

République Algérienne Démocratique et Populaire

**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique**



Université Echahid Hamma Lakhdar d'El-Oued

FACULTE DE TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT DE GENIE ELECTRIQUE



Mémoire de fin d'études

Présenté pour l'obtention du diplôme de

MASTER ACADEMIQUE

Domaine : Sciences et Techniques

Filière : Télécommunications

Spécialité : Systèmes de Télécommunications

Thème

**Simulation d'une cellule photovoltaïque à
base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$**

Devant le jury composé de :

Boulila Mohamed.

Président

Medjouri Abdelkader.

Examineur

Hima Abdelkader.

Encadreur

Présenté par :

-Lekhouimes Ahmed Khalil

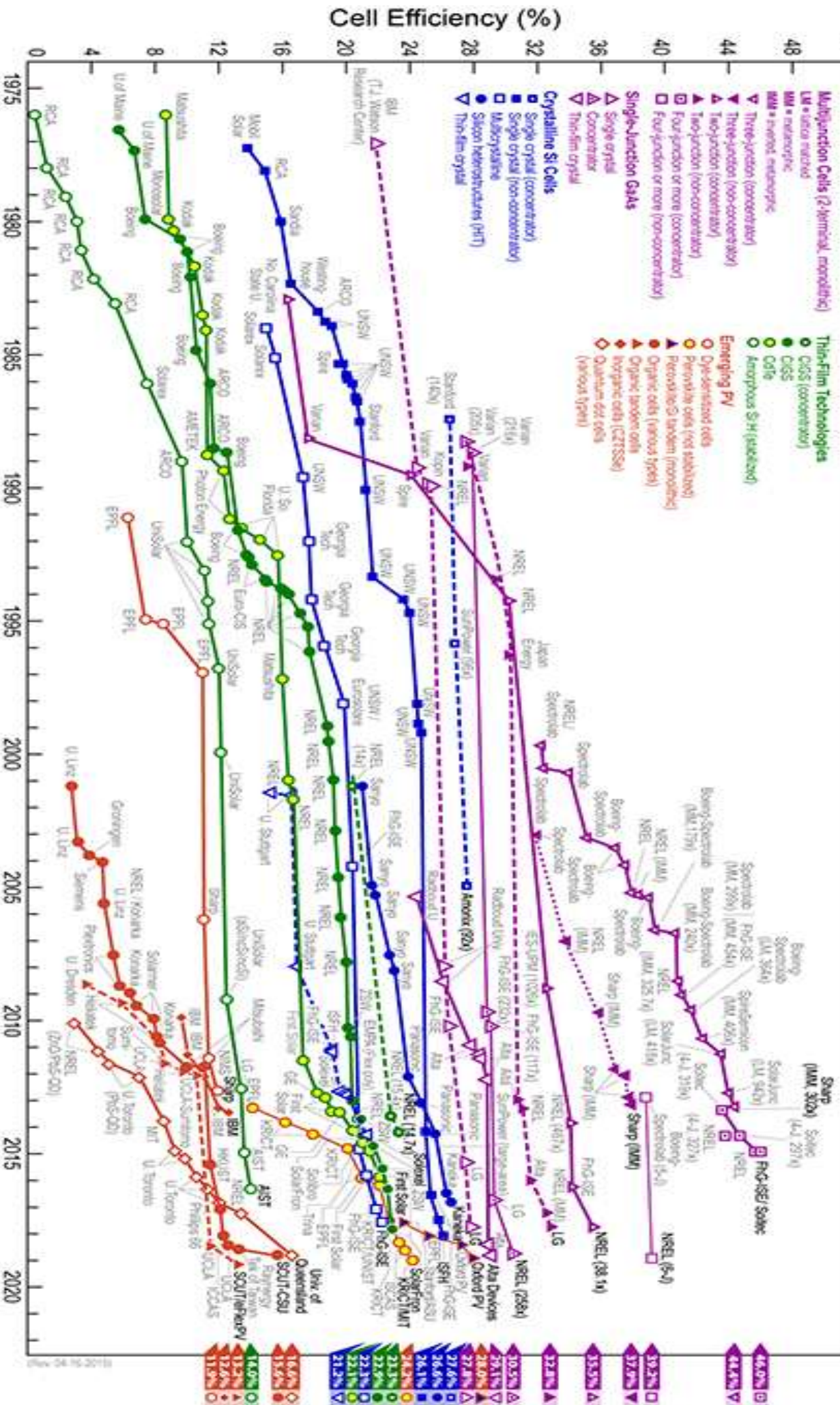
-Rezzoug Abdallah

- Ben YahkemMouslem

2019-2018

Best Research-Cell Efficiencies

52



Dédicaces

Nous dédions ce modeste mémoire

Pour nos mères

À nos parents

À nos frères et sœurs

Pour toute notre famille

À tout nos amis

Ahmed Khalil – Abdallah – Mouslem

Remerciements:

Nous remercions Dieu de nous avoir donné la volonté et le courage de réaliser ce mémoire.

Nous voudrions également remercier les membres du jury Boulila M. et Medjouri A.

Nous voudrions exprimer nos sincères remerciements à notre encadreur Hima A. pour sa patience et ses précieux conseils.

Nous souhaitons également remercier tous les amis qui nous ont aidés de loin ou de près à accomplir ce modeste travail.

Sommaire

<i>Dédicaces</i>	
<i>Remerciements</i>	
<i>Sommaire</i>	
<i>Liste de figures</i>	I
<i>Liste de Tableaux</i>	III
<i>Listes des symboles et abréviations</i>	IV
<i>Introduction générale</i>	1
<i>Chapitre I : Généralité Sur Semi-conducteur</i>	
I.1 Introduction :	4
I.2 Les paramètres caractéristiques d'un semi-conducteur :	4
I.2.1 Définition :	4
I.2.2 Conductivité :	4
I.2.3 Photoconduction :	5
I.2.4 Redressement :	5
I.3 Les matériaux semi-conducteurs :	5
I.3.1 Semi-conducteurs intrinsèques(purs) :	5
I.3.2 Semi-conducteurs extrinsèques :	7
I.3.3 Bandes d'énergie :	9
I.3.4 Les semi-conducteurs III-V :	11
I.4 Equations fondamentales dans les semi-conducteurs :	12
I.4.1 Equation de Poisson :	12
I.4.2 Equations de continuité :	12
I.4.3 Equations de transport :	13
I.5 Conclusion :	14
<i>Chapitre II : Cellules solaires à base de pérovskites hybrides</i>	
II.1 Introduction :	16

II.2	Propriétés structurales des pérovskites hybrides :	18
II.3	Cellules solaires à base de pérovskites hybrides :	20
II.3.1	Cellules solaires excitoniques :	20
II.3.2	Intégration des PH dans des cellules de type Grätzel :	21
II.3.3	Cellules solides à pérovskite hybride :	22
II.4	Conclusion :	24
<i>Chapitre III : Résultats et discussions</i>		
III.1	Introduction :	26
III.2	Principe de la simulation numérique :	26
III.2.1	Paramètres photovoltaïques :	26
III.3	Simulation par SCAPS :	29
III.3.1	Structure et paramètres de la cellule étudiée :	29
III.3.2	Résultats et discussion :	31
III.3.3	Effet de l'épaisseur de couche PEDOT/Pss, CH ₃ NH ₃ PbI ₃ et PCBM sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire:	31
III.4	Simulation par programme SILVACO-ATLAS :	40
III.4.1	Structure et paramètres de la cellule étudiée :	40
III.4.2	Présentation de la cellule étudiée :	40
III.4.3	Résultats et discussions	41
III.5	Conclusion:	43
<i>Conclusion générale</i>		44
<i>Références</i>		46
<i>Annexe</i>		48

Liste de figures

Figure I. 1. Structure cristalline du Silicium pur	6
Figure I. 2. Densité des porteurs intrinsèques en fonction de la température.....	7
Figure I. 3. Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore, dopage donneur de type-n	8
Figure I. 4. Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de Bore, dopage accepteur de type-P	9
Figure I. 5. Distance inter atomique représentée graphiquement contre l'énergie, pour montrer la formation des bandes d'énergie dans un matériau.....	10
Figure I. 6. Bandes d'énergie dans différents types de matériaux	11
Figure II. 1. Structure cristalline de type pérovskite (cas du $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{AX}_3$)	18
Figure II. 2. (a) Structure distordue tétragonale de MAPbI_3 , (b) structure cubique de MAPbBr_3 , (c) variation à température.....	19
Figure II. 3. Principe de fonctionnement des cellules solaires	20
Figure II. 4. (a) Diagramme d'énergie des cellules $\text{TiO}_2/\text{MAPbI}_3/$	23
Figure II. 5. Évolution du rendement record des cellules PSC ;	24
Figure III. 1. Caractéristique courant-tension et paramètres physiques d'une cellule photovoltaïque.	27
Figure III. 2. différents régimes selon la puissance d'éclairement.	28
Figure III. 3. schéma simplifié de la cellule solaire utilisée	30
Figure III. 4. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc}, J_{sc}, FF et η) avec N_d des couches PEDOT/Pss	33
Figure III. 5. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc}, J_{sc}, FF et η) avec N_a des couches PEDOT/Pss	34
Figure III. 6. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc}, J_{sc}, FF et η) Avec N_d des couches $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	35
Figure III. 7. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc}, J_{sc}, FF et η) avec N_a des couches $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	36
Figure III. 8. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc}, J_{sc}, FF et η) avec N_d des couches PCBM.	38

Figure III. 9.Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec Na des couches PCBM.	39
Figure III. 10.Courbe I-V simulée.	40
Figure III. 11.schéma simplifié de la cellule solaire utilisée	41
Figure III. 12.Caractéristique (I-V) de la cellule $CH_3NH_3PbI_3$ étudiée.....	42

Liste de Tableaux

Tableau I. 1.Situation des semi-conducteurs dans le tableau périodique.	5
Tableau I. 2.Extrait de la classification périodique des éléments chimiques.	11
Tableau III. 1.Propriétés des différentes couches (PEDOT: PSS/ CH ₃ NH ₃ PbI ₃ / PCBM/ SnO ₂ : FTO).....	31
Tableau III. 2.L'épaisseur de chaque couche de la cellule de base étudiée.	31
Tableau III. 3.Effet de l'épaisseur des couches PEDOT/Pss, CH ₃ NH ₃ PbI ₃ et PCBM sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.	32
Tableau III. 4.Paramètres des différentes couches de la cellule solaire à base de CH ₃ NH ₃ PbI ₃	41
Tableau III. 5.Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à base (CH ₃ NH ₃ PbI ₃).....	42

Listes des symboles et abréviations

PCE	Power conversion efficiency
AsGa	Gallium Arsenide
PGa	Phosphide Gallium
SbGa	Phosphide Gallium
Si	Silicon
Ge	Germanium
GaAs	Arsenide Gallium
ϵ	Permittivité électrique
ϵ_0, ϵ_r	Permittivité du vide, permittivité relative du matériau
∇	Opérateur Nabla
Ψ	Potentiel électrostatique
ρ	densité volumique nette de charges libres
D_n, D_p	Constante de diffusion des électrons et des trous respectivement, les coefficients d'Einstein
q	Charge de l'électron
j_n, j_p	Densité de courant des électrons et des trous respectivement
G_n, R_n	Les taux de génération pour les électrons et les trous par des agents externes
$\mu_n,$	Mobilité des électrons et des trous respectivement
n	Concentration des électrons et des trous respectivement
K	constante de Boltzmann
n_{ie}	Densité de porteurs libres intrinsèques
$N_c(T), N_v(T)$	Densité des états dans la couche de conduction et Densité des états dans la couche de valence
J_{sc}	densité du courant de court-circuit

V_{oc}	Tension de circuit ouvert
FF	Facteur de forme
P_{\max}	Puissance maximale
P_{in}	puissance lumineuse incidente
I_{cc}	courant de court-circuit
I_s	courant de saturation
I_{ph}	courant photo-généré
η	Rendement de conversion
T_c	température absolue
R_o	résistance interne de la diode en polarisation externe nulle

Introduction générale

Introduction générale

Le Soleil, source énergétique quasi illimitée, est à l'origine d'un nombre impressionnant d'effets biologiques qui participent directement ou indirectement à la vie animale et végétale : il procure la chaleur, permet la photosynthèse, la vision, conditionne les rythmes biologiques, etc.

L'originalité de l'énergie photovoltaïque telle qu'on l'entend ici est de transformer directement la lumière solaire en électricité. Et quand on sait que l'apport énergétique solaire total sur la planète est de plusieurs milliers de fois supérieur à notre consommation globale d'énergie, on comprend tout l'intérêt d'une telle démarche. Renouvelable, cette énergie respecte notre environnement en réduisant les émissions des gaz à effet de serre.

Les prix ne cessent de baisser grâce à l'accroissement des volumes de production car le marché est fortement stimulé par le rachat du courant par les compagnies d'électricité, et il croît de 40 % par an au niveau mondial depuis quelques années. Peu de secteurs économiques peuvent afficher de tels résultats.

De nombreuses cellules photovoltaïques ont vu le jour pour exploiter au mieux la lumière du Soleil au travers de panneaux solaires. Afin de produire de l'électricité, Ces cellules solaires constituées d'un matériau semi-conducteur qui converti l'énergie du rayonnement solaire en électricité.

Silicium, terres rares ou plastiques sont employés, mais chaque technologie a des atouts et des faiblesses dans ce domaine prometteur.

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ devient un bon collecteur de lumière grâce à son caractéristiques remarquables telles que bande interdite idéale, absorption large spectre, bon mécanisme de transporteur, facilité de fabrication sur le substrat souple et la bande accordable espace et longue longueur de diffusion. Caractéristiques précitées de pérovskite au plomb-halogénure sont encourageants à utiliser dans la fabrication de la cellule solaire pérovskite et devenir un bon matériau concurrentiel au silicium traditionnel matériau. Au début, l'PCE maximum de Ces cellules solaires à base de pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ représentent 3,8%.

En temps voulu, par les nouvelles méthodes de fabrication et la sélection appropriée de l'architecture le PCE de pérovskite cellule solaire a atteint 19,5%. Plomb méthyl ammonium les matériaux de pérovskite aux halogénures sont abondants sur la terre et ce sont des solutions traitables menant à la rentable technique de fabrication. Une compréhension claire de la relation sous-jacente entre les caractéristiques matérielles et la

une architecture de périphérique est nécessaire pour améliorer les performances de l'appareil.

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

L'objectif de ce présent mémoire est de faire une modélisation de l'effet des épaisseurs et du gap d'énergie sur les caractéristiques électriques d'une cellule solaire à base de Pérovskite en vue d'optimiser par simulation en utilisant le logiciel SCAPS 1D et Silvaco. pour simuler les caractéristiques physiques (densité de courant de court circuit I_{sc} , tension de circuit ouvert V_{oc} , Facteur de forme FF, Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η)).

Ce mémoire est organisé comme suit :

Le premier chapitre présente généralité et équations fondamentales sur les semi-conducteurs.

Le deuxième chapitre est Présentation du logiciel de simulation (SCAPS-1D et SILVACO).

Dans le dernier chapitre nous présentons discutons les résultats obtenus.

Ce travail se termine par une conclusion générale des résultats obtenus au cours de simulation.

Chapitre I : Généralité Sur Semi-conducteur

I.1 Introduction :

Le succès industriel des dispositifs à semi-conducteurs est en grande partie dû aux technologies de pointe qui ont été développées pour leur préparation. Les semi-conducteurs ont pris une importance considérable dans notre société. Ils sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques utilisés dans les systèmes informatiques, les télécommunications, la télévision, les voitures et les appareils électroménagers... etc.

Dans le monde des semi-conducteurs, les composés III-V sont d'une classe bien définie avec des propriétés qui sont des sources d'intérêt en termes de connaissances et d'applications fondamentales. A titre d'exemple, le GaAs a un gap direct proche de la valeur idéale de 1.5 eV qui résulte une efficacité maximale de conversion photovoltaïque assurée par une cellule photovoltaïque même en mono jonction. Des rendements de conversion autour de 25.7 % ont été atteints par de telle cellule au spectre AM1.5. [1]

I.2 Les paramètres caractéristiques d'un semi-conducteur :

I.2.1 Définition :

Un semi-conducteur est un matériau qui présente une conductivité intermédiaire entre celle des métaux (conducteurs) et des isolants. La spécificité d'un semi-conducteur par rapport aux autres matériaux réside dans les propriétés suivantes :

- Conductivité.
- Photoconduction.
- Redressement.

I.2.2 Conductivité :

Pour un métal, la conductivité décroît quelque peu avec la température de même pour un isolant. Pour un semi-conducteur elle croît par contre très rapidement avec la température. Dans un métal, la conduction est assurée par un seul type de porteurs qui sont en général les électrons. Par contre sont les électrons et les trous. Cette notion de porteurs (électrons et trous) sera développée un peu plus loin.

I.2.3 Photoconduction :

Un semi-conducteur éclairé voit sa résistivité diminuer. Cette propriété est absente chez les conducteurs et les isolants.

I.2.4 Redressement :

Dans un semi-conducteur, le passage du courant est dans un seul sens. Cette propriété est très utilisée pour le redressement de courant alternatif.

I.3 Les matériaux semi-conducteurs :

En analysant le tableau de Mendéléiev, une partie de ses éléments (tableau 1.1), est considérée comme étant formée de semi-conducteurs.

Groupe	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
			B	C	N	O		
			Al	Si	P	S		
		Zn	Ga	Ge	As	Se		
		Cd	In	Sn	Sb	Te	I	

Tableau I. 1. Situation des semi-conducteurs dans le tableau périodique.

En raison de leurs propriétés physiques le germanium(Ge) et surtout le silicium(Si) sont les plus utilisés dans les applications électroniques.

Les développements de la technologie ont permis de nouveaux semi-conducteurs beaucoup plus performants. Ces semi-conducteurs utilisent les alliages composés des groupes III-V et II-IV.

On obtient ainsi les semi-conducteurs AsGa; PGa; SbGa etc ... Le semi-conducteur AsGa devient aujourd'hui de plus en plus utilisé.[2]

I.3.1 Semi-conducteurs intrinsèques(purs) :

Il est impossible de créer des semi-conducteurs intrinsèques totalement purs parce qu'à un certain point pendant le processus de croissance les impuretés contaminent le matériel [3]. Si un lien de semi-conducteur intrinsèque est cassé, un électron libre et un trou sont créés simultanément, de même, si un électron est excité de la bande de valence à la bande

de conduction alors un trou sera simultanément créé dans la bande de valence [4]. On peut considérer que le trou s'est déplacé par combinaisons d'électrons. La structure cristalline du silicium pur est présentée dans la figure :

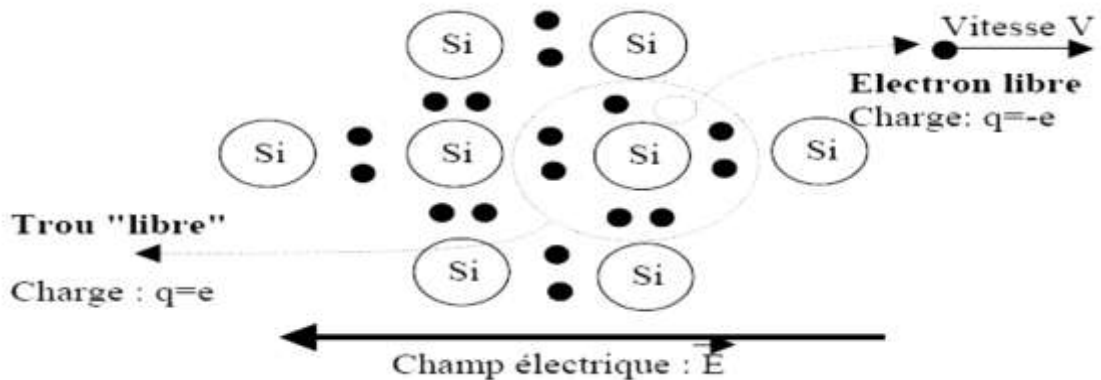


Figure I. 1. Structure cristalline du Silicium pur [5]

Les semi-conducteurs appartiennent à la 4ème colonne de la classification périodique des éléments.

- Par exemple les atomes de silicium qui possèdent 4 électrons sur leur dernière couche se regroupent entre eux en échangeant leurs électrons de valence (liaison de covalence)
- Chaque électron est mis en commun par deux atomes voisins de manière à ce que le noyau se trouve entouré par une couche de 8 électrons – Cette structure est très stable.

A la température de 0K, tous les électrons de valence sont utilisés dans des liaisons de covalence.

- Pas d'électrons libres aucune possibilité de conduction.
- le cristal est un isolant.

Quand la température augmente, l'agitation thermique donne à certains électrons un supplément d'énergie suffisant pour briser la liaison de covalence.

- Ces électrons libres peuvent alors se déplacer sous l'action d'un champ électrique extérieur.

_ le cristal est devenu conducteur

Les cristaux semi-conducteurs purs, qui ne contiennent pas d'atomes étrangers, sont appelées intrinsèque. Dans un semi-conducteur intrinsèque à 0 K° il n'y a pas de *EHP*, lorsque la température augmente, cependant, la chaleur absorbée par le matériau créera un certain nombre de *EHP* et la conductivité du matériau augmente. Depuis que *EHP* sont responsables de la conductivité, ils sont appelés porteurs intrinsèques. Leur nombre augmente de façon logarithmique. Ceci est montré dans la figure I-8 pour Si, Ge et GaAs.

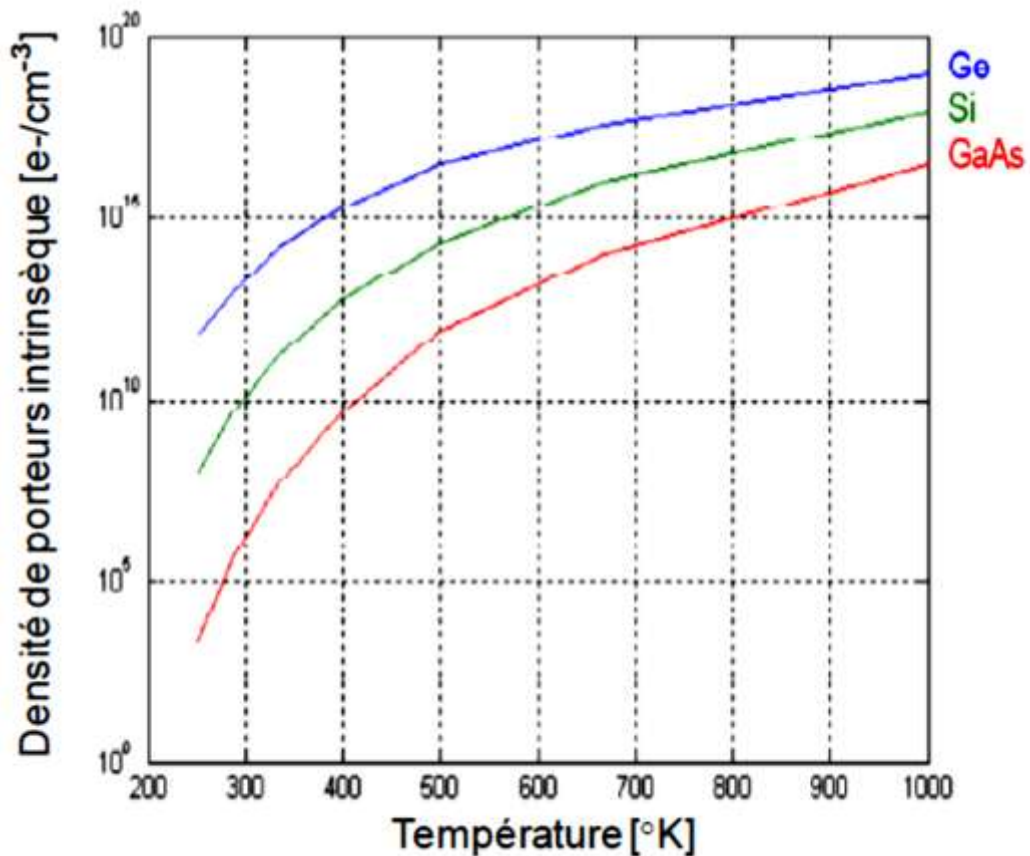


Figure I. 2. Densité des porteurs intrinsèques en fonction de la température

I.3.2 Semi-conducteurs extrinsèques :

Les semi-conducteurs extrinsèques sont créés en ajoutant des atomes d'impuretés dans les matériaux intrinsèques. Heureusement, ajouter des impuretés dans un matériel peut être bénéfique aux performances du semi-conducteur. L'ajout des impuretés dans la substance avec l'intention de contrôler ses caractéristiques de fonctionnement est connu sous le nom de dopage [3], ce processus peut engendrer des changements des propriétés électriques.

Le dopage est employé pour contrôler le nombre d'électrons ou de trous dans un matériel par l'addition d'une quantité déterminée d'impuretés, avec résultats des matériaux de type-p ou de type-n en concordance avec le nombre des trous ou des électrons libres. Le dopage d'un cristal intrinsèque consiste à substituer des atomes de semi-conducteurs du réseau par des atomes étrangers – Deux cas peuvent se présenter :

- ❖ Les dopants de type –n, sont également connus comme donneurs, car ils sont des éléments ou des composés avec cinq électrons de valence ou plus qui donneront un électron après que les quatre autres forment des liaisons covalentes avec le matériau intrinsèque dans lequel ils ont été placés.

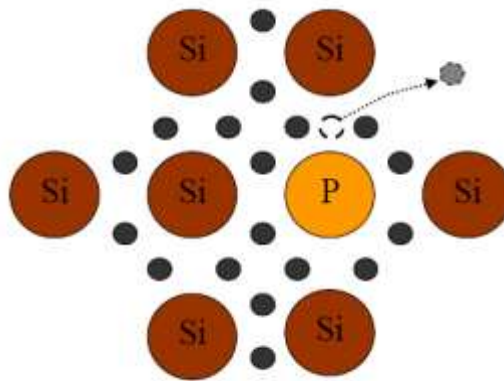


Figure I. 3. Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de phosphore, dopage donneur de type-n

Dans le matériau de type-n, les électrons sont des porteurs majoritaires et les trous sont des porteurs minoritaires [3]. Prenons le cas d'un atome de la colonne V, par exemple le phosphore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 5 électrons, comme représenté sur la figure I-3. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 9 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, cet électron va quitter son orbite pour circuler dans le cristal. Il rejoint dans ce cas la bande de conduction du cristal. Le noyau de l'atome de phosphore ayant une charge (due à ses protons) qui n'est plus compensée, cet atome va s'ioniser positivement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un électron au cristal (dans sa bande de conduction), on l'appelle atome donneur. Notons que la charge totale du cristal reste nulle, le cristal étant globalement neutre.

- Les dopants de type-p, ou accepteurs, sont des éléments ou des composés ayant trois ou moins d'électrons de valence et acceptent des électrons, forment des liaisons covalentes avec quatre ou plusieurs de leurs cinq trous. Les matériaux de type-p ont des trous comme porteurs majoritaires et des électrons comme porteurs minoritaires.

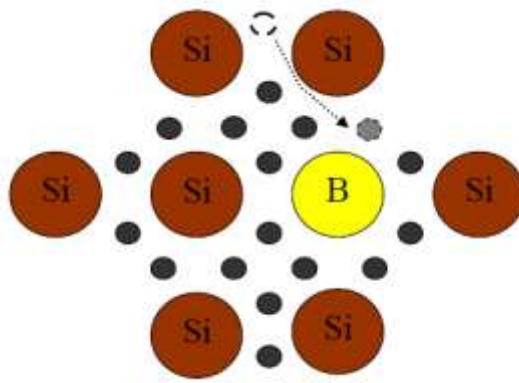


Figure I. 4. Dopage d'un monocristal de silicium par un atome de Bore, dopage accepteur de type-P

Prenons le cas d'un atome de la colonne III, par exemple le bore. La couche externe de cet atome comporte, a priori, 3 électrons, comme représenté sur la figure I-4. Inclus dans le réseau cristallin, cet atome va se retrouver avec 7 électrons sur sa couche externe. Dès que l'énergie thermique sera suffisante, un électron de valence voisin va quitter son orbite pour venir créer un octet autour de l'atome de bore. Il crée dans ce cas une lacune dans la bande de valence du cristal, c'est-à-dire qu'il crée un trou. Le noyau de l'atome de bore ayant une charge due à ses protons insuffisante, cet atome va s'ioniser négativement. Cet atome a ainsi un comportement dopant et puisqu'il a fourni un trou au cristal (dans sa bande de valence), on l'appelle atome accepteur, puisqu'il accepte un électron. Notons que la charge totale du cristal reste toujours nulle, le cristal étant globalement neutre.

Le nombre des porteurs majoritaires est analogue au dopage dans une matière, tandis que le nombre des porteurs minoritaires est analogue à la température. Notons que les deux types-p et n du matériau restent neutres. Toutefois, l'effet de dopage est optimal pour les propriétés électriques de la matière, même à de très faibles concentrations.

I.3.3 Bandes d'énergie :

Les semi-conducteurs et les métaux possèdent une structure cristalline particulière, c'est à dire que les atomes sont groupés en réseaux régulièrement disposés dans l'espace.

Dans ces réseaux, la distance inter atomique étant faible, de l'ordre de quelques Å, les atomes ne peuvent plus être considérés comme isolés, et il en résulte des interactions de nature électrostatique entre les divers atomes. Les états d'énergie électroniques sont distribués selon une loi de dispersion appelée structure de bandes, représentée par une succession de bandes permises pouvant être séparées par des bandes interdites. Toutes les

directions de propagation des électrons, c'est à dire tous les points du réseau réciproque, doivent être examinées afin d'établir l'existence d'une bande interdite (le terme anglais "gap").

Dans le diagramme de bande de la figure (I.5), la distance inter atomique est représentée graphiquement à l'encontre de l'énergie d'électrons. Le diagramme de bande montre que lorsque les atomes du même élément sont infiniment éloignés les uns des autres, ils ont les mêmes niveaux d'énergie. Toutefois, lorsque les atomes sont rapprochés, les électrons de chaque atome s'interagissent, et les niveaux d'énergie discrets divergent dans une bande d'énergie autorisée représentée par la partie grise du graphique de la figure.

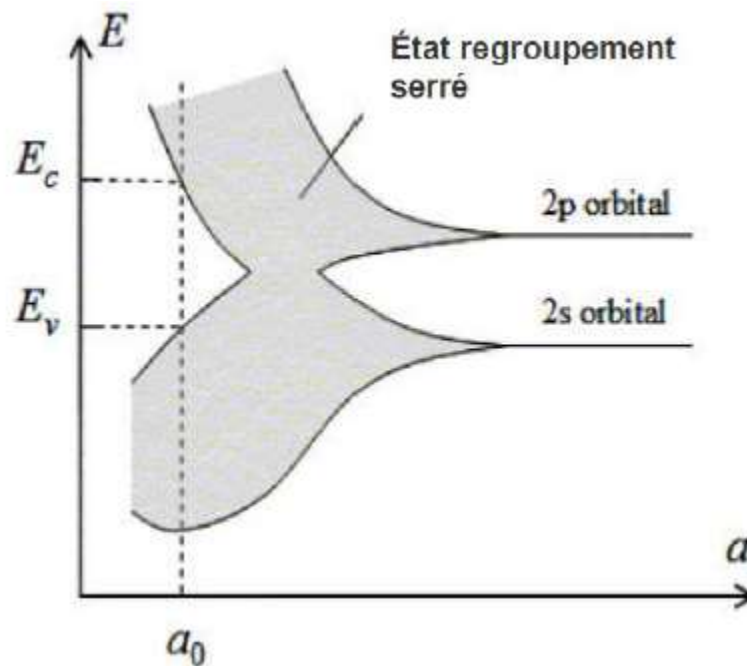


Figure I. 5. Distance inter atomique représentée graphiquement contre l'énergie, pour montrer la formation des bandes d'énergie dans un matériau

Dans un solide à 0 °K, toutes les bandes d'énergie les plus basses sont remplies, sauf la dernière qui peut être partiellement remplie ou complètement remplie.

Lorsque cette bande est partiellement remplie, on a affaire à un conducteur car si on applique un champ électrique, les électrons qui ont l'énergie la plus élevée peuvent acquérir une énergie supplémentaire en occupant des niveaux d'énergie très voisins disponibles. Lorsque cette bande est remplie, on a affaire à un isolant à 0 °K car l'application d'un champ électrique ne peut fournir assez d'énergie pour lui faire franchir la bande interdite afin d'atteindre les premiers niveaux disponibles : les électrons ne peuvent acquérir un mouvement collectif correspondant au passage du courant. On distingue isolants et

conducteurs par la différence d'énergie qu'existe entre ces bandes, comme illustré à la figure I.6

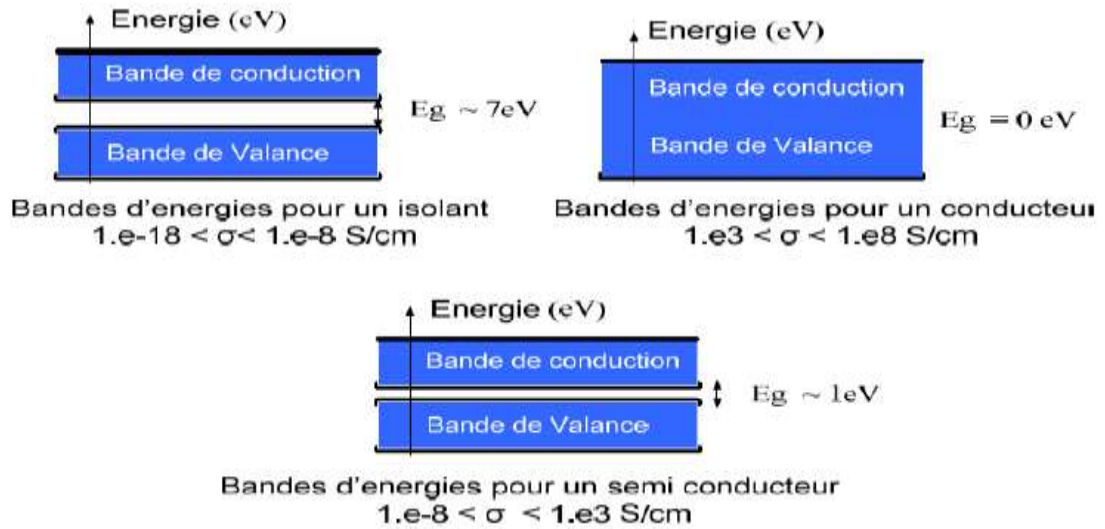


Figure I. 6. Bandes d'énergie dans différents types de matériaux

I.3.4 Les semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la troisième (III) colonne et d'un élément de la cinquième (V) colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (I.2) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). [2].

III	IV	V
$^{10.81}_{5}\text{B}$	$^{12.01}_{6}\text{C}$	$^{14.01}_{7}\text{N}$
$^{26.98}_{13}\text{Al}$	$^{28.09}_{14}\text{Si}$	$^{30.97}_{15}\text{P}$
$^{69.74}_{31}\text{Ga}$	$^{72.59}_{32}\text{Ge}$	$^{74.92}_{33}\text{As}$
$^{114.69}_{49}\text{In}$	$^{118.69}_{50}\text{Sn}$	$^{121.75}_{51}\text{Sb}$

Tableau I. 2.Extrait de la classification périodique des éléments chimiques [2].

I.4 Equations fondamentales dans les semi-conducteurs :

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à la base des semi-conducteurs ont conduit à la réalisation d'un modèle mathématique [6]. Ce modèle est capable d'opérer dans quasiment n'importe quel dispositif à base de semi-conducteurs. Il consiste en un ensemble fondamental d'équations qui rassemblent le potentiel électrostatique et les densités de porteurs de charge dans un domaine de simulation bien précis. Ces équations, qui sont résolues via des logiciels spécifiques de simulation des dispositifs à la base de semi-conducteurs, sont dérivées des équations de Maxwell. Elles sont principalement : L'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson lie les variations dans le potentiel électrostatique aux densités locales de charge. Les équations de continuité ou de transport décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous se comportent en fonction des processus de transport, de génération et de recombinaison.

Pour que les équations que nous allons présenter dans la suite de ce chapitre soient résolues, une discrétisation a dû être réalisée afin de les appliquer à une grille d'éléments finis utilisés pour représenter le domaine de simulation [7].

I.4.1 Equation de Poisson :

L'équation de Poisson s'exprime par :

$$\text{Dive } \nabla \psi = -\rho \quad (I. 1)$$

Où ψ représente le potentiel électrostatique.

ϵ la permittivité électrique ($\epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r$, ϵ_0 est la permittivité du vide et ϵ_r est la permittivité relative du matériau).

ρ est la densité volumique nette de charges libres.

Le champ électrique est donné par la relation :

$$E = -\text{grad } \psi \quad (I. 2)$$

I.4.2 Equations de continuité :

Les équations de continuité décrivent la vitesse de variation en fonction du temps des concentrations des porteurs. Les causes de la variation des concentrations des trous ou des électrons sont :

Les générations dues aux agents externes (qui sont souvent la création de paires électron-trou); les générations-recombinaisons internes ;

Les phénomènes de transport (par la présence des courants de conduction ou diffusion).

L'équation de continuité s'exprime par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (\text{I. 3})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (\text{I. 4})$$

I.4.3 Equations de transport :

Dans le cas des hypothèses de base des équations de la physique des semi-conducteurs (le champ magnétique extérieur est nul, la température est uniforme dans toute la structure) les causes de l'apparition des courants électriques sont le champ électrique et le gradient des concentrations des porteurs de charge. Les courants déterminés par le champ électrique s'appellent courant du champ ou courant de drift. Et les courants

déterminés par le gradient de concentration des porteurs s'appellent courant de diffusion.

Dans le cas hors équilibre thermodynamique, nous définissons deux quasi-niveaux de Fermi, un pour les électrons et un pour les trous, ψ et, qui expriment la modification de la probabilité d'occupation des états.

Ainsi les densités des courants des équations de continuité peuvent être approximées à l'aide de la théorie de transport de Boltzmann par le modèle de drift-diffusion [8] (modèle iso thermique de transport). Dans ce modèle, les densités de courants sont exprimées en fonction des quasi-niveaux de Fermi par les expressions :

$$\vec{J}_n = -q \mu_n n \nabla \varphi_n \quad (\text{I. 5})$$

$$\vec{J}_p = -q \mu_p p \nabla \varphi_p \quad (\text{I. 6})$$

Avec q est la charge électrique, μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous.

Les expressions pour les concentrations des électrons et des trous sont :

$$n = n_{ie} \exp \left[\frac{q (\psi - \varphi_n)}{kT_L} \right] \quad (\text{I. 7})$$

$$p = n_{ie} \exp \left[\frac{q (\psi - \varphi_p)}{kT_L} \right] \quad (\text{I. 8})$$

Avec n_{ie} est la densité effective intrinsèque. En introduisant ces équations dans les expressions de densité de courant, on obtient :

$$\vec{J}_n = qD_n \nabla n - qn \mu_n \nabla \psi - \mu_n n (kT_L \nabla (\ln n_{ie})) \quad (I. 9)$$

$$\vec{J}_p = -qD_p \nabla p - qp \mu_p \nabla \psi + \mu_p p (kT_L \nabla (\ln n_{ie})) \quad (I. 10)$$

Avec D_n et D_p sont les coefficients d'Einstein qui ont pour expression :

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad (I. 11)$$

$$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (I. 12)$$

I.5 Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons rappel quelque notion général sur les semi-conducteurs (semi-conducteur III-V spécifiquement).

Ont été présentée dans ce chapitre et quelque propriétés et paramètre destinés dans la conception des cellules photovoltaïques.

*Chapitre II : Cellules
solaires à base de pérovskites
hybrides*

II.1 Introduction :

Depuis le début de la révolution industrielle, la consommation d'énergie de l'humanité n'a cessé de croître. Actuellement l'électricité est devenue indispensable. En 2012, 68,1 % de la consommation électrique mondiale était produite à partir d'énergies fossiles non renouvelables telles que le pétrole, le charbon et le gaz, tandis que 31,9 % l'étaient à partir d'autres sources d'énergie : nucléaire et renouvelables. Hormis l'énergie nucléaire et géothermique, le soleil est à l'origine de la quasi-totalité des sources d'énergie renouvelables et fossiles utilisées par l'humanité pour ses besoins alimentaires, domestiques et industriels. Avec $\sim 7 \times 10^{17}$ kWh/an, l'énergie solaire, qui arrive à un rythme assez régulier sur terre, représente environ 6 000 fois la consommation mondiale actuelle d'énergie. Elle constitue donc une ressource très abondante et inépuisable. Directement exploitée, celle-ci serait donc capable, à elle seule, de combler largement les besoins actuels de la population mondiale. Dans le contexte actuel de changement climatique et de raréfaction des ressources, l'exploitation des sources d'énergie renouvelable et en particulier du solaire photovoltaïque (PV) est devenue une priorité. Le PV traite de la transformation directe de l'énergie solaire en énergie électrique.

On notera qu'il existe aussi des voies thermiques et thermodynamiques pour récupérer l'énergie solaire. Cette ressource d'énergie peut être produite et utilisée localement.

Différentes filières technologiques ont été développées pour les cellules PV. Les filières les plus matures qui sont actuellement industrialisées et commercialisées font appel à des matériaux semi-conducteurs et à leurs associations pour générer de l'électricité. Les cellules correspondantes sont les cellules à « jonction p-n ». Parmi les technologies qui exploitent ces structures, on distingue le silicium monocristallin et polycristallin ainsi que les technologies couches minces. Parmi ces dernières, on distingue principalement le silicium amorphe/microcristallin, les alliages CIGS à base de cuivre, d'indium, de gallium et de sélénium et le CdS/CdTe. Les cellules solaires à jonction p-n demandent des matériaux de grande pureté qui sont d'un coût, notamment énergétique, élevé. La filière qui occupe actuellement la plus grande part du marché PV est la filière au silicium cristallin.

D'un autre côté, des filières « en rupture » sont développées depuis plusieurs décennies. Elles recherchent une baisse significative du coût des cellules en se basant sur des concepts différents de fonctionnement, permettant l'utilisation de matériaux abondants et faciles à mettre en oeuvre. Ces dispositifs ne sont pas encore diffusés à grande échelle. Ceux qui ont

fait l'objet du plus grand nombre d'études sont les cellules solaires à colorant (ou cellules de Grätzel) et les cellules organiques. Les cellules à pérovskites hybrides (PH) sont apparues beaucoup plus récemment et sont très prometteuses. Le principe de fonctionnement de ces cellules est différent des cellules classiques à jonction p-n. On les qualifie souvent de cellules « excitoniques ». Leur nom provient du matériau qui collecte l'énergie lumineuse et qui génère l'exciton, c'est-à-dire la paire électron-trou (colorant, molécule organique ou pérovskite hybride). Dans ces dispositifs, il est le plus souvent nécessaire de combiner des matériaux de nature organique et inorganique pour obtenir des rendements satisfaisants. Dans le cas des cellules solaires à pérovskite (PSC), c'est aussi le collecteur de lumière qui a une nature hybride. De plus, il cristallise sous une forme structurale cubique ou tétragonale de type pérovskite.

II.2 Propriétés structurales des pérovskites hybrides :

Le terme « pérovskite » désigne à l'origine le minéral CaTiO_3 (titanate de calcium) qui a été décrit pour la première fois en 1839 par le minéralogiste allemand Gustav Rose et dont le nom est dédié au minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Perovski. Il désigne depuis la structure cristalline correspondante de formule générale ABC_3 . À la fin du XIXe siècle, de nouvelles pérovskites ont été synthétisées de formule ABX_3 avec X un halogénure, Cl^- , Br^- ou I^- , A étant le Cs^+ et B le Pb^{2+} . Leur structure cristalline n'a été résolue qu'en 1957 par Christian Moller [8]. Il avait alors observé que ces matériaux étaient photoconducteurs et donc se comportaient comme des semi-conducteurs. En 1978, D. Weber [9] a montré qu'il est possible de remplacer l'ion césium par un gros cation organique comme le méthylammonium pour obtenir des pérovskites hybrides (PH) organiques- inorganiques tridimensionnelles (3D). La structure des pérovskites hybrides utilisées dans les cellules solaires est présentée en figure II.1. Le cation, C^{st} ou une petite molécule organique [classiquement le méthylammonium (MA), mais aussi le formamidinium (FA) ou l'acide 5-aminovalérique (5-AVA)] occupe le centre d'un cube dont les sommets sont occupés par le Pb(II) ou le Sn(II). Ces cations sont eux-mêmes au centre d'un octaèdre (BX_6) composé d'ions halogénures, I^- , Cl^- ou Br^- . La structure pérovskite de plus haute symétrie est de type cubique et appartient au groupe d'espace . On la retrouve pour la pérovskite MAPbBr_3 à température ambiante (figure II.1) et MAPbI_3 à une température supérieure à 327 K [10] [11]. En dessous de cette température, cette dernière possède une structure tétragonale

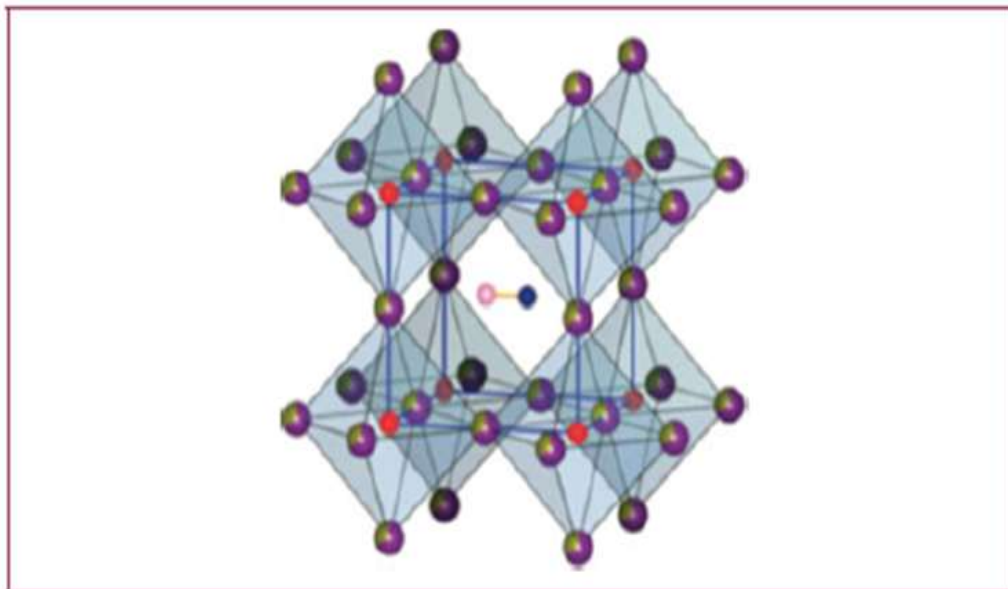


Figure II.1. Structure cristalline de type pérovskite (cas du $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{AX}_3$)

appartenant au groupe d'espace $I4/mcm$ et présentée en figure II.1. Elle résulte d'une légère rotation des octaèdres PbX_6 le long de l'axe c , les octaèdres restant liés entre eux par leurs sommets. $MAPbBr_3$ présente une transition en une phase tétragonale à 236 K [12].

$MAPbBr_3$ a été décrit comme plus stable à température ambiante que $MAPbI_3$ du fait de sa structure cubique (donc moins déformée) et sa plus grande compacité résultant de la plus petite taille de l'anion Br^- comparé à I^- [13].

À basse température, il a été noté une transition cristalline des PH de la phase tétragonale à la phase orthorhombique. Celle-ci se produit à 165 K pour $CH_3NH_3PbI_3$ [10], 160 K pour $MA(I_{1-x}Cl_x)_3$ [6], et 154 K pour $MAI_{1-x}Br_x$ [5]. Il est possible de préparer des pérovskites à halogénure mixte et de faire varier leur composition dans toute la gamme de x , par exemple dans le cas de $MAPb(I_{1-x}Br_x)_3$ [11]. L'ion Br^- dans un état de coordination 6 ayant un rayon ionique (1,96 Å) plus petit que celui de I^- (2,2 Å), une décroissance continue du paramètre de maille est observée avec x (figure II.2). D'autre part, à température ambiante, la transition entre une structure tétragonale et cubique est ici observée à $x = 0,13$ (figure II.2).

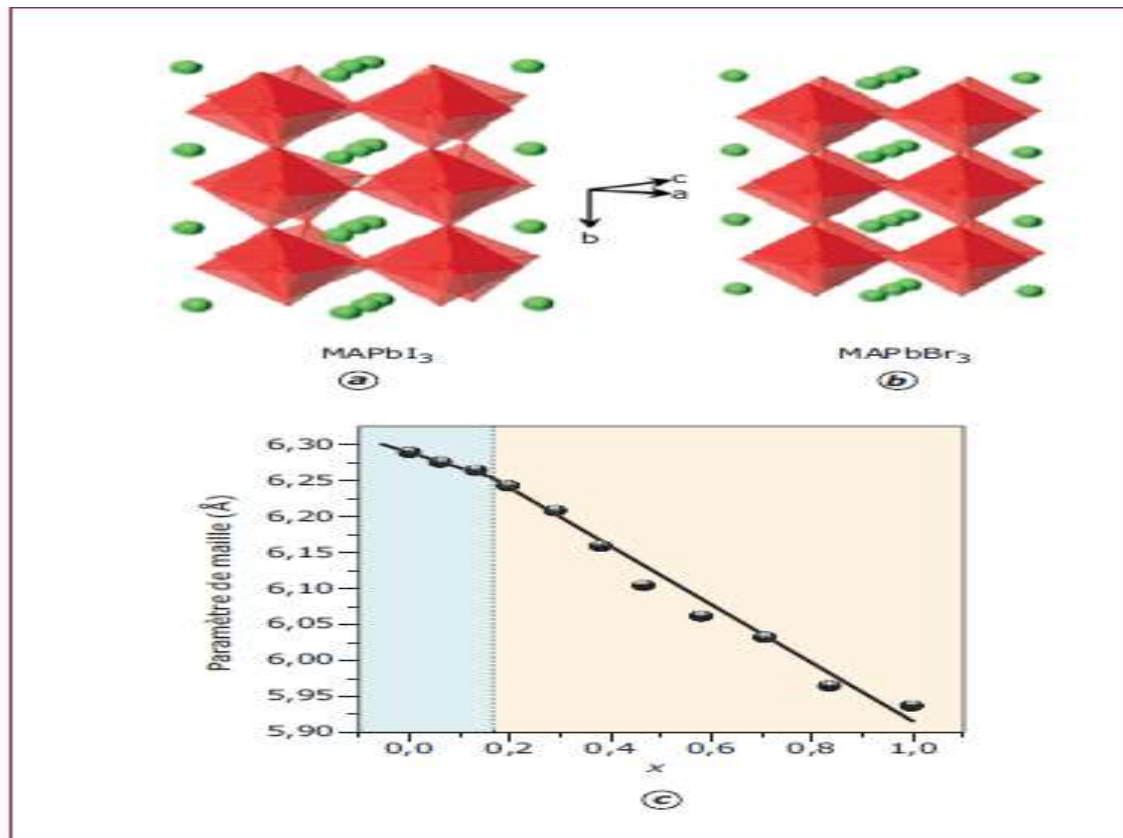


Figure II. 2. (a) Structure distordue tétragonale de $MAPbI_3$, (b) structure cubique de $MAPbBr_3$, (c) variation à température ambiante du paramètre de maille avec la composition des pérovskites hybrides $MAPb(I_{1-x}Br_x)_3$ [11]

II.3 Cellules solaires à base de pérovskites hybrides :

II.3.1 Cellules solaires excitoniques :

Dans ces cellules, la génération des électrons et des trous (lacunes d'électron) sous l'effet d'une irradiation de photons d'énergie suffisante (effet photoélectrique) se produit dans la couche de l'absorbeur. Ces charges doivent être séparées et être collectées. Sur un substrat isolant, celles-ci vont se recombiner, générant des photons d'énergie inférieure à l'énergie des photons incidents (photoluminescence) et de la chaleur (recombinaison non radiative). La séparation de charge est opérée grâce aux contacts sélectifs formés par deux autres phases adjacentes dont les niveaux énergétiques sont compatibles avec ceux de l'absorbeur. L'absorbeur est donc pris en sandwich entre deux autres phases (figure II.3). Pour récupérer les électrons, un matériau possédant une bande d'énergie inférieure à la bande de conduction de l'absorbeur est utilisé (les électrons se déplaçant d'un niveau d'énergie supérieur vers un niveau d'énergie inférieur). Les électrons se déplaceront ensuite par diffusion jusqu'au contact électrique avant (CAv dans la figure II.3). Ce matériau est appelé « transporteur d'électrons » (MTE dans la figure II.3). D'autre part, les trous sont collectés et transportés par un matériau possédant une bande de valence

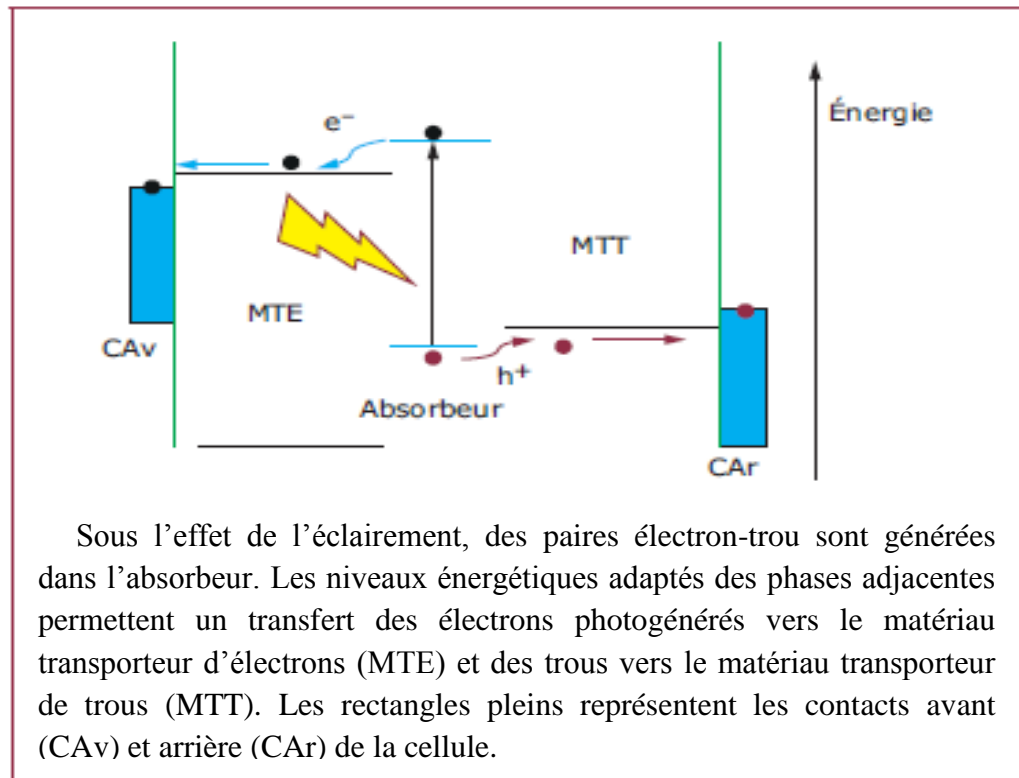


Figure II.3. Principe de fonctionnement des cellules solaires excitoniques

d'énergie supérieure à celle de l'absorbeur. Ce matériau est appelé « matériau transporteur de trous » (MTT). Les trous se déplacent des niveaux d'énergie inférieurs vers des niveaux supérieurs. Ces charges positives se déplaceront ensuite dans cette phase jusqu'au contact arrière (noté CAr dans la figure II.3) où elles seront collectées. La tension maximale que peut générer la cellule est la différence entre le travail de sortie du contact arrière et celui du contact avant. On note donc que dans ces cellules « excitoniques », contrairement au cas des cellules à jonction p-n, le transport et la séparation de charge ne sont pas assurés principalement par la présence d'un champ électrique. De plus, elles nécessitent des MTE et des MTT de bonne conductivité électrique.

II.3.2 Intégration des PH dans des cellules de type Grätzel :

Même si les matériaux PH et leurs propriétés sont connus depuis plusieurs décennies, leur utilisation dans des cellules solaires PV comme absorbeur de lumière est très récente. La première tentative prometteuse a été publiée 2009. Kojima et al. [14] ont étudié l'utilisation des pérovskites $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ et $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ (de largeur de bande interdite plus élevée à 2,3 eV), en remplacement du colorant comme sensibilisateur dans une cellule solaire de type Grätzel (voir l'article [RE 25] des Techniques de l'Ingénieur). Dans leurs cellules, le MTE était une couche mésoporeuse de TiO_2 et un électrolyte liquide comprenant un couple redox et des additifs a été utilisé comme MTT. Le rendement de conversion maximum atteint était de 3,1 % pour le MAPbBr_3 et de 3,8 % pour le MAPbI_3 [14]. Les auteurs avaient noté une tension très élevée de 0,96 V pour la pérovskite bromure de largeur de bande interdite plus élevée. Cependant la cellule n'était pas stable, cela à cause de la dissolution rapide de la pérovskite dans l'électrolyte. En 2011, l'équipe de Nam-Gyu Park en Corée du Sud a utilisé des nanoparticules de MAPbI_3 d'une taille de 2 à 3 nm pour sensibiliser une surface nanocristalline de TiO_2 d'une épaisseur de 3,6 μm [15]. En changeant la composition de l'électrolyte et en améliorant la technique de dépôt de la pérovskite, ces auteurs avaient réussi à augmenter le rendement à 6,5 % sans résoudre le problème de la stabilité des cellules dans le temps [15]. Ces auteurs avaient noté que le courant de court-circuit était amélioré par rapport à l'utilisation de N719 comme sensibilisateur (le Di-tetrabutylammonium cis-bis(isothiocyanato)bis(2,2'-bipyridyl)- 4,4'-dicarboxylato)ruthenium(II), un colorant organométallique). Cela a été attribué à la plus forte absorbance des couches de TiO_2 sensibilisées par la PH en comparaison avec celles sensibilisées par le colorant. Le rendement et la stabilité de ces cellules ont ensuite été

significativement améliorés par le passage à des cellules solaires solides utilisant des MTT solides et non plus un électrolyte liquide contenant un couple oxydo-réducteur.

II.3.3 Cellules solides à pérovskite hybride :

Différentes avancées majeures sur les cellules solaires à base de pérovskites d'halogénures ont été publiées en 2012. Kanatzidis et al. ont utilisé le CsSnI_3 (possédant une largeur de bande interdite de 1,3 eV) et le $\text{CsSnI}_{2,95}\text{F}_{0,05}$ dans des cellules solaires solides [16]. Ces composés de type p ont été employés pour jouer à la fois le rôle d'absorbeur de lumière et de MTT. Ces auteurs ont montré qu'une bonne séparation de charges nécessitait la présence d'une monocouche du colorant N719 à l'interface entre le TiO_2 et la pérovskite. Les meilleures cellules ont atteint un rendement de conversion de 10,2 % [16].

D'autres auteurs ont utilisé des PH comme sensibilisateur combinées avec du spiro-OMeTAD (2,2',7,7'-Tetrakis-(N,N-di-4-methoxyphenylamino)-9,9'-spirobifluorene). N.G Park et coll. ont étudié les cellules $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{Spiro-OMeTAD}/\text{Ag}$ [17]. Une solution de précurseur de PH a été utilisée pour imprégner une couche mésoporeuse nanoparticulaire de TiO_2 . Ils ont ainsi obtenu des cellules de J_{cc} dépassant $17 \text{ mA} \cdot \text{cm}^{-2}$, de $V_{\text{co}} = 0,89 \text{ V}$ et de facteur de forme égal à 0,62. Le rendement maximum de conversion était de 9,7 %. Ils ont montré que la séparation de charge était produite par l'injection de trous de la PH vers le spiro-OMeTAD suivi par le transfert d'électron de la PH vers le TiO_2 (figure II.4). Pour expliquer ces bonnes valeurs de photocourant et de tension, ces auteurs ont tracé le diagramme d'énergie du système et ont montré l'existence d'une force électromotrice suffisante pour la séparation des charges, résultant de la position des bandes d'énergie entre les trois composés utilisés (figure II.4).

Simultanément, le groupe de Henry Snaith à Oxford (Grande-Bretagne) a étudié l'utilisation de la pérovskite $\text{MAPbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ dans le même type de cellule [18]. Il s'est intéressé à deux types de couches oxydes : une couche dense barrière fine de TiO_2 sur laquelle a été déposée une couche mésoporeuse de nanoparticules de TiO_2 et le même type de couche barrière mais surmontée par une couche de nanoparticules de Al_2O_3 , un matériau isolant de bande interdite de 7 à 9 eV. Cette couche ne peut donc pas recevoir les électrons photogénérés et les transporter. Or, le rendement le plus élevé de conversion photovoltaïque (10,9 %) a été obtenu en utilisant le matériau poreux isolant. La V_{co} était très élevée à 1,1 eV pour un absorbeur semi-conducteur de bande interdite de 1,55 eV, ce qui correspond à une faible perte d'énergie traduisant la nécessité d'une relativement faible

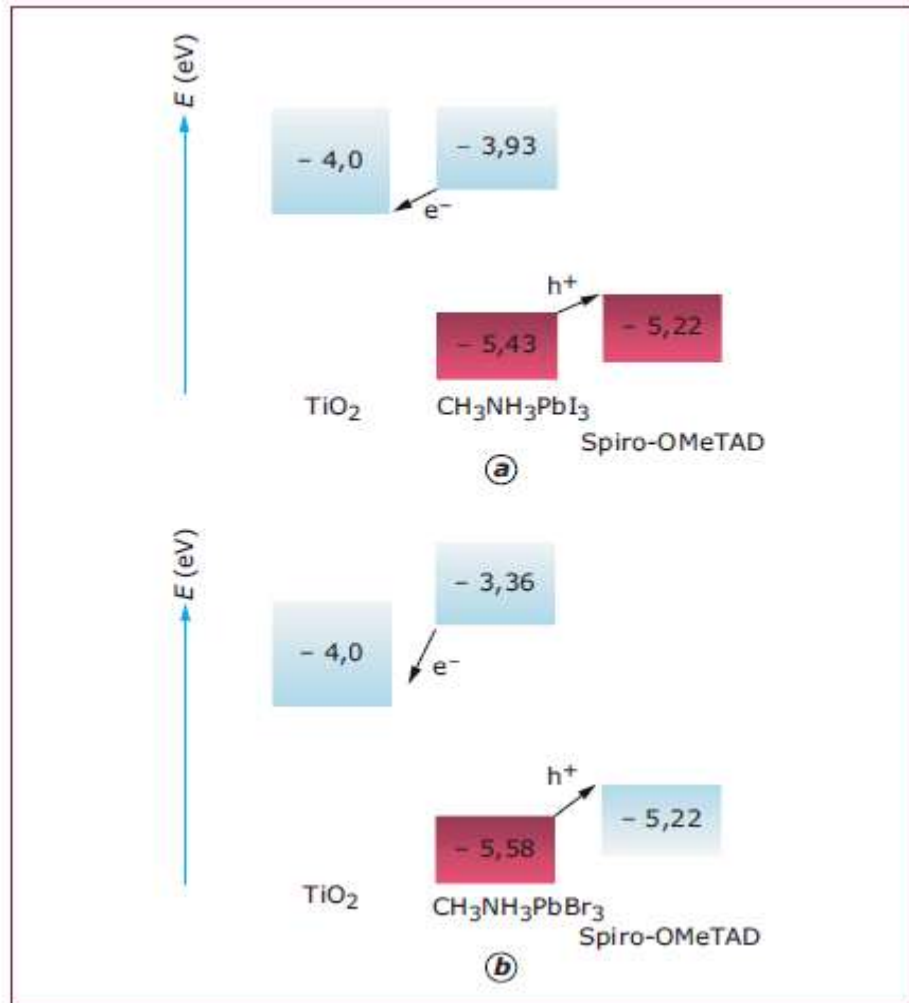
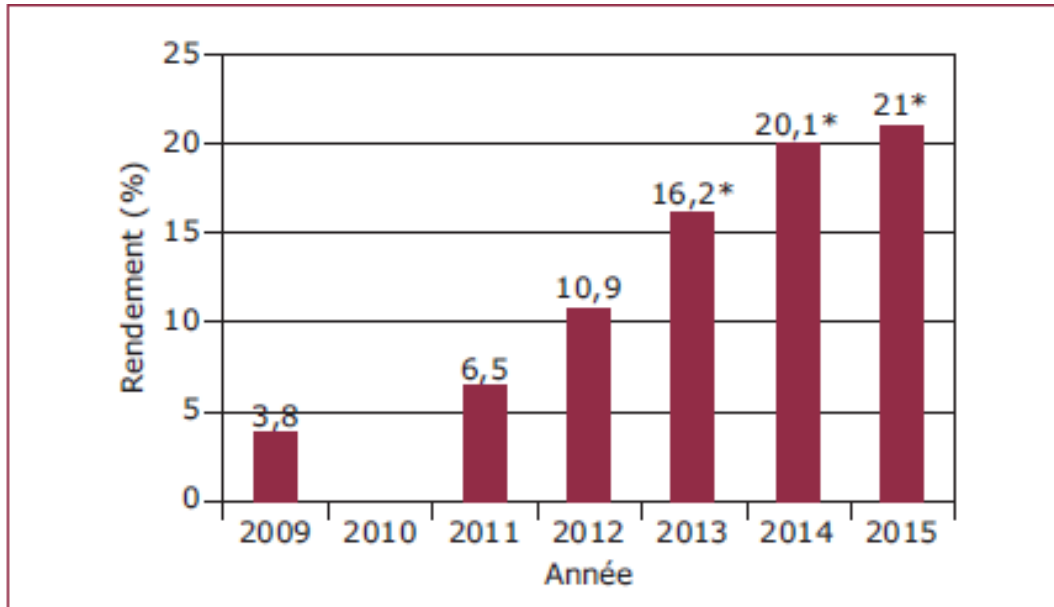


Figure II.4. (a) Diagramme d'énergie des cellules $\text{TiO}_2/\text{MAPbI}_3/\text{Spiro-OMeTAD}$ et (b) $\text{TiO}_2/\text{MAPbBr}_3/\text{Spiro-OMeTAD}$

force électromotrice pour la séparation des charges aux interfaces. Les bonnes performances des cellules à base de Al_2O_3 traduisent la forte mobilité des charges dans la PH, ce qui permet leur collecte au niveau de la couche barrière, la forte V_{co} résultant d'une accumulation de charges dans la couche de pérovskite.

Depuis ces premiers résultats et en seulement trois ans, les performances des cellules PSC ont été très largement améliorées, comme le montre la figure II.5. Les cellules record homologuées entre 2013 et 2014 ont été obtenues par le groupe de Sang Il Seok du KRICT (Korea Research Institute of Chemical Technology) en Corée du Sud [19]. Le rendement maximum obtenu fin 2014 était de 20,1 % avec une V_{co} de 1,059 V, un J_{cc} de 24,65 $\text{mA} \cdot \text{cm}^{-2}$ et un facteur de forme de 0,770 [21]. En 2015, le NREL (National Renewable Energy Laboratory) a publié un rendement record certifié à 21,02 % pour une cellule préparée à l'École polytechnique fédérale de Lausanne [19].



*Figure II.5. Évolution du rendement record des cellules PSC ;
les valeurs suivies d'un astérisque ont été mesurées
dans des laboratoires homologués*

II.4 Conclusion :

Nous avons vu que les pérovskites hybrides possèdent des propriétés optiques et électroniques remarquables. Ces matériaux sont d'une grande modularité et la largeur de leur bande interdite peut être ajustée en jouant sur leur composition. Les charges photogénérées dans ces matériaux sont très mobiles. Elles peuvent être collectées par injection dans des phases adjacentes qui constituent des contacts sélectifs. Ces dernières doivent posséder des niveaux énergétiques adaptés, permettant la séparation de charges et limitant les phénomènes parasites de recombinaison. La grande mobilité des charges permet aussi l'utilisation de couches relativement épaisses, de quelques centaines de nanomètres, qui présentent une bonne absorption de la lumière solaire.

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1 Introduction :

Ces dernières années, en raison des coûts élevés de l'expérimentation et la fabrication des cellules solaires, les chercheurs se sont orientés vers la simulation numérique. L'utilisation des différents logiciels de simulation a permis de déterminer l'influence des paramètres physiques et géométriques des échantillons en couches minces avant de les fabriquer.

Parmi les logiciels de simulation des cellules solaires, très sophistiqué, on peut citer : SILVACO-ATLAS et SCAPS. Ces logiciels permettent de simuler les cellules solaires en couches minces et de déterminer les caractéristiques électriques et optiques tel que la caractéristique courant-tension (I - V). Ils permettent aussi de calculer les paramètres photovoltaïques tels que : la densité du courant de court-circuit (I_{sc}), la tension en circuit-ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF), la puissance maximale (P_{max}), le rendement de conversion photovoltaïque (η) et la réponse spectrale en fonction de la longueur d'onde du spectre.

III.2 Principe de la simulation numérique :

III.2.1 Paramètres photovoltaïques :

Il existe de nombreux paramètres qui permettent de caractériser une cellule solaire. Ces paramètres sont appelés paramètres photovoltaïques et sont déduits de la caractéristique (I - V).

La figure III-1 représente une caractéristique courant-tension $I(V)$ dans le noir et sous illumination typique d'une cellule photovoltaïque à jonction PN. Le tracé de cette courbe permet d'accéder à bon nombre de paramètres physiques caractéristiques du composant. Les premiers paramètres qui apparaissent sur la caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque sont le courant de court-circuit (I_{sc}), la tension à circuit ouvert (V_{oc}) et le facteur de forme (FF) du composant.

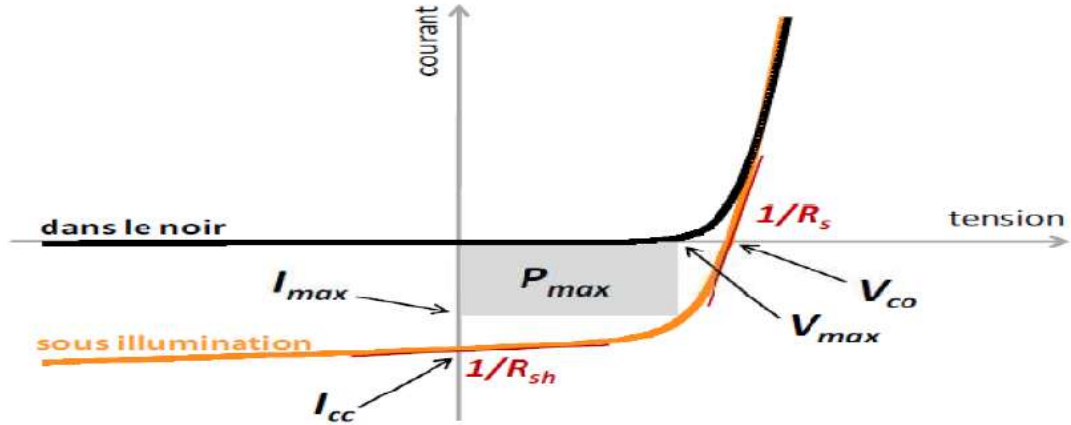


Figure III. 1. Caractéristique courant-tension et paramètres physiques d'une cellule photovoltaïque.

III.2.1.1 Courant de court-circuit (I_{sc}) :

Il s'agit du courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule est nul. C'est le plus grand courant que la cellule peut fournir. Celui-ci est fonction de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule et de la mobilité des porteurs. Ce courant est linéairement dépendant de l'intensité lumineuse reçue. [20]

III.2.1.2 Tension de circuit ouvert (V_{oc}) :

Comme son nom l'indique, c'est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge ou lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie. Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction PN, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts de la couche active-électrode. Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule .

$$V_{oc} = \frac{KT_c}{q} \text{Log}\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \quad (\text{III. 1})$$

Avec :

$\frac{KT_c}{q}$: représentant le potentiel thermodynamique

T_c : est la température absolue

q : la constante de charge d'électron, $1.602 \cdot 10^{-23} \text{ C}$

K : la constante de Boltzmann, $1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J/K}$

I_{ph} : le courant photonique

I_s : le courant de saturation

Deux régimes peuvent être observés suivant le degré d'éclairement.

❖ Régime des faibles flux lumineux : dans ce cas, $I_{ph} \ll I_s$, ce qui permet d'écrire :

$$\text{Log} \left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right) = \frac{I_{ph}}{I_s} \quad (\text{III. 2})$$

D'où :

$$V_{oc} \approx \frac{K.Tc}{q} \cdot \left(\frac{I_{ph}}{I_s} \right) \quad (\text{III. 3})$$

C'est la zone de comportement linéaire de la cellule. La formule précédente peut s'écrire aussi

$$V_{oc} = R_o \cdot I_{ph} \quad (\text{III. 4})$$

en posant :

$$R_o = \frac{K.Tc}{q.I_s} \quad (\text{III. 5})$$

R_o : est la résistance interne de la diode en polarisation externe nulle (circuit ouvert) et sous faible flux lumineux.

❖ Régime des flux lumineux suffisamment intenses pour que $I_{ph} \gg I_s$, soit :

$$\frac{I_{ph}}{I_s} \gg 1 \quad (\text{III. 6})$$

D'où :

$$V_{oc} = \frac{K.Tc}{q} \cdot \left(\frac{I_{ph}}{I_s} \right) \quad (\text{III. 7})$$

C'est le domaine du comportement logarithmique.

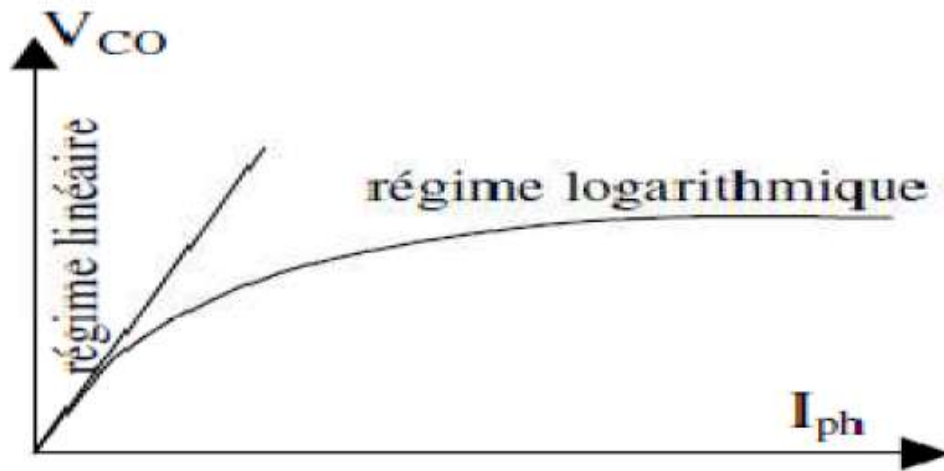


Figure III. 2. différents régimes selon la puissance d'éclairement.

Il est important de remarquer que cette tension augmente avec le log de I_{ph} , donc avec le log de l'illumination. En revanche, elle décroît avec la température, malgré le terme $\frac{K.Tc}{q}$.

En effet, le courant de saturation, I_s dépend de la surface de la diode (donc de la cellule) et des caractéristiques de la jonction : il varie exponentiellement avec la température et cette dépendance en température compense largement le terme $\frac{K.Tc}{q}$.

Donc la tension de circuit ouvert V_{oc} baisse avec la température, ce qui est important dans le dimensionnement des systèmes. [21].

III.2.1.3 Facteur de forme FF :

Un paramètre important est souvent utilisé à partir de la caractéristique $I(V)$ pour qualifier la qualité d'une cellule ou d'un générateur PV : c'est le facteur de remplissage ou fill factor (FF). Ce coefficient représente le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer la cellule notée P_{max} et la puissance formée par le rectangle $I_{sc} * V_{oc}$. Plus la valeur de ce facteur sera grande, plus la puissance exploitable le sera également. Les meilleures cellules auront donc fait l'objet de compromis technologiques pour atteindre le plus possible les caractéristiques idéales. Il est défini par la relation suivante :

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

III.2.1.4 Le rendement η :

Le rendement, η des cellules PV désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente, P_{in} .

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{FF \cdot I_{sc} \cdot V_{oc}}{P_{in}} \quad (III. 9)$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert. Le rendement de conversion est un paramètre essentiel. En effet, la seule connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule.

III.3 Simulation par SCAPS :

III.3.1 Structure et paramètres de la cellule étudiée :

III.3.1.1 Présentation de la cellule étudiée :

Notre travail consiste à simuler une cellule solaire à base de $CH_3NH_3PbI_3$. En raison de ses caractéristiques remarquables telles que l'intervalle de bande interdite (Band gap) idéal, Large spectre d'absorption, Le mécanisme de transmission est bon, Facilité de fabrication sur substrat flexible, ajustement de l'écartement et grande longueur d'étalement et à simuler ces paramètres électriques, optiques et géométriques afin de concevoir une cellule ayant le rendement électrique optimal.

Dans notre étude, nous utilisons une cellule solaire composée des hétérojonctions suivantes: (PEDOT: PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ / PCBM/ SnO_2 : FTO).

Une structure typique de cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ consiste d'une couche absorbante et en haut de p-type (PEDOT: PSS) et n- type (PCBM) disposé dans la partie inférieure. Comme le montre la Figure III-3

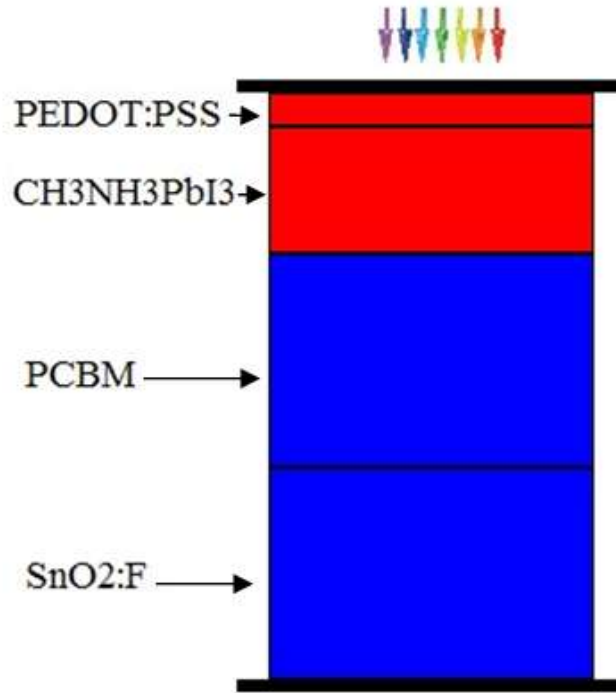


Figure III. 3.schéma simplifié de la cellule solaire utilisée

III.3.1.2 Les paramètres du dispositif étudié :

❖ Propriétés des différentes couches :

Couche Propriété	PEDOT/Pss	$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$	PCBM	$\text{SnO}_2\text{:F}$
Épaisseur (μm)	0.080	0.8	0.5	0.5
Bande interdite (eV)	2.2	1.55	2.100	3.5
Affinité électronique (eV)	2.9	3.75	3.9	4.0
Permittivité diélectrique	3.000	6.500	3.900	9.0
CB densité effective d'états (cm^{-3})	2.200E+15	2.200E+15	2.200E+19	2.200E+17
VB densité d'états effective (cm^{-3})	1.800E+18	2.200E+17	2.200E+19	2.200E+16
Vitesse thermique des électrons (cm / S)	1.00E+7	1.00E+7	1.00E+7	1.00E+7

Trou vitesse thermique (cm/ S)	1.00E+7	1.00E+7	1.00E+7	1.00E+7
mobilité (cm ² / V.S.)	0.01	2.0	0.001	2.000E+1
Trou de la mobilité (cm ² / V.S.)	0.0002	2.0	0.002	1.000E+1
densité de donneur uniforme peu profonde N _d (cm ⁻³)	1.000E+13	1.000E+13	1.000E+16	1.000E+16
densité d'accepteur uniforme peu profonde N _a (cm ⁻³)	1.000E+16	1.000E+16	1.000E+13	1.000E+13
Defect Nt(cm ⁻³)	1.000E+15	1.000E+15	1.000E+15	1.000E+15

Tableau III. 1. Propriétés des différentes couches (PEDOT: PSS/ CH₃NH₃PbI₃/ PCBM/ SnO₂: FTO)[22]

III.3.2 Résultats et discussion :

Cellule de base

Les épaisseurs et les paramètres utilisées des différentes couches de la cellule de base étudiée sont regroupées dans les tableaux 1 et 2.

	Les couches	Epaisseur (μm)
1	PEDOT/Pss	0.080
2	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	0.8
3	PCBM	0.5

Tableau III. 2. L'épaisseur de chaque couche de la cellule de base étudiée.

III.3.3 Effet de l'épaisseur de couche PEDOT/Pss, CH₃NH₃PbI₃ et PCBM sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire:

Les paramètres de la structure tirés des différentes caractéristiques représentées précédemment, sont récapitulés dans le tableau III-3.

Lorsque l'épaisseur du matériau (PEDOT/Pss) est modifiée de 0.05 à 0.08, nous choisissons les meilleures propriétés et installer leur propre épaisseur. une fois que l'épaisseur de la substance (PEDOT/Pss) est ajoutée aux propriétés énumérées dans les tableaux III 1 et 2. Nous changeons l'épaisseur du matériau (CH₃NH₃PbI₃) de 0.3 à 0.9, nous choisissons les meilleures propriétés et installer leur propre épaisseur. une fois l'épaisseur de la substance (PEDOT/Pss) et (CH₃NH₃PbI₃) ajoutée aux propriétés énumérées dans les tableaux 1 et 2. Nous changeons l'épaisseur du matériau (PCBM) de 0.3 à 0.6, et choisissons les meilleures propriétés et installer leur propre épaisseur.

	Épaisseur(μm)	V _{oc} (volt)	J _{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	η(%)
PEDOT/ Pss	0.05	1.37	14.81	32.43	6.62
	0.06	1.37	14.67	31.84	6.41

	0.07	1.36	14.50	31.28	6.21
	0.08	1.36	14.30	30.76	6.01
CH ₃ NH ₃ PbI ₃	0.3	1.40	17.32	30.26	7.36
	0.5	1.39	17.35	29.68	7.13
	0.7	1.38	16.34	30.63	6.81
	0.9	1.37	14.81	32.43	6.39
PCBM	0.3	1.40	18.97	40.73	10.85
	0.4	1.40	18.26	34.63	8.88
	0.5	1.40	17.32	30.26	7.36
	0.6	1.40	16.05	27.66	6.23

Tableau III. 3.Effet de l'épaisseur des couches PEDOT/Pss, CH₃NH₃PbI₃ et PCBM sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.

Nous avons observé à la Tableau III.3, La meilleure épaisseur pour la couche PEDOT/Pss est de 0,05 μm , nous soulignons également que les paramètres photovoltaïques diminuent avec l'épaisseur croissante . et la raison en est la saturation du matériau (PEDOT/Pss), alors on va choisir 0.05 μm comme valeur optimale.

Nous avons observé que la meilleure épaisseur de la couche CH₃NH₃PbI₃ est de 0,3 μm et nous soulignons également que les paramètres photovoltaïques diminuent avec l'épaisseur croissante. et la raison en est lors de l'augmentation de l'épaisseur de la couche (CH₃NH₃PbI₃) la résistance du matériau augmente, et cela conduit à l'inhibition du mouvement des électrons. alors on va choisir 0.3 μm comme valeur optimale.

Nous avons également remarqué que la meilleure épaisseur la couche de PCBM est de 0,3 μm , et que les paramètres photovoltaïques diminuent avec l'épaisseur accrue. La raison en est que plus l'épaisseur de la couche est élevée (PCBM), La distance entre les deux couches augmente, ce qui rend difficile le déplacement des électrons entre les deux couches. Ensuite, nous choisirons 0,3 μm comme valeur idéale. et en fin: nous obtenons les propriétés suivantes: $V_{oc} = 1.40$, $I_{sc} = 18.97$, $FF = 40.73$, $\eta = 10.85$.

III.3.3.1 Effet de densités de donneur et accepteur (N_d, N_a) des couches PEDOT/Pss, CH₃NH₃PbI₃ et PCBM sur les paramètres PV de la cellule solaire:

❖ Effet de densités de donneur et accepteur (N_d, N_a) de couche PEDOT/Pss sur les paramètres PV de la cellule solaire:

Lorsque densités de donneur et accepteur (N_d, N_a) , du la couche (PEDOT/Pss) est modifiée de **0.0E+0 à 1.0E+14**, et de **1.0E+15 à 5.0E+16**, nous choisissons les meilleures les paramètres PV, et installer le Valeurs densités de donneur et accepteur (N_d, N_a).

✚ Effet de densité de donneur N_d :

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_d \text{ cm}^{-3}$ pour la couche d'absorption (PEDOT/Pss) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit I_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme FF .
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

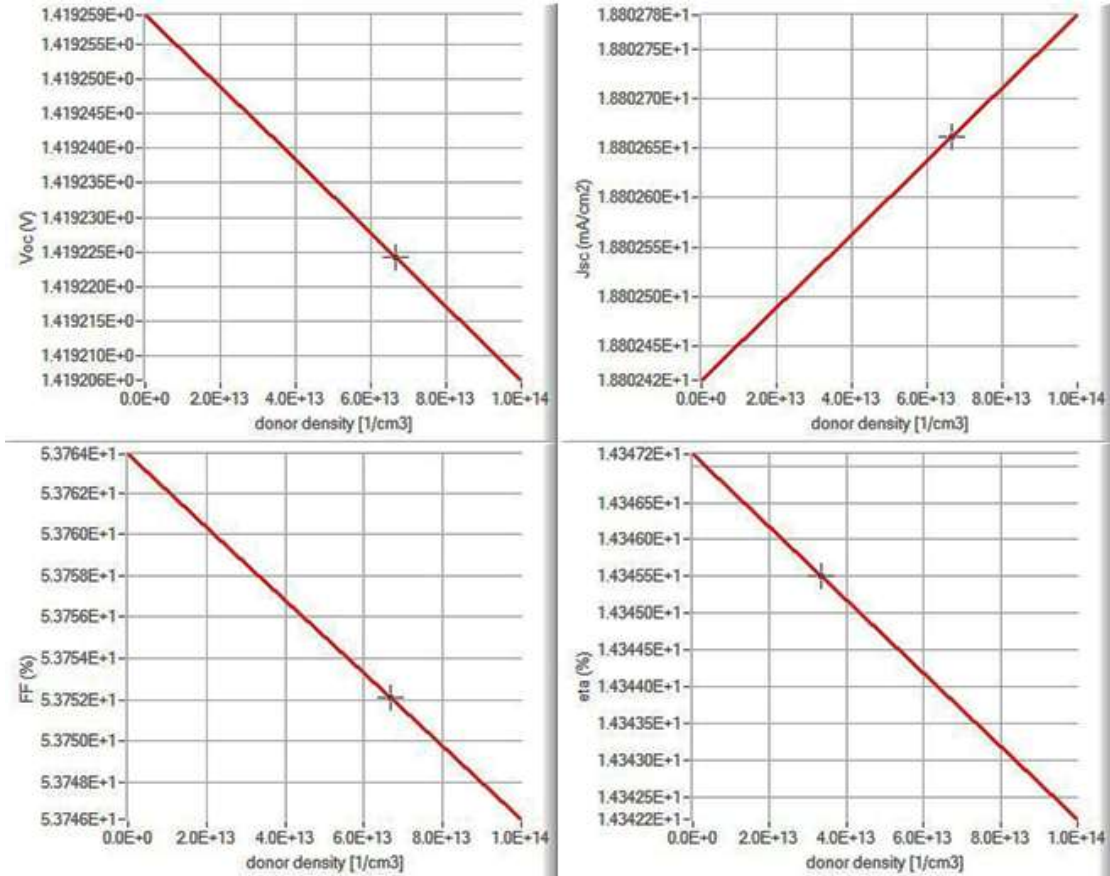


Figure III. 4. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec N_d des couches PEDOT/Pss .

Nous avons observé à la figure III-4. La meilleure densité de donneur de la couche PEDOT/Pss est de $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$. Nous notons également que la tension des circuits ouverts diminue à mesure que le courant électrique augmente, le facteur a été obtenu à 53.76% .

Nous avons obtenu un rendement maximal de 14.35% avec une N_d de $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$. La variation de la limite d'élasticité lorsque N_d est comprise entre $0.0\text{E}+0$ et $1.0\text{E}+14 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

✚ Effet de densité de accepteur N_a :

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_a \text{ cm}^{-3}$ pour la couche d'absorption (PEDOT/Pss) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit I_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme FF .
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

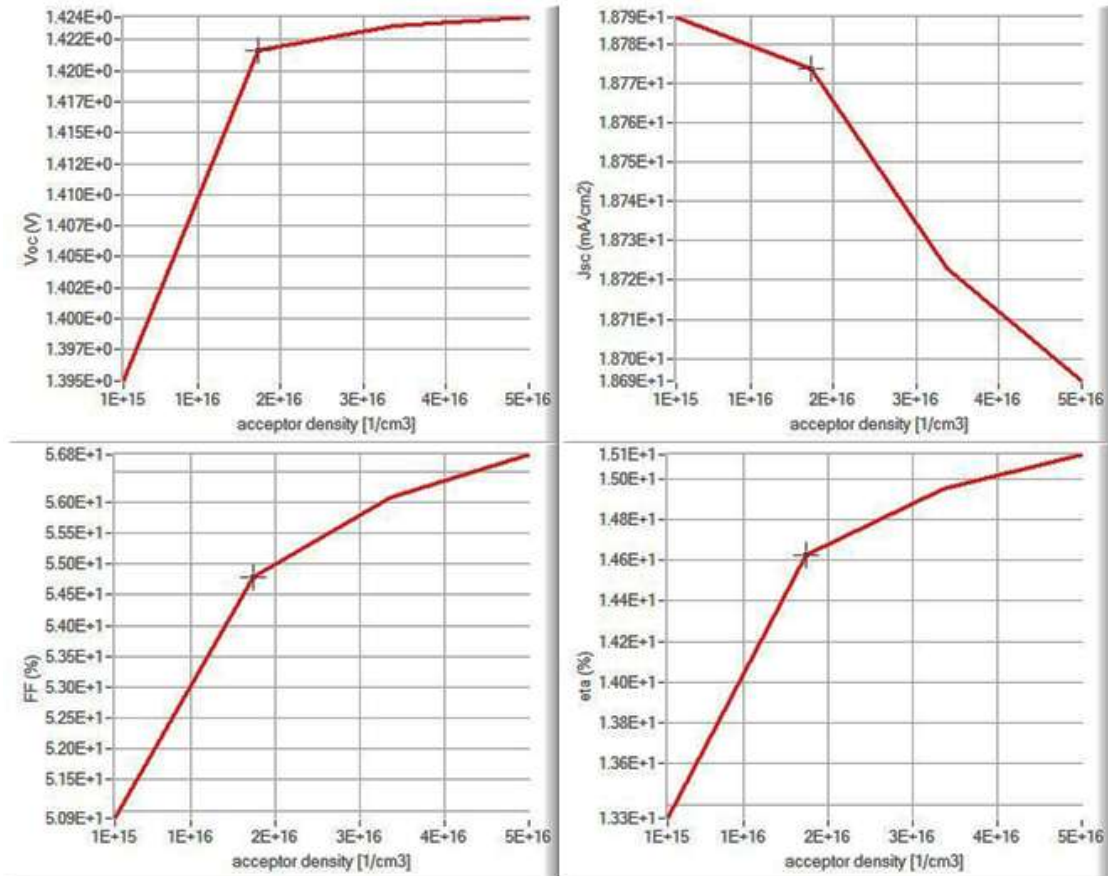


Figure III. 5. Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec N_a des couches PEDOT/Pss.

Nous avons observé à la figure III-5. La meilleure N_a de la couche PEDOT / Pss est de $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$. nous notons également que la tension des circuits ouverts augmente à mesure que le courant électrique diminue, le facteur a été obtenu à 53.76% .montre qu'il y a une augmentation du rendement avec l'augmentation de valeur N_a de la couche PEDOT/Pss.

Nous avons obtenu un rendement maximal de 15.12% avec une valeur N_a de $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$. la variation de la limite d'élasticité lorsque la valeur N_a est comprise entre $1.0E+15$

et $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

❖ **Effet de densités de donneur et accepteur (N_d , N_a) des couches $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur les paramètres PV de la cellule solaire:**

Lorsque densités de donneur et accepteur (N_d , N_a), de la couche ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) est modifiée de $0.0E+0$ à $1.0E+14$, et de $1.0E+15$ à $5.0E+16$, nous choisissons les meilleures les paramètres PV, et installer le Valeurs densités de donneur et accepteur (N_d , N_a).

✚ **Effet de densité de donneur N_d :**

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_d \text{ cm}^{-3}$ pour la couche d'absorption ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit J_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme FF .
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

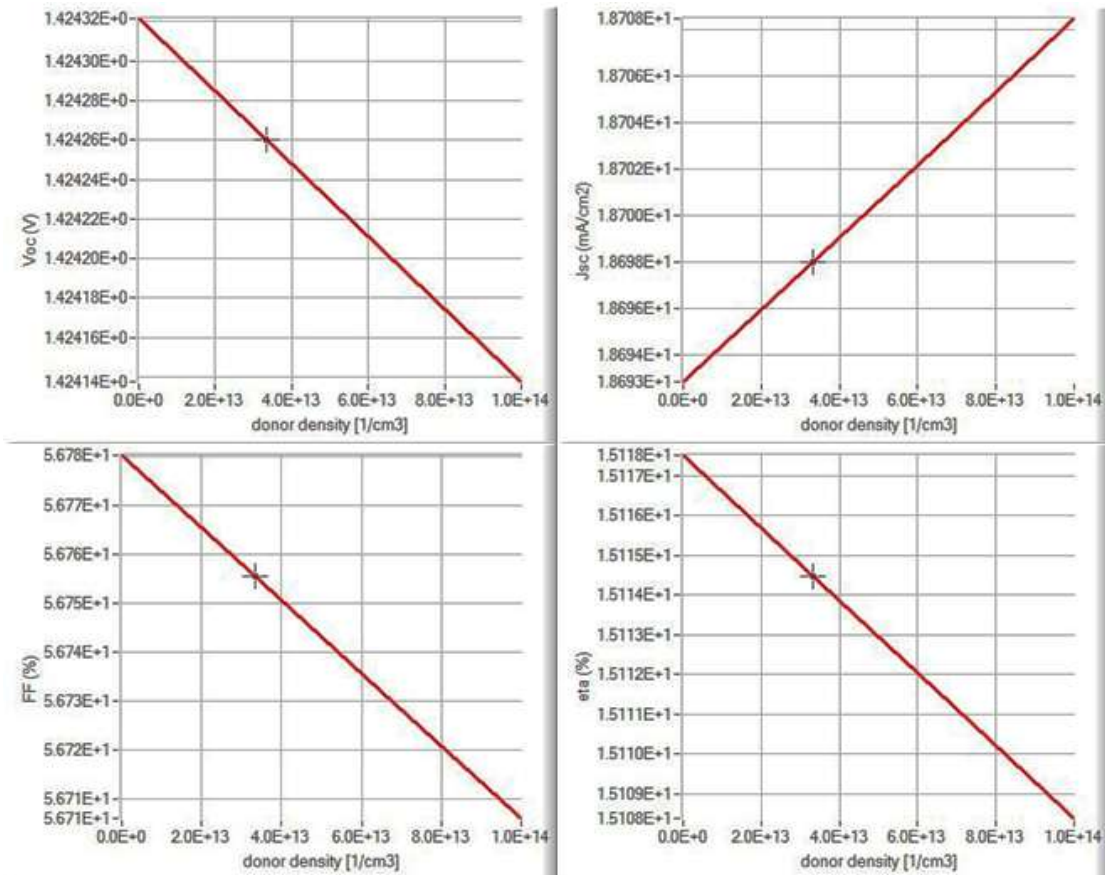


Figure III. 6. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) Avec N_d des couches $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Nous avons observé à la figure III-6. La meilleure N_d de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ est de $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$. nous notons également que la tension des circuits ouverts diminue à mesure que le courant électrique augmente, le facteur a été obtenu à 56.78%. Montre qu'il y a une diminution du rendement avec une augmentation de la valeur N_d de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Nous avons obtenu un rendement maximal de 15.12% avec une valeur N_d de $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$. la variation de la limite d'élasticité lorsque la valeur N_d est comprise entre $0.0\text{E}+0$ et $1.0\text{E}+14 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $0.0\text{E}+0 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

✚ Effet de densité de accepteur N_a :

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_a(\text{cm}^{-3})$ pour la couche d'absorption ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit I_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme FF .
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

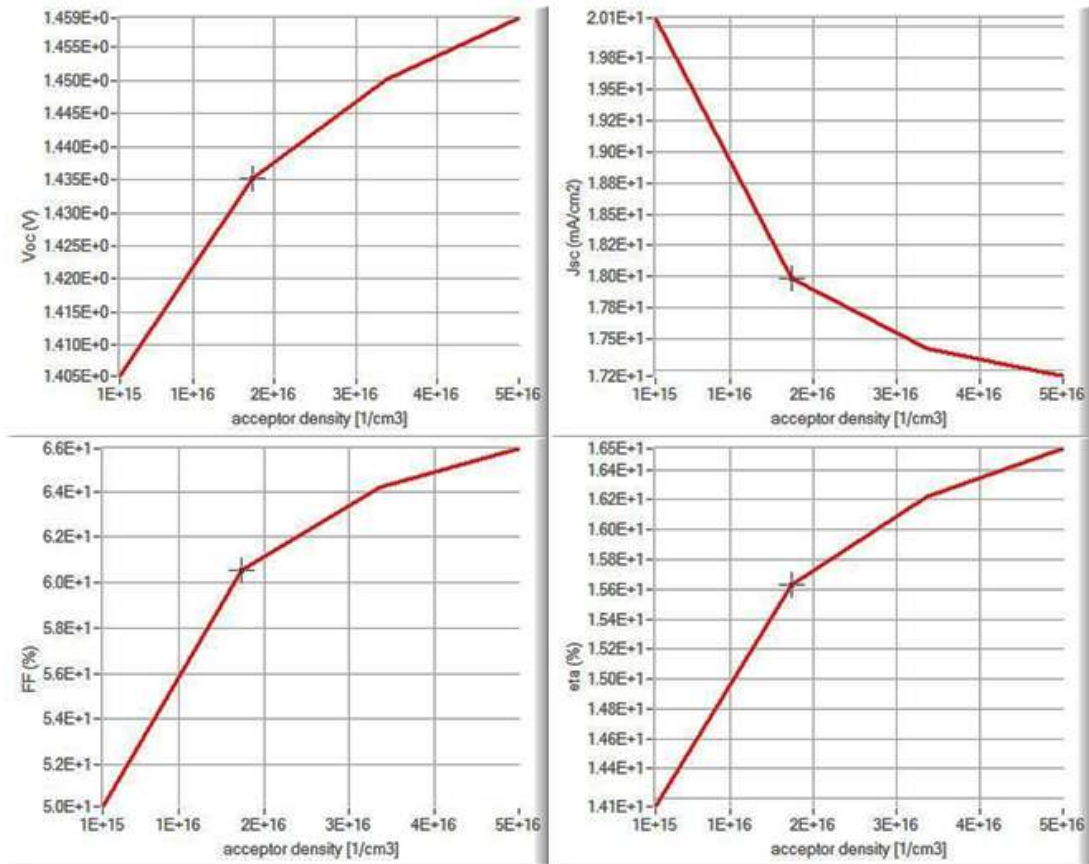


Figure III. 7. Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec N_a des couches $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Nous avons observé à la figure III-7. La meilleure N_a de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ est de $5.0\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$. nous notons également que la tension des circuits ouverts augmente à mesure que le courant électrique diminue, le facteur a été obtenu à 65.89% .montre qu'il y a une augmentation du rendement avec l'augmentation de valeur N_a de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$.

Nous avons obtenu un rendement maximal de 16.54% avec une valeur N_a de $5.0\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$. la variation de la limite d'élasticité lorsque la valeur N_a est comprise entre $1.0\text{E}+15$ et $5.0\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $5.0\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

❖ **Effet de densités de donneur et accepteur (N_d , N_a) des couches PCBMsur les paramètres PV de la cellule solaire:**

Lorsque densités de donneur et accepteur (N_d , N_a) , du la couche (PCBM) est modifiée de **$1.0\text{E}+15$ à $5.0\text{E}+16$** et de **$0.0\text{E}+0$ à $1.0\text{E}+14$** , nous choisissons les meilleures les paramètres PV, et installer le Valeurs densités de donneur et accepteur (N_d , N_a).

✚ **Effet de densité de donneur N_d :**

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_d \text{ cm}^{-3}$ pour la couche d'absorption (PCBM) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit I_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme **FF**.
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

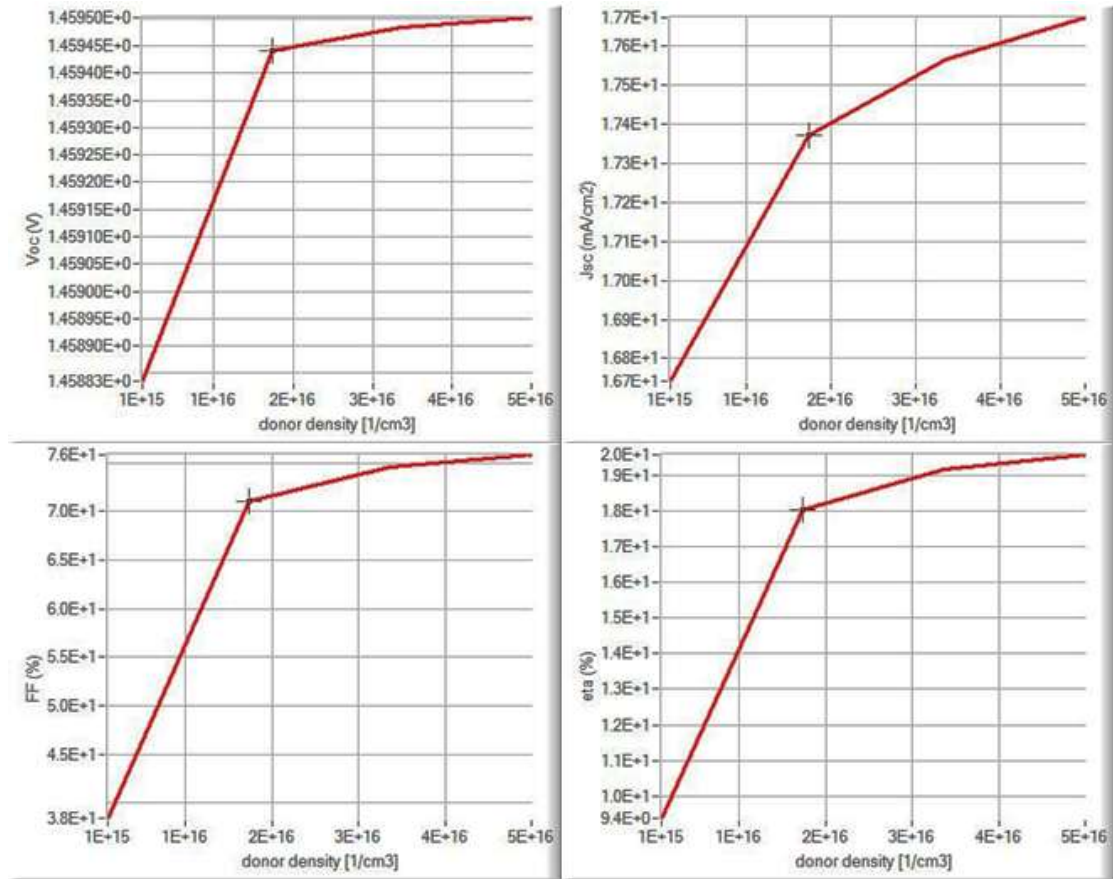


Figure III. 8. Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec N_d des couches PCBM.

Nous avons observé à la figure III-8. La meilleure valeur N_d de la couche PCBM est de $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$. nous notons également que la tension des circuits ouverts augmente à mesure que le courant électrique augmente, le facteur a été obtenu à 75.86%. Montre qu'il y a une augmentation du rendement avec une augmentation de la valeur N_d de la couche PCBM.

Nous avons obtenu un rendement maximal de 19.57% avec une valeur N_d de $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$. la variation de la limite d'élasticité lorsque la valeur N_d est comprise entre $1.0E+15$ et $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $5.0E+16 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

✚ Effet de densité de donneur N_d :

Nous sélectionnons quelques valeurs de $N_d \text{ cm}^{-3}$ pour la couche d'absorption (PCBM) pour tracer :

- ✓ La caractéristique tension de circuit ouvert V_{oc} .
- ✓ La caractéristique densité de courant de court circuit I_{sc} .
- ✓ La caractéristique Facteur de forme FF .
- ✓ Le rendement de conversion la cellule solaire étudiée (η).

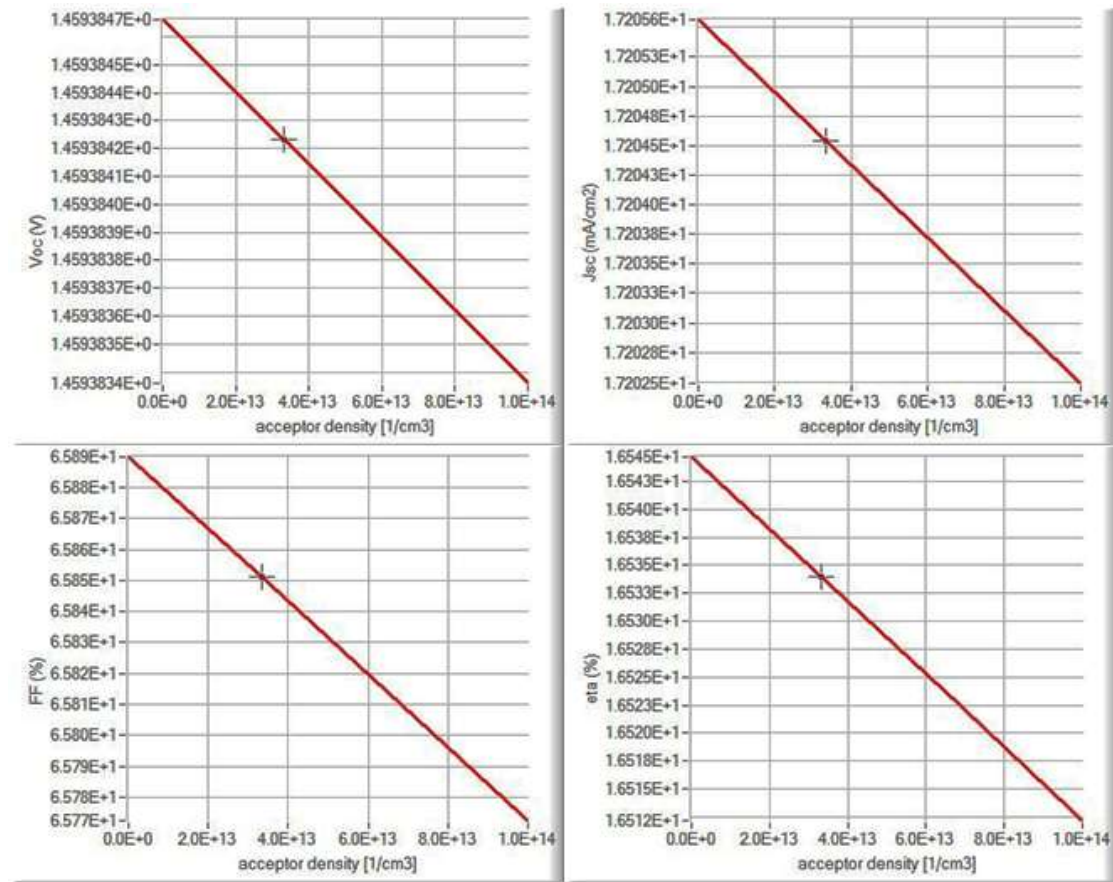


Figure III. 9. Variation du paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et η) avec N_a des couches PCBM.

Nous avons observé à la figure III-9. La meilleure N_a de la couche PCBM est de $0.0E+0 \text{ cm}^{-3}$. nous notons également que la tension des circuits ouverts diminue à mesure que le courant électrique diminue, le facteur a été obtenu à 65.89%. Montre qu'il y a une diminution du rendement avec une augmentation de la valeur N_a de la couche PCBM.

Nous avons obtenu un rendement maximal de 16.54% avec une valeur N_a de $0.0E+0 \text{ cm}^{-3}$. la variation de la limite d'élasticité lorsque la valeur N_a est comprise entre $0.0E+0$ et $1.0E+14 \text{ cm}^{-3}$ n'a pas d'importance. Ensuite, nous choisirons $0.0E+0 \text{ cm}^{-3}$ comme valeur idéale.

III.3.3.2 Courbe courant-tension:

La courbe I-V finale peut être obtenue en maintenant tous les paramètres améliorés du modèle de concepteur.

La forme finale contient une l'épaisseur des couches PEDOT/Pss= $0.05 \text{ } \mu\text{m}$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3=0.3 \text{ } \mu\text{m}$ et PCBM= $0.3 \text{ } \mu\text{m}$ et Dans ce foyer de dopage N_d et N_a en

$0.0\text{E} + 0\text{ cm}^{-3}$ et 5.10^{16}cm^{-3} , l'efficacité maximale de la puissance convertie est obtenue 19.57% et $\text{FF} = 75.86\%$, $I_{\text{sc}} = 17.67\text{mA} / \text{cm}^2$, $V_{\text{oc}} = 1,45(\text{V})$.

La Figure III-10 représente la courbe caractéristique I-V finale du modèle simulé avec tous les paramètres optimisés précédents.

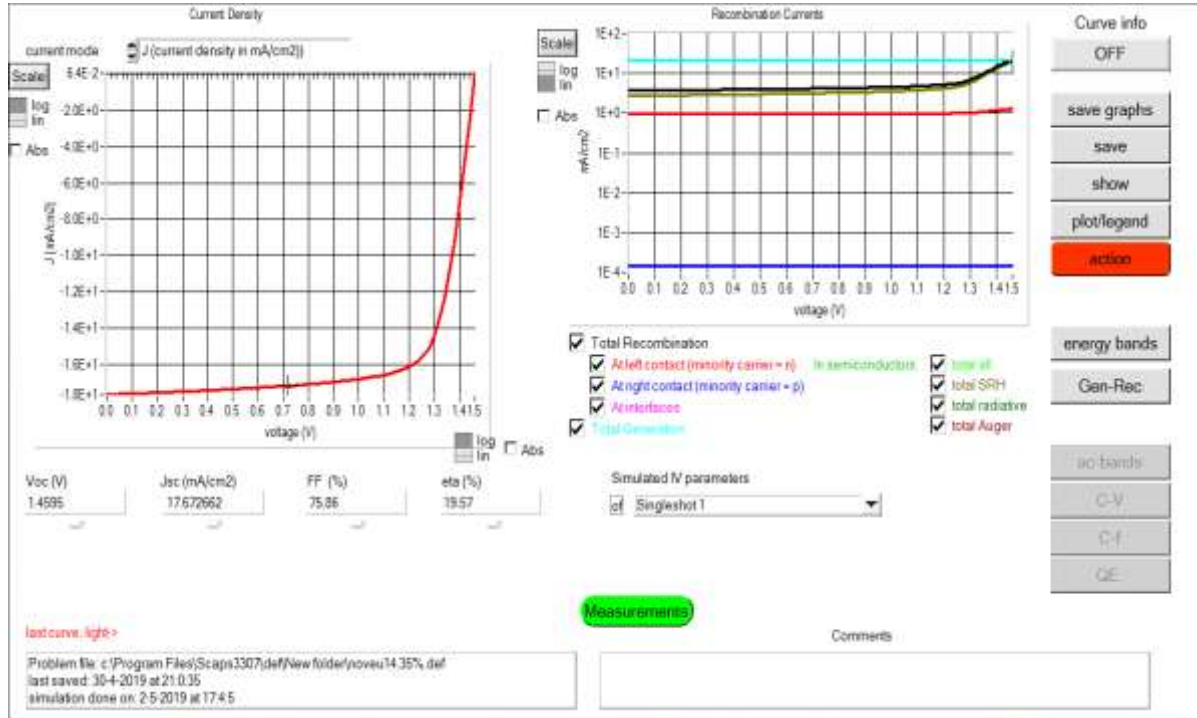


Figure III. 10.Courbe I-V simulée.

III.4 Simulation par programme SILVACO-ATLAS :

III.4.1 Structure et paramètres de la cellule étudiée :

III.4.2 Présentation de la cellule étudiée :

Notre travail consiste à simuler une cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ afin de concevoir une cellule ayant le rendement électrique optimal.

Dans notre étude, nous utilisons une cellule solaire composée des hétérojonctions suivantes: (PEDOT/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /PCBMx/ SnO_2x).

Une structure typique de cellules solaires à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ consiste d'une couche absorbante, et en haut de p-type (PEDOT) et n- type (PCBMx) disposé dans la partie inférieure. Comme le montre la Figure III-11.

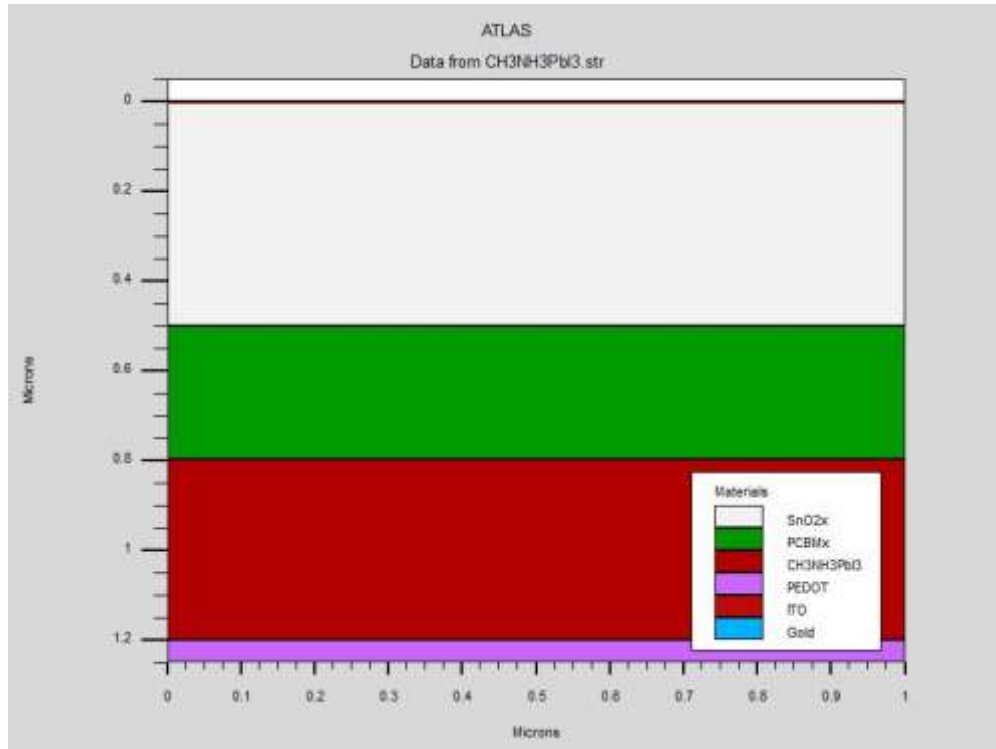


Figure III. 11. schéma simplifié de la cellule solaire utilisée

III.4.2.1 Les paramètres du dispositif étudié :

Propriétés des différentes couches :

Couche	PEDOT	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	PCBMx	SnO ₂ x
Propriété				
Épaisseur (μm)	0.050	0.4	0.30	0.5
Dopage (cm ⁻³)	N _a =5.0E+19	N _a =1.0E+13	N _d =1.0E+13	N _d =5.0E+19
EG300 (eV)	3.00	1.55	3.20	3.2
Affinity (eV)	2.45	3.9	3.9	3.9
Permittivity	3.0	6.50	9.0	9.0
densité effective d'états (NC300) (cm ⁻³)	2.200E+1 8	2.200E+1 8	2.200E+18	2.200E+18
densité d'états effective (NV300) (cm ⁻³)	1.800E+1 9	1.800E+1 9	1.800E+19	1.800E+19

Tableau III. 4. Paramètres des différentes couches de la cellule solaire à base de CH₃NH₃PbI₃ [22]

III.4.3 Résultats et discussions

Les résultats de la simulation de la cellule solaire à base de (CH₃NH₃PbI₃) sont présentés dans le Tableau (III-11).

	V_{oc} (V)	I_{sc} (mA/cm ²)	P_m (W/cm ²)	FF (%)	η (%)
Résultats	0.95	22.2	1.6517E-01	78.132	16.51

Tableau III. 5. Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à base ($CH_3NH_3PbI_3$)

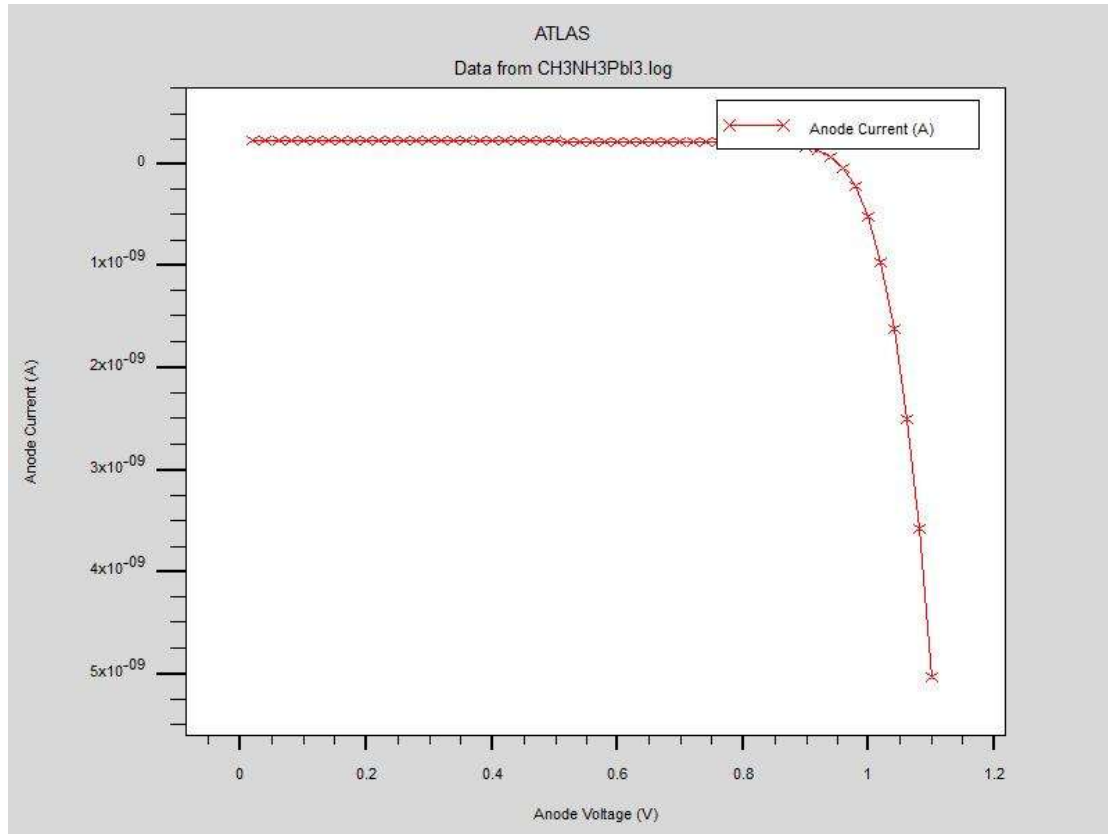


Figure III. 12. Caractéristique (I-V) de la cellule $CH_3NH_3PbI_3$ étudiée.

La Figure (III.12) présente les caractéristiques de la densité de courant électrique (I-V) sous l'éclairage AM1.5G de la cellule solaire à base de ($CH_3NH_3PbI_3$).

La simulation donne une bonne valeur pour la tension V_{oc} (0.95 volts) et la valeur optimale pour le courant I_{sc} (22.2 mA / cm²).

III.5 Conclusion:

La cellule solaire pérovskite ayant l'architecture Verre (PEDOT:PSS/CH₃NH₃PbI₃/PCBM /SnO₂:FTO / Ag). est conçue et analysée à l'aide d'un simulateur de capacité de cellules solaires. L'épaisseur de la couche absorbante et la densité de défauts ont une influence sur les performances de la cellule solaire et la concentration de dopage de HTM et l'effet ETM sur le PV, les caractéristiques observées.

Une épaisseur modérée et un absorbeur à faible défaut présentent les meilleures performances. Les concentrations de dopage HTM, ETM, apportent une amélioration significative des paramètres PV.

simulant la cellule étudiée à travers le programme scaps :

Après avoir optimisé tous les paramètres et sélectionné les meilleurs résultats obtenus:

Épaisseur d'absorption des couches (PEDOT:Pss= 0.05 μm); (CH₃NH₃PbI₃=0.3 μm); (PCBM=0.3 μm) et la densité de défauts est de 10^{15}cm^{-3} , plus le densités de donneur et accepteur (N_d, N_a) égal à $1.0E + 14\text{cm}^{-3}$ et $5.0E + 16\text{cm}^{-3}$ dans toutes les couches.

Nous avons atteint un rendement de conversion d'énergie de 19,75% et une bonne valeur I_{sc} (17,67 mA / cm²) ,en plus des valeurs de FF (75,96%) et V_{oc} (1,45 V)

simulant la cellule étudiée à travers le programme silvaco :

Nous avons simulé une cellule solaire pérovskiteComposé des classes suivantes: (PEDOT/CH₃NH₃PbI₃/PCBMx/SnO₂x),où nous obtenons de bons résultats:

$V_{oc} = 0.95(\text{V})$; $J_{sc} = 22.2 (\text{mA}/\text{cm}^2)$; $FF = 78.13(\%)$; $\eta = 16.51(\%)$.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le monde de la conversion photovoltaïque, aussi bien au niveau de la recherche qu'au niveau industriel, connaît depuis quelques années une mutation profonde associée à l'intérêt croissant pour l'énergie photovoltaïque.

Le travail présenté dans ce mémoire concerne l'étude de cellules photovoltaïques à base de pérovskitiques type semi-conducteur.

Objectifs: Les cellules photovoltaïques pérovskitiques deviennent de plus en plus une option prédominante pour les cellules solaires conventionnelles atteindre une efficacité maximale de 22,1%. Ce travail est préoccupé par la conception et les analyses de pérovskite à base de plomb modèle de cellule solaire avec l'architecture flexible glass / PEDOT:PSS/CH₃NH₃PbI₃/ PCBM / SnO₂:FTO / Ag.

Méthode / Analyse: Le l'analyse de l'architecture des cellules solaires est réalisée à l'aide du simulateur de capacité de cellules solaires (SCAPS et silvaco). C'est un ordinateur outil logiciel et est bien adapté aux analyses des homo et hétérojonctions, des multi-jonctions et de la barrière de Schottky dispositifs photovoltaïques. Cet outil logiciel fonctionne et simule sur la base de l'équation de Poisson et de la continuité des électrons et des trous. Pour ce modèle, il est utilisé pour optimiser les différents paramètres tels que l'épaisseur, la densité de défauts de l'absorbeur couche, concentrations de dopage (N_d et N_a) du matériau de transport d'électrons (ETM) et du matériau de transport de trous (HTM).

Constatations: L'épaisseur de CH₃NH₃PbI₃ varie de 0,3 μm à 0,9 μm et les meilleurs résultats sont observés à 0,3 μm. Le total la densité de défauts minimale de la couche d'absorbeur est prédit 1.0E+15cm⁻³.

Le N_d et N_a du variait du couche P-type de (0.0E+0 à 1.0E+14 cm⁻³) et (1.0E+15 à 5.0E+16 cm⁻³) et couche n-type de (1.0E+15 à 5.0E+16 cm⁻³) et (0.0E+0 à 1.0E+14 cm⁻³) et le PCE est maximal lorsque le N_d et N_a tous deux maintenus à 0.0E+0cm⁻³ et 5.0E+16 cm⁻³). En ajustant l'épaisseur de la couche d'absorbeur et les concentrations de dopage, les résultats prévus sont les suivants; rendement maximal de conversion de puissance (PCE) de 19,57%, densité de courant de court-circuit (I_{sc}) de 17,67 mA / cm², en plus des valeurs de FF (75,86%) et V_{oc} (1,45 V).

Références

- [1] R. Castagné et al., Circuits Intégrés en arsénure de Gallium., Physique, technologie et règles de conception. Masson et Cinet ENST Paris, (1989).
- [2] Henry Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, 1987.
- [3] M. AMARA, Propriétés Electroniques des Conducteurs et des Semi-Conducteurs”, rappels théoriques Plate-forme Matière Condensée et Cristallographie (MCC) C.E.S.I.R.E. Université J.Fourier Grenoble.
- [4] J. Lavery, Quantum tunneling model of a P-N junction in silvaco”, Thesis Navalpostgraduate school Monterey California, 2008.
- [5] Luc LASNE, Physique et technologie des composants de puissance”, université de Bordeaux 1, 2003.
- [6] PINTO M. R, Conor S. Rafferty and Robert W. Dutton, "PSCES2 - Poisson and continuity equation solver", Stanford Electronics Laboratory Technical Report, Stanford University, September 1984.
- [7] Y. MAROUF. Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco, Mémoire de Magister. Université Med Khider Biskra, 2013.
- [8] MOLLER (C.K.). – Crystal structure and photoconductivity of caesium plumbahalides. Nature, 182(4647), p. 1436-1436 (1958).
- [9] WEBER (D.). – $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, a Pb(II)-system with cubic perovskite structure. Z. Naturforschung B, 33(12), p. 1443-1445 (1978).
- [10] WELLER (M.T.), WEBER (O.J.), HANRY (P.F.), DI PUMPO (A.M.) et HANSEN (T.C.). – Complete structure and cation orientation in perovskite photovoltaic methylammonium lead iodide between 100 and 352 K. Chem. Commun., 51, p. 4180-4183 (2015).
- [11] NOH (J.H.), IM (S.H.), HEO (J.H.), MANDAL (T.N.) et SEOK (S.I.). – Chemical management for colorful, efficient, and stable inorganic- organic hybrid nanostructured solar cells. Nano Lett., 13, p. 1764-1769 (2013).
- [12] WONG (A.B.), LAI (M.), EATON (S.W.), YU (Y.), LIN (E.), DOU (L.), FU (A.) et YANG (P.). – Growth and anion exchange conversion of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ nanorod arrays for light emitting diodes. Nano Lett., 15, p. 5519-5524 (2015).

- [13] WU (K.), BERA (A.), MA (C.), DU (Y.), YANG (Y.), LI (L.) et WU (T.). Temperature-dependent excitonic photoluminescence of hybrid organometal halide perovskite films. *Phys.Chem. Chem. Phys.*, 16, p. 22476-22481 (2014).
- [14] KOJIMA (A.), TESHIMA (K.), SHIRAI (Y.) et MIYASAKA (T.). – Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells. *J. Am. Chem. Soc.*, 131, p. 6050-6051 (2009).
- [15] IM (J.H.), LEE (C.R.), LEE (J.W.), PARK (S.W.) et PARK (N.G.). – 6.5 % efficient perovskite quantum-dot-sensitized solar cell. *Nanoscale*, 3, p. 4088-4093 (2011).
- [16] CHUNG (I.), LEE (B.), HE (J.), CHANG (R.P.) et KANATZIDIS (M.G.). – All-solid-state dye-sensitized solar cells with high efficiency. *Nature*, 485, p. 486-489 (2012).
- [17] KIM (H.S.), LEE (C.R.), IM (J.H.), LEE (K.B.), MOEHL (T.), MARCHIORO (A.), MOON (S.J.), HUMPHRY-BAKER (R.), YUM (J.H.), MOSER (J.), GRÄTZEL (M.) et PARK (N.G.). – Lead iodide perovskite sensitized all-solid-state submicron thin film mesoscopic solar cell with efficiency exceeding 9 %. *Sci. Report*, 2, p. 591 (2012).
- [18] LEE (M.M.), TEUSCHER (J.), MIYASAKA (T.), MURAKAMI (T.N.) et SNAITH (H.J.). – Efficient hybrid solar cells based on meso-superstructured organometal halide perovskites. *Science*, 338, p. 643-647 (2012).
- [19] NREL website http://www.nrel.gov/ncpv/images/efficiency_chart.jpg.
- [20] RoshanakRadbeh «Réalisation et caractérisation des cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbones ». Thèse de doctorat, Université de Limoges, 2008.
- [21] ZouacheFoudil « Etude de la concentration solaire sur les performances des systèmes photovoltaïques ». Mémoire de magister en Electronique, Université Mentouri de Constantine 2009.
- [22] Mandadapu, U., Vedanayakam, S. V., &Thyagarajan, K.(2017). Simulation and analysis of lead based perovskite solar cell using SCAPS-1D. *Indian J. Sci. Technol*, 10, 1-8.

Annexe

Annexe 1 : Présentation du logiciel SCAPS-1D

Utilisation du logiciel :

Après avoir cliqué sur l'icône qui représente le logiciel, la fenêtre figure 1. apparait et ce qu'on appelle le panneau d'action.

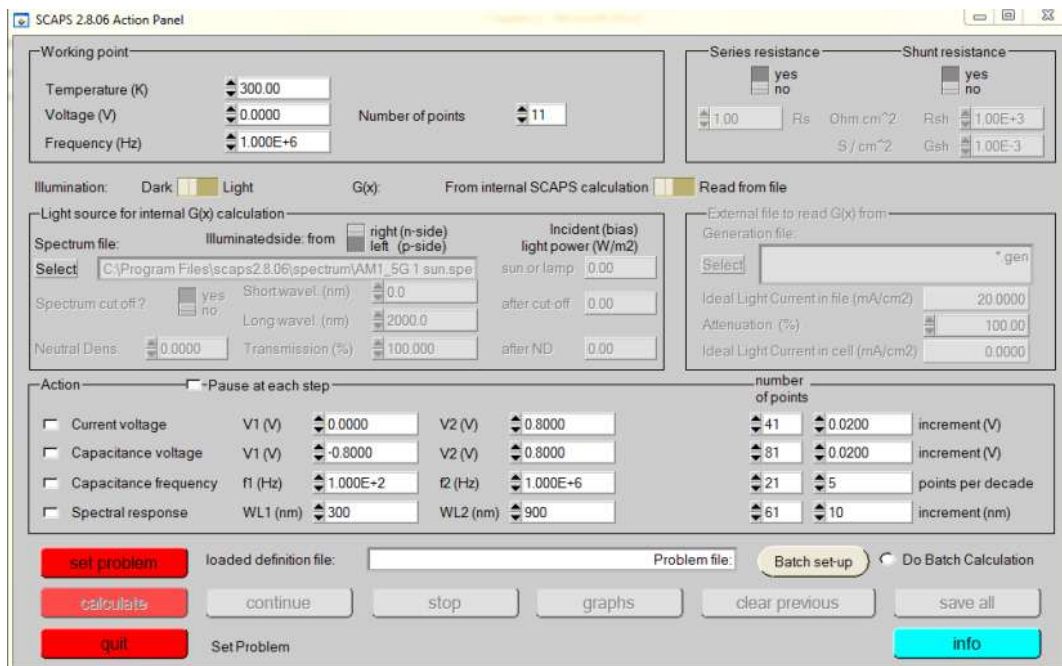


Figure 1. Fenêtre d'exécution « action panel » du logiciel SCAPS

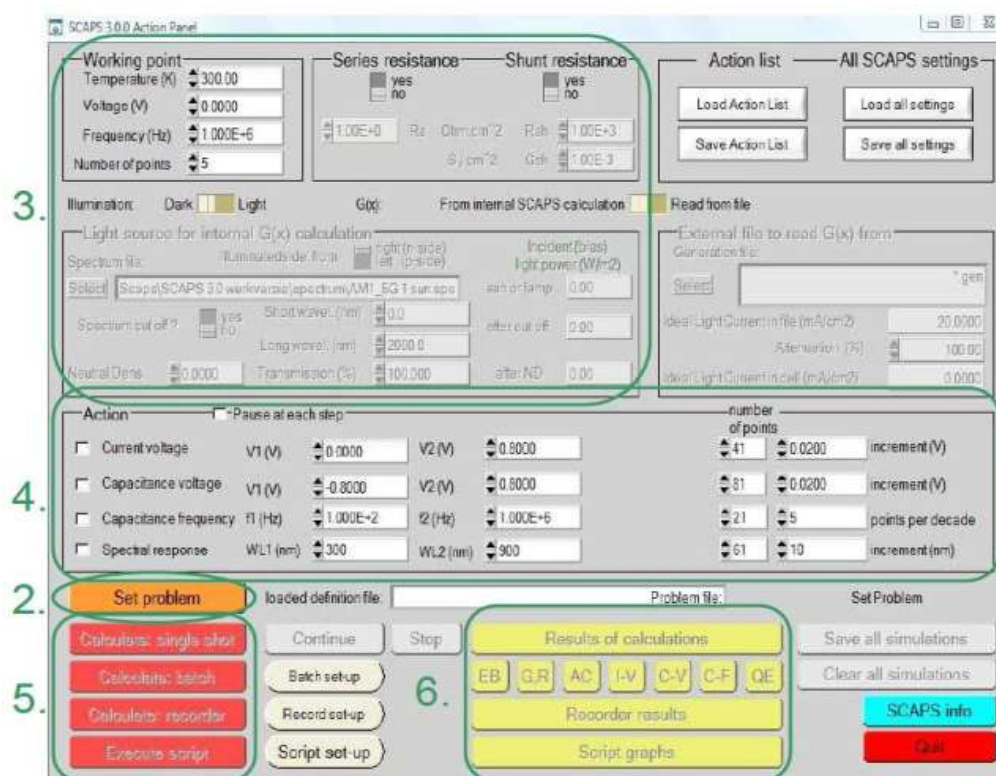


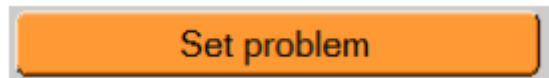
Figure 2. Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.

- ❖ La signification des blocs numérotés de 1 à 6 est expliquée dans le texte . Il ya des panneaux dédiés pour les actions de base :

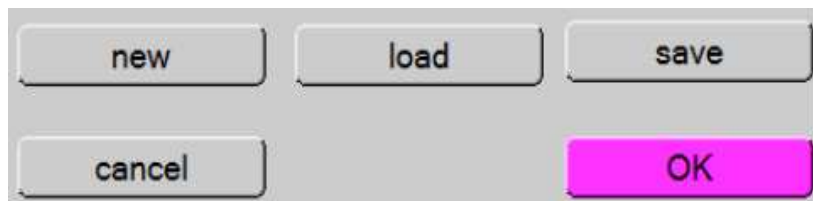
1. Lancer SCAPS.



2. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée.



3. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de fonctionnement).



4. Indiquer la mesure (la caractéristique) à simuler.
5. Commencer le(s) calcul(s).
6. Afficher les courbes de simulation.

Lancer SCAPS :

On clique sur l'icône ci-dessus sur le bureau, ou bien double-clique sur le fichier SCAPS3200.EXE dans le gestionnaire de fichiers (ou dans n'importe quelle autre version de SCAPS). SCAPS s'ouvre avec le panneau d'action.

Définir le problème :

On clique sur le bouton SET PROBLEM dans le panneau d'action, et onchoisi LOAD dans le coin droit en bas du panneau qui s'ouvre par la suite. On sélectionne et on ouvre (par exemple NUMOS CIGS Baseline.def. Ceci est un fichier exemple d'une cellule solaire à base de CIGS. Par la suite, il est possible de modifier toutes les propriétés de la cellule en cliquant sur 'SETPROBLEM' dans le panneau d'action.

Définir le point de fonctionnement :

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

- La température T : Importante pour toutes les mesures. Note : dans SCAPS : $N_c(T)$, $N_v(T)$, les vitesses thermiques, le voltage thermique kT et tous leurs dérivés sont

les seuls variables qui ont une dépendance thermique explicite ; on doit saisir manuellement, pour chaque valeur T, les paramètres du matériau correspondant.

Working point	
Temperature (K)	300.00
Voltage (V)	0.0000
Frequency (Hz)	1.000E+6
Number of points	5

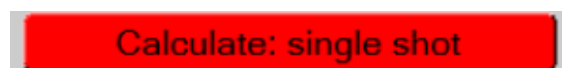
Figure 3. Le point de fonctionnement

- Le voltage V : il ne concerne pas les simulations I-V et C-V. C'est le voltage de la polarisation DC dans une simulation C-f et QE(λ). SCAPS commence toujours à 0 V, et s'exécute au voltage du point de fonctionnement par un nombre d'étapes qu'on doit aussi spécifier.
- La fréquence f : elle ne concerne pas les simulations I-V, QE(λ) et C-f. C'est la fréquence dans laquelle la caractéristique C-V est simulée.
- L'illumination : elle est utilisée dans toutes les mesures. Pour QE(λ), elle détermine les conditions de polarisation de la lumière. Les paramètres de base sont : l'obscurité ou la lumière, le choix du côté illuminé, le choix du spectre. Le spectre d'illumination on Sun (= 1000 W/m²) avec la masse d'air 1.5 global est le spectre par défaut, mais il existe aussi une large gamme de lumières monochromatiques et de spectres pour plus de simulations personnalisées. S'il y a un simulateur optique, on peut immédiatement charger un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre.
- Nombre de point : le nombre de point utilisé pour tracer les courbes.

Sélection des caractéristiques à simuler :

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

Lancer le calcul :



Afficher les courbes simulées :

Après les calculs, SCAPS passe au panneau de bande d'énergie, présenté dans la figure 4. Dans ce panneau, on peut voir les diagrammes de bandes, les densités des porteurs libres, la densité du courant ; au dernier point de polarisation. Si on veut afficher les résultats pour des tensions intermédiaires, on utilise le bouton pause dans le panneau d'action. On peut faire apparaître les résultats par les commandes PRINT, SAVE GRAPHS, SHOW, et les valeurs s'affichent par la suite à l'écran. Il est possible de faire du Couper & Coller vers, par ex., Excel, ou sauvegarder les valeurs dans un fichier de données. Vous pouvez basculer vers un de vos panneaux personnalisés (si vous avez toutefois simulé au moins une seule opération de mesure) .



Figure 4. Panneau des bandes d'énergie.

Les courbes I-V :

La Figure 5 montre le panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et sous éclairage. La couleur de la dernière courbe calculée est indiquée (lorsque le graphe est trop encombré, on clique CLEAR ALL GRAPHS dans le panneau d'action). Les courbes des taux de recombinaison sont affichées seulement pour la dernière simulation. La couleur de la légende correspond à la couleur de la courbe. Si CURVE INFO est sur ON et si on clique sur une courbe du graphe, un panneau pop-up apparaîtra, avec des informations concernant le graphe, la courbe ainsi que le point cliqué.

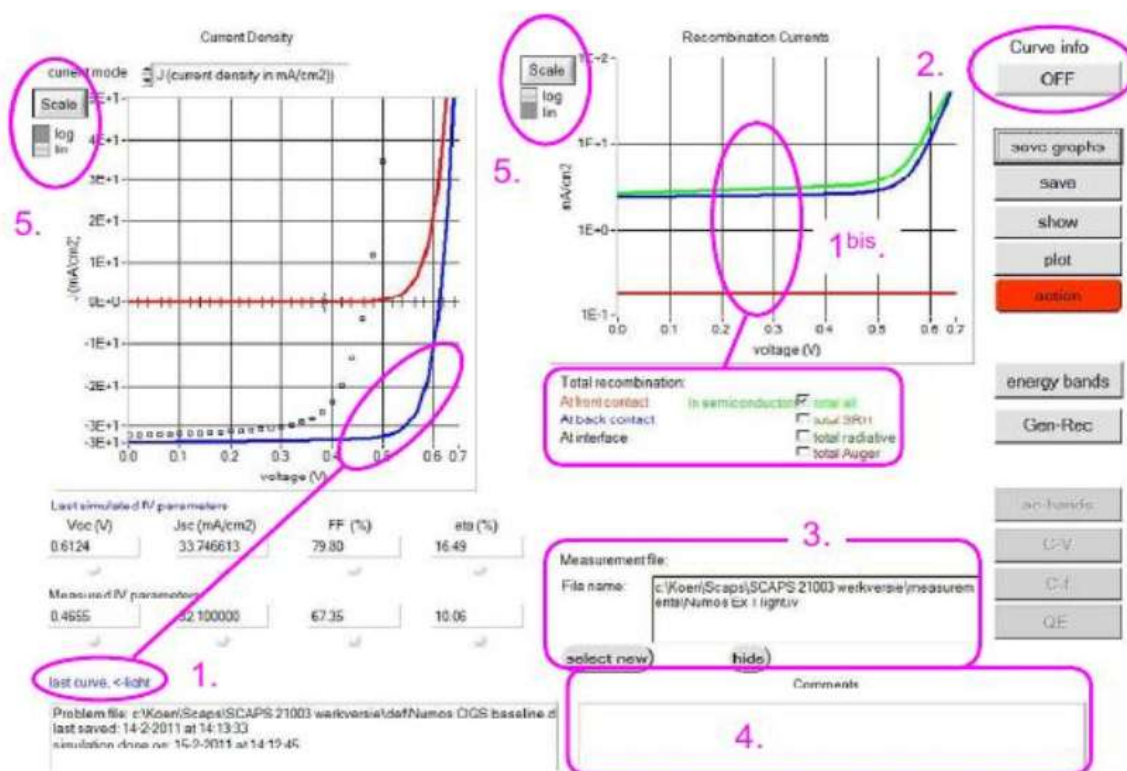


Figure 5. Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.

Le bouton SCALE aide à changer la gamme et l'échelle des axes. Si on appuie sur le bouton CTRL et on sélectionne une aire rectangulaire dans un graphe, celui-ci fera un zoom intérieur (agrandissant) dans la zone sélectionnée. L'appui sur le bouton CTRL accompagné d'un clic droit donnera un zoom extérieur (Zoom out).

Définition d'une cellule solaire :

La méthode recommandée pour introduire une cellule solaire est d'utiliser l'interface graphique du programme. De cette façon on peut introduire interactivement tous les paramètres qui seront contrôlés par SCAPS de manière à ne pas obtenir des valeurs impossibles ou incohérentes.

Edition de la structure d'une cellule solaire:

Quand on clique sur le bouton 'SET PROBLEM' sur le panneau d'action, le panneau 'SOLAR CELL DEFINITION' s'affichera. Ce dernier permettra de créer ou de modifier les structures des cellules solaires et de les enregistrer, ou bien de les charger à partir d'autres fichiers. Ces fichiers de définition sont des fichiers standards ASCII (American Standard Code for Information Inter change) d'extension .def qui peuvent s'ouvrir avec Notepad.exe ou Wordbad.exe. Il est déconseillé des les modifier au risque des les rendre inutilisables par la suite.

Les propriétés des couches, des contacts et d'interfaces peuvent être modifiées en cliquant sur le bouton approprié comme le montre la figure 6. De la même manière, des couches peuvent être rajoutées en cliquant 'ADD LAYER'.

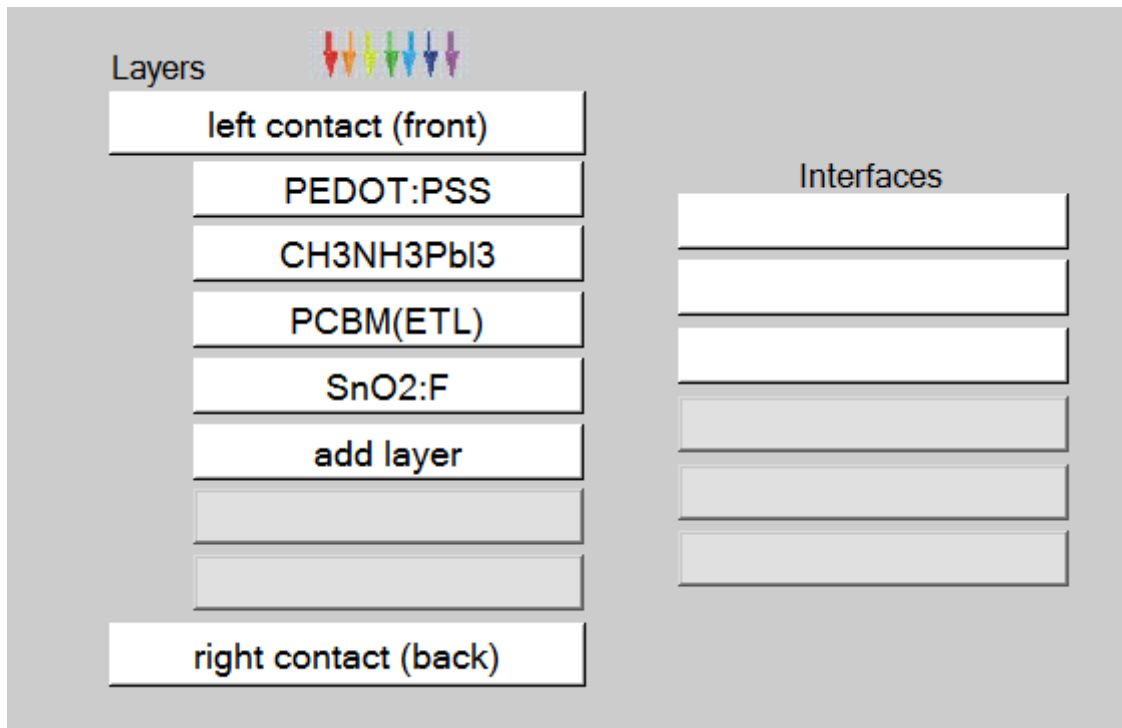


Figure 6. Définition de la structure d'une cellule solaire.

Contacts :

Les propriétés des contacts peuvent être introduits soit en cliquant sur le bouton du contact avant ou celui du contact arrière sur le panneau de définition de la cellule. Un panneau des propriétés de contact 'CONTACT PROPERTIES PANEL' s'ouvre, comme le montre la Figure 7.

The image shows two panels from a software interface. The top panel, titled 'Electrical properties', contains several input fields and checkboxes. It includes 'Thermionic emission / surface recombination velocity (cm/s)' for electrons (1.00E+5) and holes (1.00E+7), 'Metal work function (eV)' (5.0000) with a 'flat bands' checkbox, 'Majority carrier barrier height (eV)' relative to EF (0.2000) and relative to EV or EC (0.0000), an 'Allow tunneling' checkbox, and 'Effective mass of electrons' (1.00E+0) and 'Effective mass of holes' (1.00E+0). The bottom panel, titled 'Optical properties', has an 'optical filter' checkbox checked, a 'Filter Mode' dropdown set to 'transmission', a 'Filter Value' (0.700000), a 'Complement of Filter' (3.0000E-1), and a 'Select Filter File' button.

Figure 7. Panneau des propriétés des contacts.

Les propriétés des contacts, se divisent en propriétés électriques et optiques. Dans les propriétés électriques, on définit :

- ❖ Les vitesses de recombinaison surfaciques des électrons et des trous libres.
- ❖ Si le contact a un travail de sortie, ou il est idéal (régime de bande plates).
- ❖ La barrière des porteurs majoritaires.
- ❖ L'effet tunnel (si on veut en tenir compte).

Pour les propriétés optiques, on peut définir la transmission ou la réflexion, par une valeur ou un fichier de données.

Définition des couches :

En cliquant sur le bouton « add layer », une fenêtre Figure 8. s'ouvre qui contient les différents paramètres du matériau à introduire. Ces paramètres peuvent avoir des distributions uniformes ou non uniformes, selon la physique du matériau.

Dans la première case, on introduit le nom de la couche (qui correspond au type du dopage). Dans la deuxième case, l'épaisseur de la couche est introduite.

Le troisième block, concerne la pureté du matériau et son profile.

Dans le quatrième block, on introduit : le gap d'énergie, l'affinité électronique, la permittivité diélectrique, les densités effectives des bandes de conduction et de valence, vitesse thermiques des électrons et des trous libres, les mobilités des électrons et des trous. Finalement, une case, qui permet d'ajouter les masses effectives des électrons et des trous si on tient compte du transport des porteurs par effet tunnel.

Si le matériau est un composé d'éléments avec des concentrations non uniforme, on peut introduire des variations graduelles des précédents paramètres.

Dans le cinquième block, figure 9, on introduit le dopage, type et densité. Le dopage aussi peut être introduit comme étant uniforme, comme il peut avoir des variations graduelles (linéaire, paraboliques,...).

Dans le sixième block, on définit l'absorption de la couche, comme le montre la figure

10. L'absorption peut être définie par le modèle analytique fourni par SCAPS, comme elle peut être introduite sous forme de données. SCAPS fournit un nombre de données de l'absorption pour plusieurs types de semi-conducteurs. On peut également utiliser d'autres données de l'absorption pour des semi-conducteurs non disponibles dans SCAPS, à condition que le fichier ait la même extension des fichiers de l'absorption fournis par SCAPS.

LAYER 1		PEDOT:PSS
thickness (μm)	0.050	
	uniform pure A (y=0)	
The layer is pure A: y = 0, uniform	0.000	
Semiconductor Property P of the pure material	pure A (y = 0)	
bandgap (eV)	2.200	
electron affinity (eV)	2.900	
dielectric permittivity (relative)	3.000	
CB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)	$2.200\text{E}+15$	
VB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)	$1.800\text{E}+18$	
electron thermal velocity (cm/s)	$1.000\text{E}+7$	
hole thermal velocity (cm/s)	$1.000\text{E}+7$	
electron mobility (cm^2/Vs)	$1.000\text{E}-2$	
hole mobility (cm^2/Vs)	$2.000\text{E}-4$	
<input type="checkbox"/> Allow Tunneling	effective mass of electrons	$1.000\text{E}+0$
	effective mass of holes	$1.000\text{E}+0$
no ND grading (uniform)		
shallow uniform donor density ND ($1/\text{cm}^3$)	$1.000\text{E}+14$	
no NA grading (uniform)		
shallow uniform acceptor density NA ($1/\text{cm}^3$)	$5.000\text{E}+16$	

Figure 8. Propriétés de la couche ajoutée.

no ND grading (uniform)	
shallow uniform donor density ND ($1/\text{cm}^3$)	$1.000\text{E}+14$
no NA grading (uniform)	
shallow uniform acceptor density NA ($1/\text{cm}^3$)	$5.000\text{E}+16$

Figure 9. Propriétés des dopages définis.

Absorption model Show / Set alpha(composition; lambda)

	alpha (y=0)	alpha (y=1)
	<input type="checkbox"/> from model <input type="checkbox"/> from file	<input type="checkbox"/> from model <input type="checkbox"/> from file
absorption constant A (1/cm eV ^(1/2))	1.000E+5	1.000E+4
absorption constant B (eV ^(1/2) /cm)	0.000E+0	0.000E+0
	sorption\CuInSe2.abs	
	absorption file for y = 0	absorption file for y = 1

Figure 10.Modèle de l'absorption.

Le type des recombinaisons en volume présent est indiqué dans le côté droite du panneau des propriétés de la couche (Figure 11). Tous les types des recombinaisons sont présents; directsou à travers les pièges.

Band to band recombination

Radiative recombination coefficient (cm ² /s)	1.000E-5	1.000E-5	uniform
Auger electron capture coefficient (cm ⁶ /s)	1.000E-25	1.000E-25	uniform
Auger hole capture coefficient (cm ⁶ /s)	1.000E-25	1.000E-25	uniform

Defect 4 of layer 1

defect type	Single Donor (0/+)
capture cross section electrons (cm ²)	1.000E-15
capture cross section holes (cm ²)	1.000E-15
energetic distribution	Gauß
reference for defect energy level Et	Above EV (SCAPS < 2.7)
energy level with respect to Reference (eV)	0.600
characteristic energy (eV)	0.200

Nt grading dependent on position x: Nt (x) exponential

Nt total (1/cm ³)	Left (x=0)	1.000E+15	Right (x=1)	1.000E+14
Nt peak (1/eV/cm ³)	Left (x=0)	2.821E+15	Right (x=1)	2.821E+14

Figure 11.Définition des types de recombinaison présents.

Si on introduit les défauts (pièges) ; ils peuvent être uniformes ou non uniformes, discrets, ave des distributions gaussiennes, donneurs, accepteurs, neutres, monovalents ou

divalents. On peut même définir des transitions de porteurs entre les différents niveaux d'énergie des pièges.

Annexe 2 : Présentation du logiciel SILVACO

Présentation d'Atlas :

La capacité à simuler avec précision un dispositif semi-conducteur est cruciale pour l'industrie et milieux de recherche. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D des composants basés sur la physique des semi conducteurs, en incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix .Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne des variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes des courants, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations des continuités des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini des points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme.

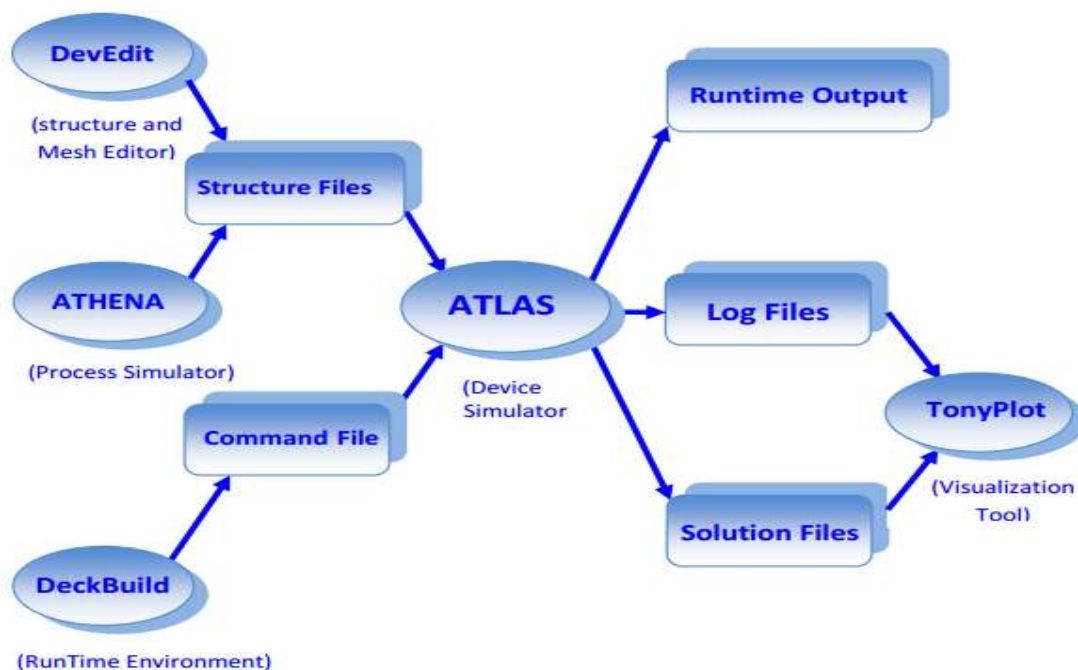


Figure 12. Entrées et sorties d'Atlas.

Ordres de commandes d'Atlas

Après la présentation de l'outil de simulation « d'Atlas » de SILVACO TCAD, sa composition interne et son fonctionnement nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation « d'Atlas ». Ainsi il existe cinq groupes des commandes, ces groupes doivent être organisés correctement (Figure 13). Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ou les modèles des matériaux ne sont pas placés dans l'ordre, le simulateur ne les prend pas en compte.

Groupe		Commandes
1. Spécification de la structure	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	—————	METHOD
4. Spécification des solutions	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	—————	EXTRACT TONYPLOT

Figure 13. Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes)

Les commandes fondamentales sont :

- MESH : cette commande produit un maillage ou lit un maillage qui a été défini auparavant. L'élément de maille utilisé est le triangle.
- REGION : c'est une instruction qui définit une région dans une structure.
- ELECTRODE : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une structure.
- DOPING : indique le type et le profil de dopage.

- **MATERIAL** : associe des paramètres physiques aux matériaux utilisés dans la simulation par exemple : affinité électronique, énergie de gap, la fonction de la densité des états, les vitesses de saturation, les durées de vie des porteurs minoritaires, etc (Il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standards)
- **MODELS** : Cette instruction permet de faire appel aux modèles physiques existants dans le logiciel, nous pouvons citer comme exemples les modèles de recombinaison Shockley Read Hall (SRH), Auger et les modèles concernant les statistiques des porteurs de Boltzmann, Fermi, etc ...
- **CONTACT** : indique les attributs physiques d'une électrode : anode, cathode, drain, etc ...
- **INTERFACE** : indique les paramètres d'interface aux frontières de semi-conducteur/isolant, comme exemple, la vitesse de recombinaison en surface et la densité de charge à l'interface.
- **METHOD** : place les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes. Les méthodes numériques qui peuvent être spécifiées par cette instruction incluent des méthodes telles que celles de Gummel et de Newton.
- **LOG** : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transitoire ou C.A., générée par la commande SOLVE est sauvée après la commande LOG (donc les informations sauvées sont de type électrique et elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Si dans le programme il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.
- **SOLVE** : ordonne à Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.
- **LOAD** : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conditions initiales à d'autres points de polarisation.
- **SAVE** : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.

- **EXTRACT** : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou solution.
- **TONYPLOT** : démarre le programme « TonyPlot » de post processus graphique des donnés. Elle permet de présenter les solutions trouvées pendant la simulation sous forme de graphe.

Une autre commande importante est **BEAM**, sa position est au niveau 4 des groupes de commande. **BEAM** indique un signal d'entrée optique sous forme d'un faisceau de lumière (mono ou multi-spectrale) collimatée. Le faisceau ainsi déclaré est allumé et utilisé par la commande **SOLVE**, dans ce cas le module Luminous est activé. Donc **BEAM** est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales .

Spécification de la structure :

La spécification de la structure se fait en définissant le maillage, les régions, les électrodes et les niveaux des dopages.

a) maillage :

Le maillage est une série des lignes horizontales et verticales, dans notre étude les maillages utilisés sont à deux dimensions par conséquent, seuls les paramètres X et Y sont définie. Le format général pour définir la maille est :

X. MESH LOCATION = <VALEUR> SPACING = <VALEUR>

Y. MESH LOCATION = <VALEUR> SPACING = <VALEUR>

b) Région :

Après avoir défini le maillage, il est nécessaire de définir les régions, le format pour

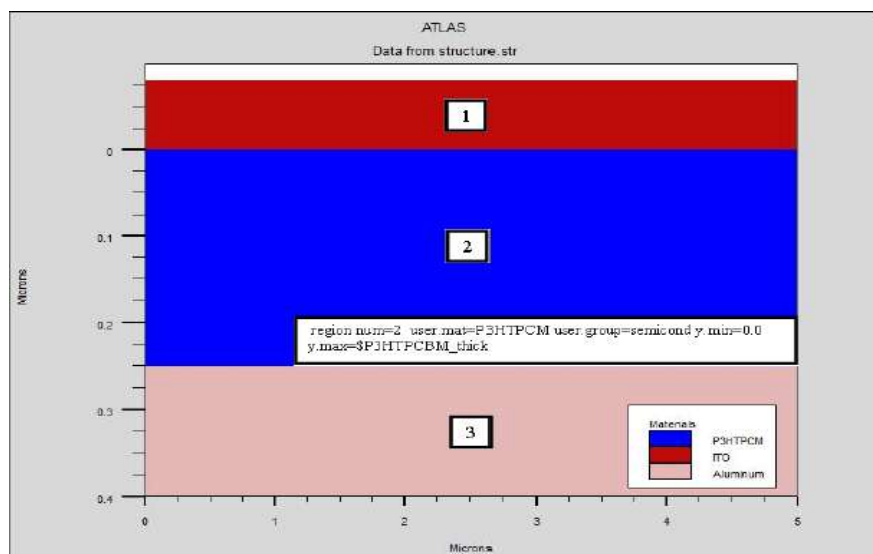


Figure 14.Régions avec les matériaux définis.

définir les régions est : RÉGION nombre = <integer><material_type> / < position des paramètres > Figure 14, il y'a trois région définies.les limites de chaque région sont explicitement identifiées dans l'axe X et Y.

a) Electrodes :

Atlas a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définies. Dans notre travail les électrodes définies sont l'anode et cathode selon le format comme suit :

elecnum=1 name=anode x.min=0 x.max=5.0 y.min=-\$ITO y.max=0 material=ITO

elecnum=2 name=cathode x.min=0x.max=5.0 y.min=\$P3HTPCBM y.max=\$total_thick material=Aluminum

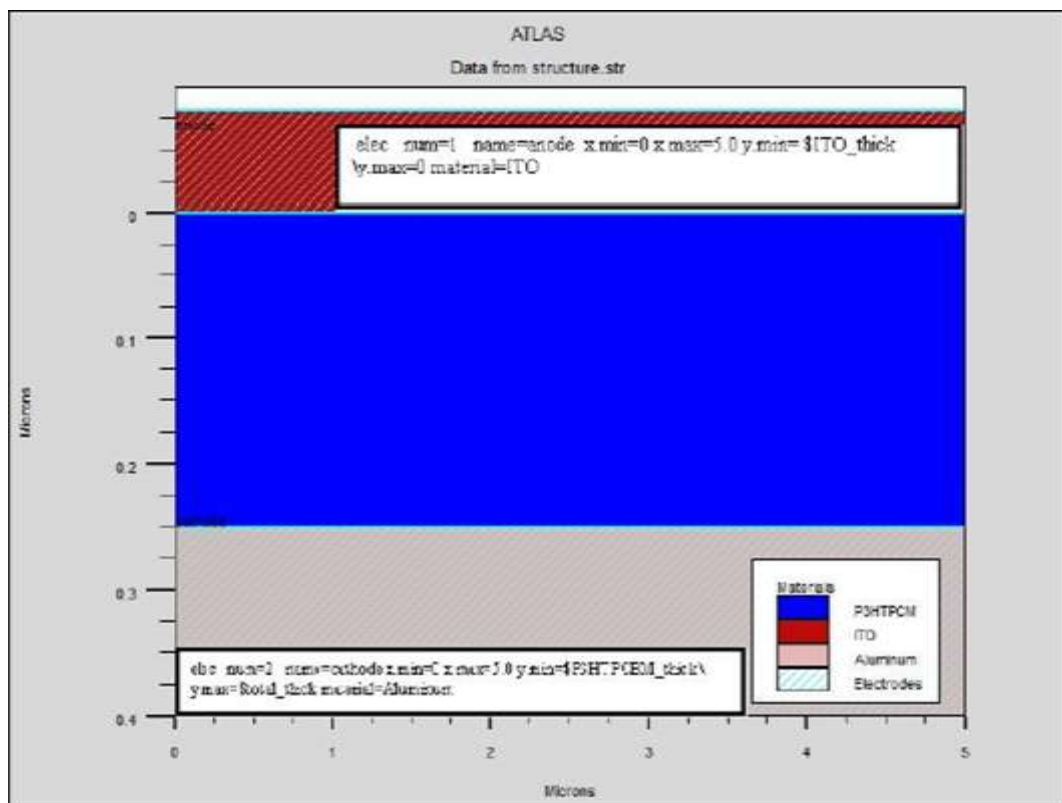


Figure 15. Les électrodes dans une cellule solaire.

b) Dopage :

Le dernier paramètre de structure à spécifier est le dopage. Le format de la déclaration d'atlas est comme suit : DOPAGE < type de distribution >< type de dopant > / < position des paramètres >

Le type de dopage dans notre simulation est de type P avec une distribution non uniforme Figure 16.

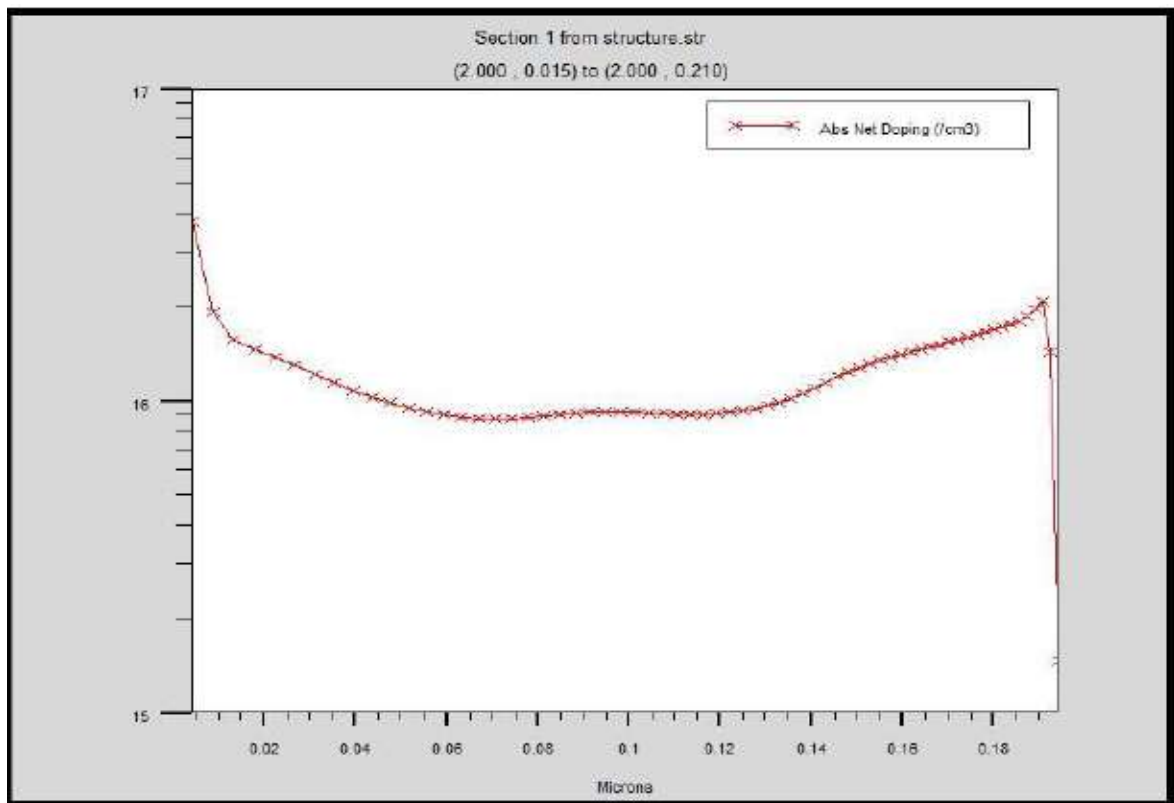


Figure 16. Schéma Atlas dopage, exemple de profil non uniforme.

Spécification des matériaux et des modèles :

Après la définition de la structure, on doit spécifier le modèle physique, il se compose en quatre parties tel que, matériau, modèles, contact et interface.

a) matériaux :

La syntaxe pour déclarer en niveau d'atlas les nouveaux matériaux qui ne contiennent pas au sien de la base de données est :

MATERIAL < localisation > < définition des matériaux >

Plusieurs paramètres peuvent être identifiés pour les matériaux dans une région donnée, par exemple dans notre étude : le gap d'énergie à la température ambiante (E_g), les mobilités des électrons et des trous, la durée de vie des excitons, les densités des états effectives et aussi l'indice de réfraction et le coefficient d'absorption en fonction de vecteur d'onde.

b) modèle :

Les modèles physiques se répartissent en cinq catégories. Les mobilités des porteurs des charges, mécanisme de génération et recombinaison, les statistiques de transport, l'ionisation par impact et l'effet tunnel. La syntaxe de la déclaration du modèle est la suivante :

Model langevin singlet s.dissoc

Le choix de modèle dans notre étude est le modèle de Langevin

c) contact :

Le contact détermine les attributions des électrodes. La syntaxe du contact est :

contact name=anode workfunc=5

contact name=cathode workfunc=4.3

d) l'interface :

Les limites des semi-conducteurs ou de l'isolant sont déterminées dans la déclaration d'interface. La syntaxe est la suivante :

interfacex.min=0 x.max=5 y.min=0 y.max=0 s.n=1e-7 s.p=1e7

interfacex.min=0 x.max=5 y.min=\$P3HTPCBM_thick y.max=\$P3HTPCBM_thick
s.n=1e-7 s.p=1e7

Sélection des méthodes numériques

Après la précision du modèle des matériaux, la sélection de la méthode numérique doit être indiquée permet de choisir les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et aussi de choisir les paramètres liés à ces algorithmes , Parmi les différentes méthodes numériques de résolution des systèmes d'équation, trois types de technique sont utilisée dans ATLAS-SILVACO.

- Méthode de Gummel
- Méthode de Newton
- Méthode de blocs

Spécification de Solution :

a) Log :

Log : enregistre toutes les caractéristiques finales de simulation dans un fichier de données. N'importe quel type de données, générées par la commande Solve est sauvé après la commande LOG. Si dans le programme il ya plusieurs commande LOG, chaque fois le fichier log qui à été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.

b) Solve :

L'instruction SOLVE suit l'instruction LOG elle effectue une solution pour un ou plusieurs point de polarisation.

c) Load et Save :

L'instruction LOAD introduit à partir d'un fichier existant, pour chaque point de polarisation les solutions précédentes en tant que proposition initiale. L'instruction SAVE permet l'enregistrement de toutes les informations obtenues pour un nœud dans un fichier de sortie.

Analyse des résultats:

EXTRACT : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou structure.

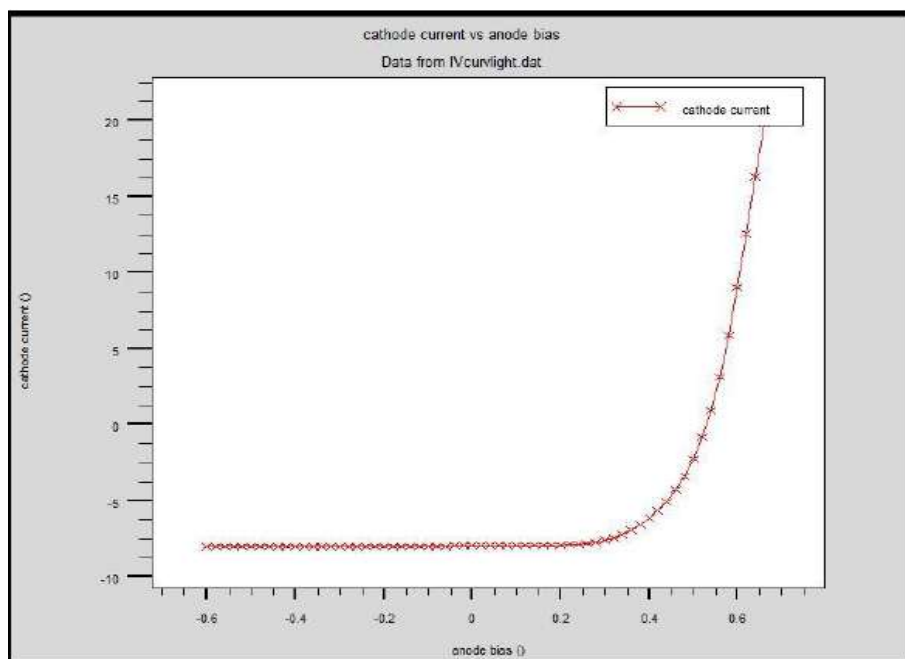


Figure 17.Exemple de Tonyplot courbe IV.

Résumé:

Dans le contexte global de la diversification de l'utilisation des ressources naturelles, le recours aux énergies renouvelables et en particulier le solaire photovoltaïque se fait de plus en plus fort. A ce titre, le développement d'une nouvelle génération de cellules photovoltaïques à base de pérovskitiques semble prometteur. Dans ce travail de modélisation et de simulation, nous utilisons le logiciel SCAPS et SILVACO, pour étudier les performances des cellules solaires à base de pérovskitiques. Nous évaluons dans un premier temps, le courant de court circuit I_{sc} , la tension en circuit ouvert V_{oc} , le facteur de forme FF et le rendement électrique η pour une structure typique de PEDOT:PSS/CH₃NH₃PbI₃/PCBM/SnO₂/Ag.

Par la suite nous nous intéressons au gap et à l'épaisseur de la couche (pérovskitiques), pour étudier l'influence de celles-ci sur les paramètres de sortie, surtout le rendement électrique de la structure.

Report titre: Simulation of a photovoltaic cell based on CH₃NH₃PbI₃

Keywords: Solar cell, photovoltaic, perovskitic, simulation, SCAPS. SILVACO

Abstract:

In the global context of the diversification of the use of natural resources, the use of renewable energies and in particular solar photovoltaic is becoming stronger. As such, the development of a new generation of photovoltaic cells based on perovskites seems promising. In this modelling and simulation work, we use the software SCAPS and SILVACO to study the performance of perovskitic solar cells. We first evaluate the short circuit current J_{sc} , the open circuit voltage V_{oc} , the form factor FF and the electrical efficiency η for a typical structure of PEDOT:PSS / CH₃NH₃PbI₃/PCBM/SnO₂/Ag.

Subsequently we are interested in the gap and the thickness of the layer (perovskitic), to study the influence of these on the output parameters, especially the electrical efficiency of the structure.

عنوان المذكرة: محاكاة للخلايا الضوئية على أساس CH₃NH₃PbI₃

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية ، الكهروضوئية ، البيروفسكيت ، المحاكاة SCAPS ، SILVACO.

المخلص:

في السياق العالمي لتنويع استخدام الموارد الطبيعية ، أصبح استخدام الطاقات المتجددة وخاصة الطاقة الشمسية الضوئية أقوى. على هذا النحو ، فإن تطوير جيل جديد من الخلايا الضوئية المستندة إلى البيروفسكايت يبدو واعداً. في أعمال النمذجة والمحاكاة هذه ، نستخدم برنامجي SCAPS و SILVACO لدراسة أداء الخلايا الشمسية البيروفيتية. نقوم أولاً بتقييم تيار الدائرة القصيرة (I_{sc}) ، والجهد الكهربائي للتيار المتردد (V_{oc}) ، وعامل الشكل FF والكفاءة الكهربائية η للهيكل النموذجي لـ PEDOT:PSS/CH₃NH₃PbI₃/PCBM/SnO₂/Ag بعد ذلك نحن مهتمون بالفجوة وسمك الطبقة (perovskitic)، لدراسة تأثير هذه على معلمات الإخراج ، وخاصة الكفاءة الكهربائية للهيكل.