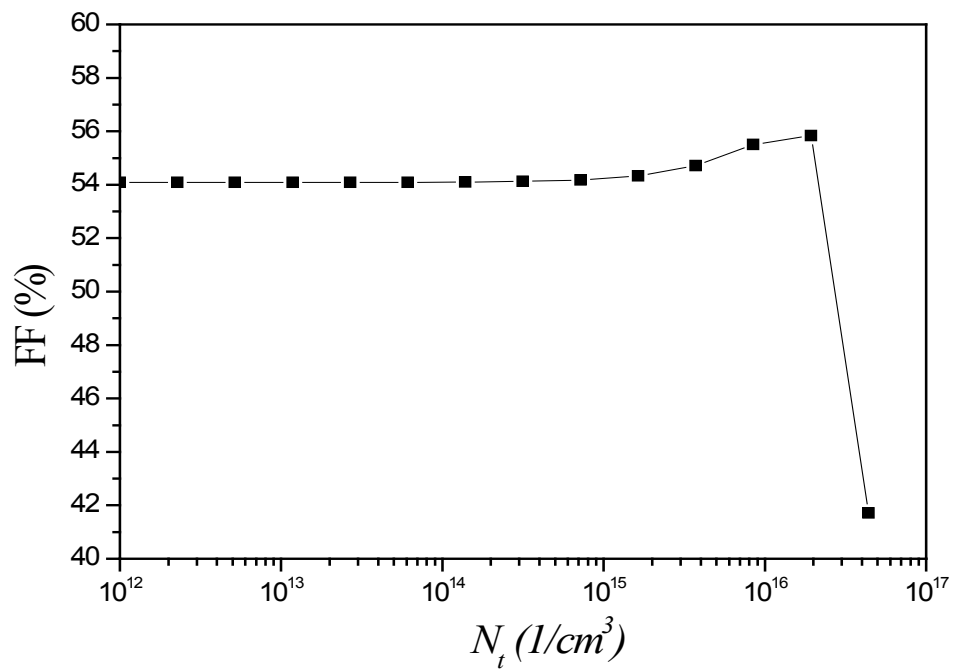


Figure 3.8 : Le facteur de forme en fonction des concentrations des pièges.

A partir de 10^{16} cm^{-3} pour la densité des pièges on peut remarquer une diminution totale des caractéristiques photovoltaïques due à l'augmentation de la recombinaison non radiative assisté par les pièges est décrit par les statistiques de Sah-Shockley.

On a remarqué une diminution de courant de court-circuit, lorsque la densité des pièges est d'environ 10^{15} cm^{-3} , le (J_{sc}) diminue de 10,3 à 8.2 mA/cm^2 jusqu'à 1.3 mA/cm^2 ; ainsi pour la tension de circuit ouvert, si $N_t \geq 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ le (V_{oc}) est à 0.6 V qui diminue jusqu'à 0.42 V , pour le rendement de conversion (η) lorsque la densité des pièges est à 10^{15} cm^{-3} , le rendement diminue de 3,6% jusqu'à 3.25%. Tandis que pour le facteur de forme (FF), il augmente jusqu'à environ 56% pour une densité de 10^{16} cm^{-3} après il décroît ($N_t \geq 10^{16}$ le FF est à 54% jusqu'à 41 %), car il est inversement proportionnel à la tension (V_{oc}).

On a aussi étudié l'effet de variation de la section efficace de capture d'électrons et des trous simultanément sur les performances de la cellule à base de mélange interpénétré P3HT/PCBM.

On a pu remarquer que la cellule obtient un meilleur rendement (η) d'environ 3,6% pour une section de capture d'électrons $\leq 10^{-15} \text{ cm}^2$ et une section de capture des trous $\leq 10^{-19} \text{ cm}^2$, pour la tension de circuit ouvert (V_{oc}) elle est d'environ 0.636 V pour une $\sigma_n \leq 10^{-15} \text{ cm}^2$ et une $\sigma_p \leq 10^{-18} \text{ cm}^2$, pour le courant de court-circuit (J_{sc}) est d'environ 10.40 % pour une section de capture d'électrons $\leq 10^{-15} \text{ cm}^2$, et une section de capture des trous $\leq 10^{-20} \text{ cm}^2$. Ainsi la cellule P3HT/PCBM obtient un facteur de forme (FF) d'environ 54.40% pour une section efficace de capture d'électrons $\leq 10^{-15} \text{ cm}^2$ et une capture des trous $\leq 10^{-19} \text{ cm}^2$.

Donc si on parle de l'optimisation de la cellule on doit choisir les sections efficaces de capture des électrons et des trous ($\sigma_n \approx 10^{-15} \text{ cm}^2$ et $\sigma_p \approx 10^{-20} \text{ cm}^2$).

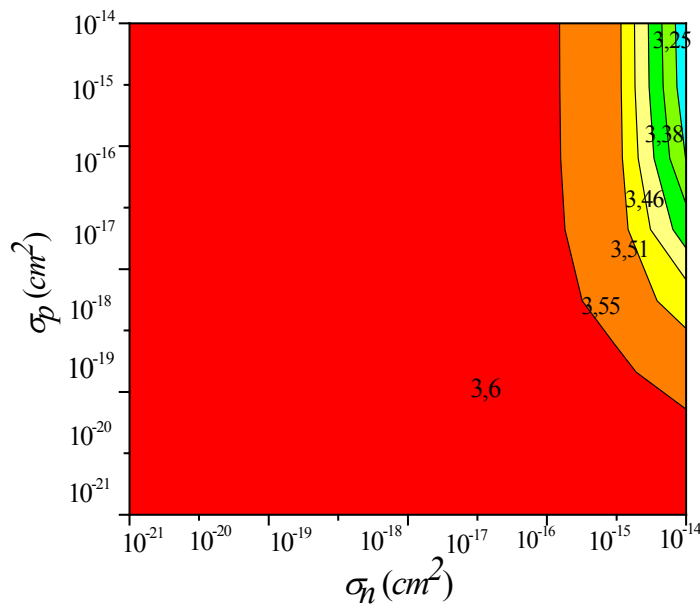


Figure 3.9 : L'influence de la section efficace de capture d'électrons et des trous simultanément sur le rendement η .

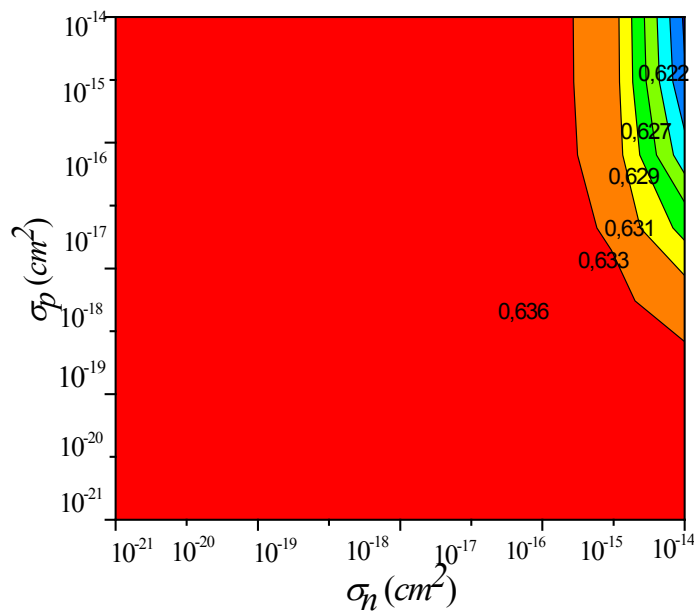


Figure 3.10 : L'influence de la section efficace de capture d'électrons et des trous simultanément sur la tension de circuit ouvert V_{oc} .

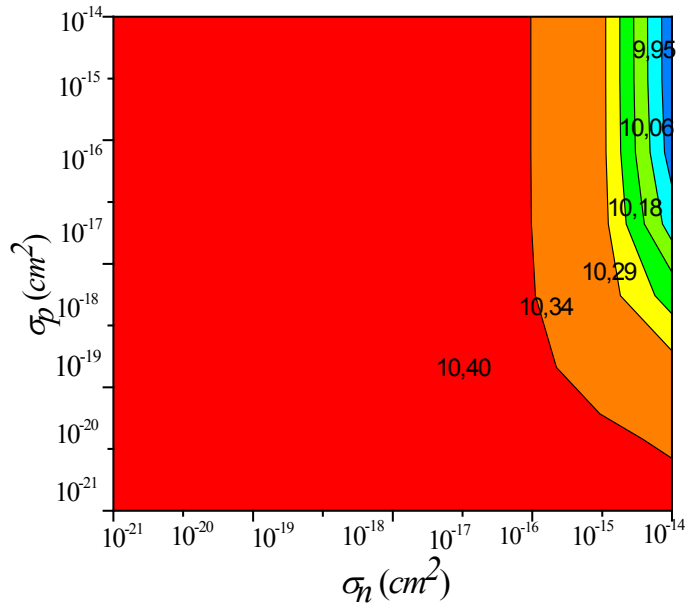


Figure 3.11 : L'influence de la section efficace de capture d'électrons et des trous simultanément sur le courant de court-circuit J_{sc} .

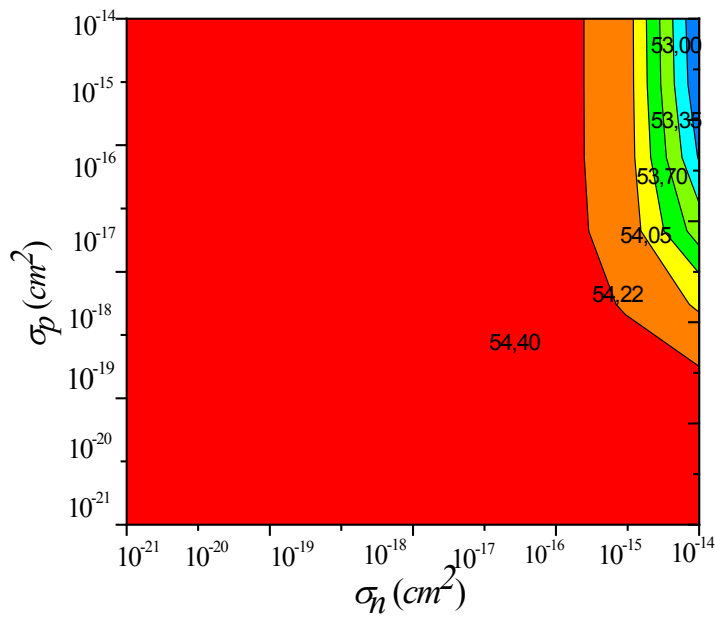


Figure 3.12 : L'influence de la section efficace de capture d'électrons et des trous simultanément sur le facteur de forme FF .

3.4.4 Effet de la température :

Une cellule photovoltaïque convertit l'énergie radiative (rayonnement) en énergie électrique avec un rendement compris entre 3% et 20% selon la technologie. Le reste de rayonnement est convertit en grande partie sous forme de chaleur. Ainsi, une cellule photovoltaïque mal ventilé voit sa température monter très rapidement [61].

Pour cela nous avons étudié l'effet de la température sur la caractéristique J - V de la cellule présentée dans la figure suivante :

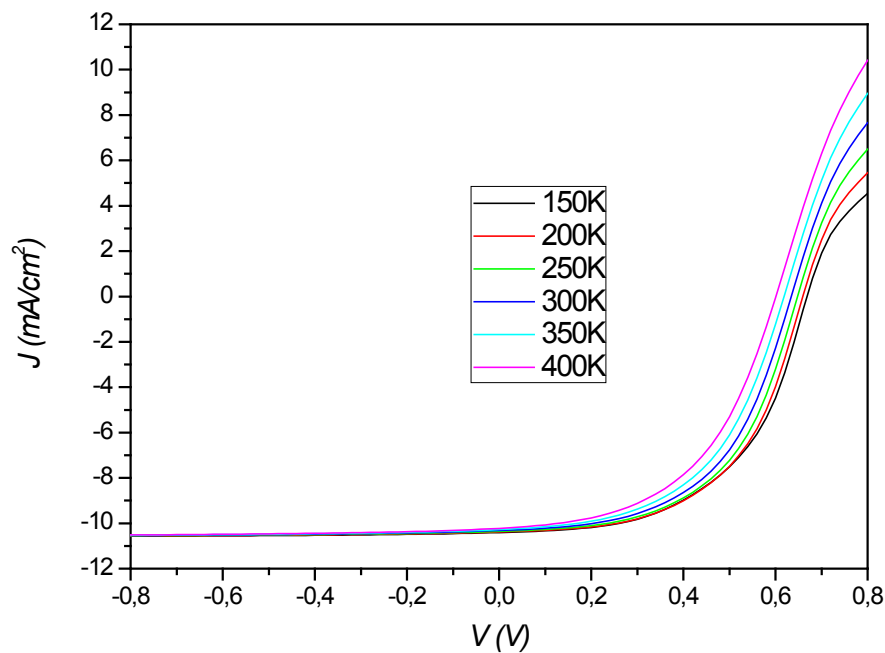


Figure 3.13 : Effet de la température sur la caractéristique J - V de la cellule.

Dans ce paragraphe, nous avons étudié l'influence de la température sur les performances de la cellule solaire P3HT/PCBM, dans cette étude nous avons fait varier la température entre 120K à 400K, nous avons obtenus les courbes suivantes :

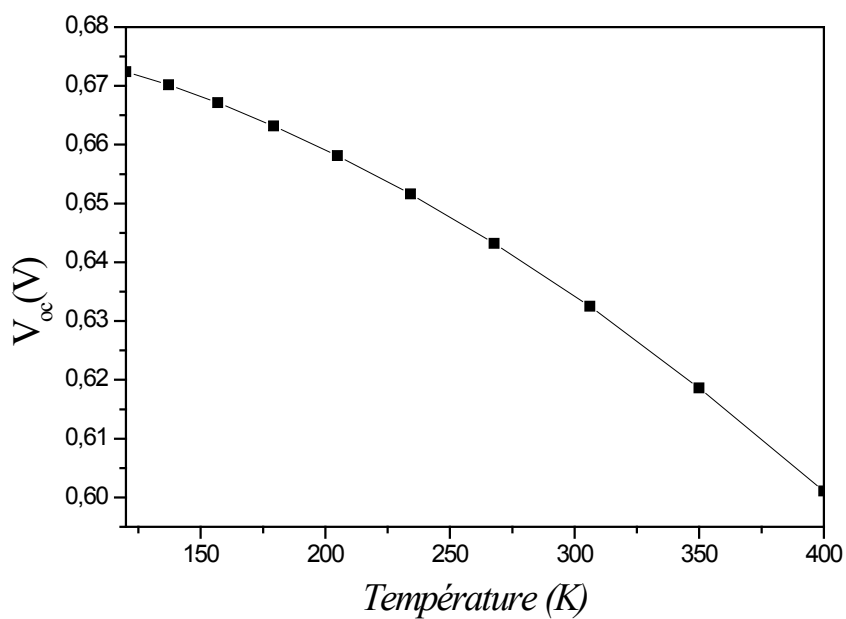


Figure 3.14 : La tension de circuit ouvert en fonction de la température.

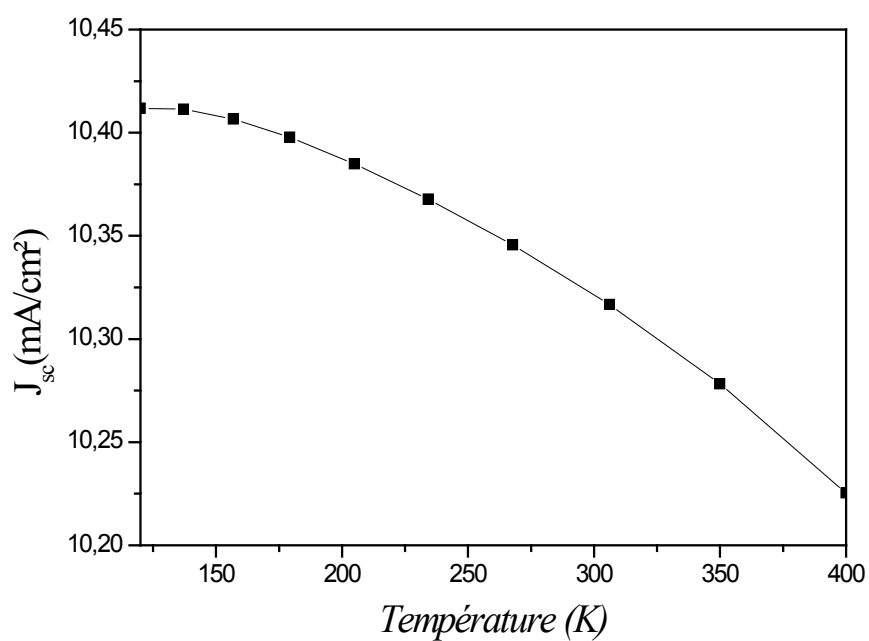


Figure 3.15 : Le courant de court-circuit en fonction de la température

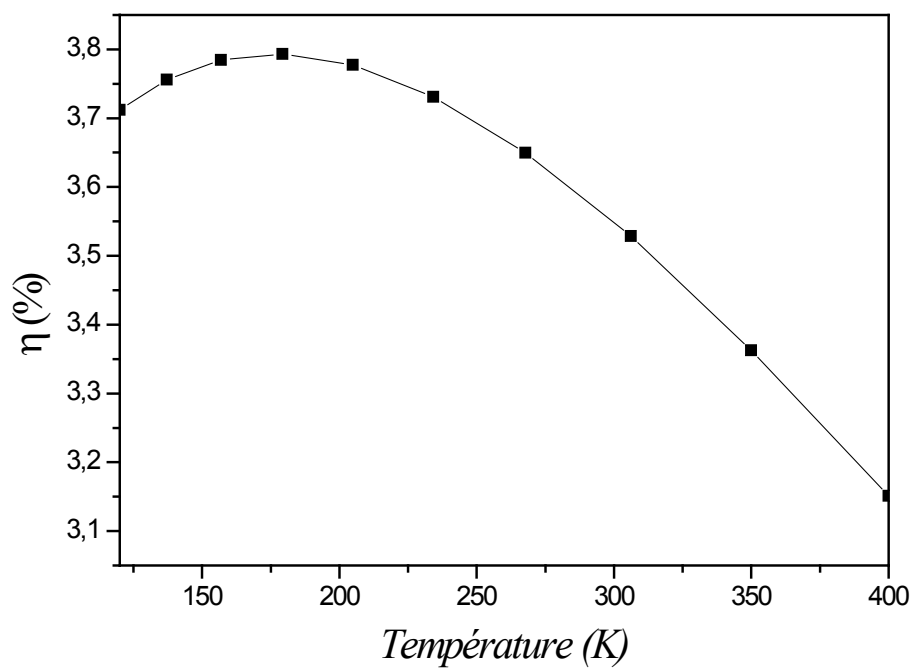


Figure 3.16 : Le rendement de conversion en fonction de température.

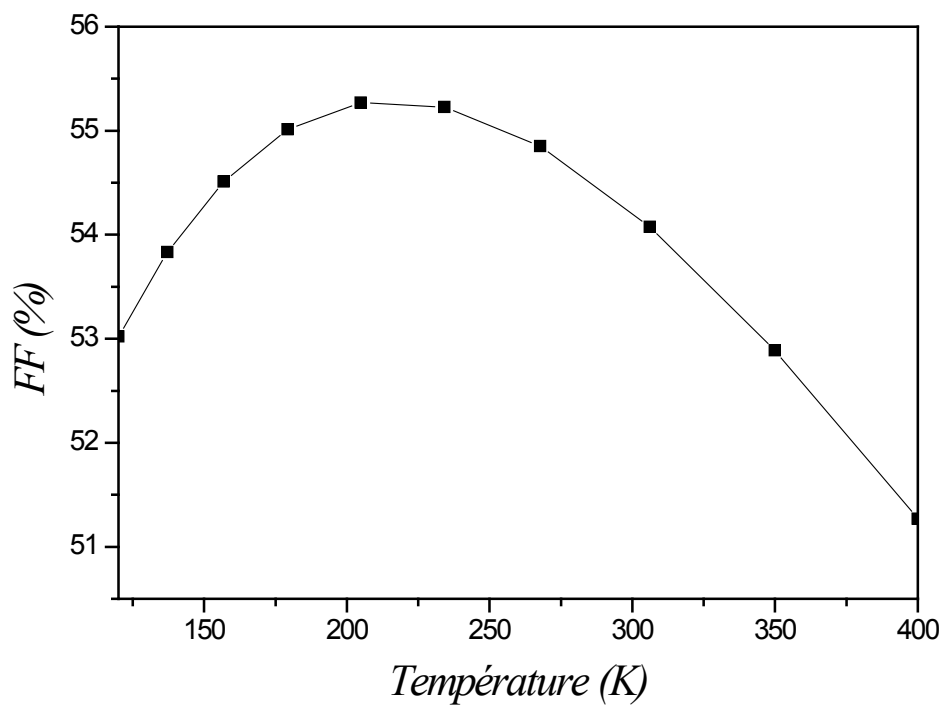


Figure 3. 17 : Le facteur de forme en fonction de température.

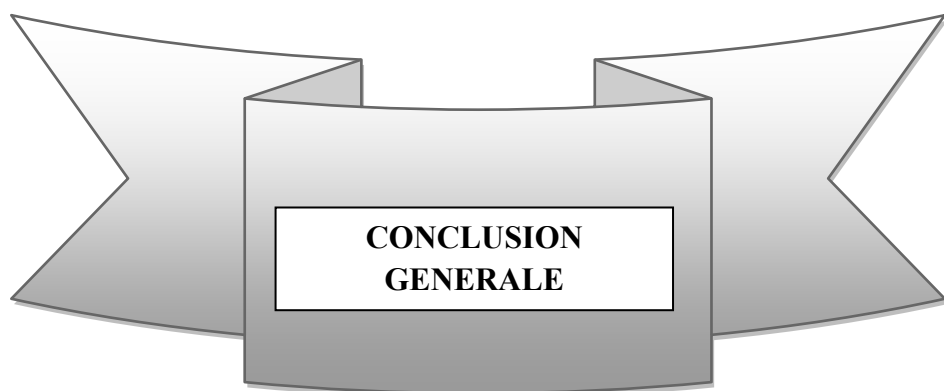
On observe que la température de la cellule photovoltaïque P3HT/PCBM étudié induit un effet notable sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}) de celle-ci.

Il apparaît que plus la température de la cellule augmente plus la tension de circuit ouvert à vide de celle-ci diminue lorsque la température est d'environ 350K la V_{oc} est de 0.62 V. Le rendement de conversion (η) de la cellule étant en fonction du produit du courant de court-circuit (J_{sc}) et de la tension de circuit ouvert, la même règle s'applique sur le rendement : plus la température de la cellule augmente, plus le rendement de celle-ci diminue si la température est d'environ 300K et 350K le rendement est d'environ 3.55% et 3.35%. Pour le facteur de forme il ya une augmentation (53 % jusqu'à 55.5 %) entre 150K à 300K après une diminution 54% jusqu'à 51% entre 300K à 400K [62].

Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons étudiés l'effet des pièges et de la température sur les caractéristiques de cellule solaire organique à base de mélange interpénétré P3HT/PCBM, et aussi nous avons présenté le modèle basé sur l'approche de milieu effectif et les résultats du simulateur SCAPS basé sur la structure hétérojonction en volume (P3HT/PCBM).

Ensuite, nous avons obtenue qu'à partir de 10^{16} cm^{-3} pour la densité des pièges on peut remarquer une diminution totale des caractéristiques photovoltaïques due à l'augmentation de la recombinaison non radiative. Puis nous avons étudié l'influence de la température sur les performances de la cellule étudiée et nous avons trouvé un bon rendement entre 3.8% et 3.7% pour des températures entre 175K et 275K et que la température a un effet notable sur la tension de circuit ouvert (V_{oc}).



Conclusion générale

La modélisation et la simulation pour les cellules solaires organiques sont importantes pour la conception et l'optimisation de la structure des cellules. Dans les cellules solaires organiques le processus moléculaires d'excitation, injection, transport de charge et de recombinaison dépassent le cadre de la physique des semi-conducteurs solides classiques [3,5].

Dans ce travail, nous avons étudié l'influence des pièges et de la température sur les performances de la cellule solaire organique à base de mélange interpénétré P3HT « poly (3 – hexylthiophène) » et le PCBM « phenyl-C61- butyric acid methyl ester ».

Dans le premier chapitre nous nous sommes intéressés aux matériaux organiques utilisés dans les cellules solaires organiques (OSC_s), ainsi qu'aux différentes structures des (OSC_s) et le principe de fonctionnement de ces dispositifs.

Dans le second chapitre nous avons présenté les différentes théories utilisées pour la modélisation de la caractéristique courant-tension $J-V$ des cellules solaires nano-structurées, ainsi le modèle choisi pour notre travail qui nous mène aux relations entre les propriétés des matériaux et les caractéristiques électrique des cellules, et puis nous avons cité les paramètres limitant les performances de ces derniers. Notre objectif est d'étudier l'effet des pièges et de la température sur les caractéristiques de la cellule étudiée, le courant de court-circuit (I_{sc}), la tension en circuit-ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF), et le rendement de conversion (η).

Enfin, le dernier chapitre présente la résolution de notre problème où nous avons cherché à étudier l'effet des pièges et de la température sur les caractéristiques de la cellule solaire à base de mélange interpénétré P3HT/PCBM à l'aide du simulateur solaire « SCAPS » un ensemble de paramètres a été construit qui simule les performances de la cellule étudiée, nous avons fait varier la densité des défauts dans la couche active dopé de type p, nous avons obtenue qu'à partir de 10^{16} cm^{-3} pour la densité des pièges on peut remarquer une diminution totale des caractéristiques photovoltaïques due à l'augmentation de la recombinaison non radiative, enfin nous avons étudié aussi l'influence de la température qui a été variée entre 120K et 400K. Il apparaît que la température a un effet notable sur la tension en circuit ouvert, plus la température de la cellule augmente plus la tension de circuit ouvert à vide de celle-ci diminue lorsque la température est d'environ 350K la V_{oc} est de 0.62 V, si la température est

d'environ 300K et 350K le rendement est d'environ 3.55% et 3.35%, nous avons trouvé un bon rendement entre 3.8% et 3.7% pour des températures entre 175K et 275K.

Pour conclure, le travail entrepris dans le cadre de ce mémoire ouvre une direction de recherche qui mérite à notre avis d'être approfondi.

**REFERENCES
BIBLIOGRAPHIQUES**

BIBLIOGRAPHIE

- [1] **A. Mahfoud** 18/02/2015, modélisation des cellules solaires tandem à couche minces et à haut rendement.
- [2] **W. Boursali** Modélisation et simulation de l'influence de la résistance série sur les caractéristiques I(V) d'une cellule photovoltaïque.
- [3] **Boukli Hacène (née Benyelles) Souhila** 2013-2014, Modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT : PCBM (effet de la mobilité et la vitesse de recombinaison en surface).
- [4] **François Baert**, 2 octobre 2015, Molécules conjuguées pour le photovoltaïque organique : impact de la rigidification sur les propriétés des matériaux. Chimie organique, 78148.
- [5] **Taibi Ibrahim** 20/09/2017, Modélisation et simulation des cellules solaires à base des matériaux organiques application à la structure P3HT : PCBM.
- [6] [https:// www.ossila.com/products/pentacène](https://www.ossila.com/products/pentacène).
- [7] [https:// www.wikipédia.com](https://www.wikipédia.com) polythiophènes.
- [8] **Tarek Bouguerra** 30/06/2014, Optimisation d'un système photovoltaïque : Application en continu et en alternatif.
- [9] **Sylvain Vedraïne** 26/10/2012, Intégration de nanostructure plasmoniques au sein de dispositifs photovoltaïques organiques : étude numérique et expérimentale. 7334.
- [10] **Soltane Zeghina** 2013, Simulation et analyse d'une cellule solaire organique.
- [11] [https://fr.wikipedia . org /wiki/semiconducteur](https://fr.wikipedia.org/wiki/semiconducteur).
- [12] **Malo Robin** 19/12/2017, Développement de transistors à effet de champ organiques et de matériaux luminescents à base de nanoclusters par impression à jet d'encre, IETR –UMR CNRS 6164 et ISCR-UMR CNRS 6226.
- [13] **Sophie Panozzo** 27/04/2004, Etude des propriétés électroniques de nouveaux composés organiques électroluminescents.
- [14] [https :// fr.wikipedia.org/wiki/exciton](https://fr.wikipedia.org/wiki/exciton).

- [15] **D.Boudrioua, M.Chakroun, A.Fischer**, 2017, Livre « Introduction aux lasers organiques ».
- [16] **Debili Narimene** 2014/2015, Etude et optimisation en environnement Matlab/Simulink d'un système de pompage Photovoltaïque. Magister en électronique.
- [17] **Quentin Bricaud** 22/10/2008, Nouveaux polymères π -conjugués pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire, 920.
- [18] <https://www.researchgate.net/figure/structured'unecelluledetype-Schottky-figure2-323384804>.
- [19] **Mohra Djawida** 23/05/2012, Modélisation et caractérisation des semi-conducteurs organiques.
- [20] <https://www.researchgate.net/figure/structured'unecelluledetype-bicouche-fig3-32338408>.
- [21] **Z.Bouزيد** 03/06/2014, Etude_theorique_des_cellules_solaires_PV_organiques_structure_reseau_interpenetre_polymer_conjugué_fullerene_et_cellules_Graetzel.
- [22] **GUANOUNE WALID** 23/12/2015, Simulations des performances des cellules solaires à base de matériaux organiques.
- [23] **GUANOUNE WALID** 23/12/2015, Simulations des performances des cellules solaires à base de matériaux organiques.
- [24] **Marc-Alexandre Arnaud** 11/09/2013, Modélisation multi-échelle de polymères conjugués pour le photovoltaïque organique : confrontation expérience/ théorie.
- [25] **Bernard Pagoaga** 03/12/2012, Synthèse de nouveaux semi-conducteurs dérivés du pérylène pour l'électronique organique.
- [26] **S. Tidjane**, Synthèse et caractérisation de nanocomposites conducteurs Poly(O-méthylaniline) /Maghnite.
- [27] **Rappels Bibliographique**, chapitre 1.
- [28] **A. Raies** 02/11/2015, Elaboration de films minces électroluminescents à base de polymère conducteur électronique et de nanotubes de carbone. N° 579.
- [29] <https://www.reseachgate.net/figure/24.processus-de-dopage-d'un-polymère-conducteur-a-polymère-conjugué-non-dope-b-fig12-27229088>. uploaded by Benouaz Tayeb.
- [30] **D. lincot, L. Escoubas, J. François Guillemoles, J. Jacquessimon et A. Slaoui** 2013, Chapitre 05 Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire.

- [31] **Ben Minnaert, Catelijne Grasso***, Marc Burgelman 2005, An effective medium model versus a network model for nanostructured solar cells. Department ELIS, University of Ghent, Pietersnieuwstraat 41, B-9000 Gent, Belgium.
- [32] **B. Minnaert, C. Grasso, M. Burgelman** C R chimie 741(2004) Nanostructured Material for solar Energy conversion.
- [33] **S. Boukli Hacène** and T. Benouaz*** Influence of charge carrier mobility and surface recombination velocity on the characteristics of P3HT:PCBM organic solar cells, Phys. Status Solidi A. 211, 862 – 868, (2014).
- [34] **W. Tress, M. Furno, K. Leo, and M. Riede** Numerical drift-diffusion modeling of organic solar cells in comparison with experimental data series, Institut fuer Angewandte Photophysik, Technische Universitaet Dresden, 01062 Dresden, Germany.
- [35] **Y. Tamai, H. Ohkita, H. Benten, and S. Ito** Exciton Diffusion in Conjugated Polymers: From Fundamental Understanding to Improvement in Photovoltaic Conversion Efficiency, Department of Polymer Chemistry, Graduate School of Engineering, Kyoto University, Katsura, Nishikyo, Kyoto 615-8510, Japan, Japan Science and Technology Agency (JST), PRESTO, 4-1-8 Honcho Kawaguchi, Saitama 332-0012, Japan.
- [36] **Benjamin. Y. Fink and Benjamin J. Schwartz** Drift-Diffusion Modeling of the Effects of Structural Disorder and Carrier Mobility on the Performance of Organic Photovoltaic Devices, Department of Chemistry and Biochemistry, UCLA, Los Angeles, California 90095-1569, USA, 2015.
- [37] Charge transport inorganic material, March 31, 2014 to April 2014, University of Bremen, Germany. <https://www.cecim.org/workshop-906-html>.
- [38] **P. Blom, V. Mihailetschi, L. Koster, and D Markov**, Device Physics of Polymer:Fullerene Bulk Heterojunction Solar Cells, Advanced Materials. **19**, 1551 – 1566, (2007).
- [39] The Extended Gaussian Disorder Model Atlas. https://www.silvaco.com/the_extended-gaussian-disorder-model.
- [40] **S. Khelifi, K. Decock, J. Lauwaert, H. Vrielinck, D. Spoltore, F. Piersimoni, J. Manca, A. Belghachi, M. Burgelman**, J. Appl. Phys. 110, 094509 (2011).
- [41] **F. Monestier**, "Amélioration de l'absorption photonique dans les cellules Photovoltaïques organiques". Thèse de Doctorat à l'Université Paul Cézanne Aix- Marseille III, France (2008).
- [42] **Fredrik. Jansson, Abo. Akademi**, charge transport in disordered materials, Simulation theory, and numerical modeling of hopping transport and electron hole recombination, University of ABO 2011.
- [43] **P. Langevin**, Ann. Chim. Phys. 28, 433 (1903), [M. Pope, C.E. Swenberg, Electron Process in Organic Crystals and Polymers, Oxford university Press, NY (1999).

- [44] **L. J. A. Koster, V. D. Mihailetschi, P. W. Blom**, Appl. Phys. Lett. 88, 052104 (2006).
- [45] **Thierry. Goudon, Veramic. Janovic and Christian. Schmeiser**, On the Schokley Read Hall, Model Generation – Recombinaation in semi-conducteurs. 2007.
- [46] **C.T. Sah, W. Shockley**, Phys. Rev. **109**, 103 (1958).
- [47] **K. Decock, S. Khelifi, M. Burgelman**, Thin Solid Films. **519**, 7481 (2011).
- [48] **V. I. Arkhipov, E. V. Emelianova, H. Bassler**, charge carrier transport and recombination at the interface between disorded organic dielectrics, in journal of applied physics 90(5) :2352-2357. Septembre 2001. Universitat Marburg. Hans Meerwein-Strasse Germany.
- [49] **S.Alem-Boudjemline**, Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques plastiques. Thèse de doctorat, Université d'Angers, 2004.
- [50] **S.Alem-Boudjemline**, Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques plastiques. Thèse de doctorat, Université d'Angers, 2004.
- [51] **A. Kavala**, what is difference between SRH model and Lanjevin recombination mode ? 10/10/2014. Indian Institute of Technology Hyderabad.
- [52] **Deibel**, Recombination in low mobility semiconductors Lanjevin theory, 4 April 2008.
- [53] **Fatima Zohra TAYAOUI**, Unité de Recherche « Matériaux et Energies Renouvelables. En Physique Energétique et Matériaux, 29 / 06 /2013, Utilisation de composites à base de polymères conjugués dans les cellules photovoltaïques pour la conversion du rayonnement solaire.
- [54] **Touka. Nassim**. Option : Cristallographie Dispersion des nano-cristaux semi- conducteurs dans des matrices à large bande interdite : Etude des propriétés optiques.
- [55] **Anthony Barbot**, Dopage par co-sublimation de semi-conducteurs organiques pour la conversion en énergie : Applications aux cellules photovoltaïques, Electronique. Université de Limoges, 2014. Français.
- [56] **V. A. Trukhanov, V.V. Bruevich, D.Yu. Paraschuk**. Effect of doping on performance of organic solar cells, International Laser Center and Faculty of Physics, M.V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia (Dated: December 1, 2011).
- [57] **W.C. Benmoussa*, S. Amara et A. Zerga**, Etude comparative des modèles de la caractéristique courant-tension d'une cellule solaire au silicium monocristallin, Unité de Recherche des Matériaux et des Energies Renouvelables, 'U.R.M.E.R'. Faculté des Sciences, Université Abou Bekr Belkaïd, B.P. 119, Tlemcen, Algérie.
- [58] **Ben Abderrazak Ghania** 2013/2014, Spécialité Physique des photovoltaïque, Mémoire de fin d'étude en Master Intitulé : Etude par simulation numérique de la Cellule solaire à base de CZTS par SCAPS.
- [59] **TOUAFEK Naïma**, Option : Semi-conducteurs en biomédecine, 15 / 06 / 2015,

- Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$.
- [60] **Samira Khelifi, Koen Decock, Johan Lauwaert, Henk Vrielinck, Donato Spoltore Fortunato Piersimoni, Jean Manca, Abderrahmane Belghachi, and Marc Burgelman,** Investigation of defects by admittance spectroscopy measurements in poly (3 hexylthiophene): (6,6)-phenyl C61-butyric acid methyl ester organic solar cells degraded under air exposure. *Journal of Applied Physics* 110, 094509 (2011); doi: 10.1063/1.3658023.
- [61] **S.Alem-Boudjemline,** Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques plastiques. Thèse de doctorat, Université d'Angers, 2004.
- [62] **M. Green,** "General temperature dependence of solar cell performance and implications for device modeling", in *progress in photovoltaic: Research and applications*, Vol. 11, pp. 333-340. Lklkm, 2003.

Résumé :

L'énergie solaire est une source d'énergie qui dépend du soleil. Cette énergie permet de fabriquer de l'électricité à l'aide des cellules solaires. Notre but dans ce travail est d'étudier l'influence des pièges et de la température sur les performances des cellules solaire organiques à base de matériau P3HT : PCBM. Pour cela on a choisis le modèle du milieu effectif (EMM) et pour la simulation par SCAPS qui est utilisé pour la modélisation des cellules solaires à base des couches minces, nous avons fait varier les paramètres des pièges, nous avons trouvé que le bon rendement est atteint avec la densité de piège ne dépasse pas 10^{-15} - 10^{-16} cm^{-3} , et pour la température est entre 120K et 400K, nous avons obtenus plus la température de la cellule augmente plus la tension de circuit ouvert de celle-ci diminue et les valeurs maximales de rendement trouvé entre 175K et 200 K étant en fonction du produit du courant de court circuit et de la tension de circuit ouvert.

Mots clés :

Cellule solaire organique, P3HT : PCBM, transport de charge, recombinaison, dopage, pièges, température.

Abstract :

Solar energy is a source of energy that depends on the sun. This energy makes it possible to manufacture electricity using solar cells. Our goal in this work is to study the influence of traps and temperature on the performance of organic solar cells based on material P3HT : PCBM. For this we chose the model of the effective medium (EMM) and for the simulation by SCAPS which is used for the modeling of the solar cells based thin layers, we varied the parameters of the traps, we found that the good performance is reached with the trap density does not exceed 10^{-15} - 10^{-16} cm^{-3} , and for the temperature is between 120K and 400K, we have obtained that maximum yield values found between 175K and 200K and being a function of the product of the short circuit current and the open circuit voltage.

Keywords :

Organic solar cell, P3HT: PCBM, charge transport, recombination, doping, traps, temperature.

ملخص

الطاقة الشمسية هي مصدر للطاقة يعتمد على الشمس. هذه الطاقة تجعل من الممكن تصنيع الكهرباء باستخدام الخلايا الشمسية. هدفنا في هذا العمل هو دراسة تأثير الشوائب ودرجة الحرارة على خصائص الخلايا الشمسية العضوية على أساس المواد P3HT : PCBM. لهذا قمنا باستخدام نموذج وسيلة فعالة و جهاز محاكاة الخلايا الشمسية (SCAPS) لنموذج خصائص الخلايا الشمسية و الذي يستخدم في نمذجة الخلايا الشمسية على اساس الطبقات الرقيقة قمنا بتغيير تركيز الشوائب وجدنا ان المردود يكون يتحقق مع كثافة الشوائب لا تزيد عن 10^{-15} - 10^{-16} cm^{-3} . و بالنسبة لدرجة الحرارة فهي ما بين 120K و 400K حصلنا على ان توتر التيار المفتوح ينقص مع زيادة درجة الحرارة و القيم القصوى للمردود الموجودة بين 175K و 200K كونها بدلالة تيار الدارة المستقصرة وتوتر التيار المفتوح P3HT : PCBM

الكلمات المفتاحية : الخلايا الشمسية العضوية - نموذج وسيلة فعالة - P3HT: PCBM - درجة الحرارة - الشوائب.