



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

UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCCEN

MEMOIRE

Présenté à :

FACULTE DES SCIENCES – DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

Pour l'obtention du diplôme de :

MASTER EN PHYSIQUE

Spécialité : Physique Energétique et Energie renouvelables

Par :

Hamidi Chaima

Sur le thème

Simulation et Optimisation des Paramètres Photovoltaïques de Matériau Pérovskite à l'aide du Simulateur SCAPS

Soutenu publiquement le 30 juin 2022 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr FEROUANI Abdelmajid
Mme RAHMOUN Khadija
Mr SEKKAL Abdessamad
Mme BENABADJI Batoul

Dr A.M.C Tipaza
Pr Université Tlemcen
Dr E.S.S.A . Alger
Dr Université Tlemcen

Encadrant
Co-Encadrant
Examineur
Président

Dédicaces

Je dédie ce travail ,

A mes chers parents mon père « Mohamed » et ma mère « Hemche
Nabila » pour leur
Patience, leur amour, leur soutien et leur encouragements.

A mes sœurs Hadjer et Alaa, sans oublier mon frère Mouad et ma
petite sœur Tasnim.

A Ma cousine Amina et ma famille lui est chère pour m'avoir
encouragé.

Merci à tous.

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, nous commençons à remercier Dieu, qui nous a donné le don de réflexion, de persévérance et de patience pour mener à bien ce travail.

Je tiens à remercier mon encadrant **Dr. FEROUANI Abdelmajid** , qui m'a accueilli chaleureusement et a accepté d'envoyer cette lettre, qui a toujours été disponible, ses encouragements et ses bons conseils m'ont été très utiles.

Nous remercions également notre Co-Encadrant **Pr. RAHMOUN Khadija** pour ses conseils.

Nous souhaiterons à la fin remercier les membres du jury **Dr BENABADJI Batoul** , **Dr SEKKAL Abdessamad** ,d'avoir acceptés de juger ce modeste travail.

ملخص : تعد الخلايا الكهروضوئية أفضل طريقة لتسخير الطاقة الشمسية عن طريق امتصاص إشعاع الفوتون. في هذا العمل ، تمت محاكاة خلية شمسية من البيروفسكايت تعتمد على خليط البيروفسكايت $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3)$ باستخدام محاكي SCAPS. يعمل Spiro-OMeTAD كطبقة نقل ثقب (HTL). تعزيز كفاءة خلايا البيروفسكايت الشمسية $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ من خلال ضبط التركيزات وسمك المنشطات لطبقات نافذة TiO_2 و Spiro-OMeTAD و ITO وسمك طبقة امتصاص الضوء من البيروفسكايت ، وجدت أن سماكة المنشطات هي التركيزات 10^{17} سم⁻³ و 3- و 0.1 ميكرومتر لـ ETL و 10^{22} سم⁻³ و 3- و 0.1 ميكرومتر لـ HTL و ITO لدينا قيم 10^{15} سم⁻³ و 3- و 0.1 ميكرومتر للسمك والتركيز الأمثل لتقديم أفضل أداء في ميكرومتر نتائج المحاكاة العديدة هذه تعني أفضل أداء تلامس للأجهزة الكهروضوئية ، وبالتالي توفير كفاءة عالية.

Résumé : Les cellules photovoltaïques sont le meilleur moyen d'utiliser l'énergie solaire en absorbant le rayonnement photonique. Dans ce travail on a simulé une cellule solaire à pérovskite basée sur la pérovskite mixte $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ en utilisant le simulateur SCAPS. Parmi le ETL, nous avons utilisé du TiO_2 pour de meilleures performances et avons montré un rendement de 14.62%. tandis que le Spiro-OMeTAD a été utilisé comme couche de transport de trous (HTL). Le rendement de la cellule solaire pérovskite à base $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ a été amélioré en ajustant les concentrations et l'épaisseur dans TiO_2 , la couche Spiro-OMeTAD , la couche fenêtre ITO et l'épaisseur de la couche absorbant la lumière pérovskite. Il a été constaté que l'épaisseur et la concentration de dopage de 10^{17} cm⁻³ et 0.1 µm pour ETL et de 10^{22} cm⁻³ et 0.1 µm pour le HTL et pour ITO on a 10^{15} cm⁻³ et 0.1 µm sont les valeurs d'épaisseur et de concentration optimales pour donner le rendement optimal. Une couche de pérovskite d'épaisseur 0.2µm. Ces résultats simulés numériquement signifient la performance optimale du dispositif photovoltaïque Ce qui a donné une grande efficacité.

Abstract : Photovoltaic cells are the best way to use solar energy by absorbing photon radiation. In this work a perovskite solar cell based on mixed perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ was numerically simulated using SCAPS simulator. Among the ETL, we used TiO_2 for better performance and showed an efficiency of 14.62%. while Spiro-OMeTAD was used as hole transport layer (HTL). The performance of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ based perovskite solar cell was improved by adjusting the doping concentrations and thickness in TiO_2 , Spiro-OMeTAD layer, ITO window layer and thickness of perovskite light absorbing layer. It was found that the thickness the doping concentration of 10^{17} cm⁻³ and 0.1 µm for ETL and 10^{22} cm⁻³ and 0.1 µm for HTL and for ITO we have 10^{15} cm⁻³ and 0.1 µm are the optimal thickness and concentration values to give the optimal performance .A perovskite layer thickness 0.2µm. These numerically simulated results mean the optimal performance of the photovoltaic device What gave a high efficiency.

Listes des acronymes et abréviations

Acronymes	Signification	Unité
J_{cc}	Densité de courant de court circuit	mA/cm ²
V_{co}	La tension de circuit ouvert	V
η	Le rendement	%
P_{max}	La puissance maximale	W.m ⁻²
FF	Le facteur de forme	%
E_g	L'énergie de gap	eV
X	Affinité électronique	eV
ϵ_r	Permittivité relative	
N_c	Densité d'états de la bande de conduction	cm ⁻³
N_v	Densité d'états de la bande de valence	cm ⁻³
μ_n	Mobilité des électrons	m ² .V ⁻¹ .s ⁻¹
μ_p	Mobilité des trous	m ² .V ⁻¹ .s ⁻¹
N_A	la concentration des accepteurs	cm ⁻³
N_d	la concentration des donneurs	cm ⁻³
N_t	Densité de défauts	cm ⁻³
Rsh	Résistance shunt	Ω .cm ²
Rs	Résistance en série	Ω .cm ²

Liste des acronymes et abréviations

Signe	Signification
ITO	L'oxyde d'indium d'étain
TiO ₂	Dioxyde de titane
CH ₃ NH ₃ Pb(I _{1-x} Br _x) ₃	Films mixtes bromure-iodure de plomb pérovskite
Spiro-OMeTAD	Spirobifluorène
Au	L' Or
SCAPS	Simulateur de capacité de la cellule solaire
DL1,DL2	couches de défauts d'interface

Liste des tableaux

Tableau I.1.: Présent le rendement de chaque cellule

Tableau I.2. : Comparaison entre les critères de chaque méthode

Tableau II .1 : paramètre d'entrée utilisés dans la simulation

Tableau III.1 : Paramètres électriques des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ avec et sans résistance de contact. **Cellule1 :**ITO/ETL(TiO_2)/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /HTL(Spiro-OMeTAD)/Au ;**Cellule2 :**ITO/ETL(TiO_2)/DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /DL2/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

Tableau III.2:Paramètres électriques des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Cellule2 : ITO/ETL(TiO_2)/DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /DL2/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

comparaison avec la cellule de référence (simulation et expérience).

Tableau III.3 : Paramètres d'entrés de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ de type : ITO/ETL(TiO_2)/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

Tableau III.4 : L'influence de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.5: L'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.6 : L'influence de la concentration de dopant N_D de la couche fenêtre de l'ITO sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.7 : L'influence de l'épaisseur de la couche TiO_2 sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.8 : L'influence de la concentration de dopant N_D de la couche TiO_2 sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.9 :L'influence de l'épaisseur de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.10 : L'influence de la concentration de dopant N_A de la couche de la couche Spiro-OMeTAD sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.11 : comparaison entre les paramètres de cellule de base et optimiser.

Tableau III.12 : L'influence de la température sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.13 : l'influence des résistances série (R_s) et parallèle (R_{sh}) sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Tableau III.14 : Paramètres électriques des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ (cellule optimiser) avec résistance.

Liste des figures

Figure I.1. l'énergie du soleil vers la terre

Figure I.2. le principe simplifié d'une jonction p-n

Figure I.3. Méthode de dépôt par enduction centrifuge en une étape

Figure I.4. Méthode de dépôt en deux étapes

Figure I.5. Méthode de dépôt par voir vapeur avec deux sources

Figure I.6. Méthode de dépôt de solution assistée par vapeur

Figure II .1. Structure standard d'une cellule à base de pérovskite

Figure II .2. Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action.

Figure II .3. Structure de la cellule solaire.

Figure III.1. Structure des cellules solaires à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).

(a)Cellule 1 : ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au ; (b)Cellule 2 : ITO / TiO_2 / DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au.

Figure III.2.Caractéristique J(V) de des cellules solaires à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).Cellule 1 en trait noir : ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au ; Cellule 2 en trait rouge : ITO / TiO_2 / DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au.

Figure III.3. la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court- circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Figure III.4. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Figure III.5. la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court- circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de la couche fenêtre de l'ITO.

Figure III.6. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de la couche fenêtre de l'ITO.

Figure III.7. la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court- circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de l'ITO.

Figure III.8. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de l'ITO.

Figure III.9 : la variation du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre de la couche ETL à base de TiO_2 et de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD.

Figure III.10 : la variation du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de la couche ETL à base de TiO_2 et de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD.

Figure III.11. Caractéristique $J(V)$ de des cellules solaires à base de pérovskites $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3)$ structure de base en trait noir; Structure optimiser en trait rouge.

Figure III.12. La variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la température.

Table des matières

Introduction générale.....	1
 Chapitre I : Généralité sur les cellules photovoltaïques	
I.1. Introduction.....	4
I.2. Le gisement solaire.....	4
2.1. Historique de photovoltaïque.....	5
2.2. Principe de la convention photovoltaïque.....	5
I.3. Cellules photovoltaïques.....	6
3.1. Définition d’une cellule photovoltaïque.....	6
3.2. Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques.....	6
I.4. Les filières technologique du photovoltaïque.....	7
4.1. Les cellules 1 ^{er} génération.....	7
4.2. Les cellules 2 ^{ème} génération.....	7
4.3. Les cellules 3 ^{ème} génération.....	8
I.5. Cellule pérovskite.....	9
a) Histoire.....	9
b) Dépôt de la couche pérovskite.....	9
I.6. Conclusion.....	13
 Chapitre II : choix de matériaux	
II.1. Introduction	15
II.2. Structure d’une cellule solaire pérovskite.....	15
a. Substrat	16
b. Contact métallique arrière.....	16
c. L’absorbeur	16
d. Couche tampon	16
e. Couche fenêtre.....	16
f. Couche avant contact métallique arrière.....	17

II.3. Simulation des cellules solaires.....17

II.4. Utilisation de logiciel SCAPS.....18

 4.1. Menue principale (Action panel).....19

 4.2. Définir le problème.....20

 4.3. Sélection des caractéristique à simuler.....20

II .5. Présentation de la structure de cellule solaire.....21

 5.1. Les paramètre de cellule solaire.....22

II .6. Conclusion.....23

Chapitre III :Résultats de simulation et discussion

III.1. Introduction.....25

III.2. Structure simulée de la cellule pérovskite.....25

III.3. Caractéristique électrique de la cellule solaire à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).....26

 III.3.1 la cellule solaire à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).....26

 III.3.2 Choix de la cellule solaire à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).....29

III .4. Etude de l'influence de l'épaisseur et la concentration de dopants.....29

 III.4.1 influence de l'épaisseur de l'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$29

 III.4.2 influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO.....32

 III.4.3 influence de la concentration de dopants de la couche de l'ITO.....34

 III.4.4 influence de l'épaisseur de la couche ETL(matériau de transport des électrons) à base de TiO_236

 III.4.5 influence de la concentration de dopant de la couche ETL (matériau de transport des électrons) à base de TiO_237

 III.4.6 influence de l'épaisseur de la couche HTL (matériau de transport des trous) à base de Spiro-OMeTAD.....38

 III.4.7 Influence de la concentration de dopant de la couche HTL (matériau de transport des trous) à base de Spiro-OMeTAD.....39

III.5. Structure optimisé.....42

III.6. Influence de la température sur les performances de la cellule solaire	44
III.7. Influence des résistance série (R_s) et parallèle (R_{sh}) sur les performances de la cellule solaire.....	45
III.8. Conclusion.....	47
Conclusion générale.....	48
Références bibliographiques.....	49

Introduction générale

L'énergie solaire est une source d'énergie propre et puissante permis d'autres énergies renouvelables. L'originalité de l'énergie photovoltaïque telle qu'on l'entend ici est de transformer directement la lumière solaire en électricité. Et quand on sait que l'apport énergétique solaire total sur la planète est de plusieurs milliers de fois supérieur à notre consommation globale d'énergie. De nombreuses cellules photovoltaïques ont vu le jour pour exploiter au mieux la lumière du soleil au travers de panneaux solaires. Afin de produire de l'électricité, ces cellules solaires constituées d'un matériau semi-conducteur qui convertit l'énergie du rayonnement solaire en électricité.

Le matériau pérovskite de formule $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ devient un bon collecteur de lumière grâce à ses caractéristiques remarquables telles que bande interdite réglable, absorption large spectre, bon mécanisme de transporteur, facilité de fabrication sur le substrat souple et la bande accordable en espace et longue longueur de diffusion. Les caractéristiques précitées de pérovskite aux halogénures sont encouragées à être utilisées dans la fabrication de la cellule solaire pérovskite.

Ces dernières années, les cellules solaires à base de pérovskite ont suscité un grand intérêt. Depuis lors, grâce aux nombreux travaux de recherche menés, l'efficacité de ces cellules s'est développée très rapidement et a récemment atteint un niveau record de 25,2 %. Plus précisément, ceux à architecture dite N-I-P (structure verre/structure ITO/couche N/couche pérovskite/couche P/électrode or) à base de pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

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

Ce mémoire ayant pour but l'étude de la structure de la pérovskite à base $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ afin d'améliorer le rendement. On s'intéressera dans un premier temps à l'étude de deux types de structures pérovskites dont le but est de comprendre l'influence de la structure de la pérovskite sur le fonctionnement des dispositifs. La simulation est effectuée par le simulateur numérique SCAPS unidimensionnel développé par ELIS, à l'université de

Gent en Belgique. Ensuite, l'influence de l'épaisseur et de la concentration de dopants des différentes couches de la cellule solaire pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ tel que la couche fenêtre de ITO ; l'absorbeur de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$; la couche tampon de TiO_2 (matériau de transport des électrons ETL); la couche métallique (matériau de transport des trous HTL à base de Spiro-OMeTAD) est étudié afin d'établir le dispositif complet. Finalement, la température et des résistances série (R_s) et parallèle (R_{sh}) seront intégrés au sein de la structure pérovskite a fin d'évaluer les performances et stabilités.

Ce mémoire est organisé comme suit:

Le premier chapitre présente des généralités sur les cellules photovoltaïques (définition, étapes de fonctionnement, types des matériaux utilisés). Dans le deuxième chapitre nous présentons la structure et les différentes couches de cellule solaire à base $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ ainsi que le simulateur SCAPS . Dans le dernier chapitre , nous présentons les résultats de la simulation obtenus. Nous avons effectué la simulation numérique par SCAPS dans le but d'optimiser le rendement électrique de la structure pérovskite de type ITO/ETL(TiO_2)/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /HTL(Spiro-OMeTAD)/Au. Nous allons déterminer l'influence des paramètres physiques et technologiques. Et nous terminons par une conclusion générale.

Chapitre I: Généralité sur les Cellules Photovoltaïques

I.1.Introduction

En raison du développement de l'industrie, du transport et des moyens de communication, une croissance de la consommation mondiale d'électricité a été observée pendant les dernières décennies. Cependant, la plupart de l'énergie électrique est produite par combustion de ressources non renouvelables (carbone, pétrole, gaz, nucléaire) dont le délai. D'épuisement est estimé à quelques décennies. De plus, ce type de production d'énergie est très polluant. Le développement des sources d'énergie renouvelables et non polluantes est donc d'actualité.

Parmi les différentes sources d'énergies renouvelables, on s'intéresse aujourd'hui à l'énergie solaire photovoltaïque, elle est une source très puissante. La puissance de rayonnement solaire global de 1000 W/m² atteint la surface de la terre . C'est une quantité intéressante et cette dernière a été exploitée par les chercheurs dans la production d'électricité par les panneaux solaires photovoltaïques.

I.2.Le gisement solaire

Contrairement aux autres sources d'énergie renouvelables, l'énergie solaire n'est pas affectée par les problèmes de dépôt et est disponible partout sur notre planète. Le Soleil est une étoile d'un rayon de 696 000 km et d'une masse de 1,99 x 10³⁰ kg. Sa température interne est d'environ 15 millions de Kelvin et il peut convertir 700 millions de tonnes d'hydrogène par seconde par des réactions de fusion atomique, ce qui équivaut à 386 milliards de mégawatts d'énergie[2]. Sous forme de rayonnement électromagnétique, une partie de cette énergie atteint la surface de la Terre. En dehors de l'atmosphère, la Terre reçoit en moyenne environ 5,5 kWh/m² d'énergie par jour. En traversant l'atmosphère, le rayonnement solaire se désintègre et modifie son spectre. Ainsi, la couche d'ozone absorbe la majeure partie du rayonnement ultraviolet, tandis que la vapeur d'eau absorbe le rayonnement infrarouge .Le rayonnement solaire au sol dépend donc de l'épaisseur de l'atmosphère traversée par les rayons lumineux et n'est donc pas homogène sur toute la surface de la Terre. Pour tenir compte de ces différences, on introduit un coefficient x appelé masse atmosphérique ou nombre d'air masse (AM) dont l'expression est :

$$AM=1/(\sin\theta-1) \quad (1)$$

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

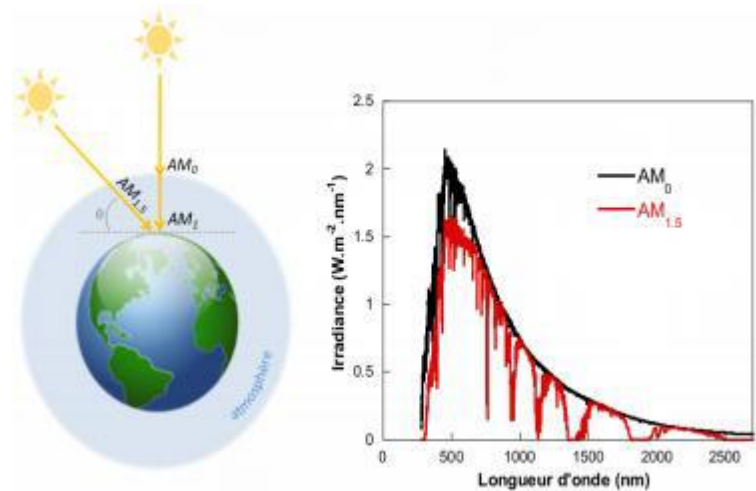


Figure I.1 : l'énergie du soleil vers la terre[2]

2.1. Historique de photovoltaïque

En 1839 le physicien français Alexandre Edmond Becquerel Les premières découvertes de l'effet photovoltaïque, la possibilité de produire de l'électricité grâce à la lumière et la présence de matériaux semi-conducteurs comme le silicium.

Naissent les premières cellules photovoltaïques Après 1913, mais Robert Millikan parvient à produire un courant continu en 1916. Le premier véritable panneau solaire, avec un rendement de 6 %, est développé en 1954 par les chercheurs des laboratoires Bell [2].

En 1958, les américains lancent que les premiers satellites avec panneaux solaires sont envoyés dans l'espace et au même moment une cellule avec un rendement de 9% est mise au point.

En 1973, la première maison photovoltaïque a été construite à l'Université du Delaware. Au cours des années 1980, la technologie photovoltaïque terrestre a connu des progrès constants avec l'installation de plusieurs centrales électriques d'une capacité de quelques mégawatts.

En 1983 la première voiture, alimentée par énergie photovoltaïque, parcourt une distance de 4 000 km en Australie[3].

2.2. Principe de la convention photovoltaïque

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière[4].

I.3. Cellule photovoltaïque

3.1. Définition d'une cellule photovoltaïque

La cellule photovoltaïque est composée de fines plaques de 125 mm² ou de 156 mm² à l'avant et de deux conducteurs métalliques, produisant un contact électrique. Son épaisseur est de l'ordre du millimètre. La cellule photovoltaïque est un générateur électrique élémentaire qui transforme directement l'énergie solaire en électricité. Le plus souvent, les cellules photovoltaïques sont en silicium.

Dans la cellule photovoltaïque, l'absorption des photons libère des électrons chargés négativement et des « trous » chargés positivement. Ceux-ci sont récoltés par une électrode, ce qui crée une différence de potentiel entre les deux bornes. La cellule photovoltaïque délivre une **tension continue**[5].

3.2. Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques

Les cellules photovoltaïques utilisent l'effet photoélectrique pour générer du courant continu en absorbant le rayonnement solaire. Cet effet permet aux cellules de convertir directement l'énergie lumineuse des photons en électricité à travers le matériau semi-conducteur porteur de charge.

Les cellules photovoltaïques sont constituées de deux types de matériaux semi-conducteurs, l'un avec un excès d'électrons et l'autre avec un déficit. Ces deux parties sont appelées "dopage" de type n et de type p, respectivement. Le dopage des cristaux de silicium consiste à leur ajouter d'autres atomes pour augmenter la conductivité du matériau.

Un atome de silicium possède 4 électrons périphériques. Une des couches de la batterie est dopée avec des atomes de phosphore, eux-mêmes à 5 électrons (soit 1 de plus que le silicium). Nous disons que le dopage de type n est négatif car les électrons (chargés négativement) sont redondants. L'autre couche est dopée avec des atomes de bore qui ont 3 électrons (1 de moins que le silicium). On parle de dopage de type p comme positif en raison du déficit d'électrons ainsi créé. Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau n diffusent dans le matériau p.

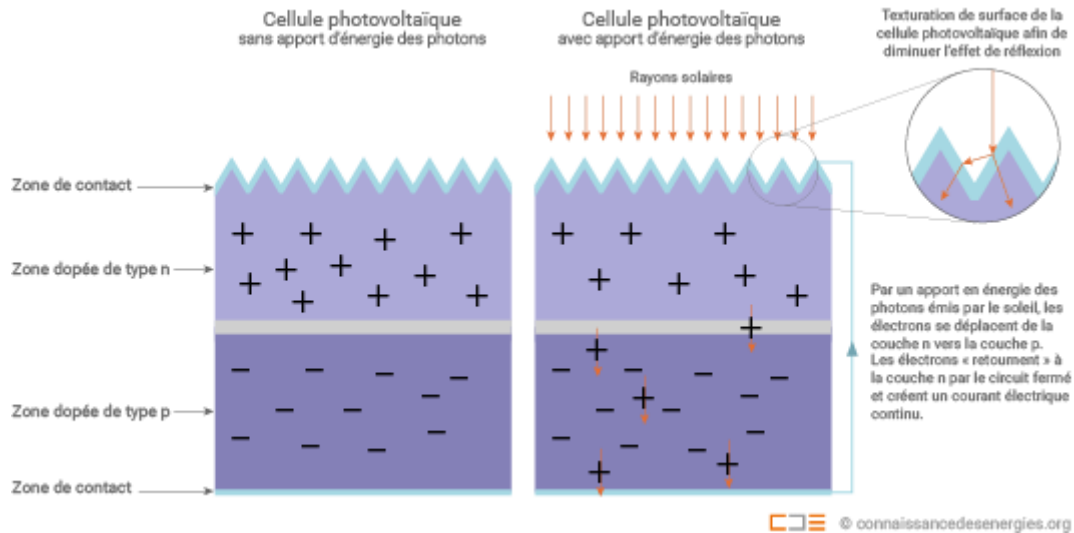


Figure I.2 : le principe simplifié d'une jonction p-n [6]

En traversant la cellule photovoltaïque, les photons arrachent des électrons aux atomes de silicium des deux couches n et p. Les électrons libérés se déplacent alors dans toutes les directions. Après avoir quitté la couche p, les électrons empruntent ensuite un circuit pour retourner à la couche n. Ce déplacement d'électrons n'est autre que de l'électricité[7].

I.4. Les filières technologique du photovoltaïque

4.1. Les cellules 1^{er} génération

Les cellules de première génération étaient basées sur une seule jonction PN, utilisant généralement du silicium sous forme cristalline comme matériau semi-conducteur. Le silicium est fondu puis refroidi pour obtenir des cristaux, qui sont tranchés en fines tranches (wafers) pour obtenir des cellules photovoltaïques. Ce mode de production est très énergivore et donc très coûteux. Il nécessite également du silicium de haute pureté. Il existe une différence entre les cellules en silicium monocristallin et poly cristallin.

4.2. Les cellules 2^{ème} génération

Les couches minces constituent la seconde génération de technologie photovoltaïque. Dans cette génération, on distingue le silicium amorphe (a-Si), le di sélénium de cuivre indium (CIS), le tellure de cadmium (CdTe), entre autres,... Dans le cas de couches minces, la couche de semi-conducteur est directement déposée sur un substrat (ex : verre, plastique,...). La production de ce type de cellules est moins coûteuse que celle de 1^{ère} génération puisqu'elles consomment moins de matériaux semi-conducteurs et ne nécessitent pas de passer par l'étape de transformation en « wafers ».

4.3. Les cellules 3^{ème} génération

La troisième génération vise à passer la limite maximale de rendement des cellules actuelles, qui est d'environ 30 %. Plusieurs concepts sont retenus pour atteindre cet objectif :

- Superposition de multiples cellules (utilisant des bandes d'énergie différentes)
- Cellules à concentration
- Utilisation de photons à basse énergie qui ne sont généralement pas suggérés par la cellule
- Cellules à électrons chauds produisent plus de paires d'électron/trou pour des énergies supérieures à la bande d'énergie
- Conversion des photons pour ajuster le spectre de la lumière solaire aux caractéristiques du semi-conducteur

Tableau I.1. :Présent le rendement de chaque cellule

Type	Rendement cellule (en labo)	Module (en labo)	Module (commercial)	Niveau de développement
1ère génération				
Silicium monocristallin	24,70%	22,70%	12-20%	+ Très bon rendement + Sensibilité accrue aux rayonnements directs
Silicium poly cristallin	20,30%	16,20%	11-15%	+ Bon rendement (moins bon que les cellules monocristallines) + Sensibilité accrue aux rayonnements directs - Forte sensibilité à la température
2e génération				
Silicium amorphe	13,40%	10,40%	5-9%	
Silicium cristallin en couche mince		9,40%	7%	+ Sensibilité accrue aux rayonnements diffus + Moins sensible à l'ombrage dû à la forme longitudinale des cellules
CIS	19,30%	13,50%	9-11 %	+ Moins de matériau de base pour la fabrication
CdTe	16,70%		6-9%	+ Moins sensible aux fortes températures + permet la fabrication de panneaux souples et flexibles - Certains éléments très polluants

				lors de la fabrication (cadmium) - Performance diminuant dans le temps - Rendement plus faible
3e génération				
Cellule organique	5,70%			+offrent un gros potentiel +faible coût +faible impact environnemental. -il faut beaucoup de travail.
Cellule de Grätzel	11%	8,40%		
Cellules multi-jonctions	39%	25-30%		

Il existe un autre type de cellule solaires de troisième génération appelé pérovskite , dont nous parlerons dans notre rubrique.

I.5. Cellule pérovskite

Une cellule photovoltaïque à pérovskites est un type de cellule photovoltaïque qui comprend un élément chimique ayant une structure de pérovskite, le plus souvent un hybride organique-inorganique de plomb ou un halogénure d'étain, dans sa couche active.

Elle est passée de 3,8% en 2009 à 25,2% en 2019, et 29.1% pour le tandem de pérovskite et de silicium, soit une efficacité supérieure aux cellules photovoltaïques à simple jonction en silicium. Les cellules à pérovskites sont donc à ce jour la technologie solaire ayant connu le développement le plus rapide de l'histoire[8].

c) Histoire

L'utilisation des pérovskites pour l'application photovoltaïque a débuté avec les travaux du groupe du professeur Tsutomu Miyasaka.

En 2012 les premières cellules pérovskites voient véritablement le jour grâce au professeur Grätzel et au professeur Park avec un rendement de 3,81%.

En 2013, des travaux a créé une cellule photovoltaïque en posant une couche de pérovskites par évaporation[9] .

Quelque temps après, la réalisation d'une cellule pérovskite dopée au chlore permettant une amélioration des performances par le professeur Snaith , cette avancée est permis d'atteindre des rendements de l'ordre de 10,9%. Le développement de ce type d'architecture a ouvert la voie aux cellules solaires pérovskites développées aujourd'hui dans les laboratoires.

d) Dépôt de la couche pérovskite

Le dépôt de la couche de pérovskite peut se faire selon plusieurs voies (liquide ou gazeuse) et en une ou plusieurs étapes. Le procédé employé pour le dépôt de la couche pérovskite a un impact direct sur les performances des cellules solaires ainsi que sur leur stabilité, par conséquent il est primordial de choisir une méthode de dépôt la plus adaptée possible.

- **Dépôt des précurseurs en une étape**

Cette méthode de dépôt est la plus utilisée pour la fabrication des couches minces, Cette technique est constituée d'une seule étape. Un complexe de pérovskite-solvant est formé dans la solution de précurseurs puis cette dernière est ensuite déposée par enduction centrifuge. Le programme d'enduction est ensuite déclenché (adapté selon l'épaisseur voulue de la couche), à la fin du dépôt le film pérovskite est recuit afin de terminer le processus de cristallisation.

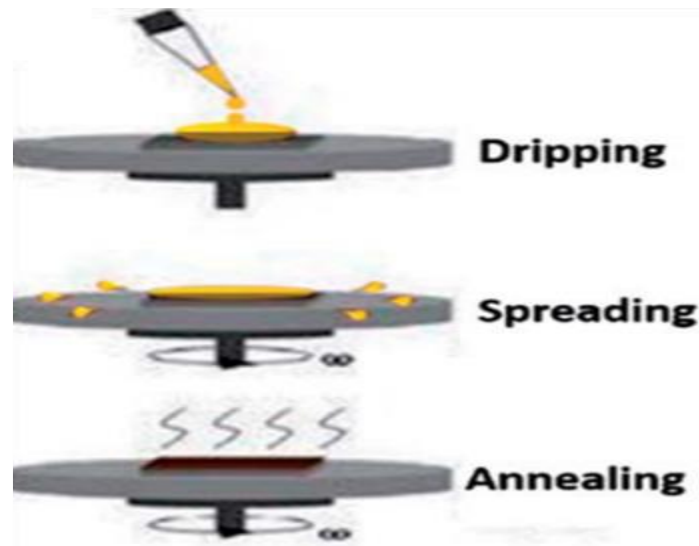


Figure I.3 : Méthode de dépôt par enduction centrifuge en une étape[10]

- **Dépôt en deux étapes :**

Elle consiste à déposer dans une première étape un film d'iodure de plomb par enduction centrifuge. Le substrat est ensuite trempé dans une solution d'iodure de méthyl ammonium dont le solvant est l'isopropanol. Le substrat est recuit à la suite de ce traitement pour finaliser la formation et cristallisation de la pérovskite. Les autres couches sont généralement déposées par enduction centrifuge.



Figure I.4 : Méthode de dépôt en deux étapes[11]

- **Dépôt par voie vapeur avec deux sources :**

Pour cette technique, une source contient le précurseur de type organique (MAI, FAI...) et l'autre source contient le précurseur inorganique : l'iodure de plomb. L'évaporation simultanée des deux réactifs permet une formation de la pérovskite directement sur le substrat.

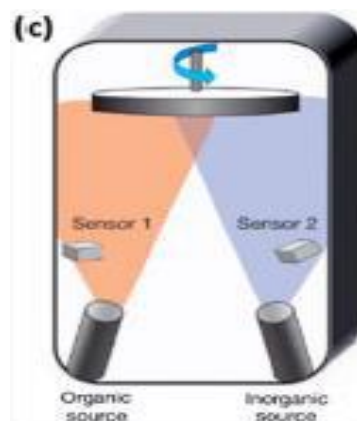


Figure I.5 :Méthode de dépôt par voir vapeur avec deux sources[11]

- **Dépôt de solution assisté par vapeur :**

Cette technique est un mélange des deux dernières méthodes présentées précédemment. Ainsi une couche d'iodure de plomb est déposée par enduction centrifuge sur un substrat composé d'une couche méso-poreuse de dioxyde de titane. Le substrat est ensuite exposé à des vapeurs de méthyl ammonium pendant deux heures, sous atmosphère inerte (azote), pression ambiante et à 150°C. Les films obtenus sont très homogènes, les performances des cellules sont également très bonnes.

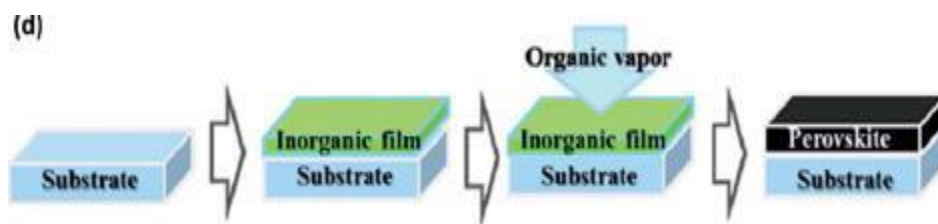


Figure I.6 :Méthode de dépôt de solution assistée par vapeur [11]

Type	Niveau de développement
Dépôt des précurseurs en une étape	Cette technique permet d'adapter facilement l'épaisseur de la couche désirée. cette méthode de dépôt étant la plus répandue dans les laboratoires de recherche.
Dépôt en deux étapes	cette technique permet un meilleur contrôle de la formation de la pérovskite puisqu'elle induit un meilleur confinement de l'iodure de plomb dans le réseau poreux.
Dépôt par voie vapeur avec deux sources	Cette technique est au final peu utilisée car elle requiert beaucoup d'énergie et de nombreux réglages pour travailler sous vide. Des problèmes de contamination sont de plus récurrents avec cette technique, limitant grandement la reproductibilité des résultats.
Dépôt de solution assisté par vapeur	La technique est simple et peu couteuse en énergie comparée à la méthode de dépôt par voie vapeur avec deux sources. Cette technique fonctionne très bien pour des architectures de cellules possédant une structure méso-poreuse de dioxyde de titane

Tableau I.2. : Comparaison entre les critères de chaque méthode.

I.6.Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté un aperçu sur l'énergie photovoltaïque, le principe de fonctionnement, l' historique, nous avons présenté aussi les cellules photovoltaïques et citez les types des matériaux utilisés pour leur fabrication pour chaque génération (1ère, 2^{ème} et 3^{ème} génération).On n'en déduit que le meilleur rendement est porté par les cellules au silicium monocristallin 24,70%mais pour des raisons économiques et le cout faible du silicium multi cristallin (Poly cristallin) cette technologie est devenue actuellement la plus utilisée. D'autres technologies récentes des cellules solaires à pérovskite offrent un potentiel important en termes d'amélioration du rendement tout en réduisant les coûts de fabrication, ces cellules feront l'objet de notre étude dans les chapitres suivants.

Chapitre II : choix de matériaux

II .1.Introduction

En raison de son abondance, l'énergie solaire devient l'une des principales sources d'énergie pour remplacer les combustibles fossiles. Les cellules solaires absorbent les photons pour convertir l' énergie solaire en énergie électrique. Des recherches et des efforts immenses se fait chaque jour pour trouver ou bien développé les techniques et les technologies photovoltaïques existant, au rendement efficace et dont le procédé de fabrication est peu coûteux en énergie. C'est dans cette logique qu'aujourd'hui on s'intéresse aux cellules solaires de 3ème génération dont font partie les pérovskites, sont développées depuis quelques années.

Dans ce chapitre nous avons présenté différentes couches constituant d'une cellule solaire à base de pérovskite . Ensuite nous présentons le logiciels SCAPS [12]et sa façon d'utilisation.

II .2. Structure d'une cellule solaire pérovskite

Dans sa configuration la plus répandue, une cellule pérovskite est formée d'un empilement de plusieurs matériaux en couches minces déposés successivement sur un substrat. la structure n-i-p fabriquée expérimentalement à l'aide d'un précurseur de pérovskite mixte (ITO/TiO₂/CH₃NH₃Pb(I_{1-x} Br_x)₃/Spiro-OMeTAD/Au) a été utilisée.

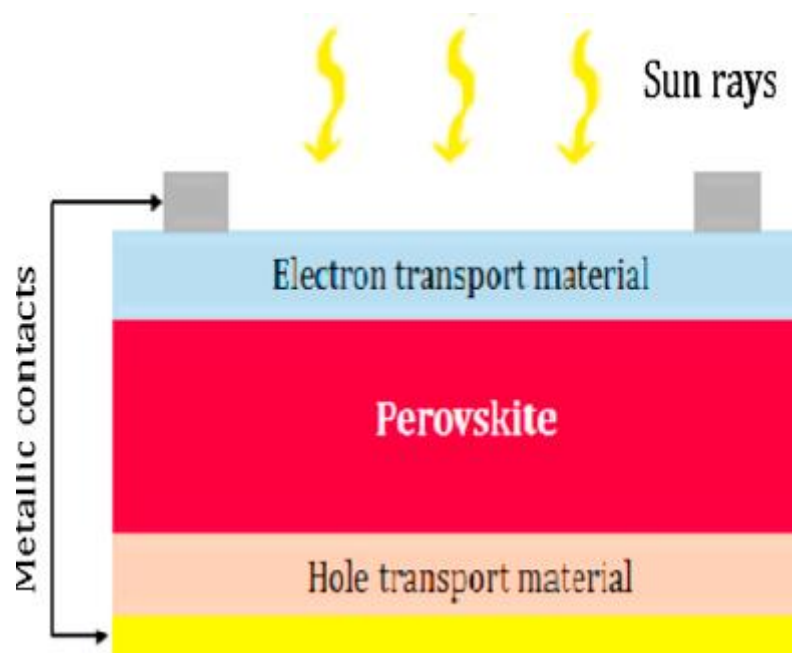


Figure II .1 : Structure standard d'une cellule à base de pérovskite [13]

a) Substrat

Le substrat est le support permettant la tenue mécanique des différentes couches, dont l'empilement ne dépasse pas quelques micromètres d'épaisseur. Il doit répondre à différents critères chimiques et mécaniques, qui le rendent apte à suivre toutes les étapes de fabrication de la cellule, sans en détériorer la qualité, tout en ayant un coût limité. Il existe trois catégories de substrat : les oxyde , les métaux, et les polymères.

b) Contact métallique arrière

La première couche déposée sur le substrat est l'électrode de contact arrière. Elle a pour rôle principal de collecter les charges générées dans la cellule. D'un point de vue électrique, elle constitue le pôle positif du générateur photovoltaïque. Cette couche est composée de molybdène (Au) .

c) L'absorbeur :

La couche située directement au-dessus couche de transport de trous est composée du matériau absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$, Une couche de pérovskite d'halogénure métallique mixte.

d) Couche tampon :

Le $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ est formée en ajoutant une couche appelée couche tampon(Couche de transport d'électron) Cette couche est située au-dessus de l'absorbeur et plus fréquente dans le cas des architectures NIP est le dioxyde de titane (TiO_2) . Cette dénomination provient du fait qu'elle joue aussi un rôle de protection physique du, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ lors du dépôt par pulvérisation cathodique des couches suivantes . Actuellement, les meilleurs rendements sont obtenus en utilisant des couches tampon à base de dioxyde titan (TiO_2). cette couche fait intervenir des températures de frittage élevées (500°C). Le TiO_2 a l'inconvénient d'être sensible aux rayonnements UV possède une faible mobilité de charges .Aussi, c'est le matériau le plus utilisé ($\text{Zn}(\text{O}, \text{S})$, $(\text{Zn}, \text{Mg})\text{O}$, $\text{In}_2(\text{S}, \text{Se})_3$, etc....)

e) Couche fenêtre :

La couche tampon est recouverte d'une couche fenêtre . Cette couche est composée d'un dépôt d'Oxyde Conducteur Transparent (Transparent Conducting Oxyde , TCO) qui défini par une forte conductivité électrique combinée avec une faible absorption dans le visible

et d'un dépôt d'oxyde de zinc (ZnO). La couche de ZnO est résistive et sert à limiter la formation de court-circuit dans les zones présentant un recouvrement imparfait du $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ par la couche tampon [13]. Les TCO les plus utilisés sont l'oxyde d'indium d'étain (Indium Tin Oxyde, ITO) déposés par pulvérisation cathodique et le ZnO dopé aluminium (ZnO : Al). Le TCO permet à la couche fenêtre de constituer en partie le contact avant de la cellule photovoltaïque tout en étant transparente au rayonnement solaire, ce dernier devant être évacué dans la couche de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

f) Couche avant contact métallique arrière

Spiro-OMeTAD a été utilisé comme couche de transport de trous, est largement utilisé pour produire des PSC à haut rendement et bon alignement des niveaux d'énergie. Cette dernière fait partie de la famille communément appelée « petites molécules »

Spiro-OMeTAD est prouvée HTL le plus approprié pour tester les PSC en raison de sa mise en œuvre facile et haute performance. De même, Spiro-OMeTAD retient l'attention dans d'autres applications autres que dans les cellules solaires en raison des propriétés souhaitables.

Les polymères les plus couramment employés pour l'application en cellule pérovskite sont le P3HT (poly(3-hexylthiophène)), le PTAA (poly(triaryl amine)) et le PEDOT:PSS (poly(3,4-éthylène dioxythiophène) et le poly(styrène sulfonates) de sodium).

II .3.Simulation des cellules solaires

L'étude de la plus part des dispositifs à semi-conducteurs est basée sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. Il calcule à chaque instant et en tout point de l'espace en une suite d'éléments finis, la concentration des électrons et des trous et la valeur du potentiel électrostatique. L'équation de Poisson définit la relation entre le potentiel et la densité des porteurs

$$\Delta V = -q\varepsilon (N_d - N_a + p - n) \quad (\text{II.1})$$

Où :

ε : est la constante diélectrique (F/cm)

V : le potentiel (V)

q : est la charge élémentaire d'électrons (A. s)

N_d et N_a : sont les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisées (cm^{-3})

n et p sont les densités des porteurs (C/cm)

L'évolution temporelle des densités de porteurs obéit aux équations de continuité pour

Respectivement les électrons et les trous :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = G - U_n + \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{J}_n \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = G - U_p + \frac{1}{e} \operatorname{div} \mathbf{J}_p \quad (\text{II.3})$$

Où :

\mathbf{G} et \mathbf{U} sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs, et sont respectivement les densités de courant des électrons et des trous.

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle d'entraînement-diffusion. Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier correspond à l'entraînement des charges par le champ électrique et le second correspond à la diffusion des porteurs.

$$\mathbf{J}_n = q n \mu_n \mathbf{E} + q D_n \operatorname{grad} n \quad (\text{II.5})$$

$$\mathbf{J}_p = q p \mu_p \mathbf{E} + q D_p \operatorname{grad} p \quad (\text{II.6})$$

Où : D_n, D_p sont les coefficients de diffusion

II.4. Utilisation du logiciel SCAPS

SCAPS est un programme de simulation de cellules solaires unidimensionnel à haute performance destiné à décrire le comportement électrique d'appareils utilisant des matériaux semi-conducteurs à cristaux. Il a été spécialement créé pour simuler des dispositifs photovoltaïques. Il a été développé par de nombreux chercheurs par le Département des systèmes électroniques et informatiques de l'Université de Gand. [14] Il est à la disposition des institutions et instituts de recherche photovoltaïque, en tenant compte de tous les facteurs qui peuvent limiter les performances photoélectriques dans les cellules solaires par exemple: réflexions externes, installation, et couverture de surface. Indépendamment des facteurs primaires, à savoir: épaisseur et activation des zones avant et de base. Ce programme fonctionne sur les ordinateurs sous Windows.

Nous allons présenter des généralités sur le programme SCAPS, comment le faire fonctionner et l'utiliser, et ceci en mentionnant les étapes les plus importantes, et nous aborderons également la définition des classes qu'il contient.

Afin de simuler et contrôler tous les paramètres d'un dispositif photovoltaïque au moyen du Logiciel SCAPS nous devons passer par trois grandes fenêtres :

- Fenêtre d'exécution (« action panel ») ;
- Fenêtre de conception de dispositif et la définition du problème
- Fenêtre des résultats.

4.1. Menu principal (Action panel)

SCAPS s'ouvre avec l'icône 'Action Panel'. La fenêtre qui s'ouvre on modifie les paramètres : la température, la résistance série et parallèle et les paramètres d'illumination est présentée dans la figure suivante:

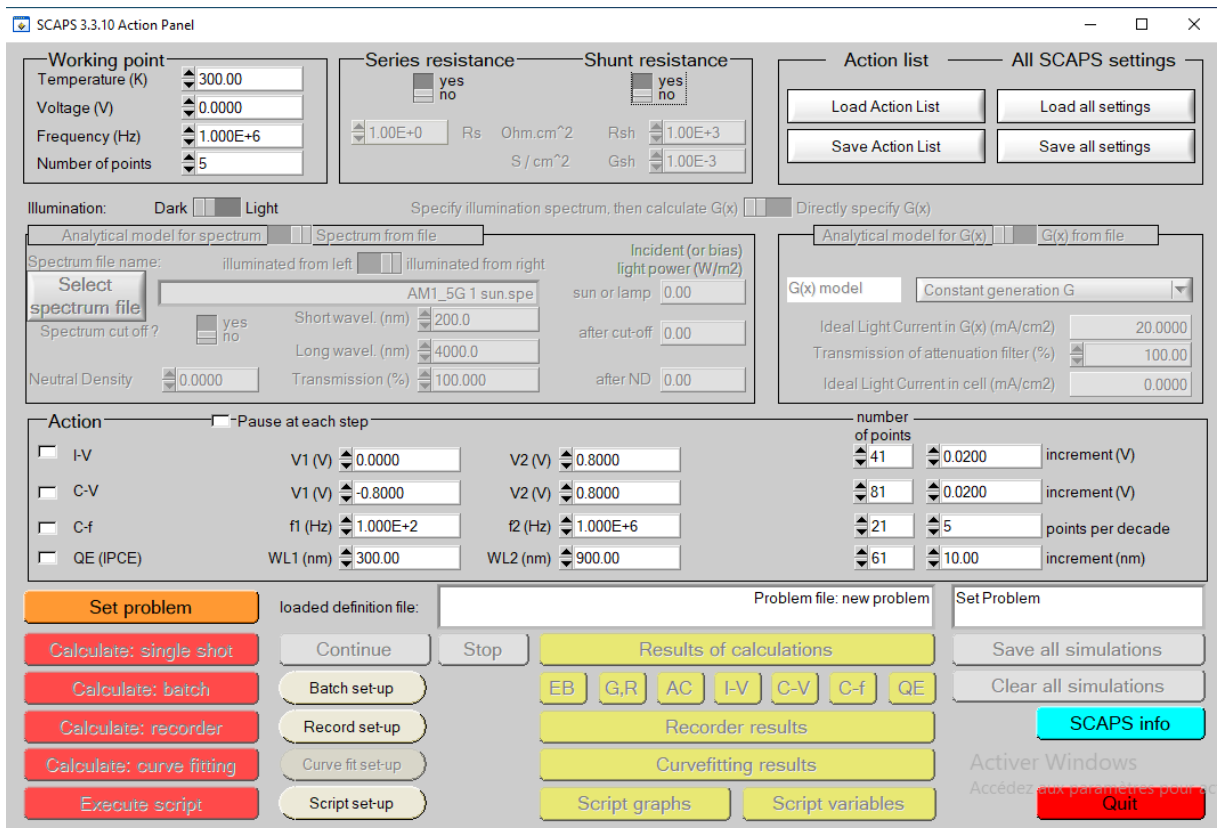


Figure II .2 : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action.

4.2. Définir le problème

Nous cliquons sur le bouton SET PROBLEM dans le panneau de commande pour modifier toutes les propriétés de la batterie. Grâce à ce bouton, nous pouvons définir les dispositifs photovoltaïques de deux manières Nouveau:

Nous pouvons créer de nouveaux dispositifs photovoltaïques à travers des domaines spécifiques, À savoir:

- Ajouter une couche : (Ajouter une couche) Fenêtre contextuelle lorsque l'utilisateur clique sur ce bouton. Il comprend plusieurs paramètres tels que l'énergie de l'entrefer, la constante diélectrique, l'affinité, le dopage, le type de dopage, etc. Il est à noter que les utilisateurs peuvent utiliser directement les valeurs standard dans le fichier de données du logiciel.
- Contacts gauche et droit : Modifier les paramètres optiques et électriques des surfaces extérieures gauche et droite de la batterie.
- Paramètres numériques : Modifier l'affichage graphique, les messages d'erreur et les paramètres numériques de convergence.

4.3. Sélection des caractéristiques à simuler

Vous pouvez choisir une ou plusieurs métriques à simuler : I-V, C-V, C-f et QE (λ) dans la section Action, car vous pouvez également ajuster les valeurs initiales et finales des paramètres, ainsi que le nombre d'étapes.

II .5. Présentation de la structure de la cellule solaire

Notre travail consiste à modéliser une cellule solaire à base de Pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$) et à simuler ces paramètres électriques, optiques et géométriques afin de concevoir une cellule ayant le rendement électrique optimal. Dans notre étude, nous utilisons une cellule solaire composée des hétérojonctions suivantes : ITO/ TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD/Au . Le schéma simplifié de l'hétéro structure est représenté sur les couches semi-conductrices $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ (absorbeur), TiO_2 (tampon) et ITO (fenêtre)et Spiro-OMeTAD(couche avant contacte métallique arrière) , ont fait l'objet de notre étude dans les modèles numériques pour voir l'influence de celles -ci sur les performances électriques de la cellule solaire.

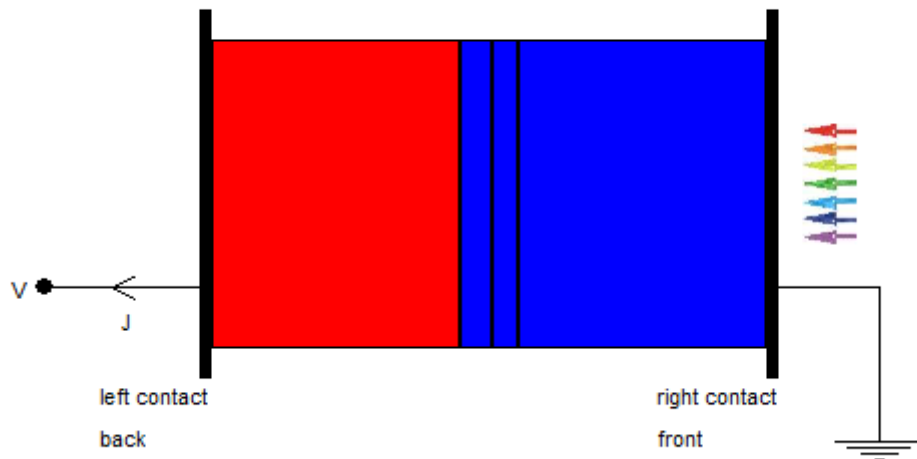


Figure II .3 : Structure de la cellule solaire.

5.1. les paramètres de la cellule solaire

Les paramètres des matériaux en ITO/TiO₂/CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃/Spiro-OMeTAD/Au utilisés dans la simulation de la cellule solaire et groupés dans le tableau II .1 suivant :

Paramètre	ITO	ETL (TiO ₂)	Couche de défaut, DL1	Absorber (CH ₃ NH ₃ Pb(I _{1-x} Br _x) ₃)	Couche de défaut, DL2	HTL (Spiro- OMeTAD)
Épaisseur (nm)	500	40	10	600	10	300
$E_g(ev)$	3.5	3.2	1.61	1.61	1.61	3
$X(ev)$	4	3.9	3.86	3.86	3.86	2.45
E_r	9	9	6.5	6.5	6.5	3
$N_c(cm-3)$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$	$2.2 \cdot 10^{18}$
$N_v(cm-3)$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$	$1.8 \cdot 10^{19}$
$\mu_n(cm-3/Vs)$	20	20	2	2	2	2E-4
$\mu_p(cm-3/Vs)$	10	10	2	2	2	2E-4
$ND(cm-3)$	$1 \cdot 10^{18}$	$1 \cdot 10^{21}$	$1 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{13}$	0
$NA(cm-3)$	0	0	$1 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{20}$
$NT(cm-3)$	$1 \cdot 10^{15}$	$1 \cdot 10^{15}$	$1 \cdot 10^{17}$	$2.5 \cdot 10^{13}$	$1 \cdot 10^{17}$	$1 \cdot 10^{15}$

Tableau II .1 : paramètre d'entrée utilisés dans la simulation

II .6.Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les bases fondamentales à la compréhension de la cellule solaire. Nous avons également, décrit les cellules a base pérovskite utilisé dans ce travail , les différentes couches constituant cette cellule et défini leur utilisation et nous avons terminé par la présentation de logiciel Nous avons défini comment le faire l'utiliser dans cette étude il est nécessaire pour l'optimisation des structures des dispositifs photovoltaïques.

Chapitre III : Résultats de simulation et discussion

III.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons l'étude d'une structure de la cellule solaire à base de matériau pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$). Le but de travail est d'étudier la sensibilité des principaux facteurs qui interviennent dans le rendement de conversion des cellules pérovskite à base de matériau $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$: ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au afin d'optimiser les caractéristique $J = f(V)$. Nous commençons par la présentation des structures de la cellule solaire pérovskite à base de $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3)$ étudiées. nous avons simuler deux types des structures avec et sans DL : ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au et ITO / TiO_2 / DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au .la simulation est effectuer par le simulateur numérique SCAPS unidimensionnel développé par ELIS, à l'université de Gent en Belgique. En suite nous présentons les paramètres de la structure simulée de la cellule solaire pérovskite et nous terminons par les résultats obtenus.

III.2.Structure simulée de la cellule pérovskite

La cellule pérovskite est formée d'un empilement de plusieurs matériaux en couches minces déposés successivement sur un substrat. La figure III.1 présente une vue schématique de la structure standard des cellules solaires pérovskites à base de $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3)$. Il s'agit d'une simple cellule à hétérojonction NIP (ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au) noté cellule 1 et son schéma de base comprend principalement : Une couche ITO (d'oxyde d'indium et d'étain) de $0.1 \mu\text{m}$ (appelée couche fenêtre) ; Une couche de $0.2 \mu\text{m}$ de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ absorbe la lumière ; une couche de $0.1 \mu\text{m}$ de TiO_2 (appelée couche tampon, naturellement de type n et dopée avec l'azote) forme la jonction ; un Couche de $0.1 \mu\text{m}$ de Spiro-OMeTAD avant contact arrière métallique (utilisé comme couche de transport de trous). Dans la cellule 2 (ITO / TiO_2 / DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au) on ajoute la couche DL1 et DL2 dans la structure standard. Cette structure a été simulée en introduisant les paramètres pour toutes les couches dans le logiciel SCAPS voir le tableau II.1[15].Le choix de nos paramètres repose sur les données générales que l'on peut trouver dans la littérature Les contacts ohmiques sont placés aussi bien sur la face avant que sur la face arrière. La structure est ensuite mise sous un éclairement AM1.5 qui est l'éclaircement standard de tests d'évaluation des cellules solaires photovoltaïques. Il correspond à une puissance lumineuse incidente de $1000\text{W}/\text{m}^2$ et une température de 300K.

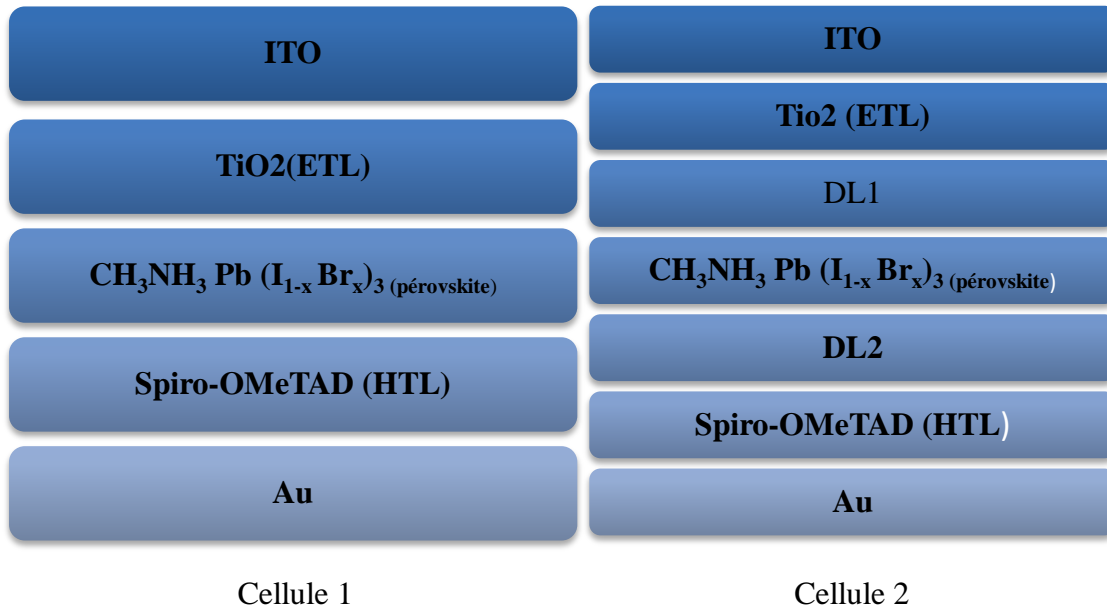


Figure III.1. Structure des cellules solaires à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$).

(a)Cellule 1 : ITO / TiO₂/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au ; (b)Cellule 2 : ITO /TiO₂/ DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au.

III.3.Caractéristique électrique de la cellule solaire à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$)

III.3.1 la cellule solaire à base de pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$) :

Ces cellules ont récemment atteint un rendement très rapidement évolué pour atteindre de 15 % en laboratoire[16]. Le tableau III.1 représente effet de la résistance sur les caractéristiques électriques (tension de circuit ouvert V_{co} , densité de courant de court-circuit J_{cc} , facteur de forme FF et rendement η) des cellules solaires pérovskites (cellule1 et cellule2).Le tableau III.2 montre que tous les paramètres électriques augmentent pour la cellule1 et la cellule2 lorsqu'on considère que n'en pas de résistances électrique de contact. On remarque que on a même les deux cellules ils ont les mêmes type de couche mais dans la cellule 2 ajouté des couche supplémentaires .le meilleur cellule est cellule 2 elle a donné le meilleur rendement .

Paramètre	Résistance($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF(%)	η (%)
Cellule 1	-	0.6487	34.844	50.04	11.31
	2.35 [15]	0.6489	33.803	49.79	10.04
Cellule 2	-	0.6653	37.938	51.3341	12.9561
	2.35 [15]	0.6654	36.853	46.52	11.41

Tableau III.1 : Paramètres électriques des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ avec et sans résistance de contact. **Cellule1** :ITO/ETL(TiO_2)/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /HTL(Spiro-OMeTAD)/Au ; **Cellule2** :ITO/ETL(TiO_2)/DL1/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ /DL2/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

La figure III.2 représente la caractéristique de courant-tension $J(V)$ sous éclairage des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ (cellule 1 et cellule2). Pour cette étude en utilisant les paramètres du tableau (II.1) sans pris en considération effet des contacts c.à.d. pas de résistances de contacts. Le tableau III.3 représente une comparaison des performances obtenues (tension de circuit ouvert V_{co} , densité de courant de court-circuit J_{cc} , facteur de forme FF et rendement η) de la cellule 2 avec des résultats dans la littérature. On observe que les résultats obtenus se rapprochent à ceux obtenus par [16].

Paramètres externe	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
Notre travail Cellule 2	0.6652	37.937	51.334	12.95
expérience 2020[16]	1	18	63.53	[9-15]
Simulation SCAPS[17]	0.8953	21.45	69.06	13.26
Expérience[18]	0.9	21.45	69	13.39

Tableau III.2: Paramètres électriques des cellules solaires à base de $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$.

Cellule2 : ITO/ETL(TiO_2)/DL1/ $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$ /DL2/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

comparaison avec la cellule de référence (simulation et expérience)[16-18].

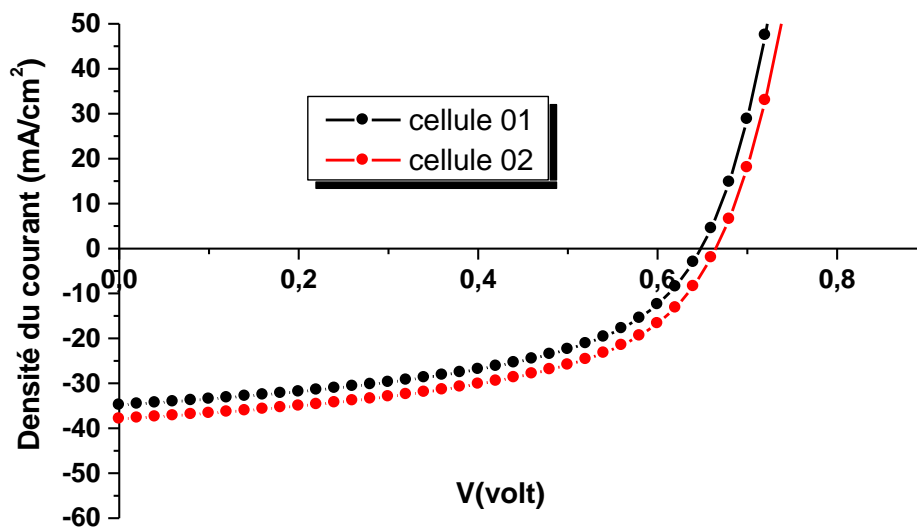


Figure III.2. Caractéristique $J(V)$ de des cellules solaires à base de pérovskites ($CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$). Cellule 1 en trait noir : ITO / TiO_2 / $CH_3NH_3 Pb (I_{1-x} Br_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au ; Cellule 2 en trait rouge : ITO / TiO_2 / DL1/ $CH_3NH_3 Pb (I_{1-x} Br_x)_3$ / DL2/Spiro-OMeTAD / Au.

III.3.2 Choix de la cellule solaire à base de pérovskites (CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃)

Dans cette étude on a chois il a structure de la cellule solaire à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃de type: ITO/ETL(TiO₂)/CH₃NH₃Pb(I_{1-x} Br_x)₃/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au. Cette structure donne un rendement de conversion η =11.31% avec une puissance maximal 0.022 W, une densité du courant de court-circuit Jcc de 34.84 mA/cm², une tension en circuit ouvert Vco de 0.6487 V et un facteur de forme FF de 50.04%. On a vu précédemment que les résultats de simulation obtenus de cette structure sont proches de ceux de référence. Cela signifié nos choix des paramètres d'entrées qui sont regroupée dans le tableau (III.3).

	Epaisseur(μm)	N _D (cm ⁻³)	N _A (cm ⁻³)
CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃	0.6	1 10 ¹²	9 10 ¹⁰
TiO₂	0.08	1 10 ²²	0
Spiro-OMeTAD	0.3	0	1 10 ²²
ITO	0.8	1 10 ¹⁴	0

Tableau III.3 : Paramètres d’entrés de la cellule solaire à base deCH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃de type : ITO/ETL(TiO₂)/CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃/HTL(Spiro-OMeTAD)/Au.

III .4.Etude de l’influence de l’épaisseur et la concentration de dopants

Dans cette partie, nous allons étudier l’influence de l’épaisseur et de la concentration de dopants des différentes couches de la cellule solaire à base deCH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃tel que la couche fenêtre de ITO ; l’absorbeur de CH₃NH₃Pb (I_{1-x}Br_x)₃; la couche tampon de TiO₂(matériau de transport des électrons ETL); la couche métallique (matériau de transport des trous HTL à base de Spiro-OMeTAD).

III.4.1 influence de l’épaisseur de l’absorbeur CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃

Dans cette étape nous avons fixé la concentration de dopants de absorbeur CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ à N_A=9 10¹⁰cm⁻³, N_D=1 10¹²cm⁻³ et l’épaisseur de ETL et HTL à 0.08 μm et 0.3 μm respectivement, puis nous avons varier l’épaisseur de l’absorbeurCH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ dans la gamme de 0.06 μm à 1 μm. Le tableau III.4 représente l’influence de l’épaisseur de l’absorbeurCH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃sur les performances de la cellule solaire pérovskites.

paramètre épaisseur(μm)	V _{oc} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η(%)
0.06	0.717	20.871	76.90	11.50
0.08	0.7064	23.618	74.42	12.52
0.1	0.6980	25.839	71.79	12.95
0.2	0.6717	32.172	61.89	13.37
0.3	0.6601	34.598	56.69	12.95
0.4	0.6541	35.391	53.60	12.41
0.5	0.6508	35.348	51.48	11.84
0.6	0.6487	34.844	50.04	11.31
0.7	0.6475	34.105	49.09	10.84
0.8	0.6466	33.285	48.49	10.44
0.9	0.6460	32.477	48.08	10.09
1	0.6456	31.724	47.77	9.78

Tableau III.4 : L'influence de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

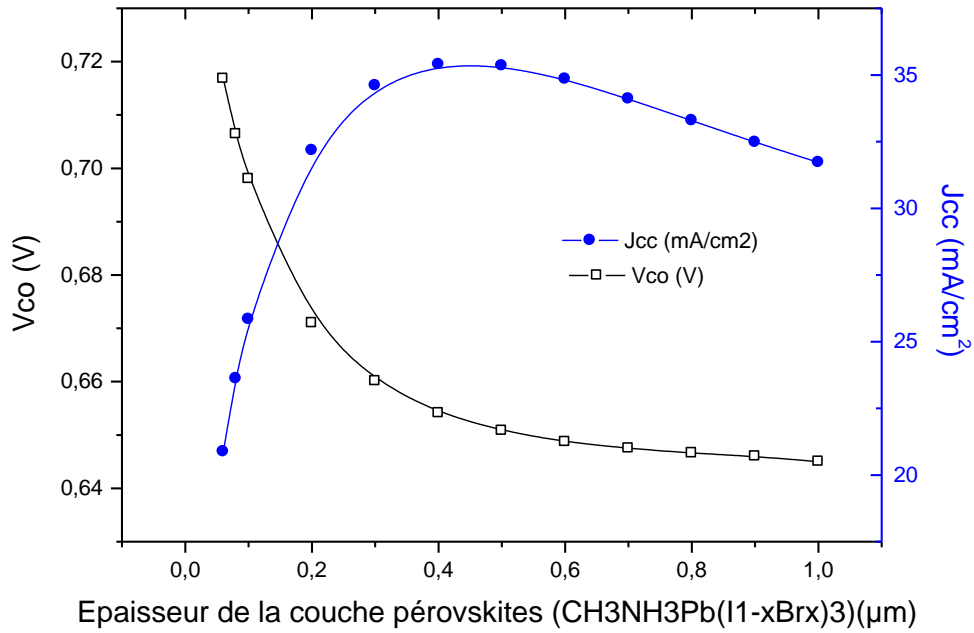


Figure III.3. la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court-circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃.

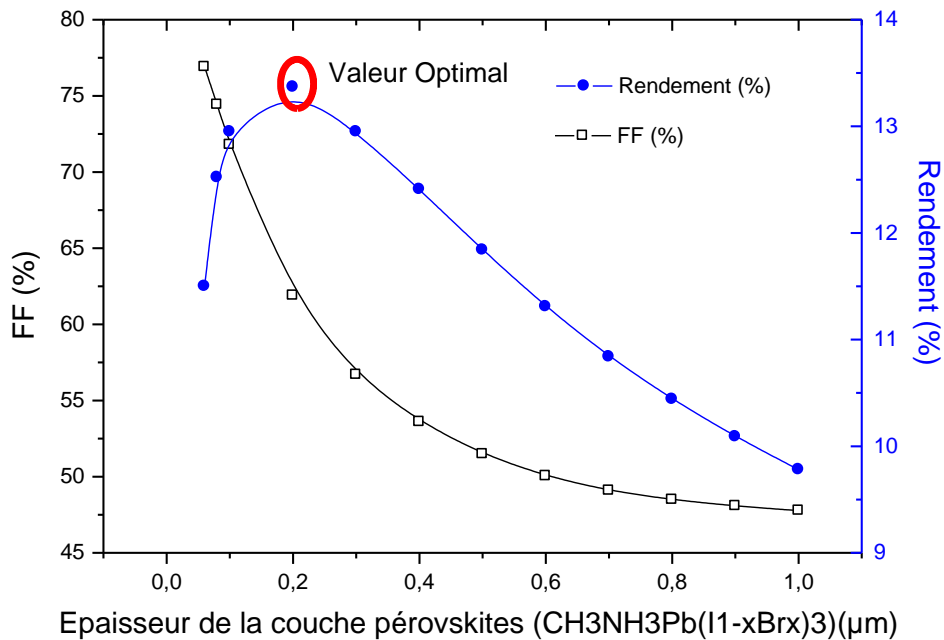


Figure III.4. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃.

La figure (III.3) représente la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court-circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$. Nous observons que l'augmentation de l'épaisseur de 0.06 μm à 0.4 μm , le court-circuit (J_{cc}) augmente jusqu'à 35.391 (mA/cm²) et elle diminue de 0.4 μm à 1 μm pour une valeur 31.27 mA/cm². De plus, la tension de circuit ouvert V_{co} et le facteur de forme FF augmentent avec l'augmentation de l'épaisseur.

La figure (III.4) la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$. Nous remarquons que l'augmentation de l'épaisseur de 0.06 μm à 0.2 μm , le rendement (η) augmente de 11.50 à 13.37 % . plus l'épaisseur de cette couche augmente de 0.2 μm jusqu'à 1 μm plus de photons ayant des longueurs d'onde plus diminuées peuvent être collectées dans la couche absorbante et donc le rendement diminue de 13.37 % à 9.78 %.

III.4.2 influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO

Nous avons fixé la concentration de dopants de ITO à $N_D=1 \cdot 10^{14} \text{cm}^{-3}$, l'épaisseur et la concentration de dopants de l'absorbeur $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$ à 0.2 μm et $N_D=9 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$, $N_A=1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ respectivement, puis nous avons varié l'épaisseur de la couche ITO dans la gamme de 0.1 μm à 1 μm . Le tableau III.4 représente l'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO sur les performances de la cellule solaire pérovskites. Les figures (III.5 , III.6) représentent la variation de V_{co} , J_{cc} , FF et le rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche ITO. On remarque lorsque l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO augmente les paramètres électriques diminuent et prend un rendement maximal de l'ordre de 13.61% lorsque l'épaisseur égale à 0.1 μm .

paramètre épaisseur(μm)	V _{oc} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η(%)
0.1	0.6732	32.610	62	13.61
0.3	0.6730	32.373	61.97	13.50
0.5	0.6729	32.286	61.90	13.45
0.7	0.6728	32.219	61.81	13.40
0.9	0.6728	32.161	61.70	13.35
1	0.6728	32.135	61.55	13.33

Tableau III.5: L'influence de l'épaisseur de la couche fenêtre de l'ITO sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

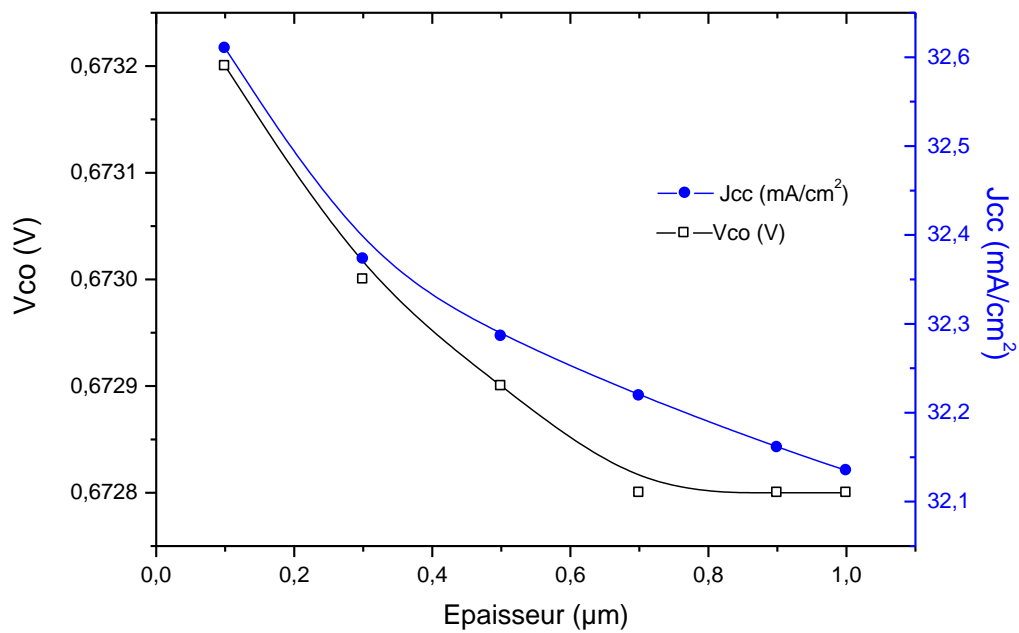


Figure III.5. la variation de la tension de circuit ouvert « Vco » et la densité de courant de court-circuit Jcc de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de la couche fenêtre de l'ITO.

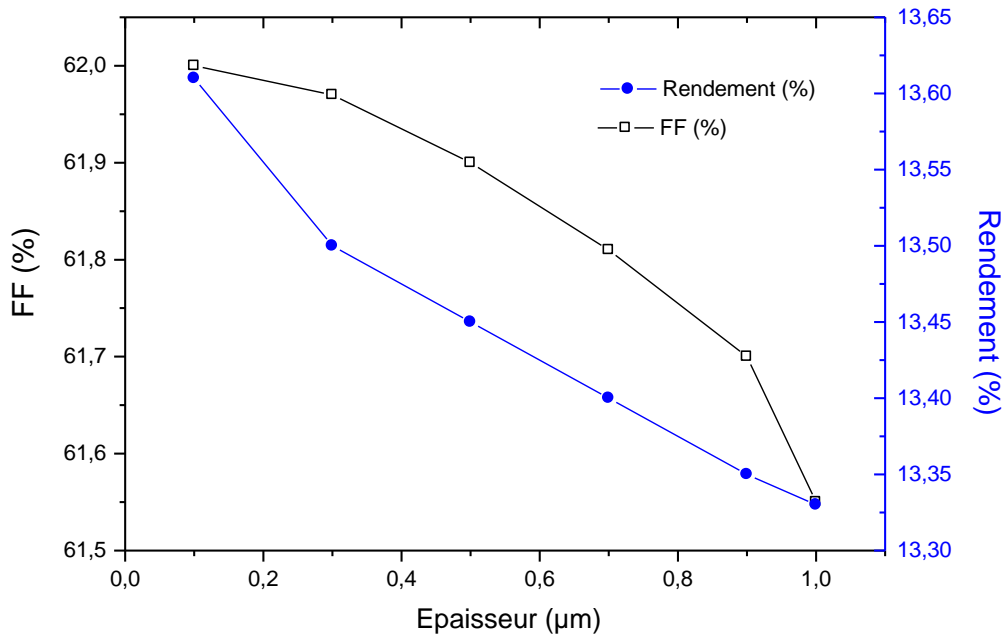


Figure III.6. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de la couche fenêtre de l'ITO.

III.4.3 influence de la concentration de dopants de la couche de l'ITO

Nous avons fixé l'épaisseur de la couche de ITO à $0.1 \mu\text{m}$, l'épaisseur et la concentration de dopants de l'absorbeur $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ à $0.2 \mu\text{m}$ et $N_D = 9 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$, $N_A = 1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ respectivement, puis nous avons varié la concentration de dopants de la couche ITO dans la gamme de 10^{11}cm^{-3} à 10^{18}cm^{-3} . Le tableau (III.6) Représente l'influence de la concentration de dopant de la couche fenêtre de l'ITO sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

Les figures (III.7, III.8) représentent la variation de V_{co} , J_{cc} , FF et le rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopants de la couche ITO. Lorsque la concentration de dopants de la couche de l'ITO augmente les paramètres électriques augmentent de 10^{11}cm^{-3} à 10^{15}cm^{-3} et reste constant dans l'intervalle de 10^{15}cm^{-3} à 10^{18}cm^{-3} . Le meilleur rendement atteint une valeur de l'ordre de 13.61% pour une concentration égal à 10^{15}cm^{-3} .

Paramètre N_D (cm ⁻³)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
10^{11}	0.6731	32.417	58.93	12.86
10^{12}	0.6733	32.57	61.43	13.47
10^{13}	0.6732	32.606	61.93	13.60
10^{14}	0.6732	32.610	62	13.61
10^{15}	0.6732	32.611	62.01	13.61
10^{16}	0.6732	32.611	62.01	13.61
10^{17}	0.6732	32.611	62.01	13.61
10^{18}	0.6792	32.611	62.01	13.61

Tableau III.6 : L'influence de la concentration de dopant N_D de la couche fenêtre de l'ITO sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $CH_3NH_3Pb(I_{1-x}Br_x)_3$.

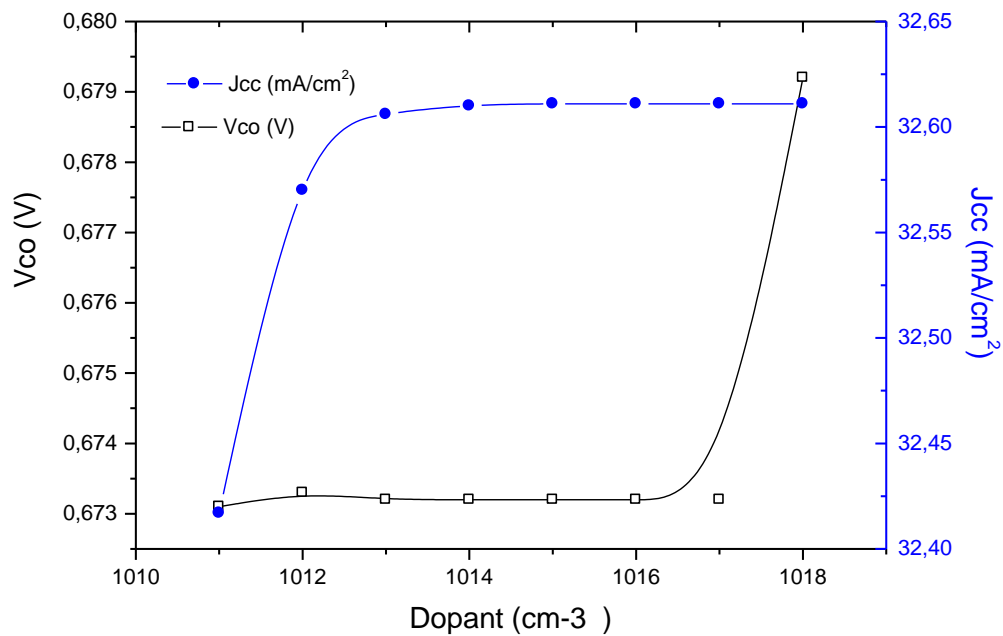


Figure III.7. la variation de la tension de circuit ouvert « V_{co} » et la densité de courant de court-circuit J_{cc} de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de l'ITO.

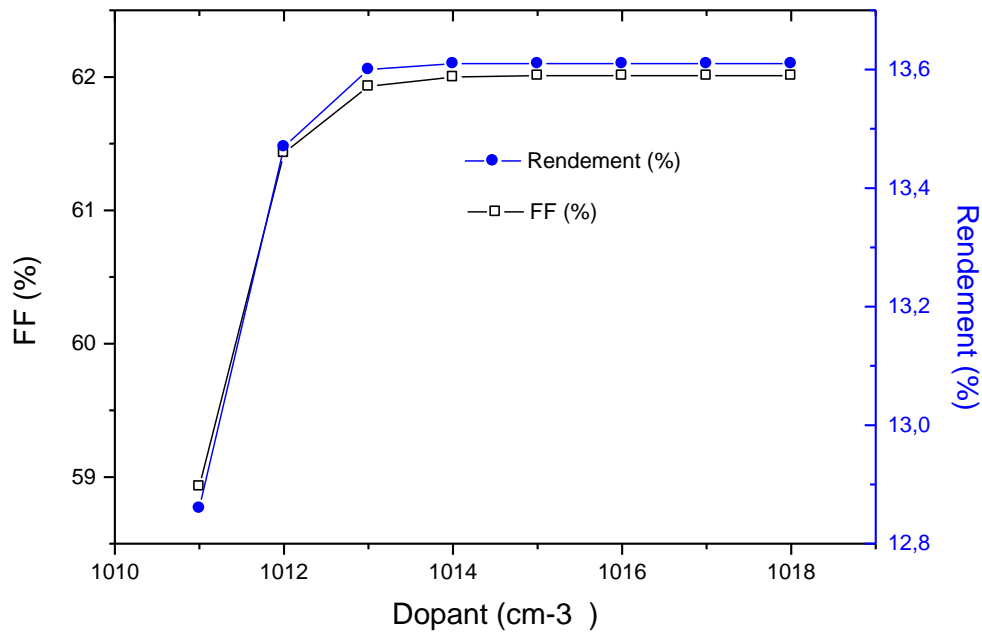


Figure III.8. la variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de l'ITO

III.4.4 influence de l'épaisseur de la couche ETL(matériau de transport des électrons) à base de TiO₂

Nous avons fixé l'épaisseur de la couche TiO₂ à $N_D = 1 \cdot 10^{22} \text{cm}^{-3}$, l'épaisseur et la concentration de dopants de la couche de l'ITO à $0.1 \mu\text{m}$ et $N_D = 1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ respectivement, puis nous avons varié l'épaisseur de la couche TiO₂ dans la gamme de $0.1 \mu\text{m}$ à $1 \mu\text{m}$. Le tableau (III.7) représente l'influence de l'épaisseur de la couche TiO₂ sur les performances de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$. Les figures (III.9) représentent la variation de rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de TiO₂. Nous remarquons que la densité du courant de court-circuit J_{cc} , le facteur de forme FF et le rendement de conversion η diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche TiO₂, ainsi que la valeur de la tension en circuit ouvert V_{co} est constante.

paramètre épaisseur (µm)	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
0.1	0.6732	32.606	62.01	13.61
0.3	0.6732	32.577	61.98	13.59
0.5	0.6732	32.556	61.96	13.58
0.7	0.6732	32.536	61.94	13.57
0.9	0.6731	32.517	61.92	13.55
1	0.6731	32.508	61.92	13.55

Tableau III.7 :L'influence de l'épaisseur de la couche de la couche TiO₂sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃.

III.4.5 influence de la concentration de dopant de la couche ETL (matériau de transport des électrons) à base de TiO2

Nous avons fixé l'épaisseur de la couche de TiO₂ à 0.1 µm , l'épaisseur et la concentration de dopants de l'absorbeur CH₃NH₃Pb(I_{1-x} Br_x)₃ à 0.2 µm et $N_D = 9 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-3}$, $N_A = 1 \cdot 10^{15} \text{cm}^{-3}$ respectivement, puis nous avons varier la concentration de dopants de la couche TiO₂ dans la gamme de 10^{11}cm^{-3} à 10^{21}cm^{-3} .Le tableau (III.8) représente l'influence de la concentration de dopant N_D de la couche de TiO₂sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x} Br_x)₃. Les figures(III.10) représentent la variation de rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopants de la couche de TiO₂.Nous remarquons que la densité du courant de court-circuit J_{cc} , le facteur de forme FF augment avec la concentration de dopant N_D de la couche de TiO₂. Le rendement augmente de 7.64 %à 13.85 % avec le dopage dans la l'intervalle [10^{11} - 10^{17}] cm^{-3} et ensuite elle diminue jusqu'à une valeur de concentration $N_D = 10^{21} \text{cm}^{-3}$ à un rendement de 13.62% .De plus la tension en circuit ouvert V_{co} diminue entre 10^{11}cm^{-3} à 10^{17}cm^{-3} .

Paramètre N_D (cm⁻³)	V_{oc} (V)	J_{cc}(mA/cm²)	FF(%)	η(%)
10¹¹	0.7360	28.779	36.09	7.64
10¹³	0.7359	28.783	36.11	7.65
10¹⁵	0.7270	29.170	38.50	8.17
10¹⁶	0.6732	31.662	57.55	12.27
10¹⁷	0.6704	33.716	61.28	13.85
10¹⁹	0.6727	32.846	61.85	13.67
10²¹	0.6732	32.624	61.99	13.62

Tableau III.8 : L'influence de la concentration de dopant N_D de la couche de la couche TiO₂ sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃

III.4.6 influence de l'épaisseur de la couche HTL (matériau de transport des trous) à base de Spiro-OMeTAD

Nous avons fixé la concentration de dopant de la couche Spiro-OMeTAD à N_A=1 10²²cm⁻³ puis nous avons varié l'épaisseur de la couche Spiro-OMeTAD dans la gamme de 0.1 μm à 1 μm .Le tableau (III.9) représente l'influence de l'épaisseur de la couche la couche Spiro-OMeTAD sur les performances de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ .La figures(III.9) . représentent la variation de rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche de Spiro-OMeTAD. Dans Le tableau (III.9) nous remarquons que la densité du courant de court-circuit J_{cc} , la tension en circuit ouvert V_{co} et le rendement de conversion η diminuent avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche la couche Spiro-OMeTAD, ainsi que le facteur de forme FF augmente avec l'augmentation de l'épaisseur. Le rendement de conversion η prend une valeur maximale de l'ordre 14.62% à un épaisseur égal à 0.1 μm.

paramètre Epaisseur(μm)	V _{oc} (V)	J _{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η(%)
0.1	0.6719	36.029	60.39	14.62
0.3	0.6704	33.716	61.28	13.85
0.5	0.6701	33.160	61.49	13.66
0.7	0.6699	32.942	61.56	13.59
0.9	0.6698	32.825	61.60	13.54
1	0.6698	32.783	61.61	13.53

Tableau III.9 : L'influence de l'épaisseur de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃.

III.4.7 Influence de la concentration de dopant de la couche HTL (matériau de transport des trous) à base de Spiro-OMeTAD

Nous avons fixé l'épaisseur de la couche de Spiro-OMeTAD à 0.1 μm, puis nous avons varié la concentration de dopants N_A de la couche de Spiro-OMeTAD dans la gamme de 10¹¹ cm⁻³ à 10²² cm⁻³. Le tableau (III.10) représente l'influence de la concentration de dopant N_A de la couche de Spiro-OMeTAD sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃. Les figures(III.9) représentent la variation de V_{co}, J_{cc}, FF et le rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de la concentration de dopants de la couche de Spiro-OMeTAD. Dans le tableau (III.10) Nous remarquons que avec l'augmentation de la concentration N_A de la couche de Spiro-OMeTAD de 10¹¹ cm⁻³ à 10²² cm⁻³, la densité du courant de court-circuit J_{cc} augmente. La tension en circuit ouvert V_{co} augmente dans un intervalle de [10¹¹ -10¹⁵] cm⁻³ et à partir de N_A=10¹⁵ cm⁻³ commence à diminuer. le tableau (III.10) montre que le facteur de forme augmente pour un intervalle de la concentration de dopants [10¹¹ -10¹⁵] cm⁻³ et diminue pour un intervalle de [10¹⁵-10²²] cm⁻³ et Le rendement augmente et prend une valeur de 14.62% pour la concentration de dopant de N_A= 10²² cm⁻³.

Paramètre N_A (cm^{-3})	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm^2)	FF(%)	η (%)
10^{11}	1.3637	7.960	42.21	4.58
10^{13}	1.7012	8.001	36.84	5.01
10^{15}	2.380	8.056	28.74	5.51
10^{17}	1.0495	6.233	48.78	3.20
10^{20}	0.6724	36.043	59.78	14.49
10^{21}	0.6720	36.040	60.35	14.62
10^{22}	0.6719	36.029	60.39	14.62

Tableau III.10 : L'influence de la concentration de dopant N_A de la couche de la couche Spiro-OMeTAD sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

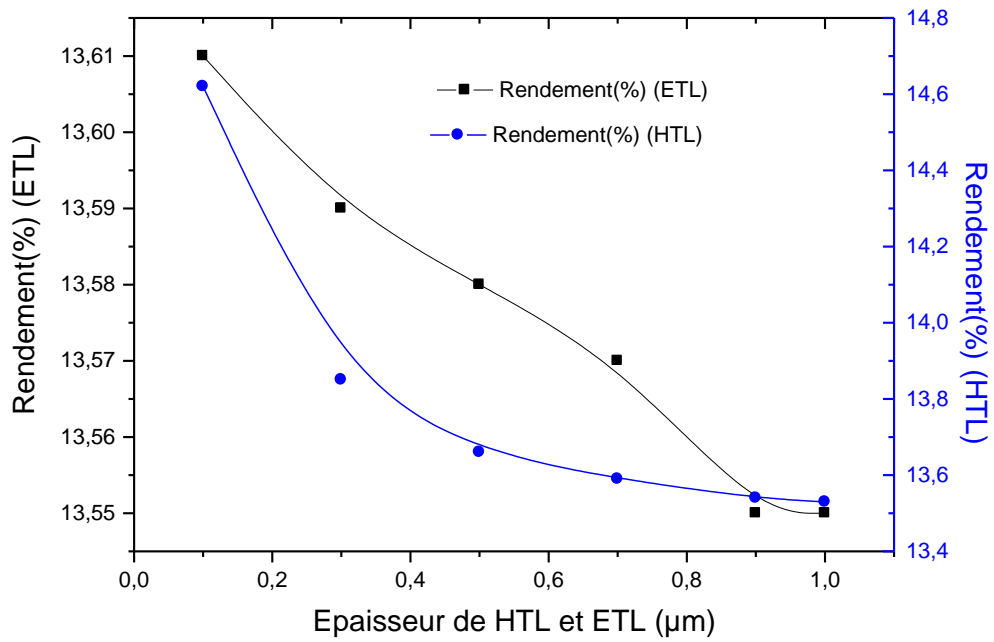


Figure III.9 : la variation du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de l'épaisseur de la couche fenêtre de la couche ETL à base de TiO_2 et de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD.

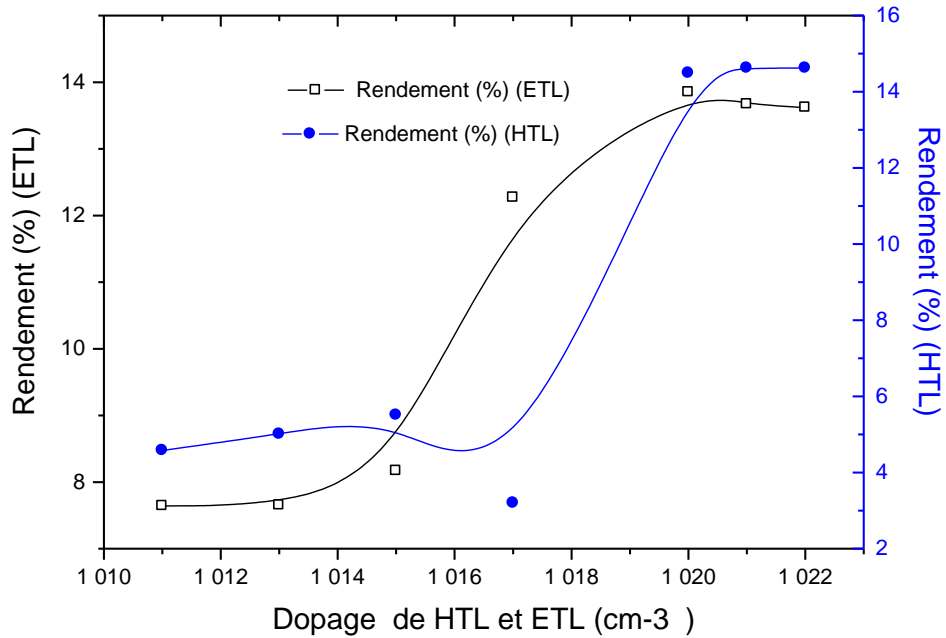


Figure III.10 : la variation du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction de en fonction de la concentration de dopant de la couche fenêtre de la couche ETL à base de TiO_2 et de la couche HTL à base de Spiro-OMeTAD.

III.5. Structure optimisé

Le Tableau (III.11) représente une comparaison de paramètre de sortie des cellules solaires pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ optimiser de la structure ITO / TiO_2 / $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ / Spiro-OMeTAD / Au avec nos résultats obtenue . La figure (III.11) représente la caractéristique de courant-tension $J(V)$ sous éclairnement des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ de structure de base et optimiser. Nous remarquons le rendement η est optimiser 14.62% ces résultats sont en très bon accord avec notre étude .

Paramètre structure	V_{oc} (V)	J_{cc}(mA/cm²)	FF(%)	η(%)
Base	0.6487	34.844	50.04	11.31
Optimisé	0.6719	36.029	60.39	14.62

Tableau III.11 : comparaison entre les paramètres de cellule de base et optimiser.

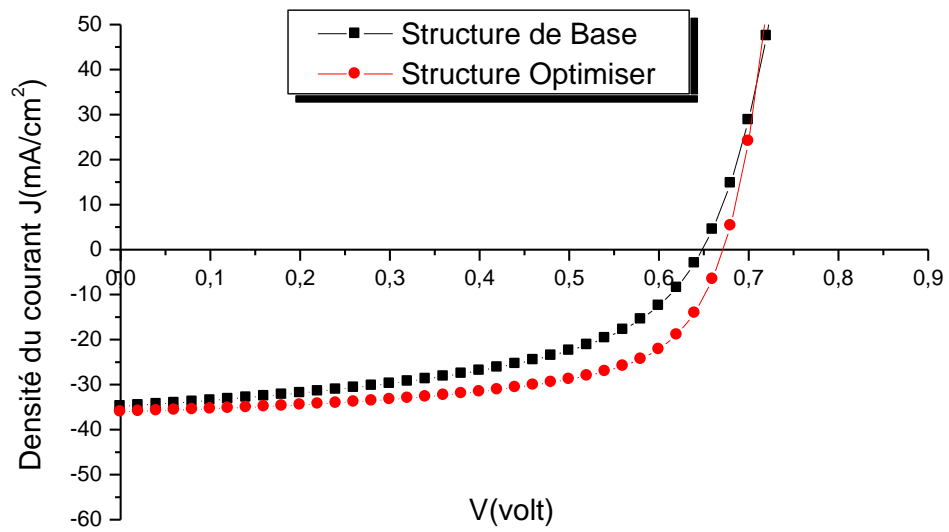


Figure III.11. Caractéristique $J(V)$ de des cellules solaires à base de pérovskites $(\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3)$ structure de base en trait noir; Structure optimiser en trait rouge.

III.6. Influence de la température sur les performances de la cellule solaire

La température est un paramètre important dans le comportement des cellules. Le tableau (III.12) représente l'influence de la température sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$. La figure (III.12) représentent la variation de FF et rendement η de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ en fonction de la température. Nous remarquons que le facteur de forme FF augment et Le rendement diminue avec l'augmentation de température. Le rendement de conversion η prend une valeur maximale de l'ordre 14.62% .

Paramètre Température	V_{oc} (V)	J_{cc} (mA/cm ²)	FF(%)	η (%)
300	0.6719	36.029	60.39	14.62
310	0.6510	36.134	61.25	14.41
320	0.6305	36.217	62	14.16
330	0.6103	36.283	62.70	13.88
340	0.5903	36.336	63.24	13.56
350	0.5706	36.380	63.67	13.21
360	0.5509	36.418	63.99	12.84
370	0.5314	36.452	64.20	12.44
380	0.5119	36.483	64.31	12.01
390	0.4926	36.512	64.32	11.57
400	0.4733	36.541	64.33	11.13

Tableau III.12 : L'influence de la température sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

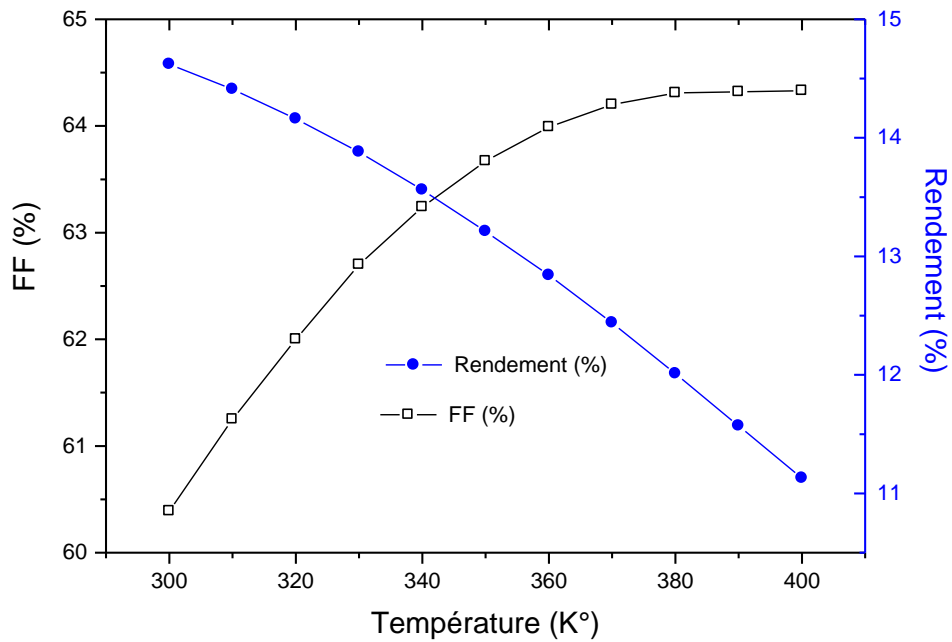


Figure III.12. La variation du facteur de forme FF et du rendement η de la cellule solaire pérovskites en fonction en fonction de la température.

III.7. Influence des résistance série (R_s) et parallèle (R_{sh}) sur les performances de la cellule solaire

Le Tableau (III.13) montre l'effet de la Variation des résistances série (R_s) et parallèle (R_{sh}) sur les paramètres photovoltaïques de notre cellule de optimiser , les valeurs de (R_s) et (R_{sh}) sont tirées depuis sources. Le rendement de conversion η prend une valeur maximale de l'ordre 14.26% à valeur des résistance $R_s:0.27 \Omega.cm^2$; $R_{sh}:1755 \Omega.cm^2$ [19] .

Paramètres (R_s), (R_{sh}) ($\Omega.cm^2$)	V_{co} (V)	J_{cc} (mA/cm2)	FF (%)	η (%)
$R_s:0.17/R_{sh}:3095$	0.6716	35.992	59.58	14.40
$R_s:0.23 /R_{sh}:880$	0.6708	35.972	58.56	14.13
$R_s:0.25/R_{sh}:1565$	0.6713	35.971	59.03	14.25
$R_s:0.27/R_{sh}:1360$	0.6712	35.966	58.88	14.21
$R_s:0.27/R_{sh}:1755$	0.6714	35.967	59.05	14.26

Rs:0.29/Rsh:1505	0.6713	35.962	58.90	14.22
Rs:0.29/Rsh:1580	0.6713	35.963	58.93	14.23
Rs:0.29/Rsh:1605	0.6713	35.962	58.94	14.23
Rs:0.30/Rsh:1465	0.6713	35.959	58.85	14.21
Rs:0.30/Rsh:1680	0.6714	35.960	58.94	14.23
Rs:0.31/Rsh:1732	0.6714	35.958	58.93	14.23
Rs:0.42/Rsh:1825	0.6715	35.933	58.67	14.16
Rs:0.42/Rsh:2710	0.6716	35.936	58.86	14.21
Rs:0.49/Rsh:1495	0.6713	35.915	58.36	14.07

Tableau III.13 : l'influence des résistances série (Rs) et parallèle (Rsh) sur les paramètres électriques de la cellule solaire pérovskites à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$.

D'après les résultats de simulation résumés dans le tableau (III.13), le paramètre le plus affecté par les changements de résistance série (Rs) et shunt (Rsh) est le rendement. Nous pouvons remarquer un comportement décroissant avec l'augmentation de la résistance série, sauf lorsque l'augmentation de la résistance est parallèle à l'augmentation de la résistance série. Le tableau (III.14) montre l'évolution de la résistance série (Rs) et shunt (Rsh) sur nos cellules optimisées :

Paramètres (Rs), (Rsh) ($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	Vco (V)	Jcc (mA/cm²)	FF (%)	η(%)
Rs=2.35	0.6723	35.502	54.19	12.93

Tableau III.14 : Paramètres électriques des cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ (cellule optimiser) avec résistance.

III.8. Conclusion

Dans ce chapitre, les performances optimales de la cellule solaire à base de pérovskite mixte ont été déterminées par des simulations à l'aide du logiciel SCAPS . Les résultats de simulation ont clairement montré que (ITO ,TiO₂ , couches absorbantes CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃, Spiro-OMeTAD) les paramètres de (épaisseur, température, la concentration de dopage) de chaque couche jouent un rôle très important dans les performances de la cellule solaire. Les résultats de simulation prévoient un rendement de conversion optimal de l'ordrée 14.62 %.

Conclusion générale

Ces dernières années, la recherche scientifique a connu un grand intérêt pour les énergies renouvelables, dont la plus importante est l'énergie photovoltaïque .

Dans ce travail nous avons présenté une étude théorique et simulation d'une cellule photovoltaïques pérovskites à base $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$. Nous avons simulé une structure spécifique à l'aide de logiciel SCAPS -1D.

L'objectif de ce travail, nous avons simulé et optimiser les caractéristiques électriques de la cellule solaire pérovskite à base $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ Composé des classes suivantes [ITO/TiO₂/CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃/Spiro-OMeTAD/Au], déterminé l'influence de certaine paramètres (épaisseur, concentration de dopage , effet des résistances série (Rs) et parallèle (Rsh), la température) de différent couches de la cellule((ITO) , ETL (TiO₂) , CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ ,HTL (Spiro-OMeTAD) sur les paramètre de sorti : tension de circuit ouvert Voc, courant de court-circuit Jsc , facteur de forme FF et le rendement η . et comparé avec l'expérience tel que donne un rendement de (9-15)%. Les paramètres obtenus dans la structure optimale par notre simulation et Voc=0.6719(V); Jcc=36.029(mA/cm²); FF=60.39 (%); η =14.62(%).

Références bibliographiques

- [1] « Petite histoire du photovoltaïque - Europe Énergie », *https://www.europe-energie.com/*, 14 août 2019. *https://www.europe-energie.com/blog/petite-histoire-du-photovoltaïque/* (consulté le 4 mars 2022)
- [2] « La divergence de l'énergie du soleil vers la terre schéma – Recherche Google ». *https://www.google.com/search?q=La+divergence+de+l%27%C3%A9nergie+du+soleil+vers+la+terre+sh%C3%A9ma&tbm=isch&ved=2ahUKEwM3wwaz2AhUt2OAKHbnQCPcQ2-cCegQIABAA&oq=La+divergence+de+l%27%C3%A9nergie+du+soleil+vers+la+terre+sh%C3%A9ma&gs_lcp=CgNpbWcQAzoHCCMQ7wMQJ1DXB1i_FmDNIWgAcAB4AIAB2AGIAY0JkgEFMC42LjGYAQCgAQQgAQtnD3Mtd2l6LWltZ8ABAQ&scient=img&ei=vA0iYpy2Ba2wgwe5oaO4Dw&bih=657&biw=1366#imgrc=wmLJFoe92OLOM* (consulté le 4 mars 2022).
- [3] « historique_photovoltaïque-0370346001296127371.pdf - Recherche Google ». *https://www.google.com/search?q=historique_photovoltaïque-0370346001296127371.pdf&oq=historique_photovoltaïque-0370346001296127371.pdf&aqs=chrome.0.69i59.1002j0j7&sourceid=chrome&ie=UTF-8* (consulté le 4 mars 2022).
- [4] « L'effet photovoltaïque ». *https://photovoltaïque-energie.fr/l-effet-photovoltaïque.html* (consulté le 4 mars 2022).
- [5] « Définition de cellule photovoltaïque - Lexique EDF ENR », *EDF ENR*. *https://www.edfenr.com/lexique/cellule-photovoltaïque/* (consulté le 4 mars 2022).
- [6] « Configuration photovoltaïque (connaissance des énergies, selon CEA). – Recherche Google ». *https://www.google.com/search?q=Configuration+photovolta%C3%AFque+(connaissance+des+%C3%A9nergies%2C+selon+CEA).&tbm=isch&ved=2ahUKEwie-LKb16z4AhXa44UKHcvPAAtMQ2-cCegQIABAA&oq=Configuration+photovolta%C3%AFque+(connaissance+des+%C3%A9nergies%2C+selon+CEA).&gs_lcp=CgNpbWcQAzoECCMQJzoHCCMQ6gIQJ1CL8w9Y1_4PYLCFEGgCcAB4AIABggiIAeIRkgEHNS0yLjAuMZgBAKABAaoBC2d3cy13aXotaW1nsAEKwAEB&scient=img&ei=2FuoYp4s2seXBMufi5gN#imgrc=HJtu3BA9HfN-iM&imgdii=f1jz8g9Iv2Y9hM* (consulté le 14 juin 2022).
- [7] « Énergie solaire photovoltaïque : fonctionnement, enjeux et chiffres clés », 30 juillet 2010. *https://www.connaissancedesenergies.org/fiche-pedagogique/solaire-photovoltaïque* (consulté le 4 mars 2022).
- [8] « Cellule photovoltaïque à pérovskite », *Wikipédia*. 15 juillet 2021. Consulté le: 8 mars 2022. [En ligne]. Disponible sur: *https://fr.wikipedia.org/w/index.php?title=Cellule_photovolta%C3%AFque_%C3%A0_p%C3%A9rovskite&oldid=184676940*
- [9] L. P. magazine, « Le jour se lève pour des panneaux solaires révolutionnaires », *Le Point*, 3 février 2019. *https://www.lepoint.fr/economie/le-jour-se-leve-pour-des-panneaux-solaires-revolutionnaires-03-02-2019-2291036_28.php* (consulté le 8 mars 2022).
- [10] « Méthode de dépôt par enduction centrifuge en une étaperéférence – Recherche Google ». *https://www.google.com/search?q=M%C3%A9thode+de+d%C3%A9p%C3%B4t+par+enduction+centrifuge+en+une+%C3%A9taper%C3%A9f%C3%A9rence&tbm=isch&ved=2ahUKEwig0rDe2az4AhVJlxoKHYDIC7EQ2-*

- cCegQIABAA&oq=M% C3% A9thode+de+d% C3% A9p% C3% B4t+par+enduction+centrifuge+en+une+% C3% A9taper% C3% A9f% C3% A9rence&gs_lcp=CgNpbWcQAzoHCCMQ6gIQJ1C_CljfFGDzG2gBcAB4AIABtQSIACQFkgEHMC4xLjUtMZgBAKABAAoBC2d3cy13aXotaW1nsAEKwAEB&sclient=img&ei=fV6oYuCfFcmuaoDLr4gL#imgrc=Rp_YHau4JEoQcM (consulté le 14 juin 2022).
- [11] M. Spalla, « Stabilité intrinsèque des cellules solaires pérovskites: impact de la formulation de la couche active et des couches de transport de charges », p. 226.
- [12] « SCAPS.pdf ».
- [13] F. Azri, A. Meftah, N. Sengouga, et A. Meftah, « Electron and hole transport layers optimization by numerical simulation of a perovskite solar cell », *Solar Energy*, vol. 181, p. 372-378, mars 2019, doi: 10.1016/j.solener.2019.02.017.
- [14] A. Khalil, « Nous dédions ce modeste mémoire », p. 70.
- [15] « Ahmed et al. - 2020 - Performance optimization of CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ bas.pdf ».
- [16] A. Ahmed, K. Riaz, H. Mehmood, T. Tauqeer, et Z. Ahmad, « Performance optimization of CH₃NH₃Pb(I_{1-x}Br_x)₃ based perovskite solar cells by comparing different ETL materials through conduction band offset engineering », *Optical Materials*, vol. 105, p. 109897, juill. 2020, doi: 10.1016/j.optmat.2020.109897.
- [17] E. Raza *et al.*, « Numerical modeling and performance optimization of carbon-based hole transport layer free perovskite solar cells », *Optical Materials*, vol. 125, p. 112075, mars 2022, doi: 10.1016/j.optmat.2022.112075.
- [18] Z. Ahmad, A. Mishra, et S. M. Abdulrahim, « Electrical equivalent circuit (EEC) based impedance spectroscopy analysis of HTM free perovskite solar cells », p. 1.
- [19] Philip Jackson, Dimitrios Hariskos, Erwin Lotter, Stefan Paetel, Roland Wuerz, Richard Menner, Wiltraud Wischmann and Michael Powalla, « New world record efficiency for Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells beyond 20% progress in photovoltaics: research and applications » (2011).