



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 Energies Renouvelables

Par :

**Mr KISSI Mohamed Arslane**

Sur le thème

---

## **Optimisation d'une cellule solaire à colorants à base d'une couche active N719**

---

Soutenu publiquement le 08 Juin 2024 à Tlemcen devant le jury composé de :

Mr KARAOUZENE Lotfi Ibrahim	MCA	Université de TLEMCCEN	Président
Mr BABA AHMED Nassim	MCA	Université de TLEMCCEN	Encadrant
Mme BACHIR née DAHMANI Nadia	MCA	Université de TLEMCCEN	Examinatrice

*Année Universitaire : 2023 ~ 2024*



### ***Je dédie ce modeste travail A :***

Mon cher père, ma chère mère, ma sœur ***Ghizlene***, mes frères ***Nadir***, ***Amine*** et ***Nassim***, ainsi que ma belle-sœur ***Merwa*** et, bien sûr, mon adorable petit neveu ***Yacine***. Votre soutien indéfectible, vos encouragements constants tout au long de mes années d'études, et votre confiance en moi ont été d'une aide précieuse.

À tous mes amis, véritables exemples d'amitié, qui m'ont accompagné tout au long de mon parcours universitaire.

Je vous exprime à toutes et à tous ma profonde gratitude et reconnaissance.

Merci !

***Arslane***

## REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord Dieu le tout puissant qui nous éclaire le bon chemin.

On m'aurait dit au début de la rédaction que les remerciements seraient la partie la plus difficile à écrire, je n'y aurais pas cru. Et pourtant, je peux le confirmer maintenant. Ils représentent bien souvent la partie la plus lue d'un mémoire de thèse, ou du moins celle qu'un lecteur regardera naturellement en premier. Il s'agit donc de trouver les mots justes pour chacun, tout en n'oubliant personne. Je commencerai donc par remercier toute personne que j'aurais pu malencontreusement oublier par la suite. Contrairement aux idées reçues, une thèse n'est pas le résultat d'un travail purement personnel. Au-delà d'être une expérience scientifique incroyable, c'est également une aventure humaine inoubliable qui m'a permis de rencontrer et côtoyer des personnes extraordinaires, qui ont contribué, de près ou de loin, à l'aboutissement de ce travail. C'est donc naturellement et en toute sincérité que je vais maintenant remercier l'ensemble des personnes qui m'ont entourée pendant ces quelques années !

Je remercie vivement et chaleureusement mon encadreur Docteur BABA AHMED Nassim Maître de conférences « A » à l'université de Tlemcen. Je tiens à lui exprimer toute ma gratitude pour son aide technique, scientifique et morale ; pour son encouragement et surtout pour la patience et la disponibilité dont il a fait preuve à mon égard.

Je tiens ensuite à adresser mes remerciements à l'ensemble des membres du jury pour le temps qu'ils ont accordé à la relecture du manuscrit.

Je remercie en particulier Monsieur KARAOUZENE Lotfi Ibrahim Maître de conférences « A » à l'université de Tlemcen de vouloir présider le jury de ce Master. Je suis très honoré par la présence de Madame BACHIR née DAHMANI Nadia Maître de conférences « A » à l'université de Tlemcen et je la remercie pour avoir accepté de siéger dans ce jury en tant qu'examinatrice. Je remercie tous les membres du jury pour leur expérience et leur regard critique qu'ils ont porté sur mon travail.

# LISTE DES FIGURES

## Chapitre 1 : Etat de l'art sur les cellules solaires à colorant

<b>Figure 1.1</b> : Anatomie d'une cellule photovoltaïque [11] .....	06
<b>Figure 1.2</b> : Panneau solaire monocristallin 425 W [17] .....	07
<b>Figure 1.3</b> : Les cellules polycristallines [18] .....	08
<b>Figure 1.4</b> : Structure d'une cellule de type Schottky [19] .....	09
<b>Figure 1.5</b> : Structure d'une cellule de type bicouche [19] .....	10
<b>Figure 1.6</b> : Cellule solaire a colorant [21] .....	10
<b>Figure 1.7</b> : Evolution du nombre de publications « dye-sensitized solar cells » [19] ....	12
<b>Figure 1.8</b> : Schéma d'une cellule de Grätzel [30] .....	12
<b>Figure 1.9</b> : Diagramme énergétique à l'intérieur d'une cellule DSSC [19] .....	13
<b>Figure 1.10</b> : Principe de fonctionnement d'une cellule DSSC à base de TiO <sub>2</sub> [11] .....	15
<b>Figure 1.11</b> : Diagramme schématique des différents processus de transfert de charge dans une cellule de DSSC [23] .....	15

## Chapitre 2 : Modélisation et simulation numérique d'une cellule solaire à colorant

<b>Figure 2.1</b> : Structure du dispositif primaire de la cellule PSC adoptée : FTO comme couche fenêtre, WS <sub>2</sub> en couche ETL, Colorant-Sensibilisateur N719 comme absorbeur, Kesterite en couche HTL et Au comme contact arrière	31
<b>Figure 2.2</b> : Structure générale de Solcore .....	33
<b>Figure 2.3</b> : Matériaux avec la plupart des paramètres inclus dans la base de données de Solcore .....	34

## Chapitre 3 : Résultats et interprétations

<b>Figure 3.1</b> : Variation des performances photovoltaïque de la cellule étudiée en fonction de la température: efficacité $P_{CE}$ , facteur de forme $FF$ et densité de courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	41
<b>Figure 3.2</b> : Variation des performances photovoltaïque de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche active: efficacité $P_{CE}$ , facteur de forme $FF$ , tension du circuit ouvert $V_{oc}$ et densité de courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	42
<b>Figure 3.3</b> : Variation des performances photovoltaïque de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche HTL : efficacité $P_{CE}$ , facteur de forme $FF$ , tension du circuit ouvert $V_{oc}$ et densité de courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	43

<b>Figure 3.4 :</b> Variation des performances photovoltaïques de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche ETL : Efficacité $P_{CE}$ , facteur de forme $FF$ , tension du circuit ouvert $V_{oc}$ et densité de courant de court-circuit $I_{cc}$ .....	44
<b>Figure 3.5 :</b> Diagramme de bande d'énergie de la structure de cellule solaire .....	44
<b>Figure 3.6 :</b> Effet de la variation d'épaisseur sur le QE de la cellule solaire .....	45
<b>Figure 3.7 :</b> AVT simulé pour des valeurs correspondantes de la résistance des différentes couches de la cellule solaire pour (a) Verre (0,7, 1,1 nm) / $WS_2$ (20 nm) / ITO (50-250 nm) et (b) Verre (1,1, 2,2, 3 mm) / $WS_2$ (25 nm) / $WS_2$ (30 nm) / ITO (250-500 nm). (c) Comparaison entre la transmittance calculée pour le meilleur substrat de verre aux revêtements ITO et FTO .....	46
<b>Figure 3.8 :</b> Variation des paramètres optiques de la Kesterite en fonction de la longueur d'onde .....	47
<b>Figure 3.9 :</b> Variation des autres paramètres optiques de la cellule solaire en fonction de la longueur d'onde .....	47
<b>Figure 3.10 :</b> Cartes en couleur de l'AVT en fonction de l'épaisseur de la couche Kesterite. Les courbes de niveau en noir indiquent le $J_{SC}$ théorique photogénéré dans la couche Kesterite. Les panneaux (a-c) sont liés à l'architecture planaire N-I-P pour laquelle nous avons fait varier à la fois le TCO et l'ETL. De même, les panneaux (d et f) sont liés aux architectures planaires P-I-N pour lesquelles il y a variation de la couche Pérovskite selon la littérature [4] .....	48

## LISTE DES TABLEAUX

### Chapitre 2 : Modélisation et simulation numérique d'une cellule solaire à colorant

<b>Tableau 2.1</b> : Paramètres par défaut du modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall	28
<b>Tableau 2.2</b> : Paramètres par défaut du modèle de recombinaison Auger .....	28
<b>Tableau 2.3</b> : Paramètres utilisés pour le modèle de Masetti .....	29
<b>Tableau 2.4</b> : Paramètres utilisés pour le modèle de Canali .....	29
<b>Tableau 2.5</b> : Paramètres utilisés par défaut pour le modèle de Del Alamo .....	30
<b>Tableau 2.6</b> : Paramètres électriques et optiques de différentes couches utilisées dans SCAPS .....	31

# TABLE DES MATIERES

Dédicace .....	I
Remerciement .....	II
Liste des figures .....	III
Liste des tableaux .....	IV
Table des matières .....	V
Introduction générale .....	01

## Chapitre 1 : Etat de l'art sur les cellules solaires à colorant

Introduction .....	05
1. Historique .....	05
2. Les cellules photovoltaïques .....	06
2.1. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire .....	06
2.2. Les différentes technologies des cellules solaires .....	07
2.2.1. Les cellules photovoltaïques inorganiques .....	07
a. Cellules solaires à base de silicium .....	07
b. Cellules solaires en films minces .....	08
2.2.2. Les cellules photovoltaïques organiques .....	09
a. Les cellules à base de matériaux moléculaires .....	09
b. Les cellules à base de polymères .....	10
2.2.3. Les cellules sensibilisées par colorant (Grätzel) .....	10
3. Cellules solaires à colorant .....	11
3.1. Historique .....	11
3.1.1. Matériaux constituant les cellules solaires à colorant .....	12
3.1.2. Principe de fonctionnement d'une cellule Grätzel .....	14
3.1.3. Différents types de transfert de charge dans une cellule Grätzel .....	15
3.2. Paramètres photovoltaïques .....	17
3.3. Avantages et inconvénients des cellules solaires a colorant .....	18
3.4. Applications possibles des cellules solaires a colorant .....	18
Conclusion .....	19
Références bibliographiques .....	19

## Chapitre 2 : Modélisation et simulation numérique d'une cellule solaire à colorant

Introduction .....	24
1. Modèles physiques utilisés dans la simulation numérique des cellules solaires .....	25
1.1. La simulation électrique .....	26
1.2. Les modèles optiques .....	26
1.3. Recombinaison Shockley-Read-Hall .....	27
1.4. Recombinaison Auger .....	28

1.5. Recombinaison en surface .....	28
1.6. Mobilité (modèle de Masetti) .....	28
1.7. Mobilité (modèle de Canali) .....	29
1.8. La densité effective (band gap narrowing) .....	29
2. Le choix du logiciel de simulation .....	30
2.1. Les paramètres d'entrée .....	31
2.2. Les équations de base .....	32
Conclusion .....	36
Références bibliographiques .....	36
<b>Chapitre 3 : Résultats et interprétations</b>	
Introduction .....	40
1. Propriétés électriques et structurales d'une cellule solaire .....	40
1.1. Effet de la température sur la structure de la cellule étudiée .....	41
1.2. Effet de la variation de l'épaisseur la couche active sur la structure de la cellule étudiée .....	42
1.3. Effet de la variation de l'épaisseur la couche HTL sur la structure de la cellule étudiée .....	43
1.4. Effet de la variation de l'épaisseur la couche ETL sur la structure de la cellule étudiée .....	44
2. Propriétés optiques d'une cellule solaire .....	46
Conclusion .....	48
Références bibliographiques .....	49
<b>Conclusion générale et perspectives</b> .....	<b>50</b>

---

# **INTRODUCTION GENERALE**

---

Depuis des décennies, l'énergie est essentielle à l'activité humaine, jouant un rôle central dans la vie quotidienne et le développement des nations. Cependant, l'augmentation de la consommation mondiale d'énergie se fait souvent au détriment de l'environnement. La majorité de l'électricité provient de la combustion de ressources non renouvelables, ce qui génère d'importantes émissions de CO<sub>2</sub> et contribue à l'effet de serre, facteur du changement climatique. Cela menace l'équilibre physique, économique, social et politique de la planète. En outre, l'utilisation excessive des énergies fossiles est à la fois polluante et limitée en ressources. La recherche de sources d'énergie alternatives est donc devenue une priorité essentielle aujourd'hui.

Une énergie est considérée comme renouvelable lorsqu'elle provient de sources qui se reconstituent suffisamment vite pour être considérées comme inépuisables. Les énergies renouvelables tirent leur origine de phénomènes naturels constants, principalement alimentés par le Soleil (énergie solaire, mais aussi hydraulique, éolienne, biomasse), la Lune (énergie marémotrice et hydrolienne) et la Terre (géothermie profonde). L'énergie solaire photovoltaïque répond aux défis majeurs de notre société en étant inépuisable, largement disponible, abondante, et sans production de déchets ou de gaz polluants. En effet, la quantité d'énergie solaire captée par la Terre en une heure suffit à couvrir les besoins énergétiques mondiaux pour une année entière.

Le secteur photovoltaïque mondial a connu une croissance moyenne annuelle de 35 % depuis 1998. Jusqu'en 2024, de nouveaux marchés solaires importants émergent en Algérie, au Brésil, en Égypte, au Mexique, au Pakistan, aux Philippines, en Arabie Saoudite et aux Émirats Arabes Unis [1]. L'Algérie entreprend une transition vers une énergie verte en lançant un ambitieux programme de développement des énergies renouvelables et de l'efficacité énergétique. Cette stratégie repose sur la valorisation des ressources inépuisables telles que le solaire, pour diversifier les sources d'énergie et préparer le pays à une ère énergétique durable. Le programme algérien privilégie le photovoltaïque, qui représente 62 % des efforts, suivi par l'éolien à 23 % et le solaire thermique à 9 % [2]. La forte concurrence dans le secteur photovoltaïque stimule des recherches rapides, aboutissant à des technologies innovantes aux rendements de plus en plus élevés. Les principales technologies photovoltaïques actuellement sur le marché sont principalement basées sur le silicium cristallin, première génération de cellules solaires, incluant le silicium monocristallin, multicristallin et en ruban. Les technologies à couches minces, qui représentent la deuxième génération, incluent le tellure de cadmium (CdTe) et le silicium amorphe (a-Si), entre autres. La troisième génération regroupe des innovations plus récentes, comme les cellules solaires organiques, notamment les cellules solaires à colorants, qui utilisent les propriétés d'absorption de la lumière des colorants organiques pour convertir l'énergie solaire en électricité. Le colorant N719, utilisé dans les cellules solaires à colorants, est particulièrement performant pour capturer la lumière dans les spectres visible et proche infrarouge. Optimiser ces cellules solaires est crucial pour maximiser leurs

efficacité et leurs performances. En améliorant la couche active basée sur le colorant N719, on peut augmenter l'absorption de lumière et optimiser la conversion de l'énergie solaire en électricité.

Dans notre travail, nous allons chercher à optimiser les performances d'une cellule solaire à colorants basée sur une couche active de colorant N719. Nous avons étudié les paramètres électriques et optiques qui influencent l'efficacité de la cellule, y compris la composition de la couche active, le tous par simulation en utilisant une combinaison entre le logiciel SCAPS-1D et le langage Python, en tirant parti de la bibliothèque SOLCORE intégrée à Python.

Ce mémoire sera développé en plusieurs parties :

- ✓ Dans le premier chapitre, nous aborderons quelques notions fondamentales sur les cellules solaires et présenterons un aperçu des différentes technologies existantes.
- ✓ Dans le second chapitre, nous exposerons la modélisation et la simulation numérique d'une cellule solaire à colorants pour déterminer les paramètres les plus cruciaux pour son fonctionnement. Pour cela, nous utiliserons d'une part SCAPS 1D et d'autre part la bibliothèque Python Solcore.
- ✓ Dans le troisième et dernier chapitre, nous analyserons et interpréterons les résultats obtenus par les simulations numériques.
- ✓ Nous concluons ce travail par une synthèse générale et nous proposons quelques perspectives en rapport avec notre étude.

---

# **CHAPITRE 1 :**

**Etat de l'art sur les cellules solaires à  
colorant**

---

## **Introduction :**

L'énergie, omniprésente dans notre quotidien, existe sous diverses formes, telles que l'énergie cinétique, thermique, électrique et chimique. Elle propulse nos véhicules, illumine nos foyers et alimente nos technologies. Parmi les sources d'énergie, les énergies renouvelables émergent comme une solution cruciale pour répondre aux défis énergétiques mondiaux tout en limitant les impacts environnementaux. L'énergie solaire, en particulier, se distingue en tant que source inépuisable et propre, capturée grâce à des technologies telles que les panneaux photovoltaïques.

Dans ce chapitre, nous allons commencer par présenter quelques généralités sur les cellules solaires notamment leur principe de fonctionnement et les différentes technologies, ensuite nous allons nous intéresser aux cellules solaires à colorant plus précisément les cellules solaires à colorant (DSSC) à base d'une couche active N719.

## **1 Historique :**

En 1839, le scientifique français Alexandre Edmond Becquerel fit la découverte de l'effet photovoltaïque. Dès le début, les recherches se sont orientées vers l'utilisation de semi-conducteurs pour absorber les photons de la lumière et générer un courant électrique [1]. Cependant, il a fallu attendre jusqu'en 1954 pour que la première cellule à base de silicium, affichant un rendement de conversion de 6%, soit réalisée aux laboratoires Bell Labs grâce à trois chercheurs américains : Daryl Chaplin, Calvin Fuller et Gerald Pearson [2].

En 1958, le satellite artificiel américain Vanguard a été équipé d'un petit générateur solaire destiné à alimenter sa radio [3]. Par la suite, les avancées se sont multipliées rapidement. Les premières applications militaires dans le domaine spatial ont émergé en 1960, avec des cellules photovoltaïques atteignant un rendement de 14%. En 1973, la première maison équipée d'une installation photovoltaïque a été inaugurée à l'université de Delaware aux États-Unis. Au cours des dernières années, le marché du photovoltaïque a connu une croissance significative, soutenue par l'amélioration du rendement de conversion et la réduction des coûts de production, attribuables à l'utilisation de matériaux organiques en remplacement du silicium [4]. La commercialisation auprès du grand public s'accélère rapidement, et en 1982, le premier parc photovoltaïque d'une capacité de 1 MW est installé aux États-Unis [5]. Ce n'est qu'à partir des années 80 que la recherche se tourne vers d'autres types de cellules, dépassant la technologie traditionnelle basée sur le silicium. En 1990, les premières cellules organiques voient le jour, bénéficiant des découvertes majeures sur les polymères conducteurs par Alan HEEGER, Alan G. MACDAIRMID et Hideki SHIRAKAWA, récipiendaires du prix Nobel de Chimie en 2000 [6]. Cependant, malgré ces avancées, le coût élevé de la technologie et des installations souligne la nécessité du développement de nouvelles filières pour démontrer des solutions compétitives à grande échelle.

Actuellement, l'énergie photovoltaïque est accessible tant aux entreprises qu'aux particuliers, avec des panneaux solaires affichant des rendements d'environ 20% [7].

## 2 Les cellules photovoltaïques :

Le terme "photovoltaïque" fait référence au processus physique qui implique la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique en transférant l'énergie des photons aux électrons d'un matériau. Le préfixe "photo" provient du grec "phos", signifiant lumière, tandis que "volt" est dérivé du patronyme d'Alessandro Volta (1745-1827), un physicien ayant apporté des contributions importantes à la recherche sur l'électricité. Ainsi, "photovoltaïque" se traduit littéralement par "électricité lumineuse" [8]. Ainsi, on peut décrire une cellule photovoltaïque comme étant fondée sur l'effet photovoltaïque, qui consiste en la conversion directe de l'énergie électromagnétique (rayonnement) en énergie électrique de type continu, immédiatement exploitable [5].

### 2.1 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire :

Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque repose sur les propriétés des semi-conducteurs qui, lorsqu'ils interagissent avec les photons, génèrent un mouvement d'électrons. Les photons, également qualifiés de "grains de lumière" par Albert Einstein, transportent l'énergie solaire à une vitesse de 300 000 km/s. En atteignant un matériau semi-conducteur tel que le silicium, ils arrachent des électrons à ses atomes, les propulsant de manière désordonnée à la recherche d'autres "trous" pour se repositionner [9]. Cependant, afin de favoriser la formation d'un courant électrique, il est essentiel que ces déplacements d'électrons soient uniformément dirigés. Pour faciliter cela, on combine deux variétés de silicium. La surface exposée au soleil est « dopée » avec des atomes de phosphore qui possèdent un excès d'électrons par rapport au silicium, tandis que l'autre surface est dopée avec des atomes de bore qui ont une déficience d'électrons. Le dopage des cristaux de silicium implique l'incorporation d'autres atomes afin d'augmenter la conductivité du matériau [10]. Cette double configuration crée une structure semblable à une pile : le côté fortement chargé en électrons devient la borne négative (N), tandis que le côté avec moins d'électrons devient la borne positive (P). Un champ électrique se forme entre ces deux bornes électriques qui tend à repousser les électrons dans la zone n et les trous vers la zone p. Une jonction (dite p-n) a été formée. [9].

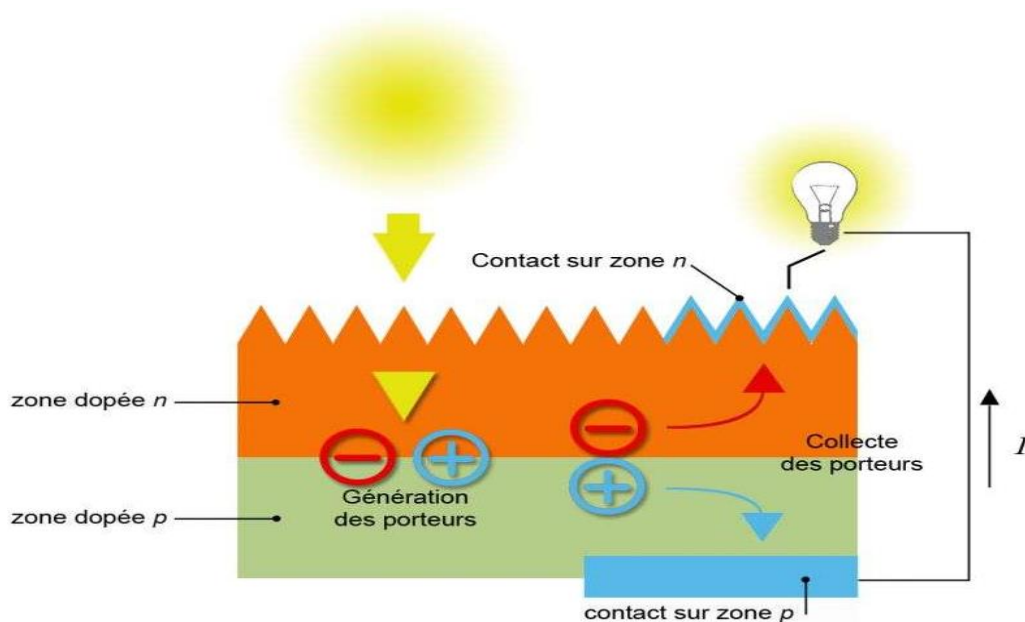


Figure1.1 : Anatomie d'une cellule photovoltaïque [11]

En intégrant des contacts métalliques aux zones n et p, on crée une diode. Lorsque la jonction est exposée à la lumière, les photons avec une énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite transfèrent leur énergie aux atomes. Chaque photon induit le passage d'un électron de la bande de valence à la bande de conduction, créant simultanément un trou mobile, formant ainsi une paire électron-trou. En appliquant une charge aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n se déplacent vers les trous de la zone p via la connexion extérieure, engendrant une différence de potentiel. Cela conduit à la création d'un courant électrique [5] [4] [12].

## 2.2 Les différentes technologies des cellules solaires :

Trois catégories de cellules photovoltaïques se démarquent en fonction des matériaux employés : les cellules PV inorganiques, les cellules PV organiques et les cellules PV hybrides.

### 2.2.1 Les cellules photovoltaïques inorganiques :

Les cellules solaires inorganiques dominent le marché mondial des panneaux solaires, avec une part de marché de 99 % [13]. Cette technologie est hautement développée, comme en témoigne la minime disparité entre le rendement théorique maximal de 27 % et les performances des meilleurs modules de laboratoire atteignant 20,8 % par pied carré [13]. Par ailleurs, le rendement du meilleur module commercial de grande taille (1 mètre) est de 15,3 % [13]. Actuellement, les cellules photovoltaïques affichant les rendements les plus élevés en conversion d'énergie solaire sont basées sur l'utilisation de matériaux inorganiques. Il est pertinent de les classer en plusieurs catégories [7] :

#### a. Cellules solaires à base de silicium :

La majeure partie de la production mondiale de panneaux solaires est actuellement dominée par la technologie du silicium. Le silicium présente de nombreux avantages, étant un matériau stable et non toxique, et ses propriétés électriques peuvent être aisément modifiées en introduisant des dopants tels que le Bore (induisant un dopage de type P) ou le Phosphore (induisant un dopage de type N). Cette technologie du silicium se subdivise elle-même en plusieurs catégories en fonction de la nature du silicium utilisé et/ou de la méthode de fabrication.

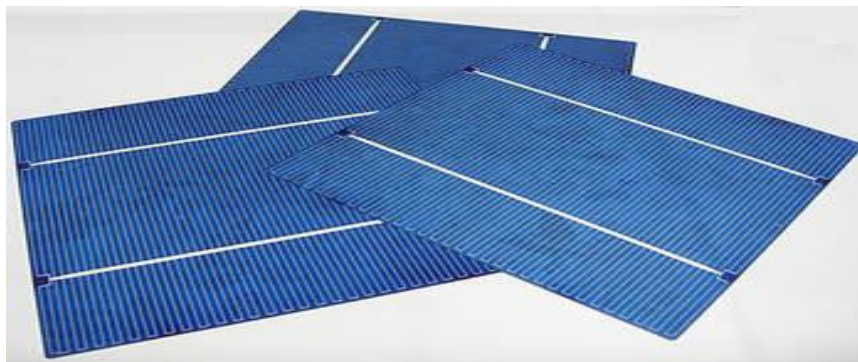
➤ **Cellules en silicium monocristallin :** Le silicium monocristallin, également désigné sous le terme mono-Si, est constitué d'un unique cristal d'une homogénéité parfaite. Les cellules solaires fabriquées à partir de ce type de silicium se distinguent par une teinte distincte, souvent décrite comme gris-noir métallique. [14] (figure 1.2).



Figure1.1 : Panneau solaire monocristallin 425 W [17]

Cette technologie présente des avantages significatifs avec une production de cellules solaires quasi-optimale. Les cellules monocristallines se distinguent par les rendements les plus élevés, atteignant environ 26% [15]. De plus, les panneaux solaires élaborés à partir de silicium monocristallin démontrent une durabilité notable, pouvant atteindre environ 30 ans [16]. Les désavantages incluent des coûts de production élevés, une efficacité réduite en conditions d'éclairage faible, et une diminution du rendement à mesure que la température augmente.

➤ **Cellules au silicium polycristallin (multi cristallin) :** À la différence du silicium monocristallin, le silicium multicristallin (mc-Si) est constitué de plusieurs domaines cristallins de tailles variées et disposés de manière aléatoire dans le matériau. Les cellules solaires multicristallines présentent donc une apparence non uniforme et une teinte bleue distinctive (figure 1.3). L'avantage de cette technologie réside dans des coûts de production moindres par rapport aux cellules monocristallines, tout en maintenant une bonne durée de vie des panneaux. Cependant, son inconvénient principal réside dans un rendement de conversion légèrement inférieur, qui tourne autour de 23,3% [14] [15].



**Figure 1.2 :** Les cellules polycristallines [18]

#### **b. Cellules solaires en films minces :**

➤ **Les cellules à base de silicium amorphe :** Les cellules à base de silicium amorphe sont fabriquées à partir de silicium sans structure cristalline ordonnée. Contrairement aux cellules cristallines, elles ont une structure atomique désordonnée, ce qui les rend amorphes. Ces cellules ont l'avantage d'être flexibles, légères et moins coûteuses à produire. Cependant, elles présentent généralement un rendement de conversion moins élevé par rapport aux cellules cristallines, ce qui les rend plus adaptées à des applications nécessitant une flexibilité et un coût compétitif plutôt qu'une efficacité maximale. Par exemple, elles trouvent souvent leur utilisation dans des dispositifs tels que des calculatrices ou des montres.

➤ **Les cellules à base de tellure de cadmium (CdTe) :** Les cellules photovoltaïques à base de tellure de cadmium (CdTe) connaissent un développement significatif, représentant une part importante du marché des cellules en couches minces depuis 2009. Elles affichent des rendements allant jusqu'à 22% pour une cellule et 19% pour un module photovoltaïque [15]. Cependant, cette technologie présente des inconvénients notables, notamment la toxicité du cadmium et la rareté du tellure, aspects qui soulignent la nécessité de recherches continues pour atténuer ces préoccupations environnementales [14].

➤ **Les cellules à base de CIS et CIGS :**

- Le **CIS** : un matériau connu sous le nom de diséléniure de cuivre et d'indium (CIS) présente une caractéristique remarquable avec un coefficient d'absorption situé entre 100 et 1000 fois supérieur à celui du silicium amorphe.
- Le **CIGS**, qui inclut le gallium, présente un inconvénient majeur du fait que le sélénium, l'indium et le gallium sont des matériaux dont les ressources sont limitées. Bien que la maîtrise à grande échelle de cette technologie soit confrontée à des défis bien connus, il est important de noter que les performances exceptionnelles de cette technologie atteignent des rendements records d'environ 23,4% pour une cellule et 20% pour un module [15]. L'avantage significatif de ces cellules en couches minces réside dans l'utilisation de substrats légers et flexibles.

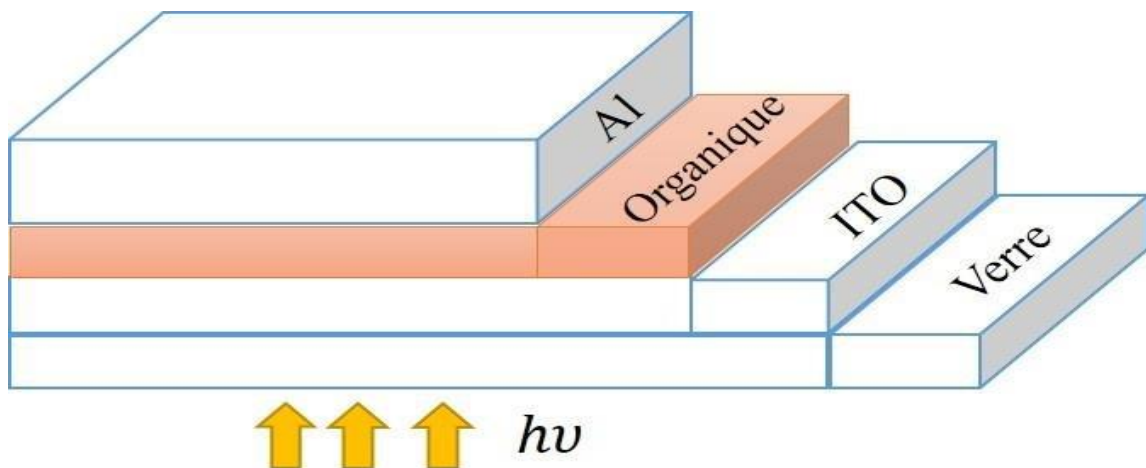
**2.2.2 Les cellules photovoltaïques organiques :**

Face à la technologie des cellules solaires utilisant des matériaux inorganiques, celles basées sur des composés organiques connaissent un essor significatif. Ces cellules présentent plusieurs avantages par rapport à leurs homologues inorganiques, tels que la capacité d'être déposées sur de grandes surfaces, une fabrication et une manipulation facilitées, la possibilité d'être élaborées sur des substrats flexibles, ainsi que des coûts de fabrication et de matériaux plus abordables. Néanmoins, elles présentent actuellement des durées de vie considérées comme inférieures à celles des cellules inorganiques et des rendements de conversion moindres. Il existe deux catégories principales de cellules organiques [4] :

**a. Les cellules à base de matériaux moléculaires :**

Au cours des dernières années, deux catégories de cellules photovoltaïques organiques moléculaires ont fait l'objet d'une recherche intensive : celles caractérisées par une structure monocouche et celles qui adoptent une structure bicouche :

- Les cellules moléculaires monocouches, dénommées de type Schottky, exploitent un semi-conducteur de type p (ou n) dans une configuration métal/organique/métal. Dans ce schéma (figure 1.4), le semi-conducteur est intercalé entre deux électrodes métalliques, créant ainsi une zone active pour la conversion photovoltaïque entre l'une des électrodes métalliques et le semi-conducteur.



**Figure 1.3 :** Structure d'une cellule de type Schottky [19]

➤ Les cellules moléculaires bicouches exploitent deux semi-conducteurs, l'un de type p et l'autre de type n, qui entrent en contact pour former une jonction p-n. La zone active pour la conversion photovoltaïque se situe à l'interface entre ces deux semi-conducteurs.

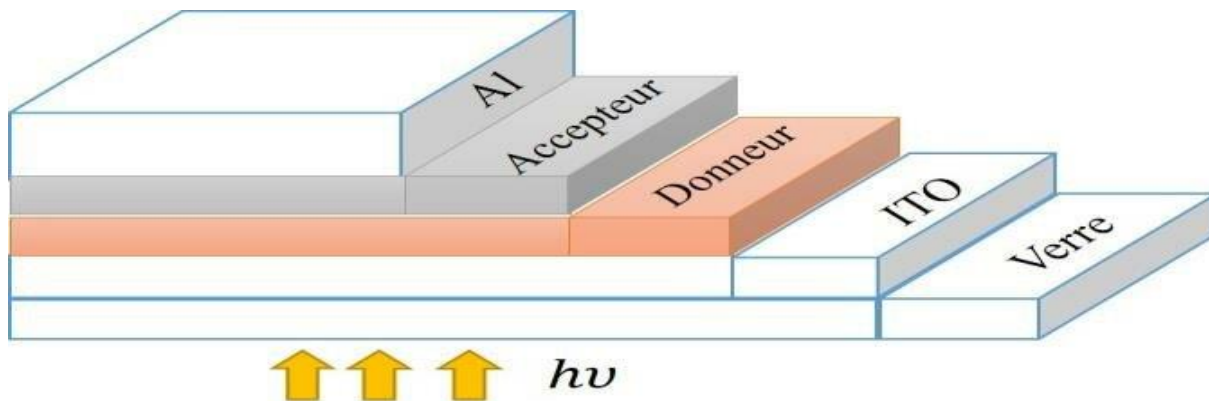


Figure1.4 : Structure d'une cellule de type bicouche [19]

### b. Les cellules à base de polymères :

Les cellules photovoltaïques à base de polymères constituent une technique innovante de production d'électricité à partir de la lumière, utilisant des polymères semi-conducteurs. Cette approche, encore largement au stade expérimental, suscite un intérêt considérable de la part de groupes industriels et d'institutions universitaires à travers le monde.

Bien que les cellules polymères photovoltaïques se trouvent à un stade précoce de développement, elles présentent des perspectives prometteuses. Leurs processus de fabrication sont moins énergivores que ceux des cellules à base de semi-conducteurs minéraux, entraînant des coûts de production plus bas. De plus, elles sont plus légères et moins fragiles. Leur caractère flexible permet même une intégration dans des matériaux souples tels que les polymères organiques, les silicones, voire les fibres textiles [20]. Cependant, leur principale limite réside dans leur durée de vie encore restreinte, attribuée à la dégradation des polymères lorsqu'ils sont exposés au soleil.

### 2.2.3 Les cellules sensibilisées par colorant (Grätzel) :

Ces dispositifs sont fréquemment désignés sous le nom de DSSC (Dye-Sensitized -Solar- Cells) ou cellules Grätzel. Dans ce type de cellules, une couche de dioxyde de titane ( $\text{TiO}_2$ ), un semi-conducteur de type n, est revêtue d'un colorant organique qui absorbe la lumière. Cette couche est mise en contact avec un électrolyte ; une solution aqueuse contenant un couple redox.

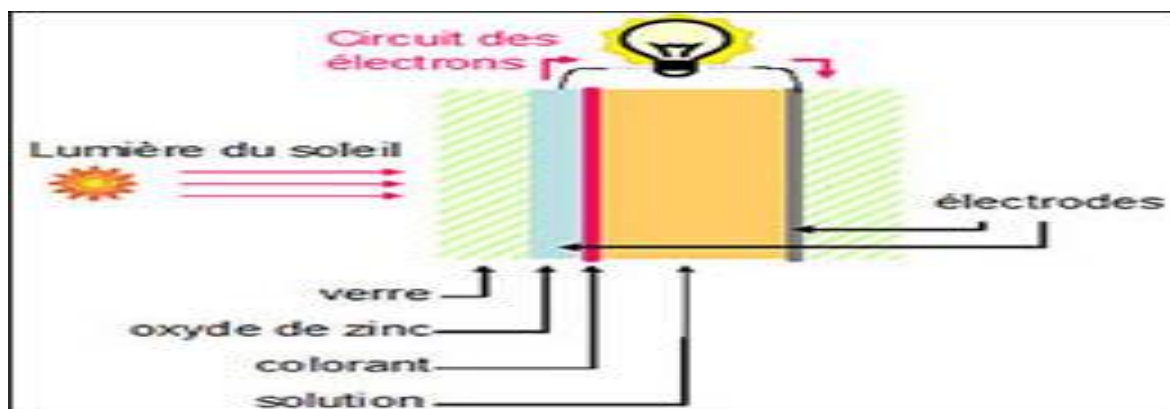


Figure1.5 : Cellule solaire a colorant [21]

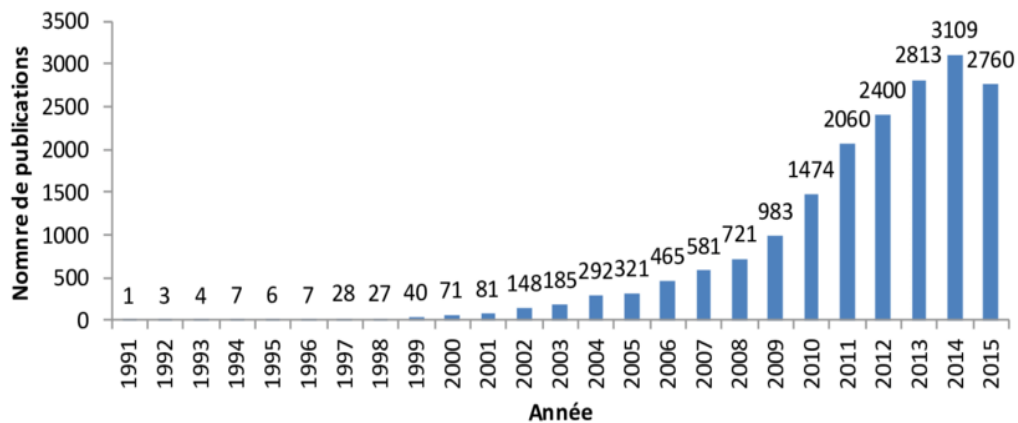
### 3 Cellules solaires à colorant :

Nées de l'inspiration tirée du processus de la photosynthèse, les cellules solaires à colorants, également connues sous le nom de DSSC (Dye Sensitized Solar Cell), ont été développées au début des années 1970, exhibant alors des rendements initialement très modestes [22]. Ces dispositifs reposent sur le transfert d'électrons entre un semi-conducteur inorganique, responsable de la collecte et du transport des électrons, et un sensibilisateur moléculaire qui s'occupe de l'absorption de la lumière [23].

Les avancées significatives dans la technologie des cellules solaires sensibilisées par colorant ont été réalisées par Brian O'Regan et Michael Grätzel en 1991. Ces progrès ont été rendus possibles par l'utilisation d'un film de  $\text{TiO}_2$  poreux composé de nanoparticules interconnectées, permettant d'atteindre un rendement de photo-conversion de 7% [24]. Depuis lors, de nombreuses recherches ont été entreprises, et l'efficacité de ces cellules a désormais dépassé la barre des 14% [25] [26]. À la différence des cellules solaires en silicium, les cellules solaires à colorants présentent une faible sensibilité à la variation de l'inclinaison et de l'intensité de la source lumineuse [26] [27]. Dans certaines situations, on constate même une amélioration des performances en conditions de faible ensoleillement. De plus, les cellules solaires à colorants peuvent être orientées verticalement sans perte d'efficacité, grâce aux nanoparticules facilitant une absorption isotrope de la lumière. Les DSSC offrent potentiellement un coût de production réduit, et la couleur de ces cellules peut être ajustée selon les préférences grâce au choix du colorant [28]. De ce fait, elles se positionnent comme des candidats idéaux pour l'intégration verticale, notamment en tant que vitraux électrogènes, ou dans le cadre d'applications pour le BIPV (*Building Integrated Photovoltaics*) [29].

#### 3.1 Historique :

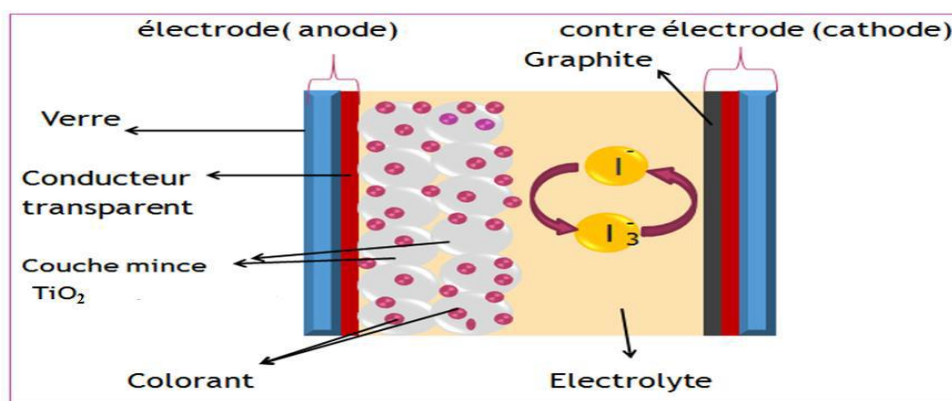
Historiquement, la sensibilisation par colorant remonte au 19<sup>e</sup> siècle avec l'invention de la photographie. Les travaux de Vogel à Berlin après 1873 peuvent être considérés comme les premières études significatives dans le domaine de la sensibilisation par colorant de semi-conducteurs, utilisant des émulsions d'halogénure d'argent pour produire des films photographiques en noir et blanc. Cependant, l'application de cette technologie à la production d'électricité photovoltaïque est restée relativement infructueuse. C'est seulement au début de 1991 qu'une percée majeure a été réalisée au Laboratoire de photonique et d'interface de l'EPFL en Suisse. Grâce à une réorganisation réussie et une implantation efficace avec des électrodes nanostructurées, le professeur Grätzel et ses collègues ont développé une cellule solaire utilisant la charge de colorant. En 1991, le rendement de conversion énergétique dépassait les 7 % et augmentait à plus de 10 % en 1993. Ces cellules ont depuis été désignées sous le nom de cellules de Grätzel, en référence à leur inventeur, le Pr Michel Grätzel. Cette découverte de principe a catalysé le développement exceptionnel de la technologie des cellules solaires à colorant. Le nombre de publications annuelles sur ces cellules a connu une croissance exponentielle depuis 1991, comme en témoigne la (figure 1.7).



**Figure 1.6 :** Evolution du nombre de publications « dye-sensitized solar cells » [19]

### 3.1.1 Matériaux constituant les cellules solaires à colorant :

La cellule conçue par Grätzel est illustrée de manière schématique dans la (figure 1.8).



**Figure 1.7 :** Schéma d'une cellule de Grätzel [30]

#### 3.1.1.1 Verre-TCO :

La plupart des recherches menées sur les DSSC impliquent le dépôt du semi-conducteur sur une surface en verre sur laquelle une couche d'oxyde métallique transparent (TCO, « Thin Conductive Oxyde ») a été préalablement déposée. Dans le domaine des DSSC, cette couche est généralement constituée d'oxyde d'étain dopé au fluor ( $\text{SnO}_2:\text{F}$ , FTO), bien que certaines études aient également été réalisées avec de l'oxyde d'indium dopé à l'étain ( $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$ , ITO) [31].

Le verre revêtu de TCO doit présenter une transparence élevée pour permettre le passage maximal de la lumière dans la cellule tout en conservant une conductivité élevée pour le transport efficace du courant électrique pendant le fonctionnement de la cellule. Ainsi, il est nécessaire de trouver un compromis concernant l'épaisseur de la couche d'oxyde conducteur, car une épaisseur plus importante favorise une meilleure conductivité mais diminue la transparence.

#### 3.1.1.2 Couche nanocristalline poreuse :

La couche nanocristalline poreuse constitue un élément essentiel d'une cellule DSSC, car elle influence ses performances en facilitant la collecte des photons (par le biais de l'absorption du colorant à sa surface), la séparation des charges (via sa configuration électronique), ainsi que le transport et la recombinaison des charges. Dans le domaine des DSSC, de nombreux semi-conducteurs ont été explorés. Cependant, seuls quelques oxydes métalliques, tels que l'oxyde d'étain ( $\text{SnO}_2$ ), l'oxyde de

zinc (ZnO), ou le dioxyde de titane ( $\text{TiO}_2$ ), répondent à ces critères tout en conservant une stabilité face à certains électrolytes (évitant ainsi les problèmes de corrosion et d'oxydation) [32].

### 3.1.1.3 Le colorant :

Le colorant joue le rôle d'élément photoactif en absorbant la lumière incidente et en générant ainsi une paire électron-trou de charges libres. Un colorant idéal doit avoir une capacité d'absorption étendue sur le spectre solaire et favoriser une injection efficace des électrons dans la bande de conduction du semi-conducteur. Pour cela, l'état excité de la molécule absorbante du colorant devrait être positionné au-dessus du bord de la bande de conduction du semi-conducteur, tout en présentant une stabilité photochimique élevée. De plus, le colorant doit comporter des groupes carboxylate ou phosphonate afin de permettre une greffe efficace à la surface de la couche poreuse du semi-conducteur. Idéalement, un colorant efficace doit présenter une densité électronique localisée dans l'état excité vers le groupement d'ancrage, favorisant ainsi l'injection électronique vers l'oxyde métallique. Ces configurations permettent d'analyser, à partir de la structure spécifique d'un colorant donné, sa configuration énergétique ainsi que les densités électroniques des états HOMO (*Highest Occupied Molecular Orbital* ou orbite moléculaire occupée la plus haute) et LUMO (*Lowest Unoccupied Molecular Orbital* ou orbite moléculaire non occupée la plus basse) [33].

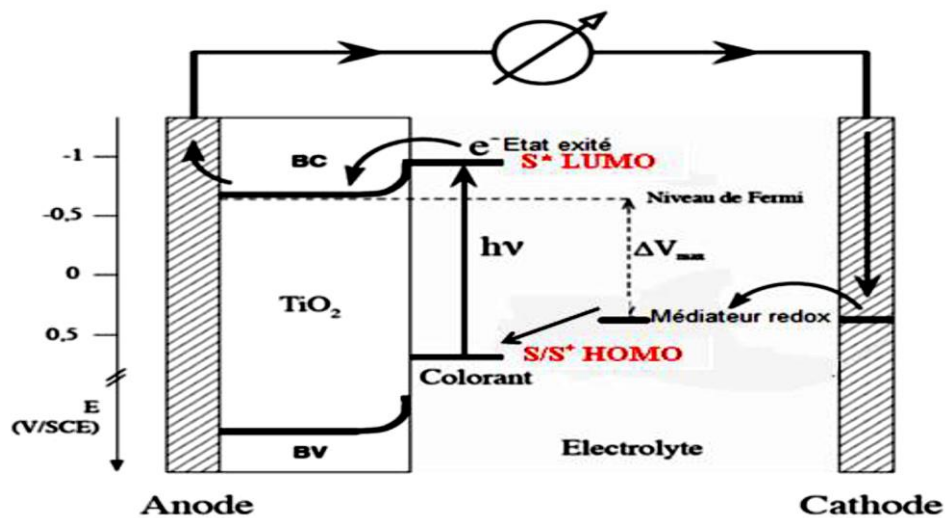


Figure 1.8 : Diagramme énergétique à l'intérieur d'une cellule DSSC [19]

### 3.1.1.4 L'électrolyte :

L'électrolyte revêt une importance cruciale dans le fonctionnement de la cellule, assurant la régénération du colorant après l'injection d'un électron dans la bande de conduction du semi-conducteur. Les systèmes les plus performants font usage d'un électrolyte liquide dans lequel le médiateur redox est dissous dans un solvant organique polaire de faible viscosité, favorisant ainsi une mobilité élevée des ions en solution et des processus de régénération rapide.

Parmi les électrolytes liquides les plus couramment utilisés figurent ceux contenant un système redox de type iode/iodure, c'est-à-dire le couple ( $\text{I}_3^-/\text{I}^-$ ). Bien que ce système présente un potentiel standard adapté à la régénération de la plupart des colorants utilisés dans les DSSC, il présente quelques inconvénients, notamment une absorption significative de la lumière en dessous de 500 nm. De plus,

il peut être corrosif à long terme pour certains composants de la cellule et peut réagir avec le colorant. D'autres types d'électrolytes ont été développés pour les DSSC, tels que ceux à base de ferrocène ( $Fc/Fc^+$ ) ou de brome ( $Br_3^-/Br^-$ ), caractérisés par un potentiel d'oxydation plus élevé que celui du couple ( $I_3^-/I^-$ ) [34].

### 3.1.1.5 La contre électrode :

La contre-électrode joue un rôle essentiel en clôturant le circuit de la cellule solaire à colorants (DSSC). Sa fonction principale est de récupérer l'électron injecté par le colorant et de régénérer la forme réduite de la paire redox à partir de la forme oxydée, complétant ainsi le circuit électrique de la DSSC. Le platine est largement utilisé comme contre-électrode en raison de sa surtension très faible, pratiquement nulle, lors de la réduction de  $I_3^-$  en  $I^-$ . Cette caractéristique limite les pertes de tension aux bornes de la cellule. Pour la fabrication de la contre-électrode, du platine est déposé sur du verre-FTO en le chauffant à 385 °C après avoir grillé un sel de platine ( $H_2PtCl_6$ ). Cette méthode permet de minimiser l'utilisation de platine, environ 5 nmol/cm<sup>2</sup>, en raison du coût élevé de ce métal [35]. Certains chercheurs travaillent à l'élimination totale du platine de la composition de la cellule. Le carbone émerge comme un candidat prometteur pour cette substitution. Bien que le graphite présente une faible activité catalytique vis-à-vis de la réduction de  $I_3^-$ , ses analogues à surface spécifique élevée tels que le noir de carbone, les nanotubes de carbone, démontrent des activités catalytiques qui peuvent dépasser celles du platine [35].

### 3.1.2 Principe de fonctionnement d'une cellule Grätzel :

À la différence des systèmes photovoltaïques classiques, le fonctionnement de la cellule solaire à colorant repose sur la dissociation des étapes d'absorption de la lumière et de collecte des charges. Inspirée du processus de photosynthèse, cette approche combine des sensibilisateurs colorés avec des semi-conducteurs [36]. Les différentes phases du cycle opérationnel, peuvent être succinctement résumées comme suit :

\* *Excitation du colorant :*



Les rayons issus de la lumière solaire pénètrent dans la couche de colorant absorbée à la surface du  $TiO_2$ . À ce niveau, les molécules de colorant absorbent les photons incidents, provoquant le passage de leur état électronique de basse énergie (LUMO) à un état excité de haute énergie (HOMO).

\* *Injection de l'électron dans le  $TiO_2$  :*



Le colorant excité procède ensuite à l'injection d'électrons dans la bande de conduction des particules de  $TiO_2$ . Ainsi, le colorant, ayant perdu un électron, se trouve dans un état  $S^+$  ; il se transforme en un oxydant capable de récupérer un électron ultérieurement.

\* *Réduction du colorant/Oxydation de l'ion iodure :*



Le colorant entre alors en réaction avec le réducteur de l'électrolyte, l'ion iodure, subissant une oxydation pour se transformer en ion triiodure. De ce fait, le colorant est régénéré et se trouve prêt pour une nouvelle excitation.

\* Réduction de l'ion triiodure à la cathode :



L'ion triiodure ( $I_3^-$ ) est réduit en iodure ( $I^-$ ) grâce au catalyseur en platine situé à la contre-électrode, en utilisant les électrons qui traversent le circuit externe. Cette réaction clôturé le cycle redox, ramenant le système à son état initial jusqu'à l'absorption d'un nouveau photon. Le temps de recombinaison de l'électron injecté dans la bande de conduction du dioxyde de titane est plus court que le temps de réaction entre le  $S^*$  et le réducteur de la solution (de l'ordre de la nanoseconde). Cette différence de vitesse, associée à la structure cristalline du semi-conducteur, empêche les recombinaisons d'électrons, assurant ainsi une bonne séparation des charges [37].

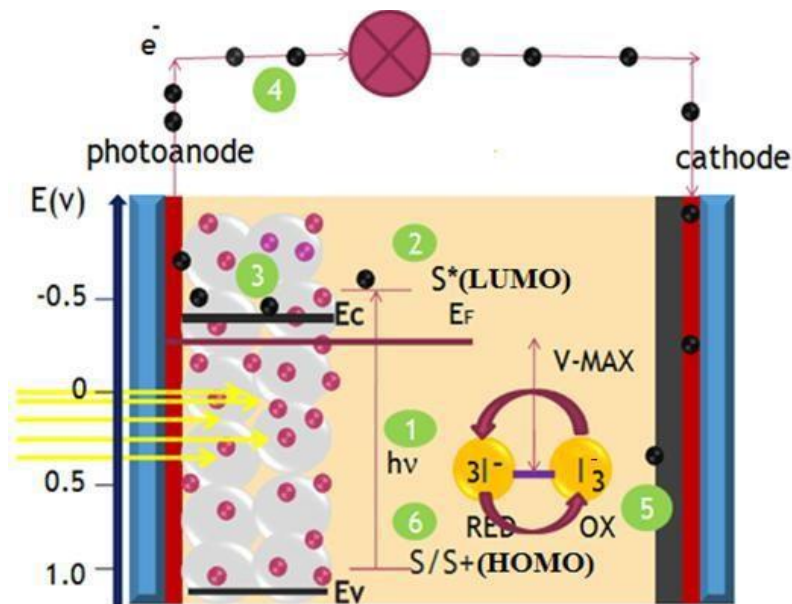
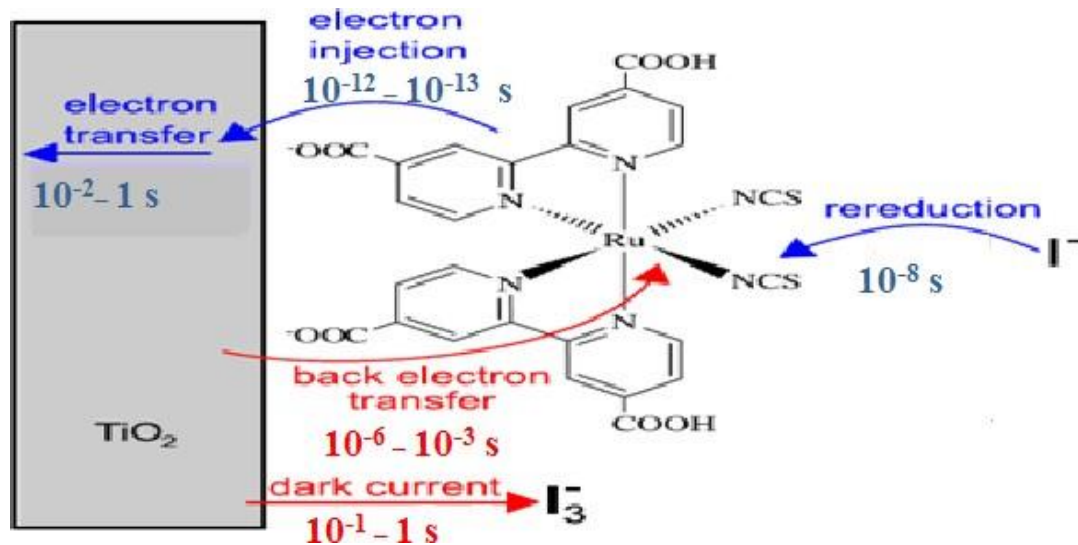


Figure 1.9 : Principe de fonctionnement d'une cellule DSSC à base de  $TiO_2$  [11]

### 3.1.3 Différents types de transfert de charge dans une cellule Grätzel :

Dans cette section, nous allons synthétiser théoriquement les divers mécanismes intervenant dans la génération du photocourant au sein des cellules solaires sensibilisées par colorant (DSSC). La Figure 1.11 offre une vue d'ensemble des différents processus de transfert électronique au sein d'une cellule DSSC.



**Figure 1.10 :** Diagramme schématique des différents processus de transfert de charge dans une cellule de DSSC [23]

**3.1.3.1 Absorption de la lumière :** L'absorption de la lumière par le colorant constitue une étape cruciale dans le fonctionnement des cellules solaires sensibilisées par colorant (DSSC). Cette phase implique que les rayons lumineux du soleil pénètrent dans la couche du colorant, absorbés à la surface du dioxyde de titane ( $\text{TiO}_2$ ). Les molécules de colorant absorbent les photons incidents, induisant ainsi une transition électronique de faible énergie (LUMO - Lowest Unoccupied Molecular Orbital) à un état excité de haute énergie (HOMO - Highest Occupied Molecular Orbital).

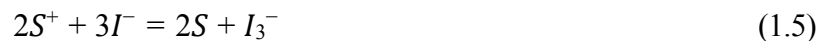
**3.1.3.2 Séparation de charges :** La séparation des charges dans les cellules Grätzel repose sur le transfert d'électrons depuis la molécule de colorant vers le  $\text{TiO}_2$ , ainsi que sur le transport des trous de la teinture oxydée vers l'électrolyte. Ce mécanisme dépend fortement de la structure électronique du colorant et de l'harmonisation des niveaux d'énergie entre son état excité et la bande de conduction du  $\text{TiO}_2$ . Contrairement aux jonctions p-n, les nanoparticules individuelles dans l'électrode nanostructurée, de taille réduite (typiquement quelques dizaines de nanomètres), ne génèrent pas de couche de charge d'espace à l'intérieur. L'absence de champ électrique significatif entre ces nanoparticules résulte de leur individualité, et l'électrolyte entourant efficacement chaque particule les isole de tout champ électrique à l'échelle nanométrique. Malgré l'inhibition de la bande de flexion à l'intérieur des particules, un champ électrique se forme à l'interface semi-conducteur/électrolyte grâce à la teinture absorbée. Les molécules de colorant, généralement dotées de groupes acides, libèrent un proton à la surface du  $\text{TiO}_2$ , laissant la molécule de colorant chargée négativement. La différence de potentiel à travers la couche formée, appelée Helmholtz, est estimée à environ 0,3 eV, contribuant à distinguer les charges et à minimiser les recombinaisons. Le mécanisme clé de séparation des charges dépend directement du positionnement des niveaux d'énergie entre la molécule

de colorant et les autres nanoparticules. L'état excité  $S^*$  de la teinture, avec un niveau LUMO au-dessus de la bande de conduction du  $TiO_2$  et un niveau HOMO inférieur au potentiel chimique de la paire redox iodure/triiodure dans l'électrolyte, fournit une impulsion énergétique pour la séparation des électrons et des trous.

**3.1.3.3 Transport de charges :** Deux modes de transport des charges sont observés : Le transport des électrons à travers l'électrode nanostructurée en  $TiO_2$  et le transport des trous à travers l'électrolyte [38].

**a. Transport électronique dans la couche de  $TiO_2$  :** Les électrons dans le semi-conducteur ne sont pas déplacés par un champ électrique comme dans les cellules solaires à base de silicium. En raison de leurs dimensions réduites (environ 15 nm pour les particules), un champ électrique significatif ne peut se former. Par conséquent, le transport des électrons dans le semi-conducteur est assuré par diffusion, influencé par le gradient de densité électronique, avec un temps de diffusion typique de l'ordre de la milliseconde.

**b. Transport ionique dans l'électrolyte redox :** L'électrolyte utilisé dans les DSSC consiste généralement en un solvant organique renfermant un couple redox  $I^-/I_3^-$ , qui agit comme médiateur pour le transport des trous. À la surface de l'électrode  $TiO_2$ , le colorant oxydé, résultant de l'injection d'électrons, est régénéré par l'ion  $I^-$  provenant de l'électrolyte, selon la réaction suivante :



À la contre-électrode, l'ion  $I_3^-$  est réduit en  $I^-$  conformément à la réaction :



**3.1.3.4 Recombinaison :** La recombinaison des électrons générés avec les trous dans l'électrode nanostructurée de  $TiO_2$  peut potentiellement se produire à deux moments distincts : après l'injection d'électrons ou lors de leur migration sur le chemin de retour vers la contre-électrode. Lors de l'illumination de ces cellules initialement en équilibre (dans l'obscurité), un champ électrique transitoire se forme entre les électrons injectés dans  $TiO_2$  et les espèces oxydées dans l'électrolyte. Ce champ électrique pourrait, en principe, entraver la séparation des charges et favoriser les recombinaisons. Cependant, dans la cellule à colorant, les ions mobiles dans l'électrolyte peuvent facilement se réorganiser et projeter efficacement le champ photo-induit adverse à travers le film d'électrode, permettant ainsi une séparation de charge efficace dans des conditions stables. Malgré la grande quantité de particules présentes sur les bords des électrodes  $TiO_2$  des DSSC et le rapport surface/volume élevé, la cellule à colorant ne semble pas souffrir de pertes par recombinaisons. Cette observation s'explique par le fait que seuls les électrons sont transportés par les particules de semi-conducteur, tandis que les trous (ions oxydés) sont transportés par l'électrolyte [39].

**3.2 Paramètres photovoltaïques :**

- **Courant de court-circuit  $I_{CC}$  :** Le courant de court-circuit représente la valeur maximale du courant lorsque la tension est nulle ( $V=0$ ). Il a tendance à augmenter proportionnellement avec

l'intensité de l'illumination et est influencé par des facteurs tels que la surface éclairée, la longueur d'onde du rayonnement incident, la mobilité des porteurs et la température.

- **Tension à circuit-ouvert  $V_{CO}$**  : La tension à circuit ouvert  $V_{CO}$  se manifeste lorsque le courant traversant la cellule solaire est nul. Cette tension dépend du type spécifique de la cellule solaire, des matériaux constituant la couche active, ainsi que de la nature des contacts entre la couche active et l'électrode. De plus, elle est influencée par l'éclairement auquel la cellule est exposée [7].

Pour les cellules de Grätzel, la tension à circuit ouvert  $V_{CO}$  représente la disparité entre le potentiel d'oxydoréduction du médiateur oxydé et le niveau de Fermi du semi-conducteur [40].

- **Le facteur de forme  $FF$**  : C'est un paramètre qui reflète la qualité de la courbe caractéristique courant-tension. Sa définition est donnée par la relation suivante :

$$FF = P_{max}/(I_{cc} \times V_{co}) = I_{max} \times V_{max}/(I_{cc} \times V_{co}) \quad (1.7)$$

$I_{max}$  et  $V_{max}$  représente le couple intensité-tension pour lequel la puissance délivrée par la cellule est maximale. Ce facteur, théoriquement compris entre 0,25 et 1, varie en fonction des technologies. Il offre également des indications sur la qualité des interfaces matériau-électrode. Une valeur inférieure à 25% suggère généralement la présence d'un contact non-ohmique ou d'une couche oxydée et/ou isolante à l'interface matériau-électrode [30] [41].

- **Puissance maximale  $P_{max}$**  : Il est important de noter que le point de fonctionnement est déterminé par la résistance de charge plutôt que par la cellule elle-même. Un ajustement astucieux de la résistance de charge permettra d'atteindre la puissance maximale [4] :

$$P_{max} = I_m V_m \quad (1.8)$$

- **Rendement de conversion en puissance  $\eta$**  : Il est caractérisé par le rapport entre l'énergie maximale fournie par la cellule ( $P_{max}$ ) et l'énergie lumineuse incidente ( $P_{in}$ ) :

$$\eta = P_{max}/P_{in} = FF \times I_{cc} \times V_{co}/P_{in} \quad (1.9)$$

$P_{in}$  représentant la puissance surfacique associée au rayonnement (1000 W/m<sup>2</sup> pour AM=1.5) [41].

Ce rendement peut être amélioré en augmentant les paramètres tels que le facteur de forme,  $I_{cc}$ ,  $V_{co}$ . Il revêt une importance cruciale, car la simple connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule [4].

### 3.3 Avantages et inconvénients des cellules solaires a colorant :

Depuis leur découverte, les cellules Grätzel ont fait l'objet de nombreuses améliorations résultant des travaux de divers laboratoires de recherche. Cependant, elles affichent toujours une efficacité de conversion inférieure à celle des cellules classiques. Les avantages et les inconvénients des cellules de Grätzel peuvent être résumés comme suit :

#### ❖ **Avantages :**

- Adaptées à un éventail étendu de conditions d'éclairement, elles conviennent donc à divers environnements, y compris les zones ombragées et sous lumière diffuse.
- Utilisent des matériaux nanotechnologiques respectueux de l'environnement.

- Fabriquées de manière écoénergétique à partir de matériaux économiques.

❖ **Inconvénients :**

- Efficacité maximale restreinte.
- L'électrolyte de la cellule à colorant présente une instabilité, les solvants le constituant sont volatils, exposant ainsi la cellule au risque d'évaporation et même d'explosion. De plus, les sels d'iodure accroissent le risque de corrosion de la cellule, entraînant potentiellement des fuites.

### 3.4 Applications possibles des cellules solaires a colorant :

- **Dispositifs Portables :** Les cellules solaires à colorant peuvent être utilisées dans des dispositifs électroniques portables tels que des montres, des chargeurs de téléphone solaires et d'autres gadgets portables en raison de leur légèreté et de leur flexibilité.
- **Applications Architecturales :** En raison de leur capacité à être intégrées dans des matériaux transparents ou colorés, ces cellules peuvent être utilisées dans des applications architecturales, telles que des fenêtres, des façades de bâtiments et des structures transparentes, pour générer de l'électricité tout en laissant passer la lumière.

Il est important de noter que bien que ces applications soient prometteuses, les cellules solaires à colorant ne sont pas encore aussi répandues que d'autres technologies solaires, et la recherche continue à améliorer leur rendement et à résoudre leurs défis techniques pour étendre leurs applications.

### **Conclusion :**

En conclusion, le chapitre consacré au photovoltaïque a offert une vue d'ensemble de l'histoire et de l'évolution de cette technologie cruciale pour la production d'énergie renouvelable. Nous avons exploré divers types de cellules photovoltaïques, mettant en lumière leurs différences et leurs caractéristiques distinctives.

Une attention particulière a été portée aux cellules solaires à colorant, une technologie innovante qui tire profit du principe de la photosynthèse pour convertir la lumière solaire en électricité. Leur fonctionnement, centré sur la séparation du processus d'absorption de la lumière et du processus de collecte de charges, ouvre la voie à des applications variées.

Il est crucial de souligner que malgré les progrès et les avantages, des défis subsistent, et la recherche continue dans le domaine du photovoltaïque, en particulier pour les cellules à colorant, est essentielle pour maximiser leur efficacité et élargir leurs applications. La quête de solutions durables et performantes dans le domaine du photovoltaïque reste un élément clé de l'avenir énergétique.

### **Références :**

- [1] M. Hanène, *Modélisation et simulation du panneau solaire sous différents rayonnement*, Thèse de doctorat.Faculté des Sciences et Technologies, 2021.

- [2] D. M. Chapin, «A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power,» *J. Appl. Phys*, vol. 25, p. 676, 1954.
- [3] O. Geraud, *Modélisation énergétique et optimisation économique d'un système de production éolien et photovoltaïque couplé au réseau et associé à un accumulateur*, Thèse de Doctorat : l'école Normale Supérieure de Cachan, 9 décembre 2002.
- [4] M. Belarbi, *Contribution à la modélisation des paramètres électriques des cellules solaires sensibilisées par colorant*, Thèse de doctorat : Université Abou Bekr Belkaid, Tlemcen, 2016.
- [5] R. BADACHE et S. MOUDJEB, *étude de cellules solaires à colorants flexibles à base de nanotubes*, El Harrach, Alger: Mémoire de projet de fin d'études pour l'obtention du diplôme d'ingénieur d'Etat en Génie de l'Environnement, 2021.
- [6] N. K. e. L. Han, «Measuring methods of cell performance of dye-sensitized solar cells,» *Review of Scientific Instruments*, n° 1175, p. 2828–2831, 2004.
- [7] Y. Djeddour et F. Bakouche, *Réalisation et caractérisation d'une cellule Grätzel*, MEMOIRE DE MASTER, U.BLIDA1, 2018.
- [8] A. Mekkaoui, *Contrôle intelligent des puissances dans un réseau électrique constitué de sources d'énergies renouvelables*, Thèse de Doctorat En Electrotechnique, UNIV.SBA, 2021.
- [9] «planete energies,» La cellule photovoltaïque : comment ça marche ?, [En ligne]. Available: [www.planete-energies.com](http://www.planete-energies.com). [Accès le 25 JANVIER 2024].
- [10] Solaire photovoltaïque, [En ligne]. Available: [www.connaissancedesenergies.org](http://www.connaissancedesenergies.org). [Accès le 27 JANVIER 2024].
- [11] «FUTURA,» anatomie d'une cellule photovoltaïque, [En ligne]. Available: <https://www.futura-sciences.com/>.
- [12] G. Renard, «La découverte et le perfectionnement des transistors,» *Revue d'histoire des sciences et de leurs applications*, pp. 323-358, 1963.
- [13] J. Zhao, A. Wang, M. A. Green et F. Ferrazza, «19.8% efficient “honeycomb” textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon solar cells,» *Applied physics letters*, vol. 73, n° 114, pp. 1991-1993, 1998.
- [14] F. AZZEMOU , *Optimisation des performances des cellules solaires à base d'hétérojonctions de silicium*, université de MOSTAGANEM: THÈSE En vue de l'obtention du Diplôme de Doctorat en Sciences, 2022.
- [15] N. Aste, C. Del Pero et F. Leonforte, «PV technologies performance comparison in temperate climates,» *Solar Energy*, vol. 109, pp. 1-10, 2014.

- [16] M. Taguchi, A. Yano, S. Tohoda, K. Matsuyama, Y. Nakamura, T. Nishiwaki, K. Fujita et E. Maruyama, «24.7% record efficiency HIT solar cell on thin silicon wafer,» *IEEE Journal of photovoltaics*, vol. 4, n° 11, pp. 96-99, 2013.
- [17] «SWISS GREEN (ENERGY SHOP),» [En ligne]. Available: <https://images.app.goo.gl/PXc2c8yB9aMabUya9>.
- [18] «Energie plus,» [En ligne]. Available: <https://images.app.goo.gl/fjUKNREcJ3uZAS9M9>.
- [19] «ResearchGate,» [En ligne]. Available: <https://images.app.goo.gl/GPxCiRyzEBVUhDR58>.
- [20] J. Xue, S. Uchida, B. P. Rand et S. R. Forrest, «4.2% efficient organic photovoltaic cells with low series resistances,» *Applied Physics Letters*, vol. 84, n° 116, pp. 3013-3015, 2004.
- [21] *cellules solaires à colorants, L'ENERGIE DE L'AVENIR*, École normale supérieure de Lyon: Thèse de Tangui Le Bahers, Prix Schueller 2013, 2013.
- [22] H. Tsubomura, M. Matsumura, Y. Nomura et T. Amamiya, «Dye sensitised zinc oxide: aqueous electrolyte: platinum photocell,» *Nature*, vol. 261, n° 15559, pp. 402-403, 1976.
- [23] A. Hagfeldt, G. Boschloo, L. Sun, L. Kloo et H. Pettersson, «Dye-sensitized solar cells,» *Chemical reviews*, vol. 110, n° 111, pp. 6595-6663, 2010.
- [24] B. O'regan et M. Grätzel, «A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO<sub>2</sub> films,» *nature*, vol. 353, n° 16346, pp. 737-740, 1991.
- [25] K. Kakiage, Y. Aoyama, T. Yano, K. Oya, J.-i. Fujisawa et M. Hanaya, «Highly-efficient dye-sensitized solar cells with collaborative sensitization by silyl-anchor and carboxy-anchor dyes,» *Chemical communications*, vol. 51, n° 188, pp. 15894-15897, 2015.
- [26] T. Higashino et H. Imahori, «Porphyrins as excellent dyes for dye-sensitized solar cells: recent developments and insights,» *Dalton transactions*, vol. 44, n° 12, pp. 448-463, 2015.
- [27] M. Grätzel, «Photobiology C: Photochem,» *Rev*, vol. 4, p. 145, 2003.
- [28] T. Baron, *Conception et synthèse de colorants sélectifs du proche infrarouge pour des applications en cellules solaires hybrides transparentes et incolores ainsi que pour la production d'hydrogène*, Nantes: These de Doctorat, 2021.
- [29] F. Grifoni, M. Bonomo, W. Naim, N. Barbero, T. Alnasser, I. Dzeba, M. Giordano, A. Tsaturyan, M. Urbani et T. Torres, «Toward Sustainable, Colorless, and Transparent Photovoltaics: State of the Art and Perspectives for the Development of Selective Near-Infrared Dye-Sensitized Solar Cells,» *Advanced Energy Materials*, vol. 11, n° 143, p. 2101598, 2021.
- [30] N. Hourri, «Proteolytic processing of the cell adhesion molecule coxsackievirus and adenovirus receptor (CAR),» 2014.

- [31] S. Ngamsinlapasathian, T. Sreethawong et S. Yoshikawa, «Enhanced efficiency of dye-sensitized solar cell using double-layered conducting glass,» *Thin Solid Films*, vol. 516, n° 121, pp. 7802-7806, 2008.
- [32] X. Tang, J. Qian, J. Huang, H. Wang et X. Zhu, «Application of tetrahydrofuran dispersant in microemulsion for fabricating titania mesoporous thin film,» *Journal of colloid and interface science*, vol. 314, n° 12, pp. 584-588, 2007.
- [33] M. d. Borniol, *Photosensibilisation d'oxydes semi-conducteurs par des dérivés organostanniques du pérylène-3, 4-dicarboximide Application à la conversion photovoltaïque*, Bordeaux 1: These de Doctorat, 2006.
- [34] K. C. Robson, . P. G. Bomben et C. P. Berlinguette, «Cycloruthenated sensitizers: improving the dye-sensitized solar cell with classical inorganic chemistry principles,» *Dalton Transactions*, vol. 41, n° 126, pp. 7814-7829, 2012.
- [35] . S. Ito, . T. N. Murakami, P. Comte, P. Liska, C. Grätzel, M. K. Nazeeruddin et M. Grätzel, «Fabrication of thin film dye sensitized solar cells with solar to electric power conversion efficiency over 10%,» *Thin solid films*, vol. 516, n° 114, pp. 4613-4619, 2008.
- [36] Y. Jiao, F. Zhang, S. Meng et . L. Kosyachenko, «Dye sensitized solar cells principles and new design,» *Solar Cells-Dye-Sensitized Devices*, vol. 1, n° 11, 2011.
- [37] . C. GIRAULT, E. JAMES et A. MONFORT, «Les cellules Grätzel: L'avenir de la filière photovoltaïque?,» *ENSTA ParisTech*, 2011.
- [38] A. Hagfeldt et . M. Graetzel, «Light-induced redox reactions in nanocrystalline systems,» *Chemical reviews*, vol. 95, n° 11, pp. 49-68, 1995.
- [39] A. Benyoucef, *Développement de surfaces à base de dioxyde de titane par PVD pour une application aux cellules solaires*, Besançon: Thèse de doctorat, 2008.
- [40] «Types of solar panels,» 2020. [En ligne]. Available: <https://www.renewableenergyhub.co.uk>. [Accès le Fevrier 2024].
- [41] V. Maffei, *Caractérisation et intégration de nouveaux systèmes donneur-accepteur dans des cellules photovoltaïques*, Université Paris-Saclay: Thèse de doctorat, 2018.

---

# **CHAPITRE 2 :**

**Modélisation et simulation numérique d'une  
cellule solaire à colorant**

---

**Introduction :**

La modélisation est un instrument efficace pour imiter mathématiquement le comportement des objets et des systèmes. Cela inclut le suivi des variations des variables électriques externes et des propriétés physiques internes sous différentes conditions. La modélisation repose sur les lois de la physique qui déterminent le comportement des semi-conducteurs. Cette modélisation a permis de développer des simulations numériques pour optimiser les cellules photovoltaïques. Indépendamment de la structure d'une cellule solaire, l'optimisation de ses paramètres est essentielle pour obtenir une performance optimale. En général, il s'agit de régler l'épaisseur de la cellule, les niveaux et profils de dopage, la disposition des contacts et le confinement optique. Les valeurs des paramètres optimaux dépendent naturellement de la structure de la cellule solaire, de la qualité du matériau du substrat (durée de vie, mobilité), de la qualité des contacts ohmiques et de la vitesse de recombinaison en surface (faces avant et arrière). Optimiser la cellule solaire implique donc d'examiner comment ces facteurs affectent l'efficacité pour aboutir à une configuration qui maximise le rendement. La simulation numérique est fréquemment utilisée pour optimiser les cellules solaires, car elle offre les avantages suivants :

- Elle permet d'économiser du temps en évitant de devoir créer plusieurs prototypes avec des paramètres variés,
- Elle permet de réaliser des économies lors du développement d'un produit, car elle est indépendante de la technologie utilisée et permet de varier largement les paramètres,
- C'est un outil de recherche précieux, car elle permet d'examiner l'impact de chaque zone individuellement, même lorsque les paramètres tels que la mobilité, la durée de vie et le dopage sont interdépendants dans une structure spécifique,

La conception assistée par ordinateur joue un rôle clé dans le développement et l'évaluation des cellules solaires photovoltaïques. Les tests de laboratoire sont efficacement comparés à des modèles détaillés qui prennent en compte tous les processus pertinents et fonctionnent selon un comportement idéal limité thermodynamiquement. Au fil du temps, divers logiciels de différents niveaux de complexité ont été créés et publiés pour couvrir divers aspects de la recherche sur l'énergie solaire. Par exemple, SMARTS [1] est couramment utilisé pour calculer le spectre solaire en fonction des conditions atmosphériques ; l'absorption de la lumière dans une cellule solaire ou au niveau du module peut être simulée à l'aide d'OPTOS [2] ou OPAL2 [3] ; et pour résoudre les équations de transport d'une cellule solaire, des outils tels que PC1D [4], SCAPS [5] ou Quokka [6] peuvent être utilisés.

Historiquement, de nombreux programmes gratuits et commerciaux qui n'ont pas été spécifiquement conçus pour la recherche sur l'énergie solaire ont été utilisés. Cela inclut AFORS-HET [7] et Nextnano [8], qui se concentrent sur les propriétés des dispositifs et des semi-conducteurs, ainsi que ATLAS [9] et SENTAURUS [10], qui traitent également les propriétés optiques des cellules solaires. Une liste exhaustive de logiciels destinés à la recherche sur l'énergie solaire a été émise par PV Lighthouse [11]. Les programmes comme ATLAS et SENTAURUS offrent une interface

polyvalente, conviviale et conçue pour résoudre des problèmes multiphysiques, tels que le transport électrique couplé au transport thermique, même si cela peut entraîner des compromis de performance. En revanche, les programmes spécialisés comme AFORS-HET ou PC1D sont extrêmement rapides et efficaces, mais ils sont limités aux problèmes qu'ils peuvent traiter, tels que les hétérostructures 1D et les cellules solaires. À l'exception de quelques programmes comme PVlib [12], la plupart de ces solveurs sont des applications autonomes de haut niveau. Bien que les utilisateurs puissent entrer leurs propres données et, dans certains cas, accéder au code source des programmes pour personnaliser certains aspects, ces programmes ne sont pas conçus dans cette optique. Dans ce chapitre, nous examinerons les orientations de programmation choisies pour répondre aux exigences de simulation numérique des modèles physiques appliqués aux cellules solaires.

### 1. Modèles physiques utilisés dans la simulation numérique des cellules solaires :

La simulation a joué un rôle clé dans ce travail, permettant d'identifier les paramètres essentiels pour le fonctionnement des cellules solaires, de minimiser les pertes et d'optimiser les aspects physiques et géométriques de la cellule pour atteindre une efficacité maximale. La principale difficulté réside dans le nombre important de paramètres qui influencent le rendement de ce type de structure. Les cellules solaires sont définies par les paramètres suivants :

- Les dimensions géométriques des contacts et des régions diffusées, comme la largeur de l'émetteur et du BSF (Back Surface Field i.e champ de surface arrière), ainsi que l'espacement entre eux, et l'épaisseur du substrat,
- Les niveaux de dopage du substrat, de l'émetteur, du BSF et du FSF (Front Surface Field i.e champ de surface arrière) ou émetteur flottant,
- La profondeur du dopage dans les régions diffusées, telles que l'émetteur, le BSF, le FSF ou l'émetteur flottant,
- Les paramètres liés aux modèles de recombinaison, comme les taux de recombinaison aux faces avant et arrière, ainsi que la durée de vie des porteurs minoritaires,
- Les coefficients de réflexion pour les faces avant et arrière.

En conséquence, pour décrire une cellule solaire, environ 15 paramètres sont requis.

L'exactitude des simulations numériques repose en grande partie sur le choix des modèles physiques utilisés pour représenter le fonctionnement de la cellule solaire. Pour une cellule solaire de structure basique, les modèles suivants sont utilisés :

- La recombinaison de Shockley-Read-Hall, la recombinaison Auger et la recombinaison en surface,
- La mobilité des porteurs dépendante du dopage (modèle de Masetti) et la saturation de la vitesse des porteurs dans un champ électrique (modèle de Canali),
- La variation de la largeur de bande interdite en fonction du dopage (modèle de Del Alamo),
- Les formules de Fresnel pour calculer le passage de la lumière à travers les différentes interfaces,
- Pas d'ionisation par impact (chaque photon peut générer une paire électron/trou, si  $h \cdot v > E_g$ ,

➤ Pas d'effet quantique.

Nous allons expliquer en détail les différents modèles physiques utilisés pour simuler le fonctionnement des dispositifs à base de semi-conducteurs :

**1.1. La simulation électrique :** La simulation électrique repose sur la résolution numérique des trois équations principales de transport de charges dans les semi-conducteurs, à savoir l'équation de Poisson et les équations de continuité pour les électrons et les trous. La concentration des porteurs est déterminée par la statistique de Boltzmann. Après avoir maillé la structure étudiée, le simulateur calcule numériquement la solution de ces équations à chaque point du maillage. L'équation de Poisson se formule ainsi :

$$\nabla \varepsilon \cdot \nabla \psi = -q \cdot (p - n + N_D - N_A) \quad (1)$$

Avec  $\varepsilon$  est la permittivité électrique,  $\psi$  est le potentiel électrostatique,  $q$  est la charge électronique élémentaire,  $n$  et  $p$  la densité des électrons et des trous et  $N_D$  et  $N_A$  sont les nombres d'impuretés ionisées. Les équations de continuité s'expriment par :

$$\begin{aligned} \text{Pour les électrons : } \quad \nabla \vec{J}_n &= q \cdot R_n + q \cdot \frac{\partial n}{\partial t} - q \cdot G_n \\ \text{Pour les trous: } \quad \nabla \vec{J}_p &= q \cdot R_p + q \cdot \frac{\partial p}{\partial t} - q \cdot G_p \end{aligned} \quad (2)$$

Où  $R$  représente le taux de recombinaison électron-trou ( $G$ , le taux de génération) et  $j_p$  et  $j_n$  sont respectivement les densités de courant d'électrons et de trous.

Les densités des porteurs sont calculées par le modèle de Dérivé-Diffusion (modèle isothermique de transport). Ce modèle est basé sur l'expression des densités de courants suivantes :

$$\begin{aligned} j_p &= -p \cdot q \cdot \mu_p \cdot \nabla \Phi_p \\ j_n &= -n \cdot q \cdot \mu_n \cdot \nabla \Phi_n \end{aligned} \quad (3)$$

Avec  $\mu_n$  et  $\mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous et  $\Phi_n$  et  $\Phi_p$  sont les quasi-niveaux de Fermi.

**1.2. Les modèles optiques :** On va simuler les effets optiques dans la structure, notamment la réflexion, l'absorption de la lumière, et le passage de la lumière à travers les interfaces. On prendra également en compte la génération de porteurs résultant de l'éclairement. Pour ce faire, on utilisera un tableau de valeurs d'intensité lumineuse en fonction de la longueur d'onde, qui représentera le spectre solaire AM1.5G. On commencera par calculer les coefficients de réflexion et de transmission de la lumière aux interfaces en employant des matrices de transfert. Ces matrices font appel au coefficient  $Z_j$ , qui est basé sur l'indice de réfraction  $n_j$  de la couche  $j$  et l'angle d'incidence de la lumière  $\theta_j$ . Les formules à utiliser sont les suivantes :

$$\begin{aligned} Z_j &= n_j \cdot \cos \theta_j \quad \text{pour une lumière longitudinale} \\ Z_j &= \frac{n_j}{\cos \theta_j} \quad \text{pour une lumière transversale} \end{aligned} \quad (4)$$

Avec ces coefficients, on construira la matrice de transfert ci-dessous ::

$$T_{j,j+1} = \frac{1}{2 \cdot Z_j} \cdot \begin{bmatrix} Z_j + Z_{j+1} & Z_j - Z_{j+1} \\ Z_j - Z_{j+1} & Z_j + Z_{j+1} \end{bmatrix} \quad (5)$$

La propagation de la lumière dans la couche  $j$  est décrite par la matrice :

$$T_j(d_j) = \begin{pmatrix} e^{2 \cdot \pi \cdot i \cdot n_j \cdot \cos \frac{\theta_j \cdot d_j}{\lambda}} & 0 \\ 0 & e^{-2 \cdot \pi \cdot i \cdot n_j \cdot \cos \frac{\theta_j \cdot d_j}{\lambda}} \end{pmatrix} \quad (6)$$

Ensuite, en utilisant ces matrices, on déterminera les intensités de lumière transmises et réfléchies à travers les différentes couches. En se basant sur ces intensités, le taux de génération optique dans la structure sera calculé selon la formule traditionnelle :

$$G_0^{opt} = \alpha \cdot \eta \cdot \frac{I(d)}{\hbar \cdot \omega} \quad (7)$$

Où  $\alpha$  est le coefficient d'absorption,  $\eta$  est le rendement quantique,  $I(d)$  est l'intensité à la profondeur  $d$  et  $\hbar \cdot \omega$  est l'énergie photonique.

**1.3. Recombinaison Shockley-Read-Hall :** Aujourd'hui, la théorie de Shockley-Read-Hall est largement acceptée pour expliquer les processus de recombinaison des porteurs excédentaires via les niveaux énergétiques présents dans la bande interdite du semi-conducteur. Selon cette théorie, le taux de recombinaison, qui représente le nombre de porteurs recombinés par centimètre cube et par seconde, est décrit par l'équation suivante [13] :

$$U = \frac{\sigma_p \cdot \sigma_n \cdot v_{th} \cdot (p \cdot n - n_i)^2 \cdot N_t}{\sigma_n \cdot \left[ n + n_i \cdot e^{\frac{E_t - E_i}{k \cdot T}} \right] + \sigma_p \cdot \left[ p + n_i \cdot e^{\frac{E_t - E_i}{k \cdot T}} \right]} \quad (8)$$

Où  $\sigma_n$  et  $\sigma_p$  sont les sections de capture efficace respectivement pour les électrons et les trous (probabilités de capture d'électron ou de trou par les niveaux énergétiques intrabandes),  $E_t$  et  $N_t$  sont respectivement la position énergétique et la concentration des états de piège ;  $n_i$  est la concentration intrinsèque ;  $E_i$  est le niveau de Fermi dans le semi-conducteur intrinsèque et  $v_{th}$  est la vitesse

thermique des porteurs, égale à :

$$v_{th} = \sqrt{\frac{3 \cdot k \cdot T}{m^*}} \quad (9)$$

Où  $m^*$  est la masse effective,  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T$  est la température. A l'équilibre thermodynamique, le taux de recombinaison est égal à zéro ( $n \cdot p = n_i^2$ ).

L'expression (8) s'implémente sous la forme suivante :

$$R_{net}^{SRH} = \frac{n \cdot p - n_{i,eff}^2}{\tau_p \cdot (n + n_1) + \tau_n \cdot (p + p_1)} \quad (10)$$

Où  $n_1$  et  $p_1$  sont donnés par la statistique de Fermi pour le niveau d'énergie du piège considéré :

$$n_1 = n_i \cdot e^{\frac{E_t}{k \cdot T}} \quad \text{et} \quad p_1 = n_i \cdot e^{\frac{-E_t}{k \cdot T}} \quad (11)$$

$\tau_p$  et  $\tau_n$  sont respectivement la durée de vie pour les trous et les électrons.

La dépendance de la durée de vie avec le dopage est donnée par la relation de Schafetter [14, 15] :

$$\tau_{dop}(N_i) = \tau_{min} + \frac{\tau_{max} - \tau_{min}}{1 + \left( \frac{N_i}{N_{ref}} \right)^{\gamma}} \quad (12)$$

Où  $\tau_{max}$  et  $\tau_{min}$  sont les valeurs maximale et minimale de la durée de vie,  $N_{ref}$  est le niveau de référence du dopage pour lequel  $\tau(N_{ref}) = \frac{\tau_{max} + \tau_{min}}{2}$  et  $\gamma$  est l'exposant.

Le tableau 2.1 représente les paramètres par défaut :

**Tableau 2.1** : Paramètres par défaut du modèle de recombinaison Shockley-Read-Hall

	$\tau_{max}$ ( $\mu s$ )	$\tau_{min}$ ( $\mu s$ )	$N_{ref}$ ( $cm^{-3}$ )	$E_t$ (eV)	$n_i$ ( $cm^{-3}$ )	$\gamma$
<b>Electrons</b>	10	0	$10^{16}$	0	$10^{10}$	1
<b>Trous</b>	3	0	$10^{16}$	0	$10^{10}$	1

**1.4. Recombinaison Auger** : La recombinaison Auger se distingue par le fait que l'énergie de recombinaison d'une paire électron-trou est transférée à un autre électron. Le taux de recombinaison Auger est décrit par les équations suivantes : [16] :  $R^A = (C_n \cdot n + C_p \cdot p) \cdot (n \cdot p - n_i^2)$  (13)

Où  $C_p$  et  $C_n$  sont les coefficients Auger pour les électrons et les trous :

$$\begin{aligned} C_n &= \left( A_{A,n} + B_{A,n} \cdot \frac{T}{T_0} + C_{A,n} \cdot \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \cdot \left( 1 + H_{A,n} \cdot e^{\frac{-n}{N_{0,n}}} \right) \\ C_p &= \left( A_{A,p} + B_{A,p} \cdot \frac{T}{T_0} + C_{A,p} \cdot \left( \frac{T}{T_0} \right)^2 \right) \cdot \left( 1 + H_{A,p} \cdot e^{\frac{-p}{N_{0,p}}} \right) \end{aligned} \quad (14)$$

Les coefficients  $A_{A,n}$ ,  $B_{A,n}$ ,  $C_{A,n}$ ,  $H_{A,n}$ ,  $A_{A,p}$ ,  $B_{A,p}$ ,  $C_{A,p}$ ,  $H_{A,p}$  décrivent empiriquement la dépendance des coefficients Auger en fonction de la température et du niveau de dopage [17, 18]. Les valeurs par défaut de ces coefficients sont données dans le tableau 2.2 :

**Tableau 2.2** : Paramètres par défaut du modèle de recombinaison Auger

	$A_A$ ( $cm^6/s$ )	$B_A$ ( $cm^6/s$ )	$C_A$ ( $cm^6/s$ )	$H_A$ (l)	$T_0$ (K)	$T$ (K)	$N_0$ ( $cm^{-3}$ )
<b>Electrons</b>	$6,7 \cdot 10^{-32}$	$2,45 \cdot 10^{-31}$	$-2,2 \cdot 10^{-32}$	3,46667	300	300	$10^{18}$
<b>Trous</b>	$7,2 \cdot 10^{-32}$	$4,50 \cdot 10^{-33}$	$2,63 \cdot 10^{-32}$	8,25688	300	300	$10^{18}$

La recombinaison Auger est significative dans les semi-conducteurs fortement dopés ou soumis à des niveaux d'injection élevés. Elle constitue la principale source de pertes par recombinaison dans les cellules solaires concentrées lorsque l'intensité lumineuse dépasse  $200 \text{ W/cm}^2$  [19].

**1.5. Recombinaison en surface** : Le taux de recombinaison Shockley-Read-Hall en surface est donné par l'expression suivante :

$$R_{surf}^{SRH} = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\frac{(n+n_1)}{s_p} + \frac{(p+p_1)}{s_n}} \quad (15)$$

Où  $S_p$  et  $S_n$  sont respectivement la vitesse de recombinaison en surface pour les électrons et les trous. Par défaut,  $S_p = S_n = 10^3 \text{ cm/s}$ .

**1.6. Mobilité (modèle de Masetti)** : La mobilité des porteurs diminue avec l'augmentation du niveau de dopage à cause des collisions entre les porteurs et les atomes de dopant ionisés. Ce phénomène est décrit par l'équation suivante (modèle de Masetti [20]) :

$$\mu_{dop} = \mu_{min1} \cdot e^{\frac{-P_c}{N_i}} + \frac{\mu_L - \mu_{min2}}{1 + \left(\frac{N_i}{C_r}\right)^\alpha} - \frac{\mu_1}{1 + \left(\frac{C_s}{N_i}\right)^\beta} \quad (16)$$

Où  $N_i$  est la concentration totale des impuretés ionisées  $N_i = N_A + N_D$  ;  $\mu_L$  est la mobilité qui tiens compte de l'interaction électrons-phonons ;  $\mu_{min1}$ ,  $\mu_{min2}$  et  $\mu_1$  sont les mobilités de référence ;  $P_c$ ,  $C_s$  et  $C_r$  sont les niveaux de référence du dopage ;  $\alpha$  et  $\beta$  sont des coefficients de l'exposant.

Le tableau 2.3 indique les paramètres utilisés pour le modèle de Masetti :

**Tableau 2.3** : Paramètres utilisés pour le modèle de Masetti.

	$\mu_L$ ( $cm^2/V \cdot s$ )	$\xi$ (l)	$\mu_{min1}$ ( $cm^2/V \cdot s$ )	$\mu_{min2}$ ( $cm^2/V \cdot s$ )	$\mu_1$ ( $cm^2/V \cdot s$ )	$P_c$ ( $cm^{-3}$ )	$C_s$ ( $cm^{-3}$ )	$C_r$ ( $cm^{-3}$ )	$\alpha$ (l)	$\beta$ (l)
<b>e</b>	1417	2,5	52,2	52,2	43,4	0	$3,34 \cdot 10^{20}$	$9,68 \cdot 10^{16}$	0,68	2
<b>h</b>	470,5	2,2	44,9	0	29	$9,23 \cdot 10^{16}$	$6,1 \cdot 10^{20}$	$2,23 \cdot 10^{17}$	0,719	2

**1.7. Mobilité (modèle de Canali)** : Dans des conditions de champ électrique élevé (comme dans la zone de charge d'espace de la jonction pn), la vitesse de dérive des porteurs n'augmente pas proportionnellement au champ électrique. Ce phénomène, appelé saturation de la vitesse des porteurs, peut être décrit comme une dégradation de la mobilité. La dégradation de la mobilité dans un champ électrique intense est modélisée par le modèle de Canali [21] :

$$\mu(F) = \frac{\mu_{low}}{\left[1 + \left(\frac{\mu_{low} \cdot F}{v_{sat}}\right)^\beta\right]^{\frac{1}{\beta}}} \quad \text{avec } \vec{F} = \vec{E} \cdot \left(\frac{\vec{j}}{|\vec{j}|}\right) \quad (17)$$

Où  $F$  est le champ d'entraînement,  $\mu_{low}$  et  $v_{sat}$  sont respectivement la mobilité dans un faible champ électrique et la vitesse de saturation ;  $\beta$  est le coefficient de l'exposant. Le tableau 2.4 indique les paramètres utilisés pour le modèle de Canali :

**Tableau 2.4** : Paramètres utilisés pour le modèle de Canali.

	$v_{sat}$ (cm/s)	$\beta$ (l)
<b>Electrons</b>	$1,07 \cdot 10^7$	1,109
<b>Trous</b>	$8,37 \cdot 10^6$	1,213

**1.8. La densité effective (band gap narrowing)** : Dans les semi-conducteurs fortement dopés, la largeur de la bande interdite se réduit en raison de l'apparition d'états supplémentaires au sein de la bande interdite. Dans DESSIS, cet effet est modélisé par le modèle de Del Alamo [22, 23, 24] :

$$\Delta E_g(N_D) = \begin{cases} E_{bgn} \cdot \ln\left(\frac{N_D}{N_{ref}}\right) & \text{si } N_D \geq N_{ref} \\ 0 & \text{si } N_D < N_{ref} \end{cases} \quad (18)$$

Où  $\Delta E_g$  est la diminution de la bande interdite,  $E_{bgn}$  est un paramètre du matériau qui caractérise la variation du gap et  $N_{ref}$  est le niveau de référence du dopage. Donc la diminution de la bande interdite a lieu si le dopage est supérieur à  $N_{ref}$ .

La concentration effective des porteurs intrinsèques est donnée par la formule suivante :

$$n_{ieff} = n_i \cdot e^{\frac{-E_{g0} + \Delta E_g(N_D)}{2 \cdot k \cdot T}} \quad (19)$$

Où  $E_{g0}$  est la largeur initiale de la bande interdite du semi-conducteur.

Les valeurs des paramètres par défaut sont données dans le tableau 5 :

**Tableau 2.5 :** Paramètres utilisés par défaut pour le modèle de Del Alamo.

$N_{ref} (cm^{-3})$	$E_{g0} (eV)$	$E_{bgn} (eV)$
$7 \cdot 10^{17}$	1,174	$1,87 \cdot 10^{-2}$

Nous allons à présent clarifier les raisons derrière les choix de langage et de méthode de programmation pour modéliser ces phénomènes physiques dans une cellule solaire. Nous expliquerons pourquoi Python a été sélectionné pour le codage, tandis que Fortran a été utilisé pour la compilation. Nous examinerons comment ces deux langages interagissent et comment ces choix soutiennent les objectifs de notre projet de Master : un outil durable, flexible et propice à la collaboration. Enfin, nous aborderons l'utilisation de la programmation orientée objet dans Fortran et Python, et ses objectifs.

## 2. Le choix du logiciel de simulation :

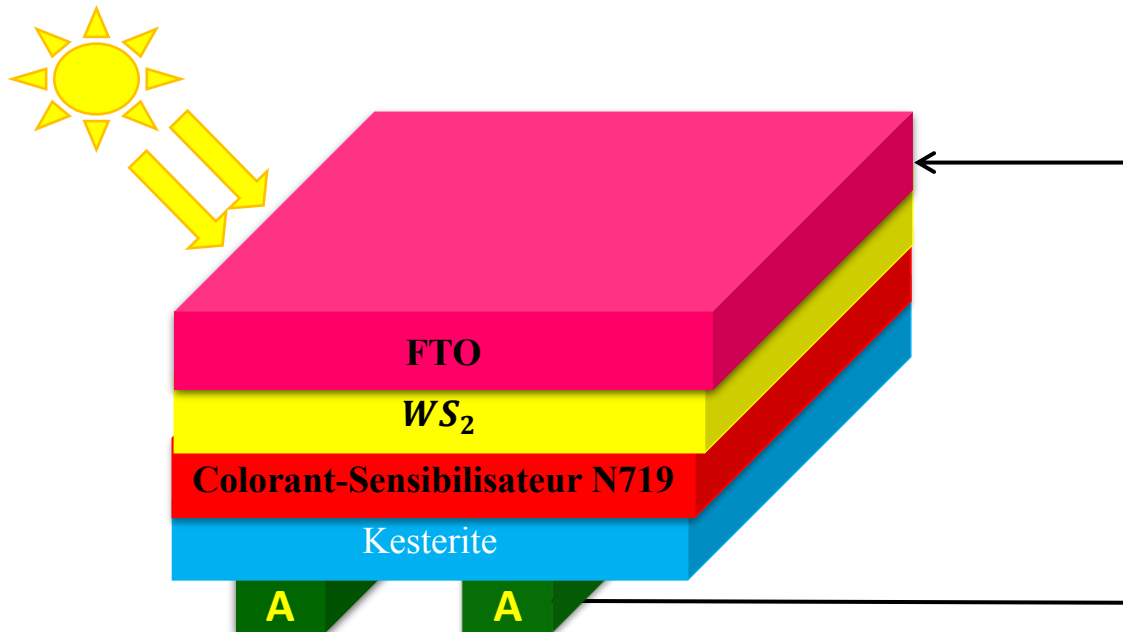
La simulation des cellules en couches minces a gagné en popularité ces dernières années, ce qui a conduit au développement de plusieurs logiciels de calcul et de simulation par la communauté scientifique dans ce domaine, tels qu'AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO, entre autres. Pour notre travail, nous utiliserons le logiciel SCAPS-1D pour simuler la partie électrique de la cellule solaire à colorants. Ensuite, nous exploiterons le langage Python, en particulier sa bibliothèque *solcore*, pour traiter la partie optique de la cellule solaire à colorants.

**SCAPS-1D**, ou « Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension », est un logiciel de simulation de cellules solaires unidimensionnelles développé à l'Université de Gand en Belgique par Marc Burgelman et ses collègues [25]. Initialement conçu pour les cellules de la deuxième génération, comme celles à base de CdTe et de CuInSe<sub>2</sub>, il est aujourd'hui largement utilisé pour analyser diverses cellules solaires de la nouvelle filière photovoltaïque (PV), y compris les cellules de la troisième génération et les cellules multijonctions.

Comparé à d'autres logiciels, SCAPS-1D offre une interface utilisateur intuitive et prend en charge une variété de modèles pour les défauts, la recombinaison et les réseaux. Le logiciel est fondé sur la physique générale des semi-conducteurs, comme les équations de Poisson, de diffusion dérivée et de continuité pour les électrons et les trous. Les équations de base sont généralement résolues en unidimensionnel dans des conditions d'état stable [26]. SCAPS-1D examine en profondeur la physique des modèles, notamment la distribution du champ électrique, les profils de recombinaison, les densités de courant individuelles et les mécanismes de transport des porteurs [26].

Nous illustrons la configuration de la cellule solaire à étudier dans ce chapitre dans la Figure 2.1.

la cellule adoptée est structuré ainsi verre/FTO/ $WS_2$ /N719/Kesterite. FTO (revêtement oxyde d'étain dopé au fluor), La couche ETL(Electron transport layer), qui dans ce cas est le disulfure de tungstène  $WS_2$ , l'absorbeur : la Colorant-Sensibilisateur N719, et la couche HTL(Hole transport layer) qui est Kesterite.



**Figure 2.1** : Structure du dispositif primaire de la cellule adoptée : FTO comme couche fenêtre,  $WS_2$  en couche ETL, Colorant-Sensibilisateur N719 comme absorbeur, Kesterite en couche HTL et Au comme contact arrière.

Le disulfure de tungstène a été sélectionné comme matériau ETL en raison de ses excellentes propriétés optoélectroniques : une bande interdite allant de 1,33 à 2,2 eV, une mobilité électronique élevée (environ  $260 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) et une grande transparence [27]. De plus, le colorant sensibilisateur N719 a été utilisé comme absorbeur avec une bande interdite de 2,37 eV [28]. L'iodure de cuivre(I), ou iodure cuivreux, est une couche inorganique utilisée comme HTL qui offre une grande mobilité des électrons (environ  $100 \text{ cm}^2/\text{V}_s$ ) [28].

### 2.1. Les paramètres d'entrée :

Les données d'entrée pour le dispositif de verre/FTO/ $WS_2$ /N719/CuI/Au ont été extraites de sources expérimentales et théoriques récentes. Les propriétés électriques de ces matériaux sont récapitulées dans le tableau 2.6. La vitesse de déplacement thermique des électrons et des trous a été maintenue constante à  $10^7 \text{ cm s}^{-1}$ . Notez que l'éclairement solaire utilisé dans le logiciel SCAPS-1D [26] est AM1,5G avec une intensité lumineuse de  $100 \text{ mW cm}^{-2}$  et une fréquence de  $10^6 \text{ Hz}$ .

**Tableau 2. 6** : Paramètres électriques et optiques de différentes couches utilisées dans SCAPS

Parameters	FTO	ELT : $WS_2$	N719	Kesterite			
				Graphene	MoS <sub>2</sub>	Cui	MPSi
<b>Bande interdite (eV)</b>	3.5	1.87	2.37	1.8	1.3	2.88	1.12

<b>Affinité (eV)</b>	4	4.3	3.9	3.92	4	2.1	1.39
<b>Permittivité diélectrique relative <math>\epsilon_r</math></b>	9	11.9	30	10	4	3	3.9
<b>Densité d'état effective dans BC <math>N_c</math> (cm<sup>-3</sup>)</b>	$2.2 \times 10^{18}$	$1.0 \times 10^{18}$	$2.4 \times 10^{20}$	$10^{22}$	$0.75 \times 10^{18}$	$2.2 \times 10^{18}$	$2.7 \times 10^{19}$
<b>Densité d'état effective dans BV <math>N_v</math> (cm<sup>-3</sup>)</b>	$1.8 \times 10^{19}$	$2.4 \times 10^{19}$	$2.5 \times 10^{20}$	$10^{21}$	$0.18 \times 10^{18}$	$1.8 \times 10^{19}$	$1.1 \times 10^{19}$
<b>Mobilité des électrons (cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>)</b>	20	260	5	$10^9$	100	$2.0 \times 10^{-4}$	1400
<b>Mobilité des trous (cm<sup>2</sup> V<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>)</b>	10	51	5	10	150	$2.0 \times 10^{-4}$	450
<b>Densité de dopage de type N <math>N_D</math> (cm<sup>-3</sup>)</b>	$10^{19}$	$10^{19}$	0	$9 * 10^{22}$	$10^{22}$	0	$1.45 \times 10^{10}$
<b>Densité de dopage de type P <math>N_A</math> (cm<sup>-3</sup>)</b>	0	0	$10^{17}$	0	0	$2.0 \times 10^{19}$	$10^{18}$

**2.2. Les équations de base :** Le logiciel SCAPS-1D effectue une résolution numérique des équations différentielles qui régissent le comportement des semi-conducteurs en état stable. Il modélise la physique du dispositif en analysant des aspects tels que le profil de recombinaison, la distribution du champ électrique et les densités de courant. Les équations différentielles fondamentales pour les semi-conducteurs sont les équations de continuité pour les trous et les électrons, ainsi que l'équation de Poisson [29]. Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont exprimées respectivement dans les équations (20) et (21) :

$$\frac{\partial j_n}{\partial x} + G - U_n(n,p) = 0 \quad (20)$$

$$-\frac{\partial j_p}{\partial x} + G - U_p(n,p) = 0 \quad (21)$$

Où  $j_n$  est la densité de courant des électrons,  $j_p$  est la densité de courant des trous,  $U_{n,p}$  est le taux de recombinaison net, et  $G$  est le taux de génération.

L'équation de Poisson établit un lien entre le champ électrique ( $E$ ) et la densité de charge d'espace ( $\rho$ ). Cette relation entre les deux variables physiques est décrite dans l'équation (22).

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\rho}{\epsilon_s} = -\frac{q}{\epsilon_s} [p - n + N_D^+(x) - N_A^-(x) \pm N_{def}(x)] \quad (22)$$

Où  $\psi$  est le potentiel électrostatique,  $\epsilon_s$  est la permittivité statique relative de l'espace libre,  $q$  est la charge élémentaire,  $n$  est la densité des électrons,  $p$  est la densité des trous,  $N_D^+$  est la densité des donneurs ionisés,  $N_A^-$  est la densité des accepteurs ionisés, et  $Nt$  est la densité de défauts de l'accepteur ou du donneur.

Le transport des porteurs de charge se fait par diffusion et par dérivation<sup>10</sup> ; ce phénomène est exprimé par les équations (23) et (24) pour les électrons et les trous, respectivement :

$$j_n = D_n \frac{dn}{dx} + \mu_n n \frac{d\Phi}{dx} \quad (23)$$

$$j_p = D_p \frac{dp}{dx} + \mu_p p \frac{d\Phi}{dx} \quad (24)$$

Où  $D_n$  est le coefficient de diffusion des électrons,  $\mu_n$  est la mobilité des électrons,  $D_p$  est le coefficient de diffusion des trous et  $\mu_p$  est la mobilité des trous.

La bibliothèque Python Solcore permet de connecter les langages Fortran et Python pour traiter les paramètres électriques et optiques d'une cellule solaire. Son objectif est de proposer une simulation modulaire multi-échelles pour la recherche sur l'énergie solaire. Solcore s'est développé à partir de SOL, un solveur de cellules solaires à puits quantique basé sur Fortran créé par Nelson et Connelly [30]. Son objectif explicite est de faciliter son intégration dans d'autres programmes, d'ajouter des routines et algorithmes personnalisés, tout en étant pédagogique et informatif.

Solcore est un outil de formation et d'apprentissage autant qu'un outil de recherche avancé. Il se distingue par sa grande flexibilité, offrant une variété d'algorithmes pour la modélisation multi-échelles des semi-conducteurs et des cellules solaires. Cela permet aux utilisateurs, même sans accès à d'autres méthodes, mais ayant une certaine expérience avec Python, de s'attaquer rapidement à de nombreux problèmes variés.

La bibliothèque Solcore offre une variété de fonctionnalités qui peuvent être connectées à d'autres outils externes, plus avancés ou spécialisés dans la résolution de problèmes spécifiques, ou utilisant des approches non présentes dans Solcore. La version la plus récente de Solcore est publiée sous la licence GNU Lesser General Public License (GNU-LGPL) et est accessible sur GitHub [31]. Ses fonctionnalités sont regroupées en quatre catégories : science des matériaux, sources lumineuses, cellules solaires et calculs à grande échelle, chacune traitant de domaines et d'échelles pertinents pour la recherche en énergie solaire.

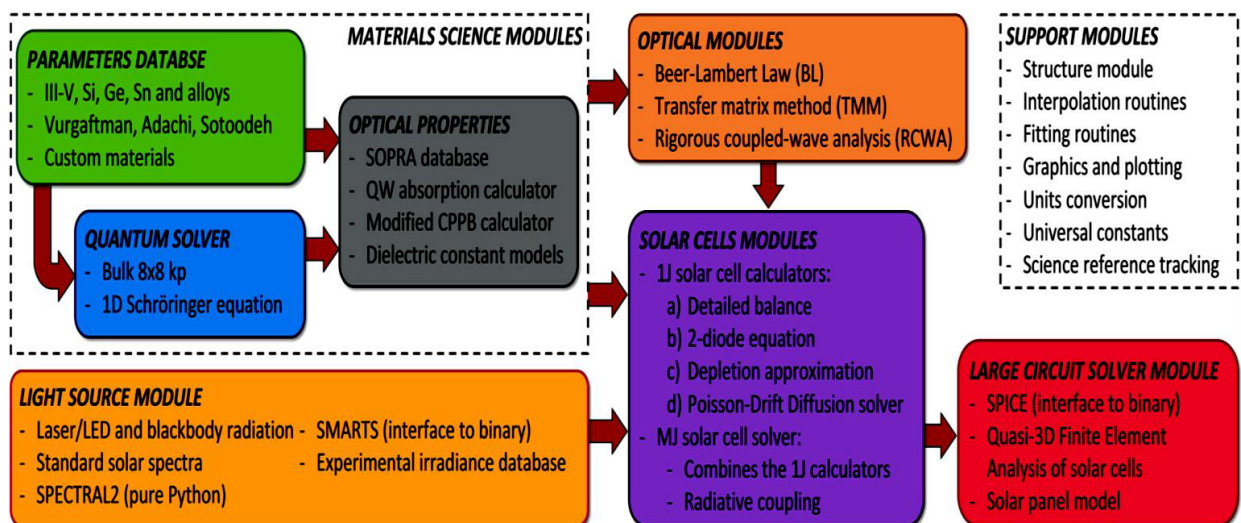
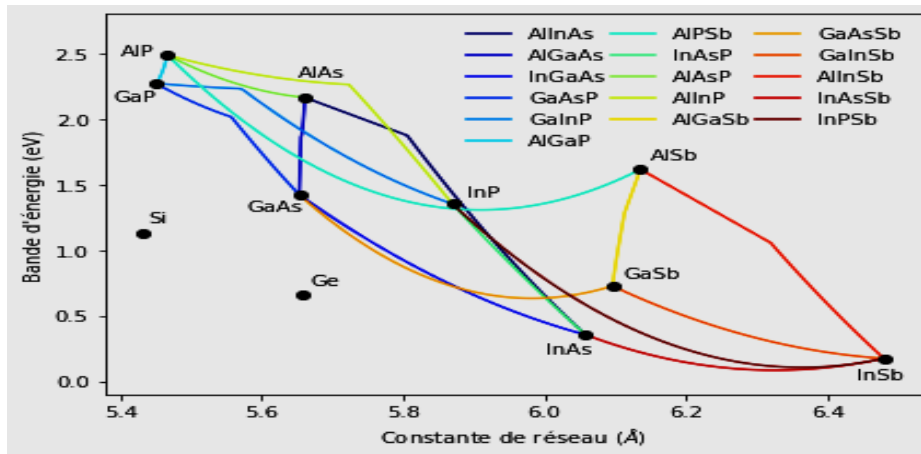


Figure 2.2 : Structure générale de Solcore

La figure 2.2 illustre les relations entre ces parties et résume leur contenu, fournissant une vue d'ensemble des fonctionnalités et de la physique de Solcore. Les modules de science des matériaux

de Solcore se concentrent sur l'obtention et le calcul des propriétés des matériaux ainsi que de celles des nanostructures quantiques, notamment les puits quantiques. Ces modules sont les éléments constitutifs nécessaires pour concevoir des structures et calculer les performances des dispositifs de cellules solaires complètes. Bien que Solcore soit axé sur les applications pour les cellules solaires, sa partie dédiée à la science des matériaux peut être utilisée dans d'autres domaines de recherche liés aux matériaux semi-conducteurs, permettant la gestion, la personnalisation et l'utilisation de propriétés matérielles dans divers calculs. Il est important de noter que les propriétés électroniques et optiques ne sont pas indépendantes mais interagissent à travers la structure de bande du matériau. Solcore utilise une approche non cohérente, avec des paramètres électroniques et optiques traités séparément à partir de différentes sources. Pour obtenir un ensemble cohérent de propriétés électroniques et optiques, il est nécessaire de recourir à des méthodes de structure complète de bande comme les approches du pseudo-potentiel ou de la liaison étroite.

La base de données des paramètres de Solcore contient les propriétés fondamentales de nombreux matériaux semi-conducteurs, comme le silicium, le germanium et divers alliages binaires et ternaires des groupes III-V. Parmi les paramètres inclus figurent la bande interdite d'énergie, les masses effectives des électrons et des trous, les constantes de réseau et les constantes élastiques. Les principales sources de données sont l'article de Vurgaftman [32], qui se concentre sur les paramètres de bande pour les semi-conducteurs III-V, ainsi que la série de manuels sur les paramètres des semi-conducteurs de Levinshstein et al. [33]. Le calculateur de mobilité des porteurs s'appuie sur le modèle de mobilité empirique à faible champ de Sotoodeh et al. [34], disponible uniquement pour certains matériaux disposant des entrées nécessaires pour le modèle. Il y a deux façons de récupérer les paramètres de la base de données. La première consiste à utiliser la fonction `get_parameter`, qui permet d'obtenir les données en fournissant les entrées requises. Par exemple `get_parameter("GaAsP", "band_gap", P=0.45, T=300)` restituera la bande interdite de GaAsP pour une concentration en phosphore de 45% à une température de 300 K, égale à 1,988 eV. Cette méthode utilise uniquement les données existantes. Une autre manière de récupérer les paramètres de la base de données consiste à créer un objet matériau. Cet objet contiendra toutes les propriétés déjà présentes dans la base de données pour le matériau en question, ainsi que les propriétés supplémentaires spécifiées en entrée. Ces nouvelles propriétés remplaceront les valeurs correspondantes des paramètres de la base de données, le cas échéant.



**Figure 2.3 :** Matériaux avec la plupart des paramètres inclus dans la base de données de Solcore. Tous les paramètres deviennent désormais des attributs facilement accessibles et sont utilisés partout dans le programme. Par exemple, **GaAs.band\_gap** représente la bande interdite de **GaAs**, tandis que **AlGaAs.lattice\_constant** correspond à la constante de réseau de l'alliage AlGaAs, à la composition et à la température définies lors de la création des objets. La figure 2.3 illustre la carte de bande interdite en fonction de la constante de réseau pour tous les matériaux semi-conducteurs et alliages (composés ternaires uniquement) actuellement disponibles dans Solcore. Néanmoins, tout autre matériau peut être utilisé dans toutes les fonctions de Solcore, à condition que les paramètres d'entrée requis soient fournis. Cela peut être réalisé en remplaçant toutes les propriétés d'un matériau existant lors de sa création, comme mentionné précédemment, ou en ajoutant le matériau en tant qu'élément externe dans les fichiers de configuration.

Le module mobilité permet de calculer les mobilités des porteurs en fonction de la composition du matériau, de la température ( $T > 100K$ ) et de la concentration en impuretés. Il s'agit d'une implémentation du modèle de mobilité par Sotoodeh et al. ([34]). La classe de matériaux décrite dans la figure 2.3 utilise ce module en interne pour obtenir la mobilité des matériaux pour lesquels il est implémenté. Pour le moment, les matériaux pris en charge sont :

- Binaires : AlAs, GaAs, InAs, InP, GaP
- Ternaires : InAlAs, AlGaAs, InGaAs, GaInP, (GaAsP), (InAsP)
- Quaternaires : InGaAsP

Les deux derniers alliages ternaires sont déterminés en effectuant une interpolation linéaire des paramètres des binaires correspondants. En conséquence, la transition entre bande interdite directe et indirecte, ainsi que d'autres dépendances, pourraient manquer de précision. Pour le matériau InGaAsP, les calculs se basent uniquement sur les données d'InGaAs et GaInP, et il est surtout adapté aux compositions de réseau compatibles avec InP.

Il existe deux façons principales d'utiliser un matériau qui n'est pas intégré à la base de données Solcore, qui peut également être connecté. Elles sont :

- Téléchargement et utilisation de la base de données de [refractiveindex.info](http://refractiveindex.info),
- Fourniture de données  $n$  et  $k$ , et d'autres paramètres, pour **create\_new\_material**.

Il existe une fonction qui ajoute un nouveau matériau au dossier **material\_data** de Solcore, afin qu'il puisse être appelé comme un matériau intégré. Il a besoin d'un nom pour le nouveau matériau et de fichiers source pour les données  $n$  et  $k$  et d'autres paramètres qui seront copiés dans le dossier **material\_data / Custom**. Le format correct pour les fichiers  $n$  et  $k$  sont des fichiers texte séparés par des tabulations ou des espaces, avec pour première colonne la longueur d'onde en mètres et pour deuxième colonne  $n$  ou  $k$ . Le fichier contenant d'autres paramètres doit également être fourni.

Solcore est écrit principalement en Python, mais le solveur Poisson-Drift-diffusion (PDD) est écrit en Fortran pour le rendre plus efficace. Les instructions suivantes devraient fonctionner dans la plupart des systèmes d'exploitation d'un ordinateur. Pour installer Solcore, on aura besoin de :

- Python > 3.4,
- Les modules Pip, Setuptools, Numpy,
- Un compilateur Fortran approprié (nécessaire uniquement pour le solveur PDD).

Pour installer un compilateur Fortran fonctionnant correctement sous Windows avec F2Py, nous avons opté pour Anaconda Python. C'est la seule méthode que nous avons trouvée pour faire fonctionner le solveur PDD sous Windows, à moins d'utiliser le shell Ubuntu disponible sur Windows 10. Le compilateur recommandé est **MinGW-W64**.

### **Conclusion :**

Dans ce texte, nous avons présenté les bases des modèles physiques nécessaires pour créer et simuler une cellule solaire, ainsi que les méthodes numériques pour modéliser ces cellules en utilisant le logiciel SCAPS 1D et le langage de programmation Python avec la bibliothèque Solcore. Dans le prochain chapitre, nous exploiterons cette simulation numérique pour montrer les résultats de la modélisation d'une cellule solaire à colorant et interpréter les résultats obtenus. L'étude se penchera sur la simulation des propriétés structurales, électroniques et optiques de certains matériaux semi-conducteurs, en fonction de la température et des paramètres intrinsèques, afin de comprendre leur impact sur l'efficacité de la cellule solaire.

### **Référence :**

- [1] Gueymard, C.: "SMARTS2" [Online] (1995). <https://www.nrel.gov/rredc/smarts/>
- [2] Eisenlohr, J., Tucher, N., Höhn, O., Hauser, H., Peters, M., Kiefel, P., Goldschmidt, J.C., Bläsi, B.: Matrix formalism for light propagation and absorption in thick textured optical heets. *Opt. Express* **23**(11), A502–A518 (2015)
- [3] Baker-Finch, S.C., McIntosh, K. R.: A freeware program for precise optical analysis of the front surface of a solar cell. In: 2014 IEEE 40th Photovoltaic Specialist Conference (PVSC), pp. 002 184– 002 187. IEEE (2010)
- [4] Basore, P.A.: PC-1D version 3: improved speed and convergence. In IEEE 20nd Photovoltaic Specialists Conference, pp. 299–302 (1991)

- [5] Burgelman, M., Nollet, P., Degraeve, S.: Modelling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films* **361–362**, 527–532 (2000)
- [6] Fell, A.: A free and fast three-dimensional/two-dimensional solar cell simulator featuring conductive boundary and quasi-neutrality approximations. *IEEE Trans. Electron Devices* **60**(2), 733–738 (2013)
- [7] Varache, R., Leendertz, C., Gueunier-Farret, M., Haschke, J., Muñoz, D., Korte, L.: Investigation of selective junctions using a newly developed tunnel current model for solar cell applications. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **141**(Supplement C), 14–23 (2015)
- [8] Birner, S., Zibold, T., Andlauer, T., Kubis, T., Sabathil, M., Trellakis, A., Vogl, P.: nextnano: general purpose 3-D simulations. *IEEE Trans. Electron Devices* **54**(9), 2137–2142 (2007)
- [9] Silvaco, “Atlas: Device Simulation Framework” (2017)
- [10] Synopsis, “Sentaurus Device” (2017)
- [11] P. L. team and contributors. PV Lighthouse. [Online] (2018). <http://www.pvlighthouse.com.au>
- [12] Andrews, R.W., Stein, J.S., Hansen, C.: Introduction to the open source PV LIB for python Photovoltaic system modelling package. In: 2016 IEEE 43rd Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), pp. 0170–0174 (2014)
- [13] Sze S.M. *Semiconductor Devices*. New York: John Wiley, 887, 1981.
- [14] J. G. Fossum, D. S. Lee. A physical model for the dependence of carrier lifetime on doping density in nondegenerate Silicon. *Solid State Electronics*, 1982, Vol. 25, N° 8, pp. 741-747.
- [15] J. G. Fossum, R. P. Mertens, D. S. Lee, and J. F. Nijs. Carrier recombination and lifetime in highly doped Silicon. *Solid State Electronics*, 1983, Vol. 26, N° 6, pp. 569-576.
- [16] L. Huld, N. G. Nilsson, K. G. Svantesson. The temperature dependence of band-to-band Auger recombination in silicon. *Appl. Phys. Letters*, 1979, Vol.35, N° 10, 1979, pp.776.
- [17] W. Lochmann and A. Haug. Phonon-assisted Auger recombination in Si with direct calculation of the overlap integrals. *Solid State Communications*, 1980, Vol. 35, pp. 553-556.
- [18] R. Hacker and A. Hangleiter. Intrinsic upper limits of the carrier lifetime in silicon. *Journal of Applied Physics*, 1994, Vol. 75, pp. 7570-7572.
- [19] A. Al-Juffal and J. E. Parrot. Optimal design of back contact solar cells. 9th EC PVSEC, Freiburg (Germany), 1989, pp. 447-450.
- [20] G. Masetti, M. Severi, and S. Solmi. Modeling of carrier mobility against carrier concentration in Arsenic-, Phosphorus- and Boron-doped Silicon. *IEEE Trans. on Electron. Devices*, 1983, Vol. ED-30, pp. 764-769.
- [21] C. Canali, G. Majni, R. Minder, and G. Ottaviani. Electron and hole drift velocity measurements in Silicon and their empirical relation to electric field and temperature. *IEEE Trans. on Electron Devices*, 1975, Vol. ED-22, pp. 1045-1047.

- [22] J. Del Alamo, S. Swirhun, and R. M. Swanson. Measuring and modeling minority carrier transport in heavily doped Silicon. *Solid State Electronics*, 1985, Vol. 28, N° 1, pp. 47-54.
- [23] S. E. Swirhun, J. A. Del Alamo, and R. M. Swanson. Measurement of hole mobility in heavily doped n-type Silicon. *IEEE Electron Device Letters*, 1986, Vol. EDL-7, N° 3, pp. 168-171.
- [24] J. Del Alamo and R. M. Swanson. Measurement of steady-state minority carrier transport parameters in heavily doped n-type Silicon. *IEEE Trans. on Electron Devices*, 1987, Vol. ED-34, N° 7, pp. 1580-1589.
- [25] Naïma TOUAFEK, “ Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  ”, mémoire fin d'étude, 2015.
- [26] Burgelman, M., Nollet, P., Degraeve, S., 2021. Modeling polycrystalline semiconductor solar cells. *Thin Solid Films* 361, 527–532.
- [27] Hankare P P, Manikshete A H, Sathe D J, Chate P A, Patil A A & Garadkar K M. , “WS<sub>2</sub> thin films: Opto-electronic characterization”, *Journal of alloys and compounds*, 479(1-2), (2009), 657-660
- [28] Nur Syamimi Noorasid, “ SCAPS Numerical Analysis of Solid-State Dye-Sensitized Solar Cell Utilizing Copper (I) Iodide as Hole Transport Layer”, 2022
- [29] Sobayel K, Akhtaruzzaman M, Rahman K S, Ferdaous M T, Al-Mutairi Z A , Alharbi H F, ... & Amin N, “A comprehensive defect study of tungsten disulfide (WS<sub>2</sub>) as electron transport layer in perovskite solar cells by numerical simulation”, *Results in Physics*, 12, (2019), 1097-1103.
- [30] Connolly, J. P.: Analytical models of bulk and quantum well solar cells and relevance of the radiative limit. In: Fara, L., Yamaguchi, M. (eds.) *Advanced Solar Cell Materials, Technology, Modelling, and Simulation*, chap. 5, pp. 59–77. IGI Global, Hershey, PA (2013). <https://doi.org/10.4018/978-1-4666-1927-2>
- [31] Alonso-Álvarez, D., Wilson, T., Pearce, P., Führer, M., Farrell, D., Ekins-Daukes, N.J.: Solocore Code Repository. [Online] (2018). <http://doi.org/10.5281/zenodo.1185316>
- [32] Vurgaftman, I., Meyer, J.R., Ram-Mohan, L.R.: Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *J. Appl. Phys.* 89(11), 5815–5875 (2001)
- [33] Levinshtein, M., Rumyantsev, S., Shur, M., Levinshtein, M., Rumyantsev, S., Shur, M.: *Handbook Series on Semiconductor Parameters, ser. Volume 2: Ternary and Quaternary III-V Compounds*, vol. 2. World Scientific, Singapore (2012)
- [34] Sotoodeh, A. H. Khalid, and A. A. Rezazadeh, “Empirical low-field mobility model for III–V compounds applicable in device simulation codes,” *J. Appl. Phys.*, **87**, 2890, (2000).

---

# **CHAPITRE 3 :**

## **Résultats et interprétations**

---

**Introduction :**

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. Ce matériau comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type **N** et dopée de type **P** : Ce matériau est considéré comme un convertisseur instantané fournissant de l'énergie électrique s'il reçoit une énergie solaire sous forme de rayonnement en se comportant comme un générateur de courant continu. Les modèles de calcul numérique peuvent fournir un aperçu significatif des mécanismes de fonctionnement et des déficiences des cellules solaires photovoltaïques. Nous avons utilisé un ensemble de logiciels pour la conception et la simulation de cellules solaires photovoltaïques. Les calculs numériques peuvent être effectués sur un comportement limite thermodynamique idéal, jusqu'à l'ajustement de paramètres accessibles expérimentalement tels que les courbes IV sombres et claires et la luminescence. Le modèle utilisé est une simulation multi échelle qui tient compte des phénomènes à l'échelle nanométrique tels que les effets de confinement quantique des nanostructures semi-conductrices, à la propagation au niveau micronique de la lumière jusqu'à la performance globale des réseaux solaires, y compris la modélisation de l'irradiance spectrale en fonction des conditions atmosphériques.

Dans ce chapitre, nous allons présenter les résultats de la simulation numérique d'une cellule solaire à base de colorants et l'interprétation de ses résultats trouvés. Nous allons étudier par simulation, la modélisation de quelques propriétés structurales, électroniques et optiques de notre cellule solaire, en fonction de la température et des paramètres intrinsèques, afin de voir leurs influences sur le rendement de la cellule solaire.

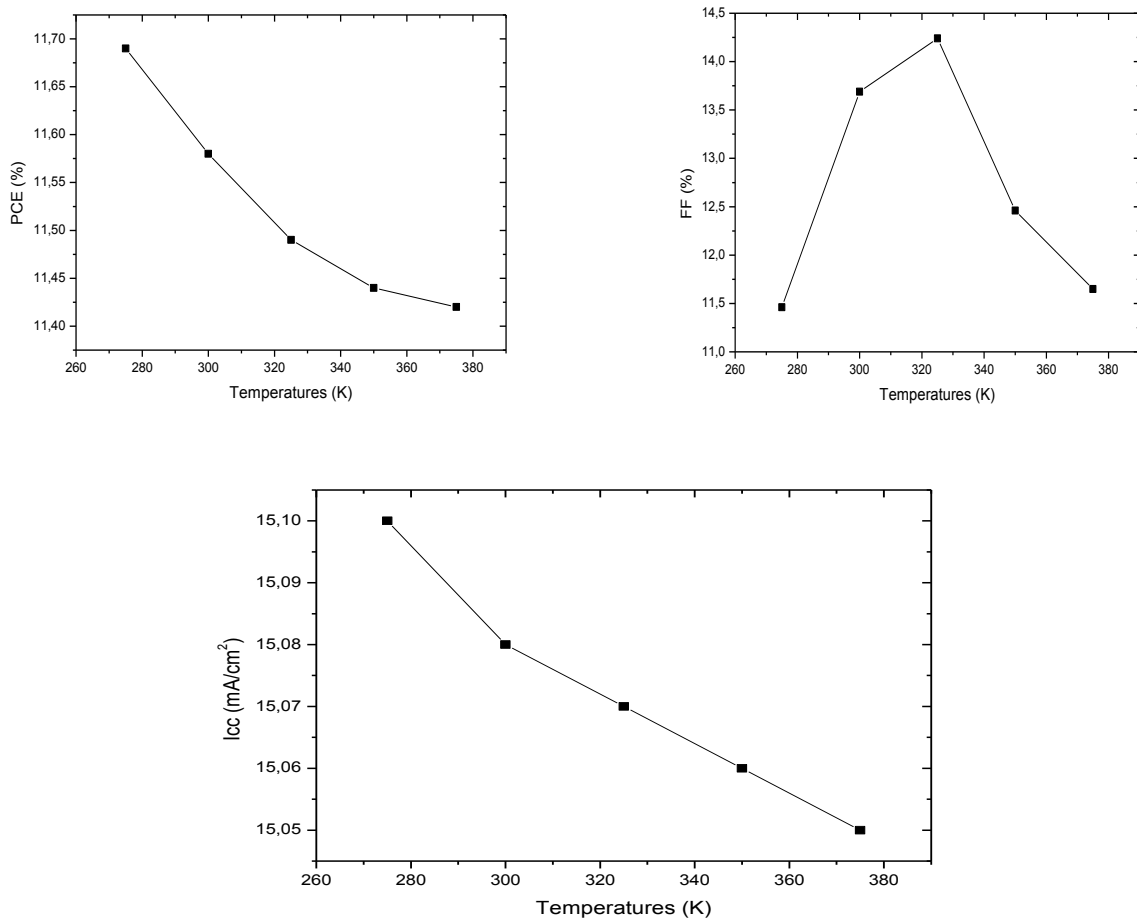
**1. Propriétés électriques et structurales d'une cellule solaire :**

Dans cette partie, on va interpréter la variation de l'efficacité PCE,  $I_{CC}$ ,  $V_{oc}$  et facteur de remplissage (FF) par rapport à la concentration. D'après les premiers calculs, on constate que l'efficacité de la cellule est juste au-dessus de 12 % à 1 soleil, et augmente avec la concentration, culminant à environ 200-300 soleils. Augmenter encore la concentration diminue rapidement l'efficacité. Les  $I_{CC}$ ,  $V_{oc}$  et les FF suivent la tendance linéaire attendue dans les graphes logarithmiques et semi-logarithmiques, respectivement, tandis que le facteur de remplissage augmente pour les faibles concentrations, puis diminue continuellement à partir de 20 soleils et, surtout, à partir de 200 soleils. La chute initiale en douceur du facteur de remplissage peut être liée à un transport de transporteur limité à travers la région des puits quantiques équilibrés, qui sous concentration, souffre de l'accumulation de charge et l'amortissement du champ électrique.

Cette interprétation va être détaillée suivant la structure de la cellule solaire étudiée en fonction de plusieurs paramètres comme suit :

### 1.1 Effet de la température sur la structure de la cellule étudiée :

La température peut influencer considérablement les performances des cellules solaires à Kesterite. Les changements structurels se produisant dans une cellule solaire en réponse au changement de température de fonctionnement ont fait l'objet de recherches importantes. La figure 3.1 montre une diminution de PCE et  $I_{CC}$ , mais il a été observé que le FF augmente avec l'augmentation de la température jusqu'à arriver à un seuil puis on constate sa diminution. Il a été rapporté que les matériaux Kesterite subissent une transition de phase avec le changement de température. Les transitions de phase dues aux variations de température conduisent généralement à une contraction et affectent ainsi la stabilité de la structure des matériaux. L'élévation de la température favorise la formation de défauts cristallins tels que des défauts de luxation et la formation de joints de grains [1]. Ces défauts favorisent la recombinaison des porteurs de charge et ont ainsi des effets néfastes sur les performances des cellules solaires [1]. Les paramètres de performance obtenus pour le dispositif photovoltaïque conçu par rapport aux mesures de performance des structures de cellules solaires étudiées dans le passé soulignent l'importance de la présente étude.



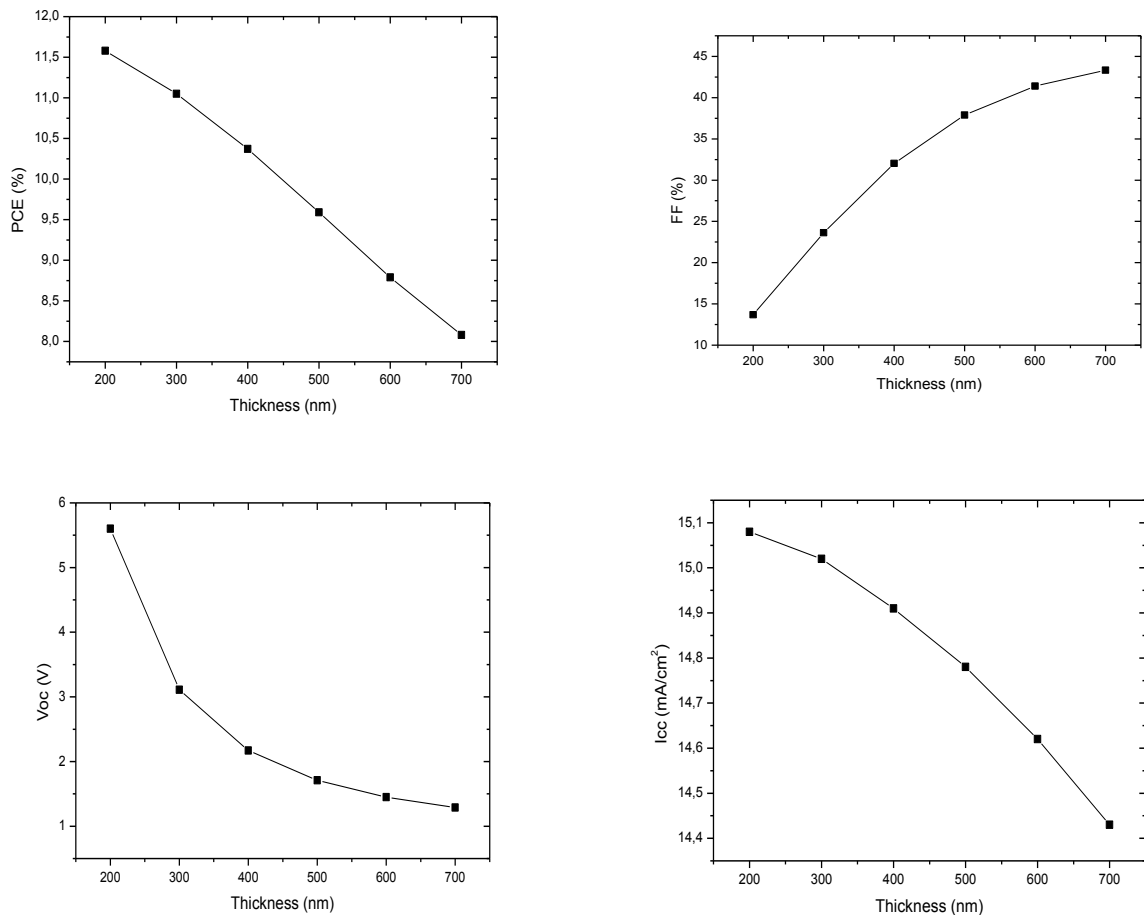
**Figure 3.1 :** Variation des performances photovoltaïques de la cellule étudiée en fonction de la température : efficacité  $P_{CE}$ , facteur de forme  $FF$  et densité de courant de court-circuit  $I_{cc}$ .

En première étape, nous avons étudié l'effet de la température sur les performances de la cellule solaire à colorants. On considère un large intervalle de température allant de 275 à 375K. On trace les caractéristiques électriques influencée par ces températures dans la Figure 3.1.

Quand nous avons fait la variation de température entre 275 – 375 K , le courant court-circuit et le rendement diminuent de 15.10 à 15.05 mA/cm<sup>2</sup> et 11.69 à 11.42 % respectivement . Contrairement au comportement de la tension du circuit ouvert, le facteur de forme augmente jusqu'à 325 K puis il diminue considérablement au-delà de cette valeur de température. On note aussi que le rendement de conversion maximale de cette cellule étudiée est 11.69% obtenue à 275K : cette valeur est supérieure à celle obtenue par Nur Syamimi Noorasid [2] (5.65% à 280K) pour une structure différente de la nôtre dans la couche ETL (nous avons utilisé WS<sub>2</sub> au lieu de TiO<sub>2</sub>).

### 1.2 Effet de la variation de l'épaisseur de la couche active sur la structure de la cellule :

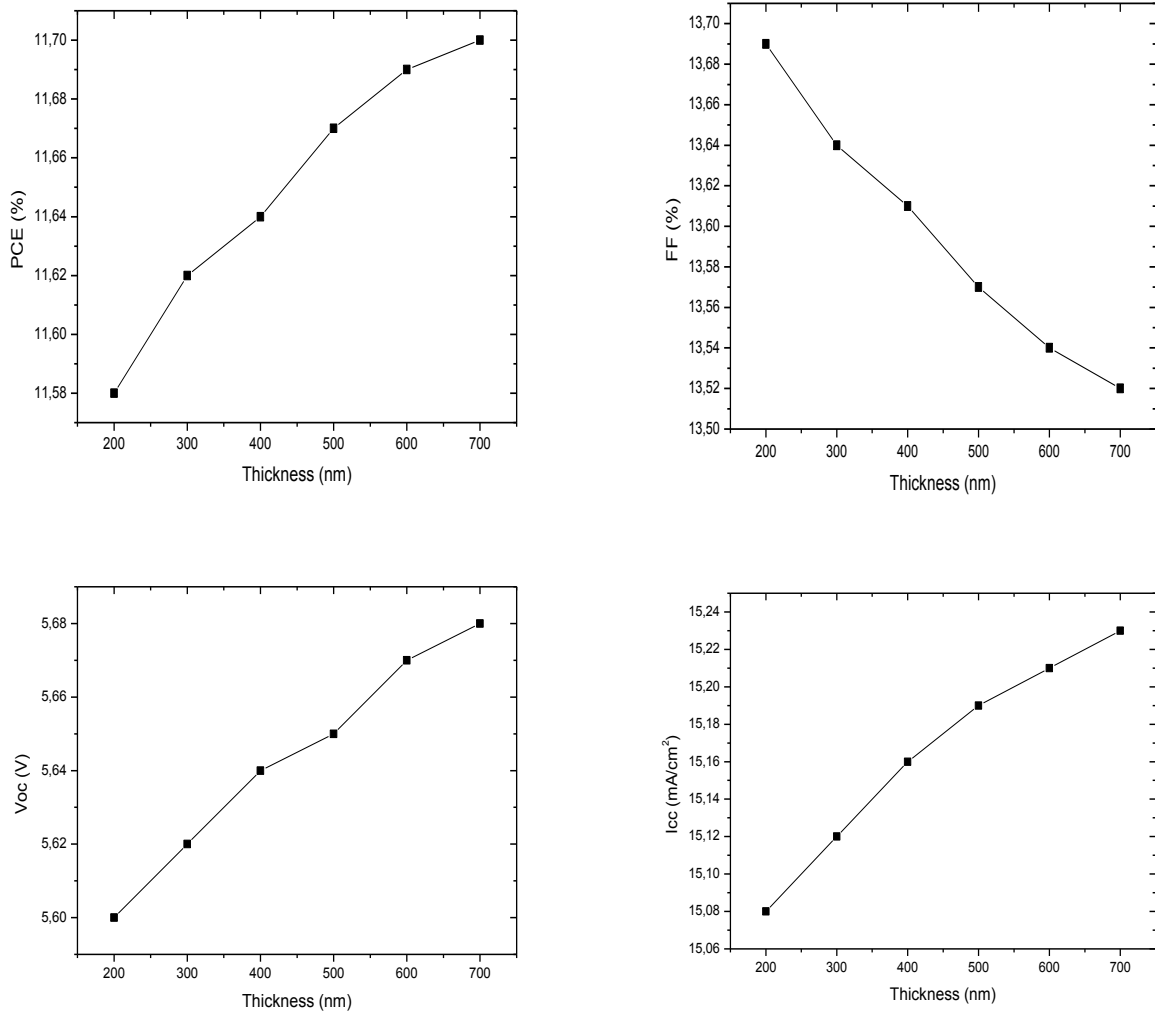
En deuxième étape, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche active sur les performances de la cellule solaire a colorants. On considère un large intervalle d'épaisseur allant de 200 à 700 nm. On trace les caractéristiques électriques influencée par ces épaisseurs dans la Figure 3.2. Quand nous avons fait la variation de l'épaisseur de la couche active (N719) entre 200 – 700 nm, le courant court-circuit, la tension du circuit ouvert et le rendement diminuent de 15.08 à 14.43 mA/cm<sup>2</sup> , 5.60 à 1.29 V et 11.58 à 8.08 % respectivement, le facteur de forme augmente de 13.69 à 43.34 %. On note aussi que le rendement de conversion maximale de cette cellule étudiée est 11.58% obtenue à 200 nm (5.6 % pour 2000 nm de l'épaisseur de N719 dans le travail de Nur Syamimi Noorasid [2]).



**Figure 3.2 :** Variation des performances photovoltaïques de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche active : efficacité  $PCE$ , facteur de forme  $FF$ , tension du circuit ouvert  $V_{OC}$  et densité de courant de court-circuit  $J_{cc}$

### 1.3 Effet de la variation de l'épaisseur de la couche HTL sur la structure de la cellule étudiée :

En 3<sup>ème</sup> étape, nous avons étudié l'effet de de l'épaisseur la couche HTL sur les performances de la cellule solaire a colorants. On considère un large intervalle d'épaisseur allant de 200 à 700 nm. On trace les caractéristiques électriques influencée par ces épaisseurs dans la Figure 3.3.

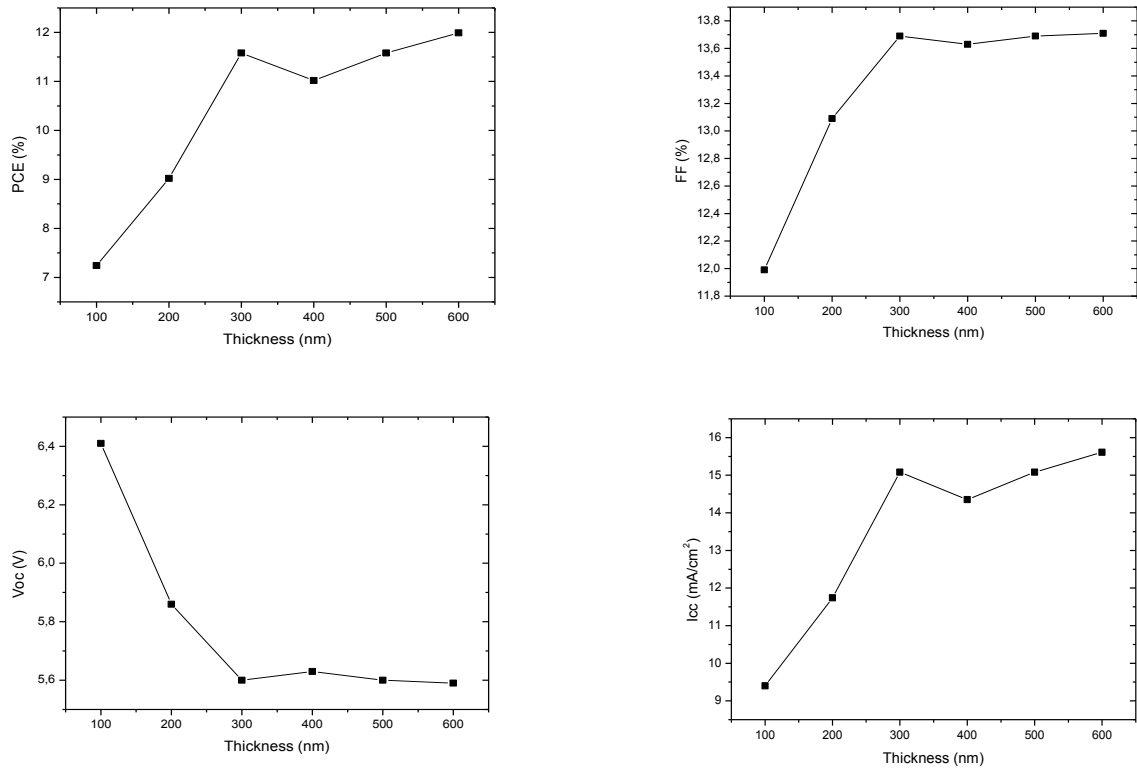


**Figure 3.3 :** Variation des performances photovoltaïques de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche HTL : efficacité  $PCE$ , facteur de forme  $FF$ , tension du circuit ouvert  $V_{oc}$  et densité de courant de court-circuit  $J_{sc}$ .

Quand nous avons fait la variation de l'épaisseur de la couche HTL (CuI) entre 200 – 700 nm , le courant court-circuit , la tension du circuit ouvert et le rendement augmentent de 15.08 à 15.23  $\text{mA}/\text{cm}^2$  , 5.60 à 5.68 V et 11.58 à 11.70 % respectivement , le facteur de forme diminue de 13.69 à 13.52 %. On note aussi que le rendement de conversion maximale de cette cellule étudiée est 11.7% obtenue à 700 nm de l'épaisseur de la couche HTL.

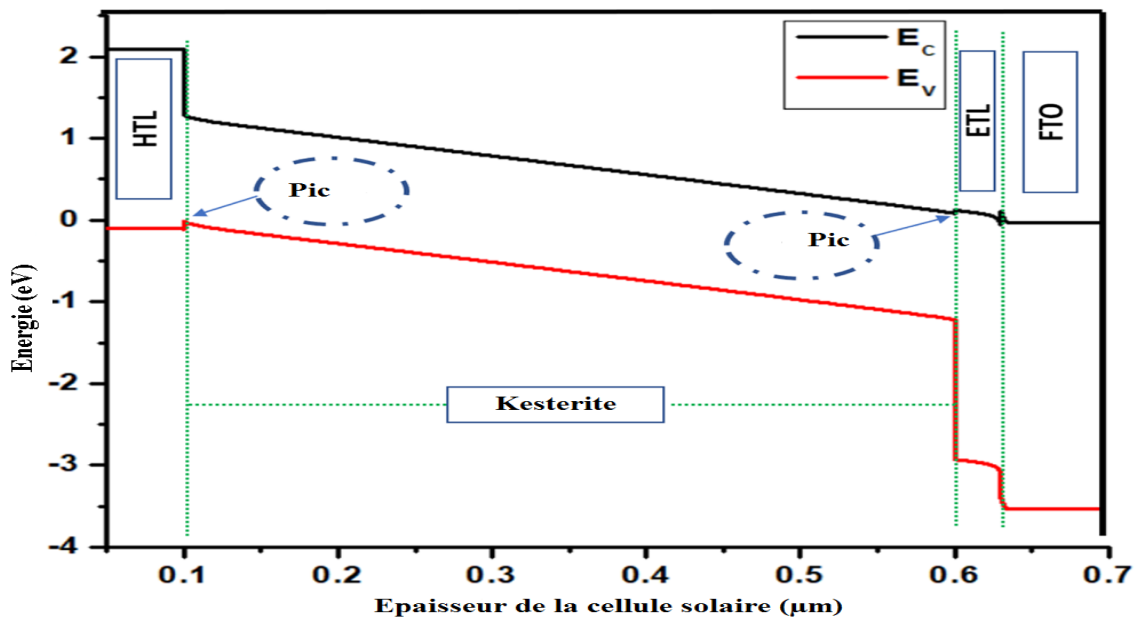
### 1.4 Effet de la variation de l'épaisseur de la couche ETL sur la structure de la cellule étudiée :

En 4<sup>ème</sup> étape, nous avons étudié l'effet de l'épaisseur de la couche ETL sur les performances de la cellule solaire a colorants. On considère un large intervalle d'épaisseur allant de 100 à 700 nm. On trace les caractéristiques électriques influencée par ces épaisseurs dans la Figure 3.4.



**Figure 3.4 :** Variation des performances photovoltaïques de la cellule étudiée en fonction de la variation de l'épaisseur de la couche ETL : Efficacité  $PCE$ , facteur de forme  $FF$ , tension du circuit ouvert  $V_{oc}$  et densité de courant de court-circuit  $J_{cc}$ .

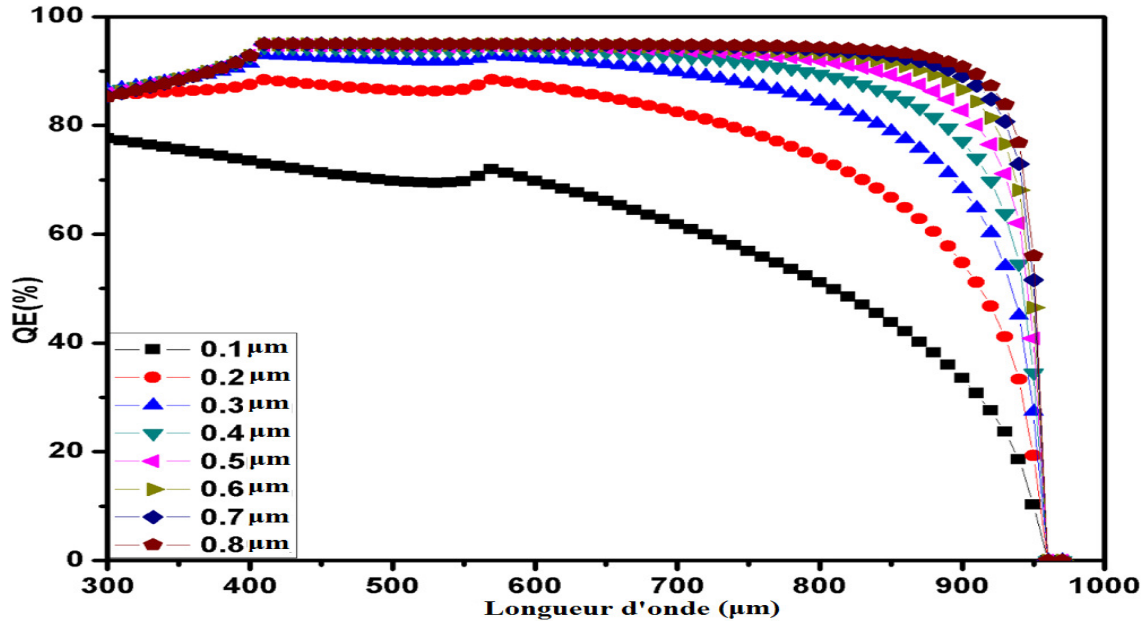
Quand nous avons fait la variation de l'épaisseur de la couche ETL ( $WS_2$ ) entre 100 – 600 nm, le courant court-circuit, le facteur de forme et le rendement augmentent de 9.40 à 15.61 mA/cm<sup>2</sup>, 11.99 à 13.71 % et 7.24 à 11.99 % respectivement, la tension du circuit ouvert diminue de 6.41 à 5.59 V. On note aussi que le rendement de conversion maximale de cette cellule étudiée est 11.99 % obtenue à 600 nm de l'épaisseur de la couche ETL.



**Figure 3.5 :** Diagramme de bande d'énergie de la structure de cellule solaire

Le diagramme de bande d'énergie du dispositif avec CuI comme HTL et  $WS_2$  comme ETL a été représenté sur la figure 3.5. Le décalage de bande de conduction en forme de pic à l'interface entre

la couche de Kesterite et l'ETL facilite les injections rapides de charges, réduit la recombinaison de charges et améliore  $V_{OC}$  et FF. En outre, il améliore le PCE et la stabilité du dispositif en cas d'exposition prolongée aux conditions environnementales. La présence d'un pic comme décalage de bande de conduction réduit également la recombinaison non radiative due au piégeage de charge par les états défectueux au sein du dispositif photovoltaïque.



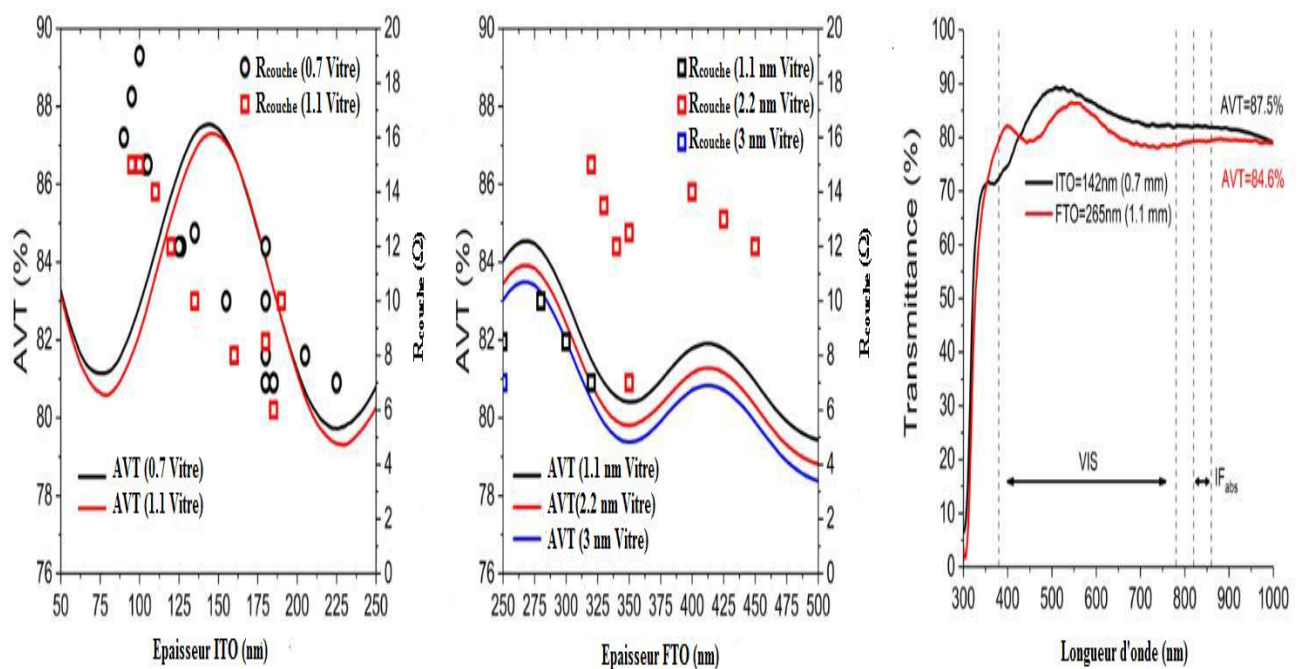
**Figure 3.6 :** Effet de la variation d'épaisseur de la couche absorbante sur le QE de la cellule solaire. Les performances d'une cellule solaire dépendent de la longueur d'onde (énergie) de la lumière incidente. Pour une efficacité plus élevée, l'énergie et la longueur d'onde des photons incidents doivent être tels qu'ils excitent efficacement les électrons de la bande de valence à la bande de conduction de la couche active. Par conséquent, la sensibilité d'une cellule solaire varie en fonction des différentes longueurs d'onde de la lumière du soleil. L'efficacité quantique (QE) d'une cellule solaire est la mesure de son efficacité pour différentes plages de longueurs d'onde de la lumière solaire. Il indique la sensibilité d'une cellule solaire à une gamme particulière de longueurs d'onde de la lumière solaire et les performances d'une cellule peuvent être testées pour l'ensemble du spectre lumineux en mesurant le QE. Pour une cellule solaire, le QE dépend de l'épaisseur de l'absorbeur. La couche et l'épaisseur de la couche absorbante doivent être optimisées pour avoir une efficacité maximale. La figure 3.6 montre la variation du QE avec longueur d'onde de la lumière à différentes épaisseurs de la couche absorbante. On voit sur la figure 3.6 que le QE augmente d'abord lorsque l'épaisseur augmente de 0,1 µm à 0,6 µm puis montre une valeur presque constante jusqu'à une épaisseur de 0,9 µm. Une autre caractéristique remarquable de la figure 3.6 est que le QE affiche le niveau le plus élevé pour une gamme de longueurs d'onde de 400 nm à 900 nm et pour une épaisseur supérieure à 0,2 µm. Une baisse brutale du QE peut être observée sur la figure 3.6 à la longueur d'onde vers 900 nm.

Un autre point très important qu'on doit mentionner est que le contact arrière est un composant important dans une cellule solaire car il est responsable de la collecte et du transport des porteurs de

charge vers le circuit externe. Le contact arrière en conjonction avec le contact avant fournit une voie permettant à l'énergie électrique générée d'être utilisée. Il est prévu que le contact arrière d'un dispositif photovoltaïque forme un chemin à faible résistance pour les porteurs de charge pour une perte de puissance minimale. Dans notre travail, on a choisi le contact arrière en Or pour le dispositif de la cellule solaire à colorant. On peut voir sur le premier graphe de la figure 3.4 que le PCE est maximum grâce au contact arrière en or avec un travail de sortie de 5,1 eV pour la cellule solaire proposée. Faible résistance électrique, haute réflectivité et stabilité chimique fait de l'or un matériau approprié pour une application comme contact arrière dans les cellules solaires. Bien que l'argent présente une réflectivité lumineuse plus élevée, sa conductivité est comparativement inférieure à celle de l'or. L'inertie chimique supplémentaire de l'or face aux conditions environnementales le rend plus adapté à une application dans les cellules solaires.

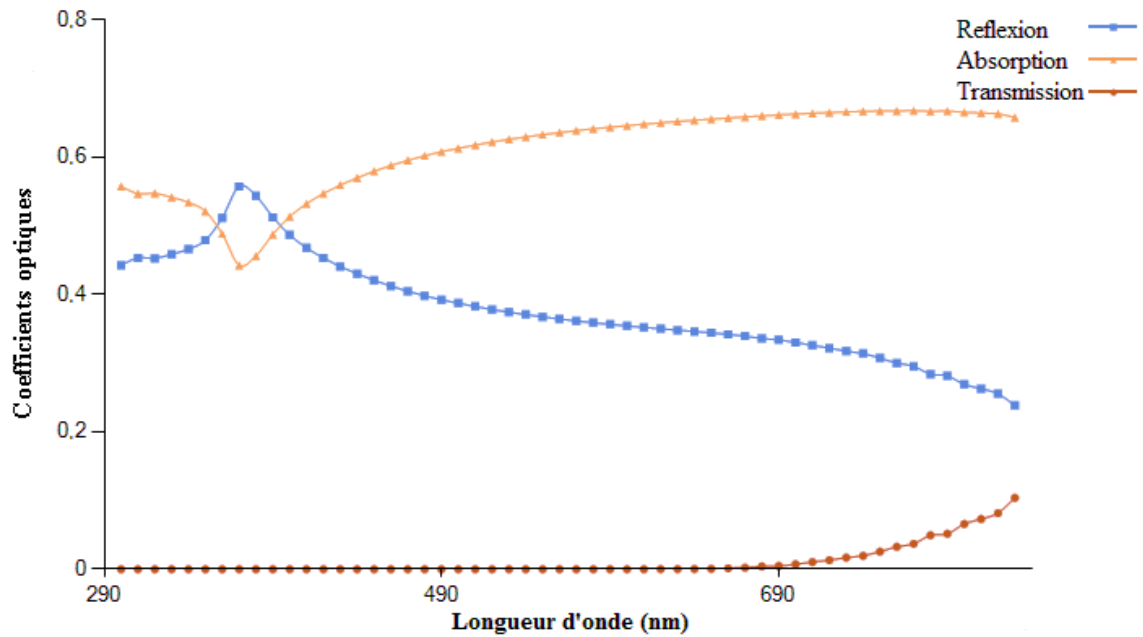
## 2. Propriétés optiques d'une cellule solaire :

Les données TCO de la figure 3.7 sont basées sur la fiche technique des paramètres d'entrées mentionnés dans la tableau 2.6 dans le chapitre 2.



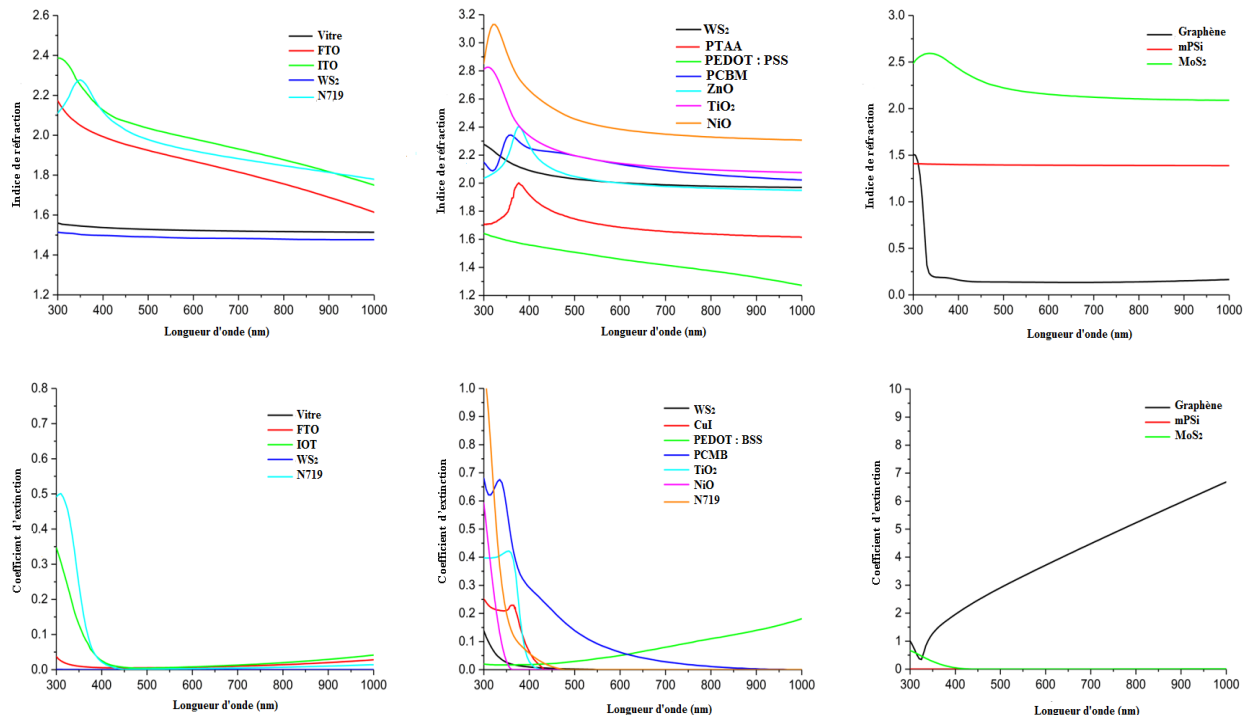
**Figure 3.7 :** AVT simulé pour des valeurs correspondantes de la résistance des différentes couches de la cellule solaire pour (a) Verre (0,7, 1,1 nm) / WS<sub>2</sub> (20 nm) / ITO (50-250 nm) (b) Verre (1,1, 2,2, 3 nm) / WS<sub>2</sub> (25 nm) / WS<sub>2</sub>(30 nm) / ITO (250-500 nm) (c) Comparaison entre la transmittance calculée pour le meilleur substrat de verre aux revêtements ITO et FTO.

La figure 3.8 contient les indices de réflexion, d'absorption et de transmission de la couche Kesterite utilisé pour les calculs optiques. La bande interdite du composé Kesterite est ajustée en faisant varier le rapport volumique entre les solutions précurseurs à 0 %, 5 %, 15 %, 20 % et 35 %. Les composés Kesterite résultants présentent une augmentation de la bande interdite optique de 0,4 à 0,6V, et un décalage conséquent de la longueur d'onde de 300 nm à 400 nm. Les indices de chaque composé sont calculés à partir de Solcore en utilisant la théorie de l'approximation du milieu effectif (EMA).



**Figure 3.8 :** Variation des paramètres optiques de la Kesterite en fonction de la longueur d'onde

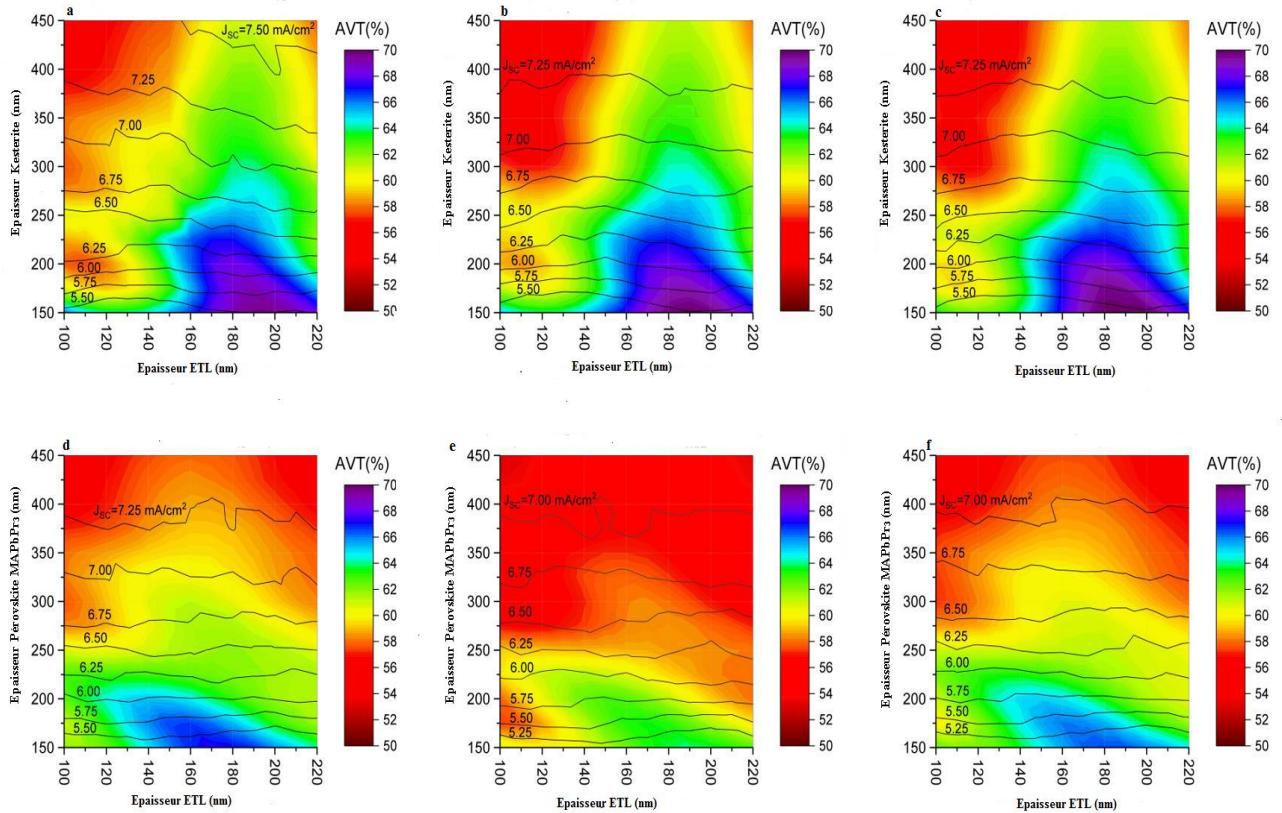
Toutes les autres constantes optiques utilisées dans les calculs optiques sont présentées à la figure 3.9. Les paramètres  $n$  et  $k$  liés aux matériaux constituant les substrats de verre à revêtement ITO et FTO et  $W_2S$  liés aux couches de transport d'électrons et de trous ainsi que les constantes optiques de la couche de notre colorant N719 utilisé dans les cristaux photoniques pour la gestion de la lumière dans les OSC.



**Figure 3.9 :** Variation des autres paramètres optiques de la cellule solaire en fonction de la longueur d'onde

Nous avons effectué des calculs optiques préliminaires sur les architectures PSC planaires P-I-N et N-I-P, afin de choisir la pile la plus efficace en termes d'AVT et d'efficacité de conversion de puissance (PCE). En particulier, pour la configuration N-I-P, nous avons étudié l'effet de différents TCO / ETL, notamment ITO/ $SnO_2$ , FTO/ $W_2S$  et ITO /  $W_2S$ , tandis que pour la configuration P-I-N,

nous effectuons la même étude en faisant varier le HTL en NiO, PEDOT : PSS et PTAA. Dans la figure 3.10, nous rapportons les cartes de couleurs 2D indiquant l'AVT obtenu pour les différentes piles étudiées. Les courbes de niveau de noir indiquent le JSC idéal (avec IQE = 100 %) réalisable en fonction du dimensionnement de la cellule solaire.



**Figure 3.10 :** Cartes en couleur de l'AVT en fonction de l'épaisseur de la couche Kesterite. Les courbes de niveau en noir indiquent le J<sub>SC</sub> théorique photogénéré dans la couche Kesterite. Les panneaux (a-c) sont liés à l'architecture planaire N-I-P pour laquelle nous avons fait varier à la fois le TCO et l'ETL. De même, les panneaux (d et f) sont liés aux architectures planaires P-I-N pour lesquelles il y a variation de la couche Pérovskite selon la littérature [4].

Les cartes liées à l'architecture N-I-P montrent que l'ITO / W<sub>2</sub>S permet d'obtenir un photocourant et un AVT plus élevés comparables aux autres. Alors que les cartes d et f montrent que le HTL affecte de manière importante les performances de l'architecture P-I-N, en fait l'utilisation du graphène très fin (10 nm) permet d'obtenir un bon photocourant tout en conservant une valeur AVT élevée. Dans cette figure, nous comparons avec des calculs similaires qui ont été fait récemment par des chercheurs [3, 4] sur des cellules pérovskites.

### Conclusion :

Les logiciels utilisés nous ont permis de faire la simulation de cellules solaires photovoltaïques. Les calculs ont été effectués sur un comportement limite thermodynamique idéal, ce qui nous a aidé à présenter les résultats de la simulation numérique d'une cellule solaire et d'interpréter ses résultats trouvés. Dans ce cadre, nous avons étudié la modélisation de quelques propriétés structurales, électroniques et optiques de certains matériaux semi-conducteurs en fonction de la température et de l'épaisseur afin de voir leurs influences sur le rendement de la cellule solaire. Dans ce cadre,

nous avons discuté de plusieurs approches de modélisation des processus d'interface à différentes longueurs et échelles de temps, et les avons divisées en deux grandes sections : les approches basées sur les données optiques puis les approches atomistiques pour des prédictions de haute précision avec une modélisation explicite des changements structuraux et électroniques au niveau d'une interface. Nous avons présenté des cas où ces approches ont permis une meilleure compréhension des performances des matériaux ou dispositifs, ainsi que de leurs principales limites. Nous voyons également des opportunités pour le développement et l'utilisation accrue de programmes logiciels qui englobent la nature multi-échelle de la simulation de dispositifs à semi-conducteurs et qui combinent des solveurs quantiques avec la modélisation optique, la modélisation électrique et les solveurs de grands circuits.

En premier lieu, on a analysé l'effet de la température sur les performances PV d'une cellule solaire au colorant en utilisant le simulateur SCAPS-1D. Avec la variation des épaisseurs de la couche active (N719), Iodure de cuivre (CuI) comme une couche de transport des trous HTL et  $WS_2$  comme la couche de transport des électrons ETL. Les résultats de simulation montrent que l'efficacité de la conversion d'énergie PCE maximal est 11.99 pour l'épaisseur de la couche N719, HTL, ETL sont 200 nm, 700 nm, 600 nm respectivement. Ensuite, nous avons présenté l'effet des propriétés optiques sur les performances de la cellule solaire étudiée grâce à une simulation faite sous Python en intégrant la bibliothèque Solcore. On a constaté que les composés Kesterite résultants présentent une augmentation de la bande interdite optique de 0,4 à 0,6V, et un décalage conséquent de la longueur d'onde de 300 nm à 400 nm.

#### Référence :

- [1] Elizabeth S. Parrott, Rebecca L. Milot, Thomas Stergiopoulos, Henry J. Snaith, Michael B. Johnston, Laura M. Herz, "Effect of structural phase transition on charge-carrier lifetimes and defects in  $CH_3NH_3SnI_3$  perovskite, *J. Phys. Chem. Lett.* 7 (7) (2016) 1321–1326.
- [2] Nur Syamimi Noorasid, "SCAPS Numerical Analysis of Solid-State Dye-Sensitized Solar Cell Utilizing Copper (I) Iodide as Hole Transport Layer", 2022.
- [3] Feurer T., Carron R., Torres Sevilla G., Fu F., Pisoni S., Romanyuk Y. E., Buecheler S., Tiwari A. N., "Efficiency improvement of near-stoichiometric  $CuInSe_2$  solar cells for application in tandem devices.", *Adv. Energy Mater.* 2019, 9: 1901428
- [4] Chen W., Zhu Y., Xiu J., Chen G., Liang H., Liu S., Xue H., Birgersson E., Ho J. W., Qin X., et al., "Monolithic perovskite/organic tandem solar cells with 23.6% efficiency enabled by reduced voltage losses and optimized interconnecting layer.", *Nat. Energy*, 2022, 7: 229-237

---

# **CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES**

---

Ce mémoire s'est concentré sur l'étude des cellules solaires à colorant, en explorant les différentes technologies existantes et en se focalisant particulièrement sur la cellule solaire à colorant. L'état de l'art, présenté dans le premier chapitre, a permis de contextualiser notre étude dans le paysage actuel des technologies photovoltaïques, mettant en lumière les avantages et les défis spécifiques des cellules solaires à colorant.

Dans le deuxième chapitre, nous avons abordé la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à colorant, en choisissant SCAPS-1D comme logiciel principal. La structure du dispositif étudié était composée de FTO comme couche fenêtre,  $WS_2$  en couche ETL, le colorant-sensibilisateur N719 comme absorbeur, la Kesterite en couche HTL, et l'or comme contact arrière. Ce choix de matériaux a été guidé par leurs propriétés optimales pour améliorer l'efficacité de conversion énergétique de la cellule.

Le troisième chapitre a été dédié à l'analyse des résultats et à leur interprétation. Les simulations ont révélé l'impact de différents paramètres sur les performances photovoltaïques, tels que la température et l'épaisseur des différentes couches. Par exemple, nous avons observé que l'efficacité maximale de conversion énergétique (PCE) de 11.69 % était obtenue à 275 K, tandis que l'épaisseur optimale de la couche active (N719) permettant une efficacité de 11.58 % était de 200 nm. De même, une efficacité maximale de 11.99 % a été atteinte avec une épaisseur de 600 nm pour la couche ETL.

En analysant les propriétés électriques et structurales, nous avons constaté que la variation de la température et de l'épaisseur des couches active, HTL, et ETL influence significativement les performances de la cellule. Les résultats montrent que l'optimisation de ces paramètres est cruciale pour améliorer l'efficacité globale des cellules solaires à colorant.

Les propriétés optiques des cellules solaires ont également été explorées à l'aide de simulations effectuées avec la bibliothèque Solcore sous Python. Cette analyse a montré une augmentation de la bande interdite optique et un décalage de la longueur d'onde, confirmant que les composés de Kesterite peuvent être optimisés pour améliorer les performances optiques des cellules solaires.

### **Perspectives**

Les résultats obtenus dans cette étude ouvrent plusieurs perspectives pour des recherches futures :

**1- Optimisation Matériaux et Structures** : Il serait bénéfique d'explorer de nouveaux matériaux pour les couches ETL, HTL, et l'absorbeur afin de surpasser les performances actuelles. La recherche de colorants alternatifs avec des propriétés d'absorption supérieures pourrait également augmenter l'efficacité.

2- **Amélioration des Modèles de Simulation** : Le développement de modèles de simulation plus avancés qui intègrent des effets quantiques et des interactions à l'échelle atomistique pourrait fournir des prédictions encore plus précises des performances des cellules solaires.

3- **Études Expérimentales** : Les résultats de simulation doivent être validés par des études expérimentales approfondies. La fabrication de prototypes basés sur les configurations optimisées identifiées par simulation est essentielle pour évaluer les performances réelles.

4- **Analyse de la Durabilité** : Une étude approfondie sur la durabilité et la stabilité des cellules solaires à colorant dans des conditions d'utilisation réelle est nécessaire. Cela inclut des tests de vieillissement accéléré pour comprendre les mécanismes de dégradation et développer des stratégies pour améliorer la longévité des dispositifs.

5- **Intégration et Applications Pratiques** : La recherche sur l'intégration des cellules solaires à colorant dans des applications pratiques, telles que les dispositifs portables ou les surfaces architecturales, pourrait ouvrir de nouvelles opportunités pour l'utilisation de cette technologie dans des contextes variés.

En conclusion, ce travail a démontré que les cellules solaires à colorant présentent un potentiel considérable pour des applications photovoltaïques efficaces, à condition que les paramètres structurels et optiques soient soigneusement optimisés. Les simulations numériques, effectuées avec des outils comme SCAPS-1D et Solcore, se révèlent être des approches puissantes pour prédire et améliorer les performances des dispositifs photovoltaïques. Nos résultats ouvrent la voie à de futures recherches visant à affiner encore davantage ces paramètres pour maximiser l'efficacité des cellules solaires à colorant.

**Résumé :** Ce mémoire s'est concentré sur l'étude des cellules solaires à colorant, en explorant les différentes technologies existantes et en se focalisant particulièrement sur la cellule solaire à colorant. Nous avons abordé la modélisation et la simulation d'une cellule solaire à colorant, en choisissant SCAPS-1D comme logiciel principal. Les simulations ont révélé l'impact de différents paramètres sur les performances photovoltaïques, tels que la température et l'épaisseur des différentes couches. En analysant les propriétés électriques et structurales, nous avons constaté que la variation de la température et de l'épaisseur des couches active, HTL, et ETL influence significativement les performances de la cellule. Les résultats montrent que l'optimisation de ces paramètres est cruciale pour améliorer l'efficacité globale des cellules solaires à colorant. Les propriétés optiques des cellules solaires ont également été explorées à l'aide de simulations effectuées avec la bibliothèque Solcore sous Python. Cette analyse a montré une augmentation de la bande interdite optique et un décalage de la longueur d'onde, confirmant que les composés de Kesterite peuvent être optimisés pour améliorer les performances optiques des cellules solaires. Ce travail a démontré que les cellules solaires à colorant présentent un potentiel considérable pour des applications photovoltaïques efficaces, à condition que les paramètres structurels et optiques soient soigneusement optimisés. Les simulations numériques, effectuées avec des outils comme SCAPS-1D et Solcore, se révèlent être des approches puissantes pour prédire et améliorer les performances des dispositifs photovoltaïques. Nos résultats ouvrent la voie à de futures recherches visant à affiner encore davantage ces paramètres pour maximiser l'efficacité des cellules solaires à colorant.

**Abstract:** This dissertation focused on the study of dye-based solar cells, exploring the different existing technologies and focusing particularly on the dye-based solar cell. We approached the modeling and simulation of a dye solar cell, choosing SCAPS-1D as the main software. The simulations revealed the impact of different parameters on photovoltaic performance, such as the temperature and the thickness of the different layers. By analyzing the electrical and structural properties, we found that the variation of the temperature and the thickness of the active layers, HTL, and ETL significantly influences the performance of the cell. The results show that optimizing these parameters is crucial to improve the overall efficiency of dye-sensitized solar cells. The optical properties of solar cells were also explored using simulations performed with the Solcore library under Python. This analysis showed an increase in the optical band gap and a shift in wavelength, confirming that Kesterite compounds can be optimized to improve the optical performance of solar cells. This work demonstrated that dye-sensitized solar cells have considerable potential for efficient photovoltaic applications, if the structural and optical parameters are carefully optimized. Numerical simulations, performed with tools like SCAPS-1D and Solcore, are proving to be powerful approaches for predicting and improving the performance of photovoltaic devices. Our results pave the way for future research aimed at further refining these parameters to maximize the efficiency of dye-sensitized solar cells.

ملخص: ركزت هذه الأطروحة على دراسة الخلايا الشمسية الصبغية، واستكشاف التقنيات المختلفة الموجودة والتركيز بشكل خاص على الخلايا الشمسية الصبغية. لقد اقتربنا باعتباره البرنامج SCAPS-1D من نمذجة ومحاكاة خلية شمسية صبغية، واخترنا الرئيسي. كشفت عمليات المحاكاة عن تأثير العوامل المختلفة على الأداء الكهروضوئي، مثل درجة الحرارة وسمك الطبقات المختلفة. من خلال تحليل الخواص HTL، الكهربائية والهيكلية، وجدنا أن اختلاف درجة الحرارة وسمك الطبقات النشطة، يؤثر بشكل كبير على أداء الخلية. تظهر النتائج أن تحسين هذه المعلمات أمر ETL و بالغ الأهمية لتحسين الكفاءة الشاملة للخلايا الشمسية الحساسة للصبغ. تم أيضًا استكشاف الخصائص البصرية للخلايا الشمسية باستخدام عمليات المحاكاة التي تم أظهر هذا التحليل زيادة في فجوة Python ضمن Solcore إجراؤها باستخدام مكتبة النطاق البصري وتحولًا في الطول الموجي، مما يؤكد إمكانية تحسين مركبات الكيستيريت لتحسين الأداء البصري للخلايا الشمسية. أظهر هذا العمل أن الخلايا الشمسية الحساسة للصبغ لديها إمكانات كبيرة للتطبيقات الكهروضوئية الفعالة، بشرط تحسين المعلمات الهيكلية والبصرية بعناية. أثبتت عمليات المحاكاة الرقمية، أنها أساليب قوية SCAPS-1D و Solcore التي يتم إجراؤها باستخدام أدوات مثل للتنبؤ بأداء الأجهزة الكهروضوئية وتحسينها. تمهد نتائجنا الطريق لأبحاث مستقبلية تهدف إلى تحسين هذه المعلمات بشكل أكبر لزيادة كفاءة الخلايا الشمسية الحساسة للصبغة