

People's Democratic Republic of Algeria
Ministry of Higher Education and Scientific Research
Mohamed Boudiaf University of M'sila
Faculty of Technology



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة المسيلة
كلية التكنولوجيا

Département de Génie Mécanique

MEMOIRE DE FIN D'ETUDE

En vue de l'obtention du diplôme de :

MASTER

En Génie Mécanique

Option :Energétique

Présenté par :

Baghdadi .Dj ET Chenouf. A

Thème

Simulation et optimisation des paramètres photovoltaïques d'une cellule
Solaire Tandem (pérovskite /C-Si).

Devant le jury composé de :

NOM et Prénom	Grade	Qualité
Bakhti F. N.	MCA	Président
Leila Bechane	MCB	Encadreur
Hebiche N.	MAA	Examineur.

Année Universitaire : 2022 / 2023

N° d'ordre : GM/...../2023

إهداء

إلى والدي الأعمام، أود أن أشكركم على كل الدعم والحب والثقة والتضحيات التي قدمتموها لي طوال مسيرتي الدراسية. شكراً لكم على الدعوات المستمرة بالتوفيق والنجاح، وأتمنى أن أكون قد قدمت الأمانة بالشكل الذي يليق بها. قد يكون هذا العمل المتواضع تحقيقاً لرغباتكم المصاغة بعناية وثمره جهودكم الخاصة.

كما أهدي هذا العمل المتواضع إلى الصديق والأخ الطالب " علي بن بوذينة " رحمه الله كان يتمنى هذا العام أن يتخرج من الجامعة و ينال شهادة الماستر ولكن شاءت الأقدار أن ينتقل إلى جوار ربه قبل تحقيقه لذلك.

" اللهم ارحمه واغفر له واجعل قبره روضه من رياض الجنة "

إلى أخواتي العزيزات، أود أن أعبر عن شكري العميق لتشجيعكم المستمر ودعمكم النفسي. لقد كنتن دعمًا قويًا ومصدر إلهام لي طوال فترة دراستي. أنا ممتن لكم على كلماتكم الحماسية وثقتكم في قدراتي.

إلى إخوتي الأعمام، أود أن أعبر عن امتناني لدعمكم وتشجيعكم المستمر. لقد كنتم دعمًا لا يضاهاى وشجاعة لا تُقَدَّر. شكراً لكم على كونكم مصدر قوة ودعم لي في كل مرحلة من مراحل رحلتي الجامعية.

أمل أن يكون هذا العمل تحقيقاً لتمنياتكم المتكررة ونتيجة الدعم الذي قدمتموه بلا كلل. أنا مدين لكم بالكثير وأقدر جهودكم وتفانيكم في دعمي. شكراً لكم على أنكم دائماً هنا معي في كل الأوقات.

Remerciements

Avant tout nous tenons nos remerciements à **ALLAH de nos
avoir donné**

La force et le courage.

A la suite Nous tenons à remercier vivement :

**À la Prof. Leila Bechane pour ses énormes efforts, ses
informations, ses conseils, sa patience et son sens face aux
obstacles, ainsi que pour ses observations précises.**

**Aux membres du jury pour avoir veillé à ce que cette thèse soit
corrigée et discutée.**

**À tous les professeurs du département de Mécanique qui ont
encadré notre parcours académique.**

**Nos plus sincères remerciements à tous ceux qui ont contribué à
la production de ce message.**

**Nous sommes extrêmement reconnaissants envers notre famille
pour leur encouragement, leur confiance et leur soutien moral
constant.**

Résumé

Dans cette étude, nous avons examiné les performances des cellules solaires tandem utilisant des matériaux pérovskite et silicium, en utilisant le simulateur AMPS-1D.

L'objectif principal était de maximiser l'utilisation du spectre solaire afin d'améliorer les performances de ces deux types de cellules, en déterminant les paramètres optimaux pour leur fonctionnement. Dans ce contexte, de nombreux facteurs physiques contribuent à l'amélioration de leur rendement. Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'impact de l'épaisseur de la couche absorbante en pérovskite et en silicium.

Mots-clés : cellules solaires, cellules tandem, pérovskite, simulation, AMPS-1D.

المخلص

في هذا البحث، قمنا بدراسة أداء الخلايا الشمسية المترابطة التي تستخدم مواد البيروفسكيت والسيليكون، باستخدام محاكي AMPS-1D.

الهدف الرئيسي هو استغلال طيف الشمس بأقصى قدر ممكن لتحسين أداء هاتين الخليتين من خلال تحديد العوامل المثلى لعملهما. في هذا السياق، تسهم العديد من العوامل الفيزيائية في تحسين كفاءتهما. نحن مهتمون بشكل خاص بدراسة تأثير سمك طبقة الامتصاص في البيروفسكيت والسيليكون.

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية، الخلايا المترابطة، البيروفسكيت، المحاكاة، AMPS-1D.

Sommaire

اهتاء

Remerciements

Résumé

Sommaire

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction Générale

Introduction Générale.....1

Chapitre I Généralités sur les cellules photovoltaïques

I.1. Historique.....3

I.2. Le principe de la conversion Photovoltaïque.....3

I.3. Notion préliminaire sur le rayonnement solaire.....5

I.4. Fonctionnement et caractéristiques de sortie d'une cellule photo- voltaïque.....6

I. 4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....6

I. 4.2. Caractéristique électrique et paramètres de la cellule photovoltaïque.....7

I. 4.2.1. Caractéristique courant - tension (I-V).....7

I.4.2.2. Paramètre des cellules photovoltaïques.....8

I.5. Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.....10

I.6. Les différentes filières photovoltaïques.....11

I.6.1 La filière silicium cristallin.....12

I.6.1.1 Le silicium monocristallin.....12

I.6.1.2. Le silicium multi-cristallin (Poly-cristallin).....12

I.6.2. La filière couches minces.....13

I.6.2.1. Le silicium amorphe (a- Si: H).....13

I.6.2.2. Le tellure de cadmium (CdTe).....13

I.6.2.3. Le di sélénure de cuivre et indium (CIS ou CIGS).....13

I.7. La filière des cellules organiques.....13

I.8. La filière des pérovskites:.....14

I.9. Cellules multi-jonctions à haut rendement..... 15

I.10. Conclusion.....16

REFERENCES.....16

Chapitre II Propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs (ZnO,

Cs₂AgBiBr₆, P3HT, C-Si, a-Si).

II.1. Introduction.....	19
II.2. Matériaux Pérovskite.....	19
II.2.1. Double pérovskites Based on Bi (III) and Ag (I).....	20
II.2.2. Propriétés des matériaux pérovskites.....	21
II.2.3. Coefficient d'absorption.....	22
II.3. matériaux silicium cristallin.....	23
II.3.1. La structure silicium cristallin.....	23
II.3.2. Propriétés électriques du silicium cristallin.....	23
II.4. matériaux silicium amorphe hydrogéné.....	25
II.4.1. Description générale du matériau.....	25
II.4.2. Propriétés des matériaux silicium amorphe.....	26
II.4.2.1. Propriétés optiques.	26
II.4.2.2. Propriétés électriques.....	27
II.5. matériaux ZnO.....	28
II.5.1. La structure ZnO.....	28
II.5.2. Propriétés électriques du ZnO.....	29
II.5.3. Propriétés optiques du ZnO.....	29
II.6. matériaux poly (3-hexylthiophène) (P3HT).....	30
II.6.1. Propriétés optiques.....	32
II.6.2. Propriétés électrochimiques.....	33
II.7. Conclusion.....	34
REFERENCES.....	35

Chapitre III Logiciel de simulation AMPS-1D

III.1. Introduction.....	38
III.2. Présentation du simulateur AMPS-1D.....	38
III.2.1. Définition	38
III.2.2. Le but d'utiliser l'AMPS-1D.....	38
III.2.3. Liste Des Paramètres Introduire.....	39

III.2.3.1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.....	39
III.2.3.2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière.....	40
III.2.3.3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination.....	45
III.2.4. le panneau de différents résultats obtenus.....	45
III.3. Conclusion.....	46
REFERENCES.....	47

Chapitre IV Résultats et Discussion de simulation

IV.1.	
Introduction.....	48
IV.2. Simulation de la cellule solaire a base du Pérovskite individuelle.....	48
IV.2.1. Présentation de la cellule individuelle à base de Pérovskite.....	48
IV.2.2. Paramètres de la cellule Pérovskite individuell.....	49
IV.2.3. Résultats et discussion.....	50
IV.2.4. La caractéristique courant tension, de la cellule supérieure (ZnO/Cs ₂ AgBiBr ₆ /P3HT).....	50
IV.2.5. Effet de l'épaisseur de la couche Cs ₂ AgBiBr ₆ sur les caractéristiques (J _{sc} , Eff, FF, Voc) de la cellule solaire individuelle.....	51
IV.3. Simulation de cellule en silicium inférieure.....	52
IV.3.1. Présentation de la cellule individuelle à base du silicium.....	52
IV.3.2. Paramètres de la cellule individuelle à base de silicium.....	53
IV.3.3. Résultats et discussion.....	54
IV.3.3.1. La caractéristique : courant tension, de la cellule inferieure (a-Si/C-Si/a-Si : H) en fonction de l'épaisseur De la couche active.....	54
IV.3.3.2. Effet de l'épaisseur de la couche C-Si sur les caractéristiques (J _{sc} , Eff, FF, Voc) de la cellule solaire individuelle.....	55
IV.4. Simulation de la cellule tandem pérovskite/Si empilée mécaniquement.....	56
IV.4.1. Présentation de la cellule tandem pérovskite/Si.....	56
IV.4.2. Résultats de simulation de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si.....	57
IV.4.2.1. La caractéristique : courant tension, de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si en fonction de l'épaisseur De la couche active.....	57
IV.5. Rendement quantique.....	58

IV.6. Conclusion.....59

REFERENCES.....60

Conclusion générale

Conclusion générale.....61

Liste des Figures

Figure I.1 : Schéma de principe de la conversion Photovoltaïque.....	4
Figure I.2 : (a) Phénomènes typiques d'absorption et de diffusion du rayonnement solaire à travers l'atmosphère et (b) spectres AM0 et AM1.5	5
Figure I. 3: Structure d'une cellule (à gauche) et son diagramme de bande (à droite)	7
La Figure I.4 : la caractéristique I-V pour une cellule photovoltaïque.....	8
Figure I.5: Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque.....	11
Figure I.6 : Répartition des différents matériaux sur le marché photovoltaïque	11
Figure I.7: Cellule au Silicium Monocristallin.....	12
Figure I.8 : Cellule au Silicium Poly-cristallin.....	12
Figure I.9 : Cellule au Silicium amorphe (couche mince).....	13
Figure I.10: Structure hybride de la pérovskite Tirée de (Gheno, Vedraïne, Ratier, & Bouclé, 2016)	14
Figure I.11 : Exemple d'une cellule multi jonctions	16
Figure II.1 : Représentation de la structure stable de pérovskite des éléments à travers le tableau périodique	20
Figure.II.2: Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs ₂ AgBiBr ₆ . Le réseau d'octaèdres partageant les coins, [AgBr ₆] ⁵⁻ (gris) et [BiBr ₆] ³⁻ (violet), avec les cations Cs (Verts) occupant les sites A-cristallographiques.....	20
FigureII.3: Structure de bande électronique pour Cs ₂ AgBiBr ₆	21
FigureII.4: Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs ₂ AgBiBr ₆ ...22	22
Figure.II.5: Spectre du coefficient d'absorption optique pour Cs ₂ AgBiBr ₆	23
Figure II.6: Structure cristallographique du silicium_cristallin.....	23

Figure II.7: Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc	26
Figure II.8: Coefficient d'absorption du silicium amorphe pour différentes méthode de dépôt..	27
Figure II.9: Coefficient d'absorption du silicium.....	27
Figure II.10: Structures du silicium cristallin et du silicium amorphe.....	28
Figure II.11: Maille primitive de la phase Würtzite du ZnO.....	29
Figure II.12: Dispersion des indices de réfraction n_0 (a), n_e (b).....	30
Figure II.13: Unité de répétition monomère de poly thiophène non substitué.....	31
Figure II.14: Confirmation des triades à base de P3HT.....	32
Figure II.15: Orbitales π conjuguées d'un poly thiophène coplanaire et substituée.....	32
Figure II.16: Coefficient d'absorption de P3HT en fonction de l'énergie des photons absorbés.....	33
Figure III.1 : différentes fenêtres pour introduire les paramètres.....	39
Figure III.2: différentes paramètres pour la couche Si-a.....	41
Figure III.3: Défauts donneurs discrets et continues pour la couche Si-a.....	42
Figure III.4: Défauts accepteur discrets et continues pour la couche Si-a.....	44
Figure III.5 : coefficients d'absorption pour la couche Si-a.....	45
Figure III.6 : le panneau des courbes.....	46
Figure IV.1: Structure de la cellule solaire Pérovskite.....	49
Figure IV.2 : Caractéristiques J(V) de la cellule (ZnO/Cs ₂ AgBiBr ₆ /P3HT) en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.....	51
Figure IV.3 : Variation du paramètre photovoltaïque (VCO, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche Cs ₂ AgBiBr ₆ , Eperov.....	52
Figure IV.4: Structure de la cellule solaire individuelle à base de silicium cristallin.....	53

Figure IV.5 : Caractéristiques J(V) de la cellule (a-Si:H(P)/C-Si/a-Si:H(N)) en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.....55

Figure IV.6 : Variation des paramètres photovoltaïques (VCO, JSC, FF et Eff) en fonction del'épaisseur de la couche C-Si56

Figure IV.7 : Cellule tandem avec cellule supérieure (ZnO/Cs₂AgBiBr₆/P3HT) et une cellule inférieure (a-Si:H(P)/C-Si/a-Si:H(N)).....57

Figure IV.8 : Caractéristiques J(V) de la cellule tandem en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.....58

Figure IV. 9: Rendement quantique pour les trois cellules Simulée en conditions de court-Circuit ($V_{oc}=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.....59

Liste des tableaux

Tableau I.1 : Évolution des rendements records du photovoltaïque sur 2 ans, entre juin 2013 et août 2015 d’après les données du NREL et comparaison entre les différentes filières...	14
Tableau II.1 : Paramètres utilisés dans le calcul de mobilité des porteurs majoritaires dans le silicium cristallin.....	24
Tableau IV.1: Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure de la Figure IV.1.....	49
Tableau IV.2: Les paramètres photovoltaïques de la cellule supérieure à base de Pérovskite.....	52
Tableau IV.3: Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure C-Si.....	53
Tableau IV.4: Les paramètres photovoltaïques obtenus de la cellule C-Si individuelle.....	56
Tableau IV.5: Après le lancement de la simulation, les paramètres photovoltaïques de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si.....	58

Introduction Générale

INTRODUCTION GENERALE

Depuis le début du 21^{ème} siècle, les problèmes énergétiques et environnementaux à l'échelle mondiale sont devenus de plus en plus importants. L'énergie solaire a les avantages d'une énergie inépuisable et propre, c'est donc une solution efficace aux pénuries d'énergie, à la pollution de l'environnement et à l'effet de serre. Les dispositifs photovoltaïques démontrent qu'ils sont prometteurs pour le marché commercial en tant que technologie de conversion d'énergie renouvelable portable, qui consiste à convertir directement la lumière du soleil en électricité sans qu'aucun moteur thermique n'interfère.

Aujourd'hui, le marché photovoltaïque est dominé par les cellules solaires en silicium cristallin (c-Si) sous ses formes multicristallines et monocristallines. Jusqu'à présent, les cellules solaires en silicium cristallin ont atteint une efficacité supérieure à 25% [1].

Les cellules solaires à base de pérovskite (PVK) ont récemment émergé, montrant un développement rapide et ouvrant de nouvelles directions dans le domaine photovoltaïque. L'efficacité record des appareils PVK dépasse désormais 22% [2].

Le développement des énergies renouvelables et de l'énergie solaire a permis une ascension fulgurante des nouvelles technologies au regard des cellules photovoltaïques. Ainsi, malgré une occupation majoritaire du marché par les cellules au silicium, les chercheurs voient les cellules à pérovskites comme le futur des cellules solaires. Pour causes, la pérovskite est un matériau très peu coûteux dont la préparation est plus aisée que le silicium qui nécessite d'être extrait et dont le processus est complexe et très énergivore. Cette technologie, encore à l'état de recherche, s'avère très prometteuse pour l'avenir de l'énergie solaire. Avec des rendements qui ne cessent d'augmenter, ils pourraient à terme dépasser les rendements des cellules au silicium, jamais égalés jusqu'ici. Mais malgré ses nombreux avantages, la pérovskite reste un matériau qui nécessite encore plusieurs années de recherches avant que celles-ci n'aboutissent. Sa fragilité est un frein très important à son développement. En effet, en plus d'une mauvaise résistance à l'eau qui fait baisser leurs performances, les cellules se dégradent au soleil et aucune solution n'a encore été apportée pour permettre une utilisation des panneaux solaires à pérovskites à grande échelle.

Les chercheurs ont réussi à trouver une solution alternative qui consisterait en l'intégration des pérovskites à une cellule photovoltaïque à base de silicium appelées cellules en tandem. Celles-ci ont suscité de grands espoirs pour de futurs modules solaires à haute efficacité. Une équipe

dirigée par le professeur Henry Snaith, pionnier de la cellule solaire à pérovskites, avec les contributions du centre Helmholtz pour les Matériaux et l'Energie de Berlin et de l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne en Suisse, est parvenue à concevoir une structure monolithique de cellule photovoltaïque en tandem silicium/pérovskite. Des améliorations technologiques sur l'association de ces deux matériaux permettraient d'atteindre des performances jamais atteintes avec un rendement jusqu'à 30 % [3].

Une nouvelle génération de matériaux pérovskites comme Cs₂AgBiBr₆ a été proposée [4-5]. Ces matériaux sont inorganiques, stables et non toxiques. En outre, ils sont considérés comme des matériaux utiles pour les applications photovoltaïques puisqu'ils ont été synthétisés avec succès [6]. Les cellules solaires pérovskites basées sur le film Cs₂AgBiBr₆ ont rapporté une efficacité de 2,43% [7].

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier l'influence de l'épaisseur de la couche absorbant sur les performances photovoltaïques des cellules solaires substrate à base de composés cristallin silicium et de Pérovskite puis la cellule tandem Pérovskite (Cs₂AgBiBr₆)/C-Si, utilisant un outil de simulation très puissant et très adaptés à ce genre des structures, s'appel: AMPS-1D.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante:

Après une introduction générale, le premier chapitre présente des généralités sur Généralités sur les cellules photovoltaïques ;

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les propriétés fondamentales des propriétés des Matériaux semi-conducteurs (Zno, Cs₂AgBiBr₆, P3HT, C-Si, a-Si).

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le logiciel AMPS-1D utilisé dans notre étude de simulation.

Dans le quatrième chapitre, des discussions et des interprétations des résultats obtenus par la simulation de notre cellule solaire Tandem à base de Pérovskite/C-Si. Nous clôturerons le travail par une conclusion générale ainsi que des perspectives de ce travail.

Chapitre I

Généralités sur les cellules photovoltaïques

1.1. Historique

En 1839. Le français Antoine Becquerel a découvert la conversion de la lumière en électricité, connue sous le nom d'effet photoélectrique, et exploité cette découverte environ un siècle plus tard.

Dans les années 1950, l'énergie photovoltaïque a été développée pour l'engin spatial et la première a été lancée dans l'espace en [1958] [8]. La seule opération non nucléaire pour l'exploitation de satellites.

Dans les années 1970 et 1980, l'énergie photovoltaïque a été développée pour être utilisée dans des applications sauvages. Depuis lors, la croissance de l'industrie photovoltaïque a été très spectaculaire.

Quelques autres dates :

1839: Alexandre Edmond Becquerel trouve l'effet photovoltaïque. Il constate que certains matériaux sont étincelants quand ils sont exposés à la lumière. Il a montré qu'il s'agissait d'une transformation directe de la lumière en électricité.

1873 : Photoconduction du sélénium découverte par Willoughby Smith.

1954 : Trois chercheurs américains, Gerald Pearson, Daryl Chapin et Calvin Fuller, élaborent une cellule photovoltaïque à haute efficacité. au moment où l'industrie spatiale naissante cherche des solutions nouvelles pour alimenter ses satellites.

1958 : Une cellule avec un rendement de 9 % est développée. Les premiers satellites alimentés par des cellules solaires sont envoyés dans l'espace.

1973 : La première maison PV construite à l'Université de Delaware.

1983 : La première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt une distance de 4000 km en Australie.

1995 : Des programmes de toitures photovoltaïques reliés au réseau ont été lancés au Japon et en Allemagne et sont répandus depuis 2001. Bien que le prix n'ait pas beaucoup de stabilisation, la quantité de modules photovoltaïques expédiés chaque année ne cesse d'augmenter [8].

1.2. Le principe de la conversion Photovoltaïque

La conversion photovoltaïque est définie comme la transformation de l'énergie des photons en énergie électrique grâce au processus d'absorption de la lumière par la matière. Quand la matière absorbe le photon, Il passe une partie de son énergie quand il frappe un électron et le sort littéralement de la matière. Ce dernier était auparavant à un niveau d'énergie faible où il était dans un état stable et puis déplacé à un niveau d'énergie plus élevé, provoquant un déséquilibre

électrique dans le matériau résultant de la formation d'une paire de trou d'électron, de la même puissance électrique. En d'autres termes, la paire de trous d'électrons revient rapidement à l'équilibre en convertissant leur énergie électrique en énergie thermique. De même, tous les photons qui ne peuvent pas être convertis en électricité sont absorbés par la matière sous forme thermique. Le matériau composant des capteurs photovoltaïques à une température interne qui augmente proportionnellement à l'énergie solaire reçue. Le taux de conversion des photons et des électrons est faible car il nécessite un certain nombre de conditions pour que ce phénomène se produise. L'effet thermique est donc majoritaire sur la plupart des capteurs détériorant d'autant plus les performances de ces derniers [9].

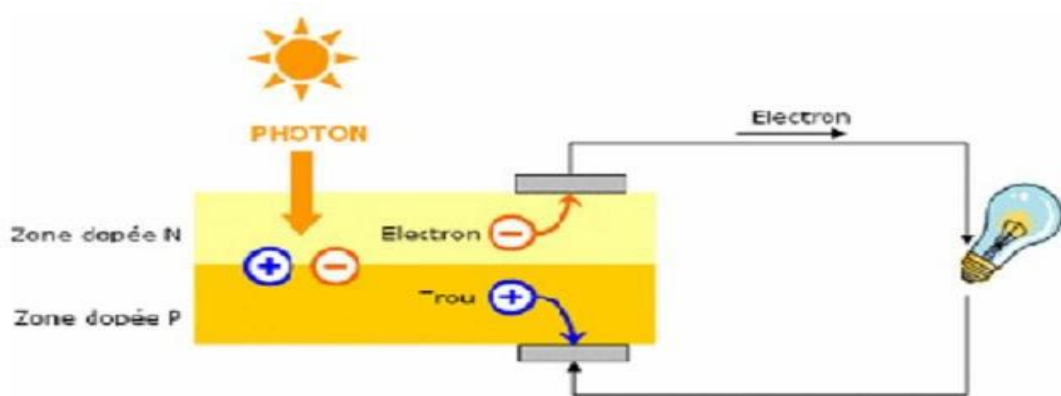
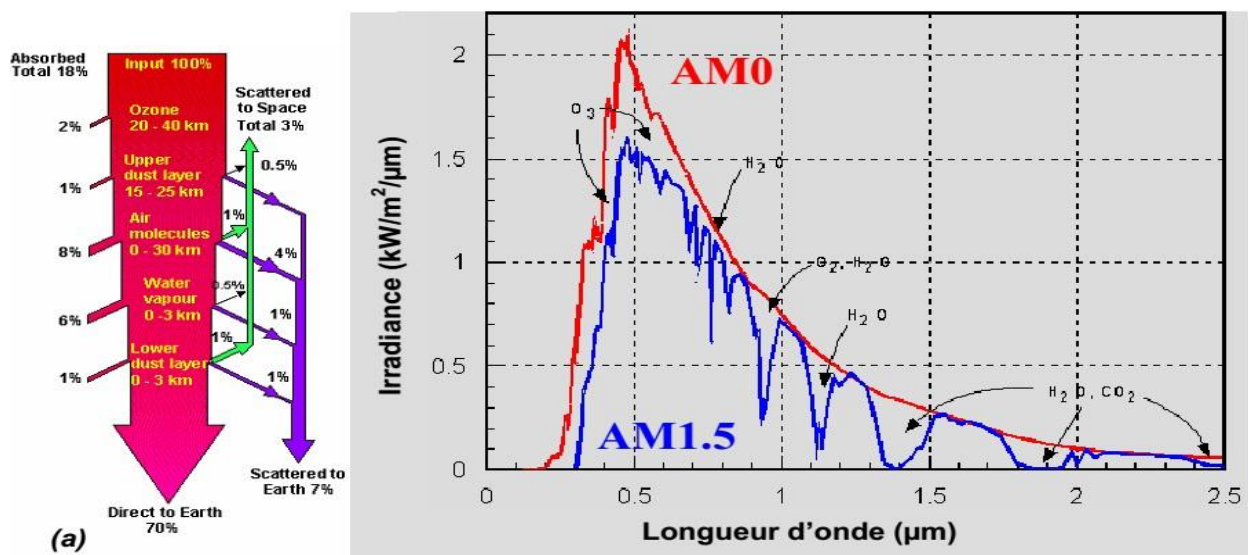


Figure I.1 : Schéma de principe de la conversion Photovoltaïque [10].

Même si le phénomène électrique est secondaire par rapport au phénomène thermique, la restauration d'une partie ou de la totalité de l'électricité est la cible principale des capteurs photovoltaïques que ce soit sous forme de cellules solaires ou de générateurs. Cela est possible, par exemple, grâce à des cellules solaires réalisées en combinant le matériau semi-conducteur dopé P avec d'autres semi-conducteurs dopés N, figure (I.1). L'énergie générée par l'absorption électrique du photon par le matériau est traduite en une paire d'électron-trou. Cette réaction provoque une différence dans la répartition de la charge, créant une différence de tension électrique, qui est appelé effet photovoltaïque. Le fait d'avoir associé deux types de matériaux pour créer une jonction permet de pouvoir récupérer les charges avant que ces dernières ne se soient recombinaées dans le matériau qui redevient alors neutre. La présence de la jonction PN permet ainsi de maintenir une circulation de courant jusqu'à ses bornes. Pour estimer l'énergie totale disponible, le nombre de photons par unité de longueur d'onde est connu pour les applications photovoltaïques. Où la longueur d'onde correspondant au nombre maximum de photons est dans la gamme de 650-670 nm.

I.3. Notion préliminaire sur le rayonnement solaire

La surface du Soleil peut être considérée comme un corps noir avec une température d'environ 5800K, conduisant à un pic d'émission autour de la longueur d'onde de 0.5 μm . Le rayonnement moyen hors atmosphère terrestre est d'environ 1.36 kW/m² [9]. Le croisement de celui-ci entraîne une baisse de l'intensité solaire due en particulier aux conditions climatiques, de la latitude, de la saison et de l'absorption par les molécules présentes dans les différentes couches de l'atmosphère (l'ozone (O₃), vapeur d'eau (H₂O), dioxyde de carbone (CO₂)). Ceux-ci absorbent des photons d'énergie proches de leur énergie liaison, qui mène à des trous dans le spectre solaire visibles au sol (figure I.2.a). La poussière et les aérosols présents dans l'atmosphère provoquent une réduction globale de la puissance incidente sur toute la gamme



spectrale.

Figure I.2 : (a) Phénomènes typiques d'absorption et de diffusion du rayonnement solaire à travers l'atmosphère et (b) spectres AM0 et AM1.5 [11].

Pour de définir une référence indépendante de la localisation sur Terre, le concept de d'Air Masse (AM) est introduite : c'est la distance parcourue par la lumière dans l'atmosphère normalisée par la plus petite distance possible (i.e. lorsque le soleil est au zénith). La masse d'air donne la diminution de puissance due au passage de l'atmosphère. On utilise la notation suivante : AM1 quand le soleil est au zénith et (AM0) hors atmosphère, Elle est définie comme suit :

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta)} \quad (I.1)$$

Avec θ est l'angle entre le soleil et le zénith.

Le spectre standard est AM1.5G, correspondant à un rayonnement d'environ 1 kW/m² (G globalement car il prend en compte les rayonnements directs et diffus). La partie la plus importante du spectre solaire en surface concerne le domaine du visible (390-780 nm) et du proche infrarouge (Figure I-3.b).

L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée par la formule empirique suivante:

$$I_D = 1,353 (0,7^{AM})^{0,678} \quad (I.2)$$

Avec I_D en kW/m² [12].

Nous concluons de ce qui précède, que la partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la terre concerne le domaine du visible et de proche infrarouge. Les irradiances définies par le nombre AM ne tiennent toutefois pas compte de la variété des conditions climatiques et de l'altitude du lieu.

La terre montre donc de grandes disparités dans la répartition de l'énergie solaire: les ensoleillements moyens sur l'année peuvent atteindre 7 kW/m²/jour dans le nord de l'Australie et au Botswana. En Europe occidentale, la puissance se situe autour de 3kW/m²/jour pour les pays comme l'Espagne, à moins de 1 KW/m²/jour pour le sud de la Suède. La France est soumise à une moyenne annuelle comprise entre 1.5 et 3.1kW/m²/jour selon les régions [12].

1.4. Fonctionnement et caractéristiques de sortie d'une cellule photo- voltaïque:

1. 4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Une cellule photovoltaïque « PV » est basée sur le phénomène physique appelé effet photovoltaïque qui consiste à établir une force électromotrice lorsque la surface de cette cellule est exposée à la lumière (photons). La tension générée peut varier entre 0.3 et 0.7V en fonction du matériau utilisé et de sa disposition ainsi que de la température de la cellule [13].

Cette transformation s'articule autour des trois mécanismes ci-dessous:

- L'absorption de photon
- La conversion de l'énergie absorbée en charges électriques libres.
- La collecte de ces particules dans un circuit électrique extérieur.

Une cellule solaire est une jonction pn éclairée. Lorsque la première partie N est mise en contact

avec la deuxième partie P du même monocristal, les électrons majoritaires du côté n diffusent vers le côté p ou ils sont minoritaires en laissant derrière eux des atomes donneurs ionisés positivement. Les trous majoritaires du côté p diffusent vers le côté n ou ils sont minoritaires en laissant derrière eux des atomes accepteurs ionisés négativement. Au niveau de la jonction, réalisation d'une zone de charge dépourvue de porteurs majoritaires libres. Cette zone de charge d'espace (ZCE) crée un champ électrique interne qui s'oppose au déplacement des porteurs majoritaires ainsi l'équilibre thermodynamique s'établit. En ajoutant des contacts métalliques aux régions n et p, une diode est obtenue. Ces contacts métalliques doivent assurer un contact ohmique avec le semi-conducteur. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie supérieure ou égale à la bande interdite transfèrent leur énergie aux atomes. Chacun atome transfère un électron de la bande de valence (BV) vers la bande de conduction (BC) tout en laissant un trou qui peut se déplacer et créer une paire électron-trou. Lorsque cette paire est créée dans la jonction ou proche de celle-ci, elle sera séparée par le champ électrique interne. Si une charge est placée aux bornes de la cellule (PV), les électrons de la région N rejoignent les trous de la région P via la connexion extérieure, donnant naissance à une différence de potentiel ainsi, un courant électrique circule (figure I.3).

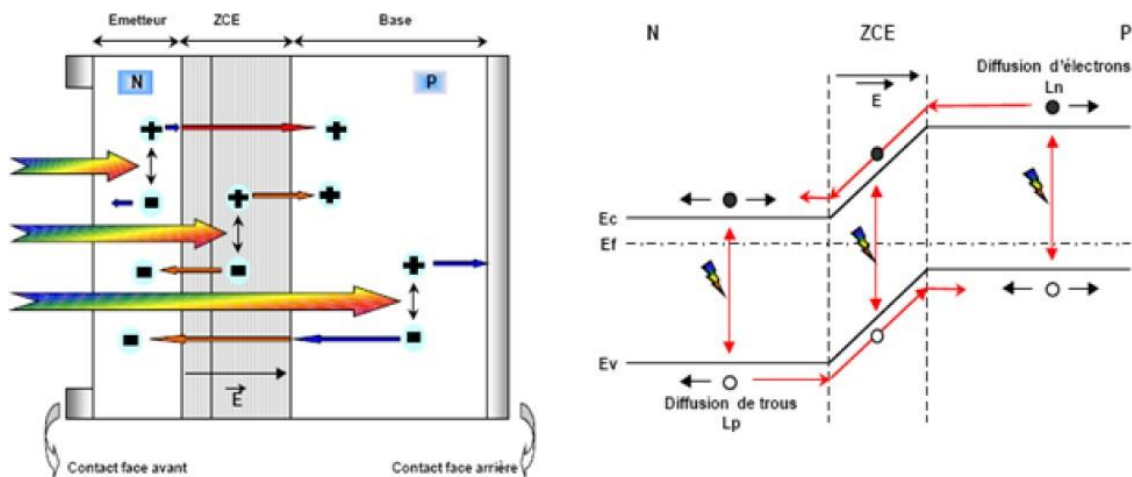


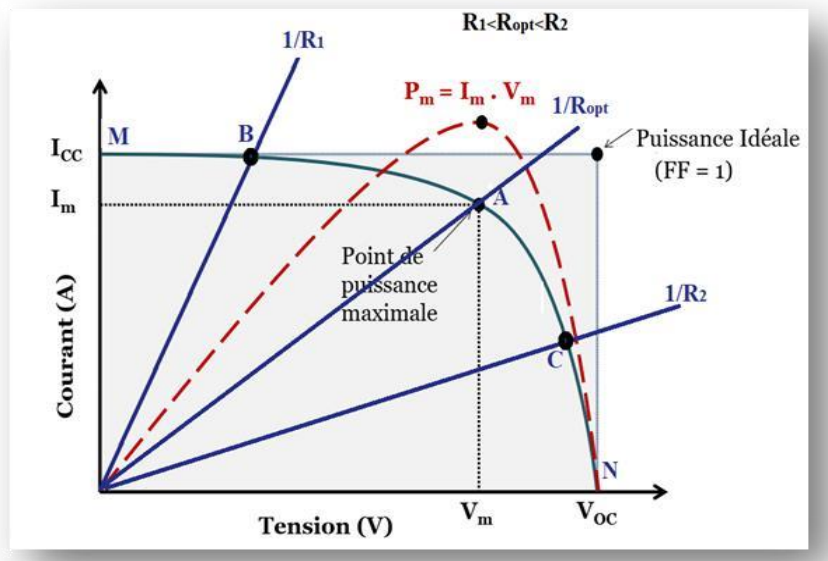
Figure I. 3: Structure d'une cellule (à gauche) et son diagramme de bande (à droite) [14].

I. 4.2. Caractéristique électrique et paramètres de la cellule photovoltaïque

I. 4.2.1. Caractéristique courant - tension (I-V)

Une cellule solaire photovoltaïque est une jonction PN de grande surface qui, exposée à la lumière (photons), génère un courant électrique. Les caractéristiques électriques de la cellule

pour différents éclairagements sont données sur la figure (I.4).



La Figure I.4 : la caractéristique I-V pour une cellule photovoltaïque

Si une résistance variable R est raccordée aux terminaux de la cellule (PV) le point de fonctionnement est déterminé par l'intersection de la caractéristique $I=f(V)$ de la cellule avec la courbe de la charge. Pour une charge résistive, la courbe de charge est une droite de pente $1/R$. Par conséquent, si la résistance R est petite, le point de fonctionnement est situé dans la région MB de la courbe. Dans cette région le courant I varie peu en fonction de la tension, il est presque égal au courant de court-circuit. La cellule se comporte alors comme un générateur de courant. D'autre part, si la résistance R est grande, la cellule fonctionne dans la région CN. Ici, la tension de la cellule varie peu en fonction du courant électrique I : la cellule possède en tant que source de tension qui est presque égale à la tension de fonctionnement à vide [15].

I.4.2.2. Paramètre des cellules photovoltaïques

Il existe de nombreux paramètres qui permettent de caractériser une cellule solaire [16]. Ces paramètres sont appelés paramètres photovoltaïques et sont dérivés de la caractéristique $I(V)$:

- Le courant de court-circuit I_{cc} (obtenu pour $V=0$) ;
- La tension en circuit ouvert V_{co} (obtenu pour $I=0$) ;
- Le facteur de forme FF;

- Le rendement de conversion d'énergie η ;
- La réponse spectrale RS;

a) Le courant de court-circuit, I_{cc}

Il s'agit du courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule (PV) est nul (en prenant $V=0$ dans le schéma équivalent) exprimé en mA. C'est le courant maximum que la cellule peut fournir. Il augmente linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et la température.

b) La tension de circuit ouvert, V_{co}

La tension de circuit ouvert exprimée en millivolts (mV), est mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans la cellule. C'est à dire : $V_{co} = V (I=0)$.

Cela dépend de la différence de la résistance Shunt et des travaux de sortie des électrodes. Elle décroît avec la température et varie avec l'intensité lumineuse.

Pour une cellule solaire idéale la tension de circuit ouvert est donnée par :

$$V_{co} = Q U_t \ln \left[\frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right] \quad (I.3)$$

c) Le facteur de forme, FF

Un paramètre important dans la caractéristique $I(V)$ est généralement utilisé pour définir la qualité d'une cellule ou d'un générateur PV : c'est le fill factor (FF) ou le facteur de remplissage. Ce coefficient exprime le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer la cellule notée P_{max} et la puissance formée par le rectangle $I_{cc} * V_{co}$. Plus la valeur de ce facteur est grande, plus la puissance disponible est grande. Par conséquent, Les meilleures cellules fera l'objet de compromis techniques afin d'atteindre le plus possible les caractéristiques souhaitées [16]. Il est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{sc} V_{co}} \quad (I.4)$$

d) La puissance maximal, P_m

La puissance débitée par une cellule solaire est maximum quand le produit $(V.I)$ est maximum. Si V_m I_m sont la tension et le courant pour lesquels on a ce maximum, la puissance maximum est la surface du plus grand rectangle de côtés V_m et I_m qu'on peut inscrire sous la courbe $I(v)$.

$$P_m = (IV)_{max} = I_m V_m \quad (I.5)$$

e) Le rendement de conversion (η)

Le rendement de conversion (efficacité) est exprimé en pourcentage (%), indiquant l'efficacité de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale (P_{max}) fournie par la cellule (PV) et la puissance lumineuse incidente (P_i). Il est défini par la relation suivante :

$$\eta = \frac{P_m}{P_i} \quad (I.6)$$

f) La réponse spectrale, $SR(\lambda)$

La réponse spectrale d'une cellule solaire est le rapport du courant total produit par la cellule au courant pouvant être généré pour chaque longueur d'onde du spectre incident. Il fournit des informations sur la réaction de la radiation incidente et permet de fixer la gamme d'utilisation de la cellule. Il est défini par la relation suivante:

$$SR = \frac{I_{ph}(\lambda)}{qF(\lambda)(1 - R(\lambda))} \quad (I.7)$$

g) Rendement quantique de la cellule QE

Le rendement quantique définit la probabilité d'un transfert énergétique à partir d'un photon incident à un électron du cristal, ce paramètre décrit la qualité et la quantité de la conversion photovoltaïque dans la cellule solaire. Il est défini par la relation suivante:

$$QE(\lambda) = \frac{\text{nombre d'électrons collectés}}{\text{nombre de photons incidents}} = \frac{N_e}{N_\nu} = \frac{I(\lambda)/q}{\varphi(\lambda)} \quad (I.8)$$

I.5. Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

Le schéma de base équivalent d'une cellule solaire photovoltaïque suit le modèle à une diode. Une cellule idéale à jonction soumise à un flux lumineux, fonctionne comme un générateur de courant, Sa caractéristique est comparable à celle d'une jonction. Le schéma équivalent d'une cellule solaire est alors représenté par une diode idéale en parallèle avec une source de courant. Les résistances séries (R_s) et shunt (R_p) modélisent les pertes engendrées par la résistivité des couches et la présence de courants de fuite [17]. Ce modèle est représenté par le schéma électrique suivant (Figure I.5).

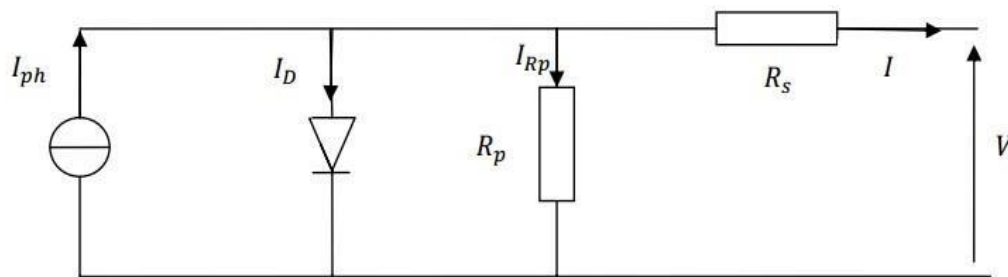


Figure I.5: Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

R_s : représente la résistance série. Elle est attribuée aux différentes résistances électriques que le courant rencontre sur son parcours au niveau des différentes couches de la cellule (couches et contacts). Cette résistance doit être la plus faible possible [15].

R_p : représente la résistance shunt qui prend en compte les fuites de courant qui interviennent entre les bornes opposées d'une photopile. Cette résistance doit être le plus grand possible.

I.6. Les différentes filières photovoltaïques

Deux grandes familles de technologies existent actuellement : la première est basée sur le silicium monocristallin et le silicium multi-cristallin, qui représente environ 85% de la production mondiale. La deuxième catégorie est la catégorie des couches minces, comprenant les cellules en silicium amorphe, poly-cristallin ou microcristallin, celle au tellure de cadmium, au cuivre indium sélénium et à l'arséniure de gallium. Par ailleurs, d'autres technologies sont testées, comme les cellules organiques (polymères ou à base de fullerènes).

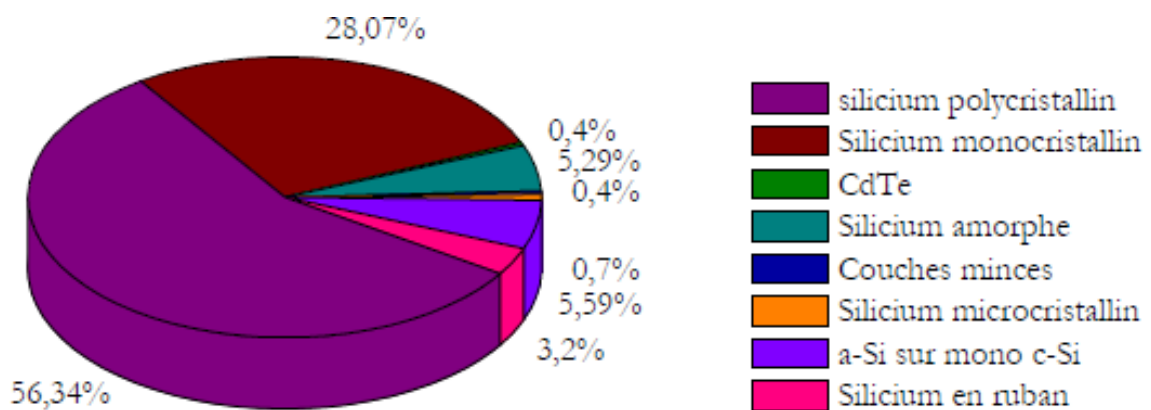


Figure I.6 : Répartition des différents matériaux sur le marché photovoltaïque [18].

1.6.1 La filière silicium cristallin

1.6.1.1 Le silicium monocristallin

Les panneaux PV avec des cellules monocristallines sont les photopiles de la première génération, elles sont élaborées à partir d'un bloc de silicium cristallisé en un seul cristal. Les cellules à base de Si monocristallin ont un rendement de 12 à 18%, elles peuvent produire beaucoup d'énergie sur un petit espace (environ 150 WC/m²) et ont une durée de vie de 25 ans. Pendant ces cellules ne fonctionnent qu'avec beaucoup de lumière solaire et les méthodes de production sont laborieuses et coûteuses [19].

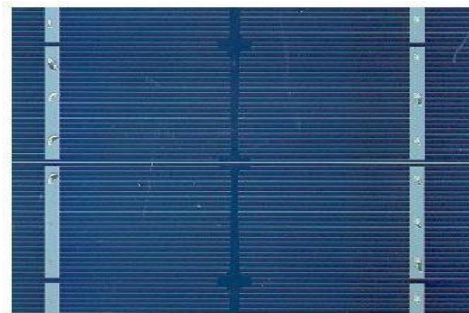


Figure I.7: Cellule au Silicium Monocristallin.

1.6.1.2. Le silicium multi-cristallin (Poly-cristallin)

Il est obtenu par coulée dans une lingotière, où il refroidit lentement pendant une dizaine d'heures. Il est moins énergivore à développer. C'est un matériau moins pur. La comparaison entre les deux a révélé que l'efficacité de conversion cellulaire des cellules en silicium monocristallin est légèrement supérieure à celle des cellules en silicium poly-cristallin, mais le coût des premières est supérieur à celui des secondes, et le silicium poly-cristallin est le plus largement utilisé [20].



Figure I.8 : Cellule au Silicium Poly-cristallin.

1.6.2. La filière couches minces

1.6.2.1. Le silicium amorphe (a- Si: H)

Les cellules solaires à base de silicium amorphe sont fabriquées en déposant une ou plusieurs couches minces sur un substrat de verre. Le rendement de ces cellules est très faible, de l'ordre de 5% à 8%, et il y a une perte de rendement (phénomène de "stabilisation à la lumière") pendant les premiers mois d'utilisation. De plus ces cellules ont des durées de vie plus courtes que les siliciums cristallins (environ 10 ans) et leurs processus de fabrication ne sont pas bien maîtrisés.

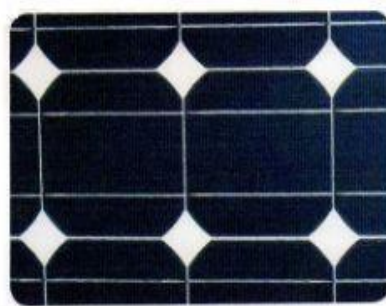


Figure I.9 : Cellule au Silicium amorphe (couche mince).

1.6.2.2. Le tellurure de cadmium (CdTe)

Le faible rendement des cellules à base de silicium amorphe a incité les scientifiques à rechercher des alternatives. Le matériau le plus prometteur est le tellurure de cadmium (CdTe), qui offre la possibilité de produire des modules à moindre coût, avec un rendement de 10 %, et présente l'avantage de la forte absorption du CdTe. Cependant, la toxicité du matériau freine le développement de cette technologie [21].

1.6.2.3. Le di-séléniure de cuivre et indium (CIS ou CIGS)

Cette filière présente un fort potentiel de développement dans le futur avec des rendements de plus de 20% en laboratoire. Cependant, les matériaux nécessaires à la fabrication de ce type de cellule ne sont pas disponibles en grandes quantités [20].

1.7. La filière des cellules organiques

Les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable face aux technologies utilisant des matériaux inorganiques. L'intérêt de ces cellules vient également du fait que, contrairement aux cellules à base de matériaux inorganiques, elles

présentent de nombreux avantages : elles peuvent être déposées sur de grandes surfaces, sont faciles à fabriquer et à manipuler, elles peuvent être fabriquées sur des substrats souples, et grâce à la fabrication Et avec des coûts de matériaux inférieurs, ces cellules devraient être globalement nettement moins chères que leurs concurrentes. En revanche, leurs durées de vie actuelles sont considérées comme inférieures à celles des cellules inorganiques, et leurs rendements de conversion sont plus faibles [22].

1.8. La filière des pérovskites:

C'est un nouveau type de cellule photovoltaïque qui n'a pas encore quitté le laboratoire. Ce domaine est considéré comme la technologie la plus prometteuse pour les systèmes solaires photovoltaïques dans un avenir proche. Les cellules solaires en pérovskite d'aujourd'hui sont une alternative intéressante aux cellules en silicium qui dominent le marché aujourd'hui [20].

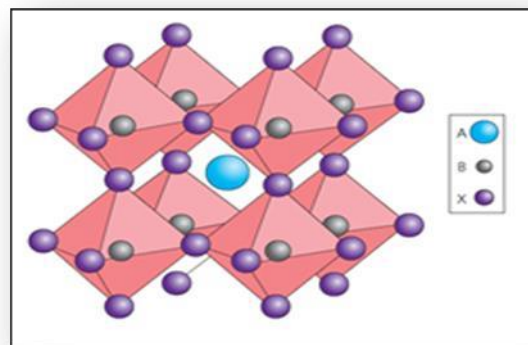


Figure I.10: Structure hybride de la pérovskite Tirée de (Gheno, Vedraïne, Ratier, & Bouclé, 2016) [23].

Comparé au silicium et à la pérovskite, le premier a besoin de 30 ans pour atteindre un record de 25,7 %, tandis que la pérovskite peut atteindre 20 % d'efficacité en seulement 6 ans. De plus, la pérovskite a 10 fois la capacité d'absorption des photons du silicium et a une bonne capacité de séparation des charges et une bonne mobilité. Malgré ces propriétés, les cellules pérovskites ne peuvent concurrencer les cellules à base de silicium car elles se dégradent à partir de 40°C et deviennent instables lorsque l'humidité dépasse 35%. Par conséquent, les chercheurs ne sont pas toujours intéressés à trouver des rendements plus élevés, ils cherchent également à augmenter la stabilité de ces cellules [20].

Tableau I.1 : Évolution des rendements records du photovoltaïque sur 2 ans, entre juin 2013 et août 2015 d'après les données du NREL et comparaison entre les différentes filières.

Type de cellule	Rendement (%) juin 2013	Rendement (%) août 2015
Multi-jonctions sous concentration	44	46
Tandem sous éclairage standard	30,8	31,1
Silicium monocristallin	25	25,6
CIGS	20,4	21,7
CdTe	18,7	21,5
Silicium polycristallin	20,4	20,8
Pérovskite hybride	14,1	20,1 (20,8*)
Couches minces Si	13,4	13,6
Cellules organiques	11,5	11,5
Cellules à particules quantiques	7	9,9

1.9. Cellules multi-jonctions à haut rendement

Une cellule solaire multi-jonction (MJ) est une cellule solaire avec plusieurs jonctions p-n constituées de différents matériaux semi-conducteurs. La jonction pn de chaque matériau génère un courant électrique en réponse à une longueur d'onde différente de la lumière. L'utilisation de plusieurs matériaux semi-conducteurs permet d'absorber une plus large gamme de longueurs d'onde, ce qui améliore la lumière du soleil de la cellule en efficacité de conversion d'énergie électrique [24].

Actuellement, les meilleurs exemples de laboratoire de cellules solaires conventionnelles en silicium cristallin ont des rendements compris entre 20% et 25%, tandis que des exemples de laboratoire de cellules multi-jonctions ont montré un rendement supérieur à 46% sous une lumière solaire concentrée. Des exemples commerciaux de cellules en tandem peuvent atteindre 30% sous un éclairage solaire unique, augmentant jusqu'à environ 40% sous une lumière solaire concentrée. Cependant, cette efficacité est obtenue au prix d'une complexité et d'un prix de fabrication accrus. Jusqu'à présent, son prix élevé et son rapport qualité-prix élevé ont limité son utilisation dans des travaux spéciaux, en particulier dans le secteur aérospatial, où un rapport résistance/poids élevé est souhaitable. Dans les applications terrestres, ces cellules solaires émergent dans les condenseurs photovoltaïques à condensation (CPV), avec un nombre croissant d'installations dans le monde [25].

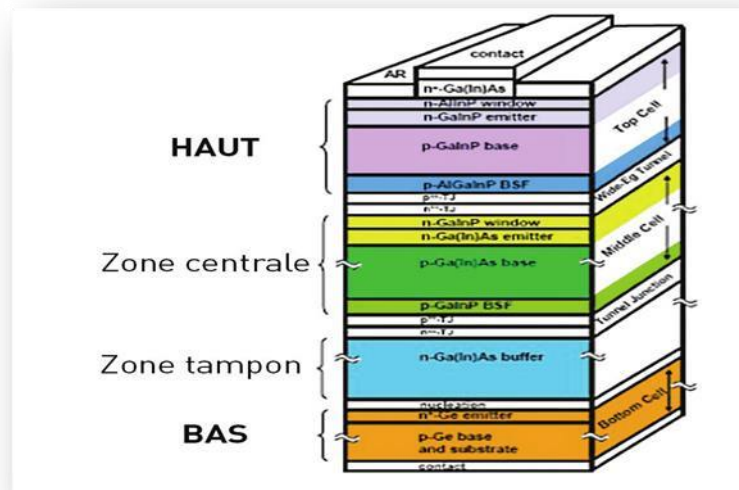


Figure I.11 : Exemple d'une cellule multi jonctions [26].

I.10. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le concept théorique et les informations générales sur les cellules solaires. Ainsi, nous avons d'abord parlé du principe de la conversion Photovoltaïque. Ensuite, nous avons parlé de la notion préliminaire sur le rayonnement solaire et l'interaction rayonnement/semi-conducteur, fonctionnement et caractéristiques de sortie d'une cellule photo- voltaïque, Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque, et les différentes filières photovoltaïques.

REFERENCES

- [1] X. Wen, X. Zeng, W. Liao, Q. Lei, S. Yin, "An approach for improving the Carriers Transport properties of a-Si:H/ C-Si heterojunction solar cells With efficiency of more Than 27% ", *Solar energy* 96,168-176,(2013).
- [2] Michele De Bastiani, Rawan Jalmoed, Jiang Liu, Christina Ossig, Ale Vlk, Karol Vegso, Maxime Babics, Furkan H. Isikgor, Anand S. Selvin, Randi Azmi, Esma Ugur, Swarnendu Banerjee ... "Monolithic Perovskite/Silicon Tandems with >28% Efficiency: Role of Silicon-Surface Texture on Perovskite Properties" 09 December (2022).
- [3] Emiliano Bellini, "Helmholtz Center achieves 29.80% efficiency for perovskite/silicon tandem solar cell" November 22, (2021).
- [4]. Zhang, Z., et al., Improvement of Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cell by rubidium doping. *Organic Electronics*, 2019. 74: p. 204-210.

- [5] Fu, R., et al., Pressure-induced structural transition and band gap evolution of double perovskite Cs₂AgBiBr₆ nanocrystals. *Nanoscale*, 2019. **11**(36): p. 17004-17009.
- [6]. García-Espejo, G., et al., Mechanochemical synthesis of three double perovskites: Cs₂AgBiBr₆, (CH₃NH₃)₂TlBiBr₆ and Cs₂AgSbBr₆. *Nanoscale*, 2019. **11**(35): p. 16650-16657.
- [7]. Greul, E., et al., Highly stable, phase pure Cs₂AgBiBr₆ double perovskite thin films for optoelectronic applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 2017. **5**(37): p. 19972-19981.
- [8] Réalisation de Parc Solaire, Le " Photovoltaïque ", M3P Solar : (2009).
- [9] Infos fiches-énergie, Energies Renouvelables (ER), institut bruxellois pour la gestion de l'environnement, FEVRIER (2009).
- [10] S. Norddine, "Thèse de Magister à l'université de Tlemcen Décembre" (2011).
- [11] C. HONSBURG, S.BOWDEN "Photovoltaics": Devices", Systems and Applications [CDROM Sydney], Australia: University of New South Wales, (1998).
- [12] N. Oleksiy, " Simulation, fabrication et analyse des cellules photovoltaïque à contacts arrières interdigités", thèse de doctorat, Institut nationale des sciences appliquées, Lyon, (2005).
- [13] A. labouret et M. viloz préface de jean louisbal "Energie solaire photovoltaïque, livre 4 édition, (2008).
- [14] F. Abdo, "croissance des couches minces de silicium par épitaxie en phase liquide à basse température pour application photovoltaïques". Institut national des sciences appliquées de Lyon, (2007).
- [15] K.E .BENDJEBBAR "Amélioration des rendements des cellules photovoltaïques à filière silicium " thèse de doctorat Année universitaire (2020 – 2021).
- [16] R. Maouedj, "Application de l'énergie photovoltaïque au pompage hydraulique sur les sites de Tlemcen et de Bouzareah". Mémoire De Magistère Décembre (2005).
- [17] GOUFI Meriem, HAMDOUNI Badr " Etude et Simulation D'une Cellule Photovoltaïque à Pérovskite ", Mémoire de Master, Université Larbi Bun M'Hidi O.E.B (2020/2021).
- [18] Le baromètre du photovoltaïque. Systèmes solaires no154, pp. 41-52, (2003).
- [19] Annel , Michel L "Energie solaire photovoltaïque", livre, 3ème édition
- [20] J. Sakai, T. Taime, K. Saito. *Organic Electronics*, 9, 582-590 (2008).
- [21] K. AMARA, "Contribution à l'étude d'une conception d'une centrale photovoltaïque de puissance (1MW) interconnectée au réseau de distribution électrique moyenne tension", thèse de magister, université de Tizi-Ouzou, (2015).

[22] M. BELARBI, ‘Modélisation des paramètres électriques d’une cellule solaire sensibilisée par colorant’, mémoire de master, université de Tlemcen, (2013).

[23] Moulay Ahmed SLIMANI ‘Cellules solaires pérovskites imprimées et optimisation des couches pérovskites pour les cellules tandems ’, ÉCOLE DE TECHNOLOGIE SUPÉRIEURE UNIVERSITÉ DU QUÉBEC (2019).

[24] <https://stringfixer.com>

[25] <https://www.hisour.com>

[26] <https://www.google.com/> image

Chapitre II

*Propriétés fondamentales des
matériaux semi-conducteurs
(ZnO, Cs₂AgBiBr₆, P3HT, C-
Si, a-Si).*

II.1. Introduction

L'énergie solaire photovoltaïque est générée par la conversion directe d'une partie du rayonnement solaire en énergie électrique. Ce processus de conversion s'effectue au moyen d'une cellule photovoltaïque (PV) qui repose sur un phénomène physique appelé effet photovoltaïque. Les cellules photovoltaïques sont composées d'un matériau semi-conducteur, le plus souvent du silicium. Ce matériau se situe entre les isolants et les conducteurs en termes de conductivité électrique. Il présente une conductivité électrique moyenne, mais suffisante pour permettre le passage d'un courant électrique, notamment lorsqu'il est dopé (c'est-à-dire qu'on y a ajouté des charges positives ou négatives).

Dans ce chapitre, nous allons présenter quelques propriétés de base de certains des matériaux utilisés dans la fabrication des cellules photovoltaïques. Nous aborderons les propriétés électriques, optiques, structurales ainsi que d'autres propriétés de matériaux tels que : e très nombreux efforts de recherche ont été réalisés sur un grand nombre de matériaux depuis une quarantaine d'années, afin d'arriver à des cellules photovoltaïques qui possèdent un bon rendement de conversion avec un faible coût.

Dans ce chapitre, nous présenterons quelques propriétés des matériaux que nous avons choisis lors de la réalisation de nos travaux:

- Pérovskite(Cs₂AgBiBr₆).
- Silicium cristallin (C-Si).
- L'oxyde de zinc(ZnO).
- Silicium amorphe hydrogéné (a-Si).
- Poly (3-hexylthiophène) (P3HT).

II.2. Matériaux Pérovskite

Récemment, Pb-free halide double pérovskites (HDPs) [1] avec une formule de A₂BIB₃X₆ ont émergé comme candidats potentiels pour les absorbeurs PV pour surmonter la toxicité et problèmes d'instabilité inhérents à MAPbI₃. Outre les applications PV classiques, les HDP sont également des matériaux fonctionnels prometteurs dans de nombreux autres domaines tels que les rayons X détecteurs.

Nous nous sommes ensuite référés au tableau périodique pour observer les éléments idéaux pour des structures LFDP stables comme le montre la figure II.1 Sun et coll. [2].

1	1																	2	
	H																	He	
2	3	4																	10
	Li	Be																	Ne
3	11	12																	18
	Na	Mg																	Ar
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	
	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Nh	Fl	Mc	Lv	Ts	Og	
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	

57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Figure II.1 : Représentation de la structure stable de pérovskite des éléments à travers le tableau périodique [3].

II.2.1. Double perovskites Based on Bi (III) and Ag (I)

Une nouvelle génération de matériaux pérovskites comme Cs₂AgBiBr₆ a été proposée [4-5]. Ces matériaux sont inorganiques, stables et non toxiques. En outre, ils sont considérés comme des matériaux utiles pour les applications photovoltaïques puisqu'ils ont été synthétisés avec succès [6]. Les cellules solaires pérovskites basées sur le film Cs₂AgBiBr₆ ont rapporté une efficacité de 2,43% [7].

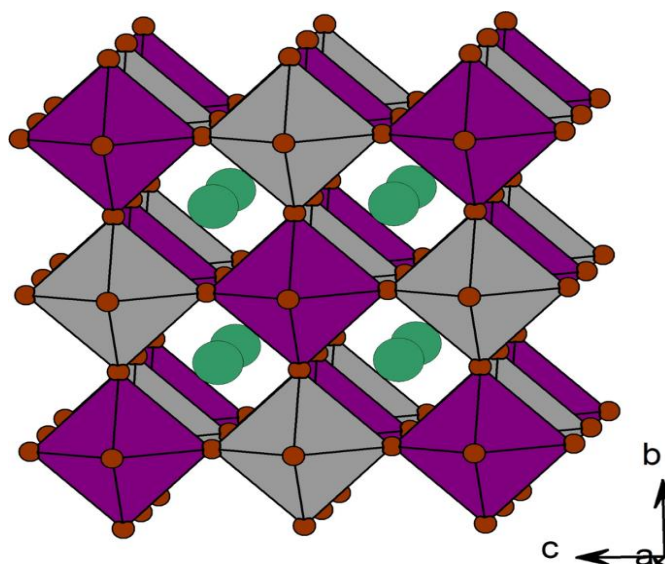


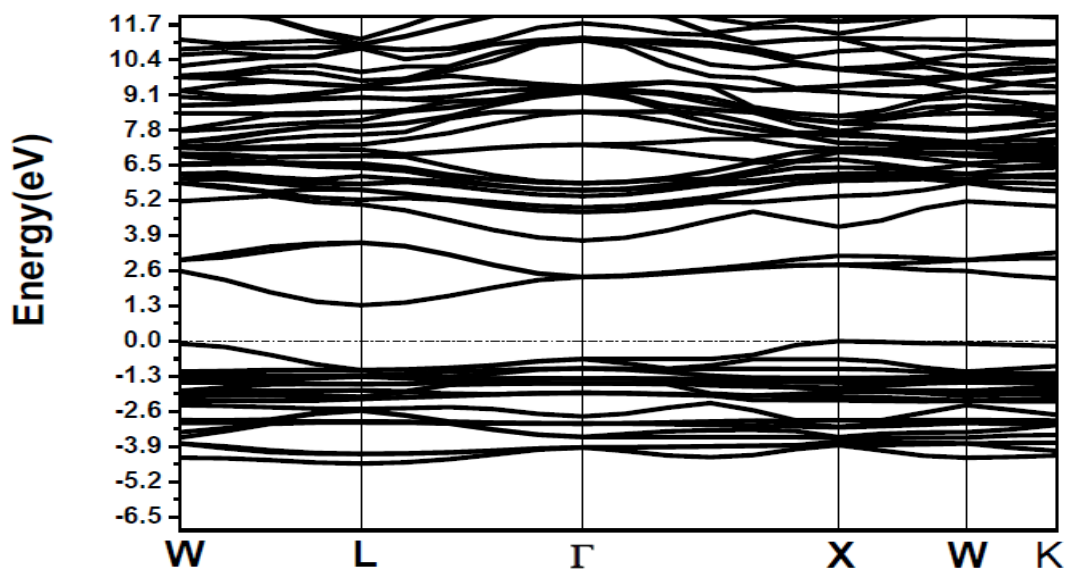
Figure.II.2: Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs₂AgBiBr₆. Le réseau d'octaèdres partageant les coins, [AgBr₆]⁵⁻ (gris) et [BiBr₆]³⁻ (violet), avec les cations Cs (Verts) occupant les sites A-cristallographiques.

II.2.2. Propriétés des matériaux pérovskites

- Propriétés électroniques

La structure électronique des bandes est un outil utile pour la recherche sur les propriétés électroniques et optiques des semi-conducteurs [8-9]. La connaissance précise de ces paramètres est une information importante pour la synthèse et la fabrication de dispositifs basés sur ces semi-conducteurs [10-11]. À cet égard, la structure électronique des bandes de la double pérovskite Cs₂AgBiBr₆ a été calculée. Nos résultats sont affichés dans la figure II.3. L'image semble qualitativement similaire à celles d'autres matériaux semi-conducteurs [12, 13].

Cela indique que le matériau en question est un semi-conducteur. En observant la figure III.5, on peut noter que le maximum de la bande de valence se situe au point de symétrie élevée L de la zone de Brillouin, tandis que le minimum de la bande de conduction se produit au point Γ . Cela suggère que le matériau en question est un semi-conducteur à gap indirect (L- Γ). La valeur calculée de ce gap de bande est de 1,32 eV, tandis que la valeur expérimentale est de 2,19 eV [14].



FigureII.3: Structure de bande électronique pour Cs₂AgBiBr₆.

FigureII.4. montre les densités partielles d'états (PDOS) du matériau double pérovskite Cs₂AgBiBr₆ qui correspondent aux structures de bandes électroniques présentées dans la FigureII.2. Le niveau de Fermi est défini comme étant à l'énergie zéro. Grâce au diagramme de densité partielle des états, nous pouvons connaître les orbitales qui composent la bande de valence et la bande de conduction, ainsi que les orbitales qui dominent dans chaque bande. Nous

remarquons que l'orbitale dominante dans la bande de valence est p-Br, tandis que l'orbitale p-Bi et dans une moindre mesure l'orbitale s-Ag dominant la bande de conduction. La présence des états Ag 4d dans la bande de valence contribue à réduire la bande interdite et est en partie responsable de la bande interdite indirecte de ces phases.

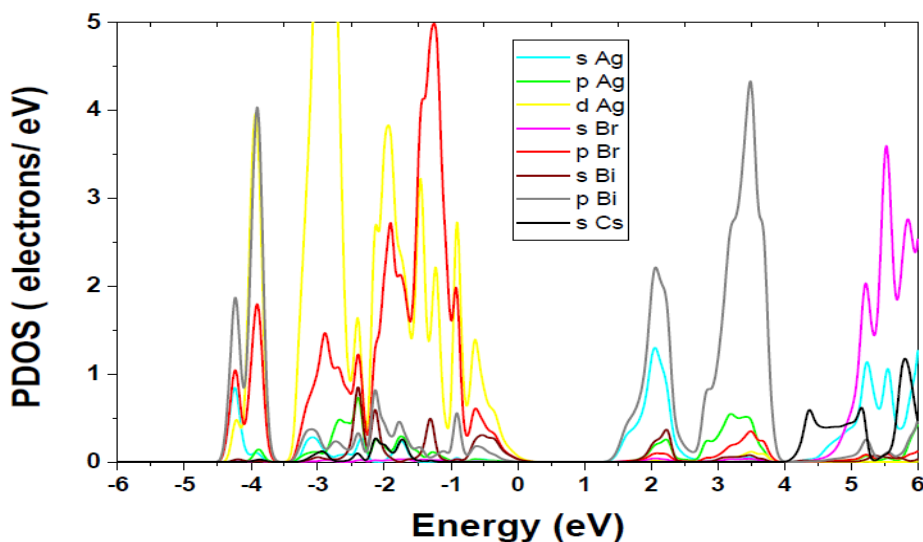


Figure II.4: Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs₂AgBiBr₆.

II.2.3. Coefficient d'absorption

Les caractéristiques optiques des semi-conducteurs sont des paramètres physiques essentiels dans la modélisation des structures quantiques [15, 16]. La lumière incidente d'une longueur d'onde spécifique pénètre dans un matériau et parcourt une certaine distance avant d'être absorbée. Le coefficient d'absorption [17-18] est un paramètre physique qui décrit cette distance. L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons incidents est représentée à la Figure II.3. Il est intéressant de noter que pour les énergies d'incidence des photons inférieures au seuil d'absorption fondamental, le coefficient d'absorption est presque nul avant d'augmenter en amplitude. Cela peut s'expliquer par une augmentation du nombre d'électrons ayant suffisamment d'énergie pour interagir avec les photons. L'amplitude du coefficient d'absorption optique est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. En ce qui concerne le matériau étudié, il présente une bonne absorption de la lumière dans la région du spectre visible. La Figure II.5 montre que Cs₂AgBiBr₆ présente une très forte absorption optique dans la partie haute du spectre solaire, avec un coefficient d'absorption de l'ordre de 10⁴ cm⁻¹.

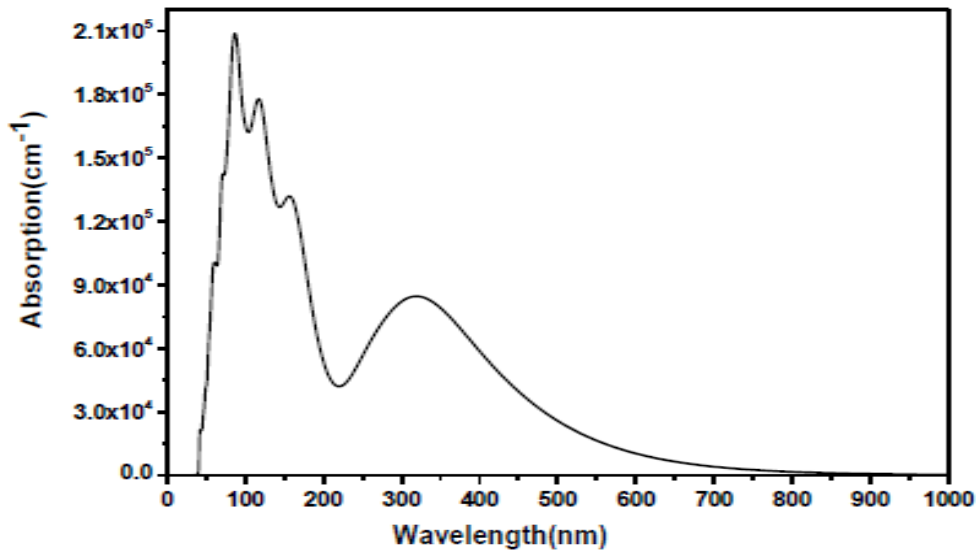


Figure.II.5: Spectre du coefficient d'absorption optique pour Cs₂AgBiBr₆.

En fait, des cellules solaires utilisant Cs₂AgBiBr₆ comme couche active ont été démontrées par Greul et al. [7], et des rendements de conversion de puissance de 2,5% ont été rapportés.

II.3. matériaux silicium cristallin

II.3.1. La structure silicium cristallin

Le silicium, un semi-conducteur simple, est classé dans la colonne IV de la classification périodique des éléments. À température ambiante, il adopte une structure cristalline de type diamant (FigureII.6). Dans cette structure, chaque atome de silicium est lié à quatre autres atomes, formant un réseau cubique à faces centrées.

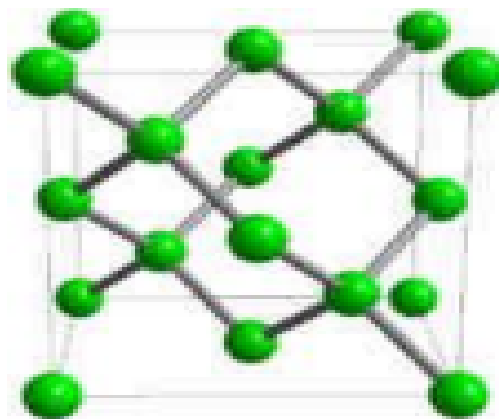


Figure II.6: Structure cristallographique du silicium cristallin

II.3.2. Propriétés électriques du silicium cristallin

Les propriétés électroniques du silicium cristallin sont influencées par plusieurs paramètres qui

ne sont pas totalement indépendants. Un premier paramètre essentiel à considérer est la densité des porteurs libres à l'équilibre, notée n_0 pour les électrons et p_0 pour les trous. Leurs

$$n_0 = N_C \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right) \quad p_0 = N_V \exp\left(-\frac{E_F - E_V}{k_B T}\right) \quad (\text{II.1})$$

Où N_C et N_V représentent respectivement les densités d'états effectives de la bande de conduction et de la bande de valence, k_B est la constante de Boltzmann et T est la température. En utilisant ces concentrations, on peut définir la densité de porteurs intrinsèques n_i avec l'expression suivante :

$$n_i = \sqrt{n_0 p_0} = \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_g}{2k_B T}\right) \quad (\text{II.2})$$

Les densités d'états aux bords de bandes N_C et N_V sont données par les expressions suivantes :

$$N_C = 2\left(\frac{2\pi m_c k T}{h^2}\right)^{3/2} \quad N_V = 2\left(\frac{2\pi m_v k T}{h^2}\right)^{3/2} \quad (\text{II.3})$$

Avec m_c et m_v représentent respectivement la masse effective des électrons dans la bande de conduction et celle des trous dans la bande de valence.

La mobilité μ des porteurs libres est également un autre paramètre important qui caractérise la facilité qu'ont les porteurs à se déplacer dans le matériau. Elle peut être mesurée par effet Hall ou par temps de vol [19, 20]. Le paramétrage de la mobilité dans le silicium cristallin est donné par la relation [21].

$$\mu = \mu_{i,min_1} \exp\left(-\frac{P_{c,i}}{N_{dop}}\right) + \frac{\mu_{i,max} - \mu_{i,min_2}}{1 + \frac{N_{dop}}{N_{i,ref_1}} x_{i,1}} - \frac{\mu_{i,1}}{1 + \frac{N_{i,ref_2}}{N_{dop}} x_{i,2}} \quad (\text{II.4})$$

Les différents paramètres de l'équation sont résumés dans le Tableau 2.1

Tableau II.1 : Paramètres utilisés dans le calcul de mobilité des porteurs majoritaires dans le silicium cristallin [21].

Paramètre	Unité	Electrons i=n	Trous i=p
μ_{min_1}	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$	68.5	44.9
μ_{min_2}	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$		0
μ_{max}	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$	1414	470.5
μ_1	$cm^2.V^{-1}.s^{-1}$	56.1	29.0
P_c	cm^{-3}	0	$9.23 \cdot 10^{16}$
N_{ref_1}	cm^{-3}	$9.20 \cdot 10^{16}$	$2.23 \cdot 10^{17}$
N_{ref_2}	cm^{-3}	$3.41 \cdot 10^{20}$	$6.10 \cdot 10^{20}$
x_1	-	0.711	0.719
x_2	-	1.98	2.00

À une température de 300K, la mobilité des électrons est d'environ $1360 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$, tandis que celle des trous est d'environ $480 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$, pour un dopage de type N avec une concentration de dopants $N_{dopants} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

La classification des matériaux semi-conducteurs est souvent basée sur leur conductivité ou leur résistivité. La conductivité σ est étroitement liée à la concentration des porteurs de charge et à leur mobilité :

$$\sigma = e(\mu_n n + \mu_p p) \quad (\text{II.5})$$

Avec e la charge élémentaire. La résistivité est l'inverse de la conductivité :

$$\rho = \frac{1}{\sigma} \quad (\text{II.6})$$

Ces paramètres sont principalement dépendants du dopage et de la température, Pour un substrat c-Si dopé avec $N_{dop} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ à la température de 300K, la résistivité vaut $4,5 \Omega.cm$ pour un dopage de type N et $13,2 \Omega.cm$ pour un dopage de type P.

II.4. matériaux silicium amorphe hydrogéné

II.4.1. Description générale du matériau

Le silicium amorphe hydrogéné a-Si:H est composé d'atomes de silicium et d'hydrogène disposé de manière désordonnée, comme illustré dans la figure En raison de sa configuration désordonnée et de la présence d'hydrogène, les propriétés du silicium amorphe diffèrent

considérablement de celles du silicium cristallin. On observe des défauts dans la structure cristalline, de nombreux atomes de silicium non tétragonaux, ainsi que des variations dans les angles et les longueurs des liaisons entre les atomes.

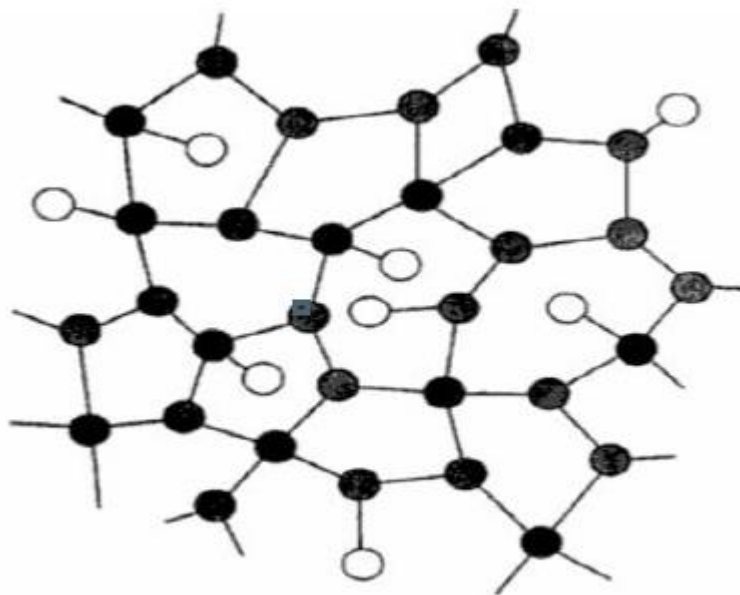


Figure II.7: Représentation du silicium amorphe hydrogéné. Les atomes de silicium sont représentés en noir et les atomes d'hydrogène en blanc [22].

II.4.2. Propriétés des matériaux silicium amorphe

II.4.2.1. Propriétés optiques

Les spectres d'absorption optique du silicium amorphe sont très sensibles aux conditions de préparation, comme on peut le voir sur la Figure 2.4 au-dessus de 1.6eV, le coefficient d'absorption α est moins sensible à la méthode de dépôt. On peut alors prévoir le comportement des dépôts en fonction de longueur d'onde lors du recuit laser. Si λ prend la valeur 0.53 μ m. Ce qui correspond à 2.34eV. On peut remarquer qu'il n'y a presque pas de différence entre différents types de dépôt. Mais au contraire pour $\lambda = 1.06\mu$ m, soit 1.17eV, les seuils de recuits doivent nettement différer. La Figure 2.5 montre le coefficient d'absorption, liée à la structure du silicium, pour différentes températures du dépôt. En effet dans la bande interdite tous les défauts de structure agissent sur la densité des états électroniques $N(E)$ et modifient de ce fait le spectre d'absorption. Pour conclure on note, d'après Carlson, que le matériau préparé par CVD, par simple de décomposition thermique présente une adsorption optique deux fois supérieure à celle d'un matériau préparé par décomposition plasma du silane SiH₄. Ceci est probablement dû à la différence de concentration d'hydrogène dans chaque matériau (Figure II.8) [23].

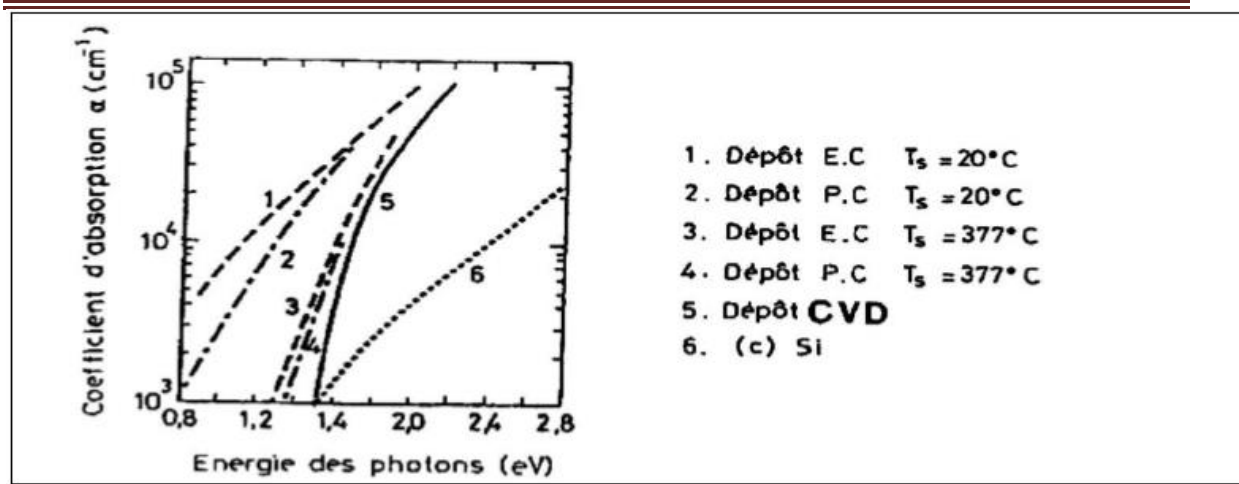


Figure II.8: Coefficient d'absorption du silicium amorphe pour différentes méthodes de dépôt.

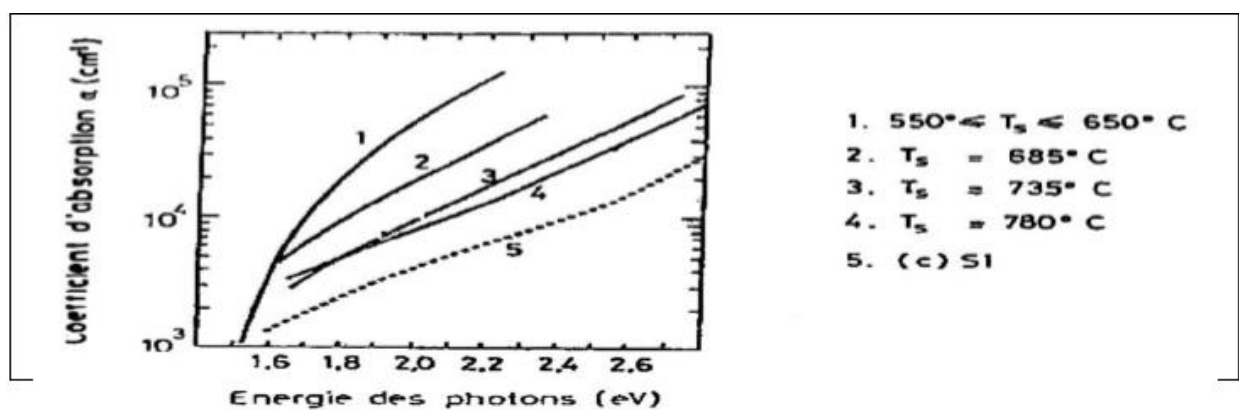


Figure II.9: Coefficient d'absorption du silicium.

II.4.2.2. Propriétés électriques

Les composants les plus utilisés en microélectronique sont les transistors à effet de champ MOS-FET et les transistors C-MOS (MOS étant l'abréviation de Métal Oxyde Silicium). Ils résultent de l'association de matériaux aux caractéristiques électriques très différentes. On distingue trois grandes familles de matériaux : les métaux, les semi-conducteurs et les isolants. Les principaux matériaux utilisés aujourd'hui en microélectronique sont le silicium, son oxyde (SiO₂), l'aluminium et plus récemment le cuivre. Cependant, le SiO₂ utilisé est amorphe, ce qui rend difficile la réalisation de structures SOI (Silicium sur isolant). Par conséquent, depuis les années 1980, les scientifiques se sont intéressés à un isolant qui peut s'épitaxier sur le silicium, car il présente une faible différence de paramètre de maille (0,6 %) à température ambiante par rapport à ce dernier.

Le solide amorphe est généralement considéré comme un réseau tridimensionnel où l'ordre à

courte distance des atomes est préservé, mais où il n'y a pas d'ordre à longue distance, c'est-à-dire qu'il n'y a pas de périodicité sur une longue distance. C'est pourquoi il arrive souvent que certains atomes de silicium ne trouvent pas de liaisons dans le réseau, ce qui crée des liaisons pendantes. Ces liaisons pendantes génèrent des états dans la bande interdite d'énergie, située entre la bande de valence et la bande de conduction. Un grand nombre de ces états conduit à de très mauvaises propriétés semi-conductrices du matériau.

En utilisant la méthode de dépôt chimique en phase vapeur PECVD, ils ont réussi, en introduisant de l'hydrogène dans les liaisons pendantes, à réduire la densité d'états (qui correspond au nombre d'états par unité de volume et par intervalle d'énergie) de 10^{19} (eV·cm³)⁻¹ à environ 10^{16} (eV·cm³)⁻¹. De cette manière, la qualité du matériau a été améliorée, ce qui permet une utilisation plus efficace dans des applications semi-conductrices. Les structures du silicium amorphe hydrogéné et du silicium cristallin sont représentées dans la figure II.10.

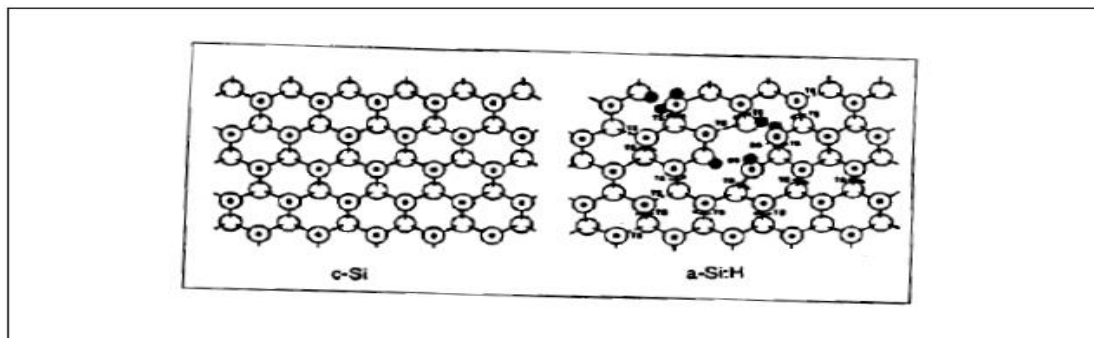


Figure II.10: Structures du silicium cristallin et du silicium amorphe.

II.5. matériaux ZnO

II.5.1. La structure ZnO

L'oxyde de zinc (ZnO), que l'on trouve naturellement sous le nom de zincite, cristallise généralement dans la phase hexagonale compacte B4 (Würtzite). Cependant, il peut être synthétisé dans la phase cubique B3 (blende) lorsqu'il est déposé sur certains substrats de symétrie cubique. L'application d'une grande pression hydrostatique (10-15 GPa) sur le ZnO de structure wurtzite le transforme en phase B1 (rocksalt), qui est métastable. Dans cette étude, nous nous concentrerons uniquement sur le ZnO de structure würtzite.

Le ZnO de structure hexagonale compacte Würtzite peut être décrit par l'alternance de deux réseaux de type hexagonal compact l'un de Zn²⁺ et l'autre de O²⁻ décalés d'un vecteur $u = 0,379c$ (Figure.II.11). Les paramètres de la maille primitive du ZnO dans les conditions normales de

température et de pression sont donnés par $a = 0,32498$ nm et $c = 0,52066$ nm [24].

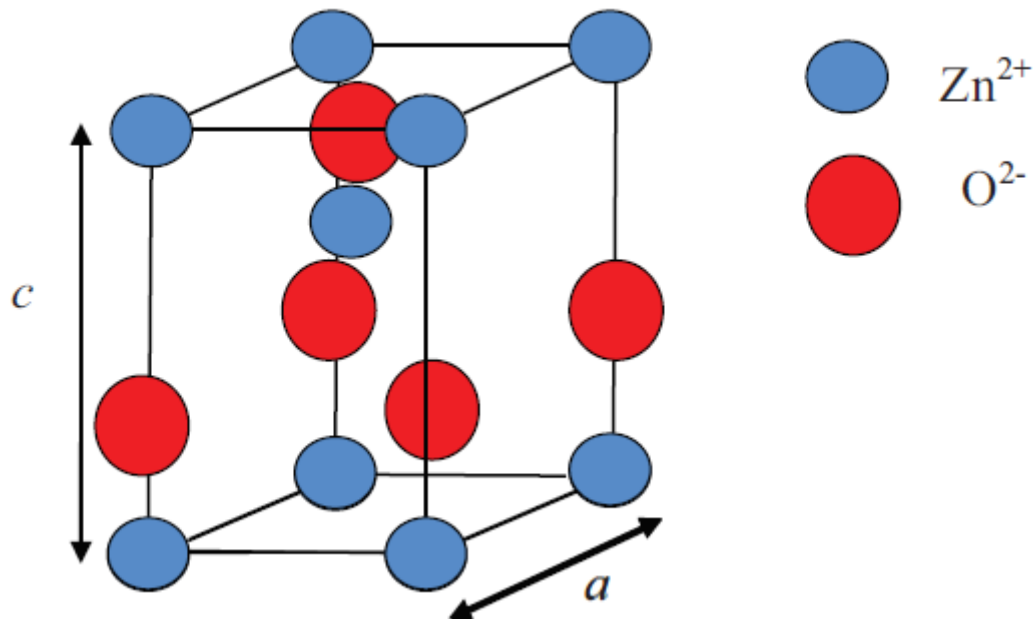


Figure II.11: Maille primitive de la phase Wurtzite du ZnO.

II.5.2. Propriétés électriques du ZnO

L'oxyde de zinc est un semi-conducteur de type II-VI à large bande interdite directe de 3,37 eV à température ambiante [25-26]. Cette énergie, également appelée "gap" ou "bandgap", correspond à l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC).

Le ZnO présente une conductivité électrique naturelle de type n qui est due à la présence des atomes de zinc interstitiels [27]. En faisant varier la valeur de la conductivité par des procédés de dopage, on peut faire passer le gap de 3,30 à 3,39 eV [28-29]. Les dopants couramment utilisés pour le ZnO appartiennent généralement aux groupes III et IV du tableau de Mendeleïev. Dans ce cas, ils remplacent les atomes de zinc en occupant leurs sites atomiques. Le dopage peut également être réalisé en utilisant des éléments du groupe VII du tableau périodique des éléments. Dans ce cas, le ZnO serait dopé par la substitution des atomes d'oxygène.

II.5.3. Propriétés optiques du ZnO

L'oxyde de zinc est un matériau transparent dans le domaine visible en raison de son large gap, ce qui lui permet d'être classé parmi les oxydes transparents conducteurs (TCO, pour "transparent conductive oxide") lorsqu'il est dopé.

En raison de l'anisotropie de sa structure cristalline hexagonale, la lumière se propageant à travers un cristal de ZnO sera soumise au phénomène de biréfringence optique. Dans ce cas, la

lumière se propagera selon deux directions : elle se propagera le long de la première direction avec une polarisation parallèle à l'axe optique du cristal (l'axe c) et sera soumise à un indice de réfraction ordinaire, noté n_0 ; et elle se propagera le long de la deuxième direction avec une polarisation perpendiculaire à l'axe optique et sera soumise à un indice de réfraction extraordinaire, noté n_e .

La Figure II.12 montre la dispersion des indices de réfraction de la lumière en fonction de la longueur d'onde [30].

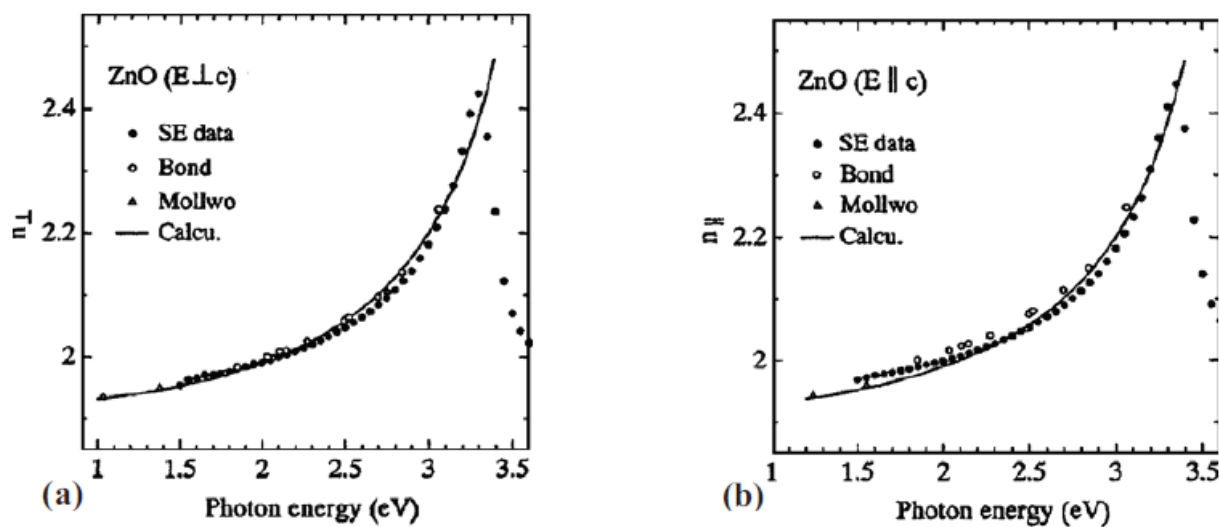


Figure II.12: Dispersion des indices de réfraction n_0 (a), n_e (b).

Le spectre de photoluminescence (PL) du ZnO présente plusieurs branches d'émission allant du proche UV (350 nm) au domaine du visible (400-700 nm). Il se caractérise par une forte énergie du premier et du deuxième excitons qui sont respectivement de 60 meV et de 15 meV [31], comparables à l'énergie de l'agitation thermique ambiante de 20 meV. L'énergie du premier exciton du ZnO est largement supérieure à celle des autres matériaux semi-conducteurs: ZnS (20 meV), GaN (21 meV) [32], Si (14,7 meV), AsGa (4,2 meV) [33], ce qui le rend très prometteur pour les applications dans le domaine des lasers.

II.6. matériaux poly (3-hexylthiophène) (P3HT)

Parmi les nombreux polymères π -conjugués, la famille des poly thiophènes est largement étudiée en raison de son utilisation dans la fabrication de dispositifs électroniques et optoélectroniques. Les polythiophènes sont le résultat de la réaction chimique de polymérisation du thiophène, qui est un hétérocycle sulfuré composé d'une chaîne fermée de cinq atomes, dont un atome de soufre. La Figure II.13 montre l'unité de répétition monomère du poly thiophène non substitué.

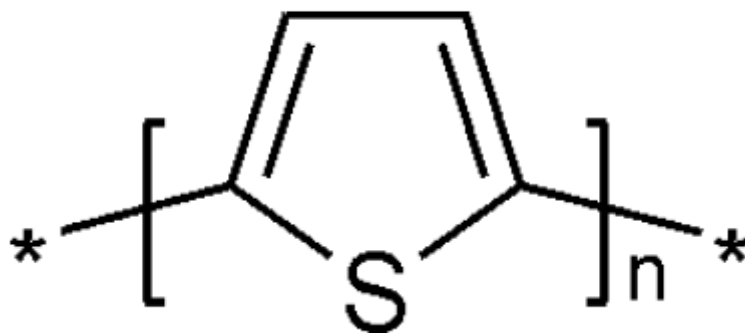


Figure II.13: Unité de répétition monomère de poly thiophène non substitué.

Les poly (3-alkyl thiophènes) ou P3ATs, sont obtenus par greffage de chaînes alkyls C_nH_{2n+1} sur le squelette de poly thiophène.

- R: $(CH_2)_{11}CH_3 \rightarrow$ P3DDT
- R: $(CH_2)_7CH_3 \rightarrow$ P3OT
- R: $(CH_2)_5CH_3 \rightarrow$ P3HT

Le poly (3-hexylthiophène), noté aussi P3HT est chimiquement stable, il possède une bande interdite assez faible de l'ordre de 1,9 à 2eV et la mobilité des trous de ce matériau est de $0,1\text{cm}^2/\text{V.S}$ qui est relativement élevée. Au moment de la polymérisation du P3HT, le couplage de deux hexylthiophènes adjacents se produit entre les positions 2 et 5 [34]. On remarque trois sortes de couplages qui donnent lieu à trois différentes triades. L'assemblage de 3 monomères provoque la formation de quatre triades régio-isomères (figure II.13).

- 2,5 têtes à queue (Head to Tail).
- 2, 2 tête à tête (Head to Head).
- 5,5' queue à queue (Tail to Tail).

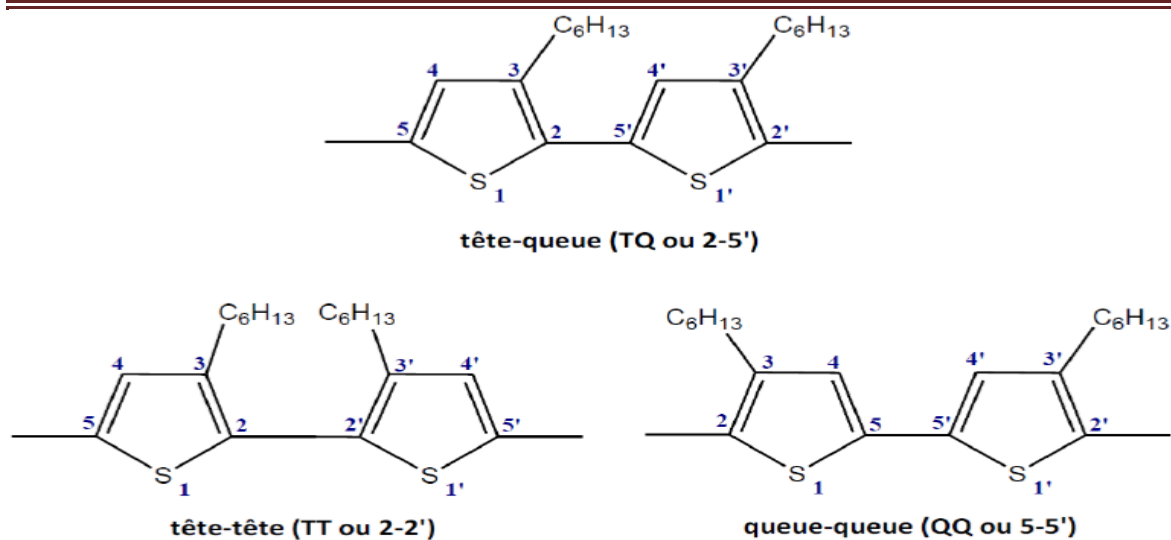


Figure II.14: Confirmation des triades à base de P3HT.

II.6.1. Propriétés optiques

Les synthèses de polymères π -conjugués étendus tels que le P3HT sont à l'origine de l'une de leurs propriétés les plus intéressantes, à savoir leurs propriétés optiques. La conjugaison repose sur la superposition des orbitales π des cycles aromatiques, ce qui nécessite que les cycles thiophènes soient coplanaires les uns par rapport aux autres (voir Figure II.15).

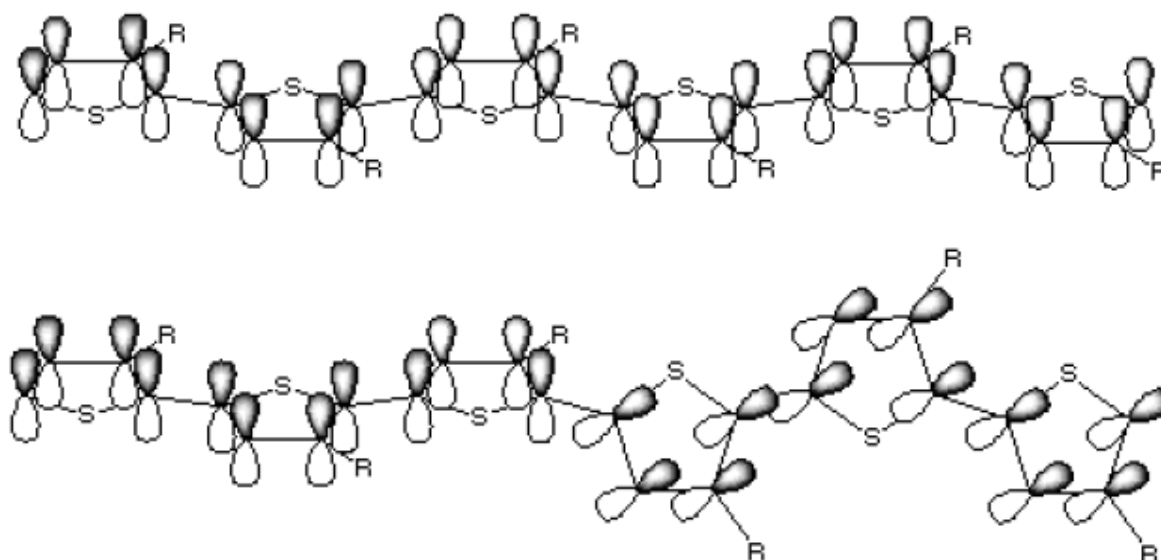


Figure II.15: Orbitales π conjuguées d'un poly thiophène coplanaire et substitué.

Le nombre de cycles détermine la longueur de conjugaison : plus celle-ci est grande, plus l'écart entre les niveaux d'énergie est faible et plus la longueur d'onde d'absorption est importante. L'absorption se décale vers le rouge du spectre lumineux lorsque la longueur de conjugaison augmente. La Figure II.16 illustre une forte absorbance de la couche mince de P3HT-RR, entre 380 et 650 nm.

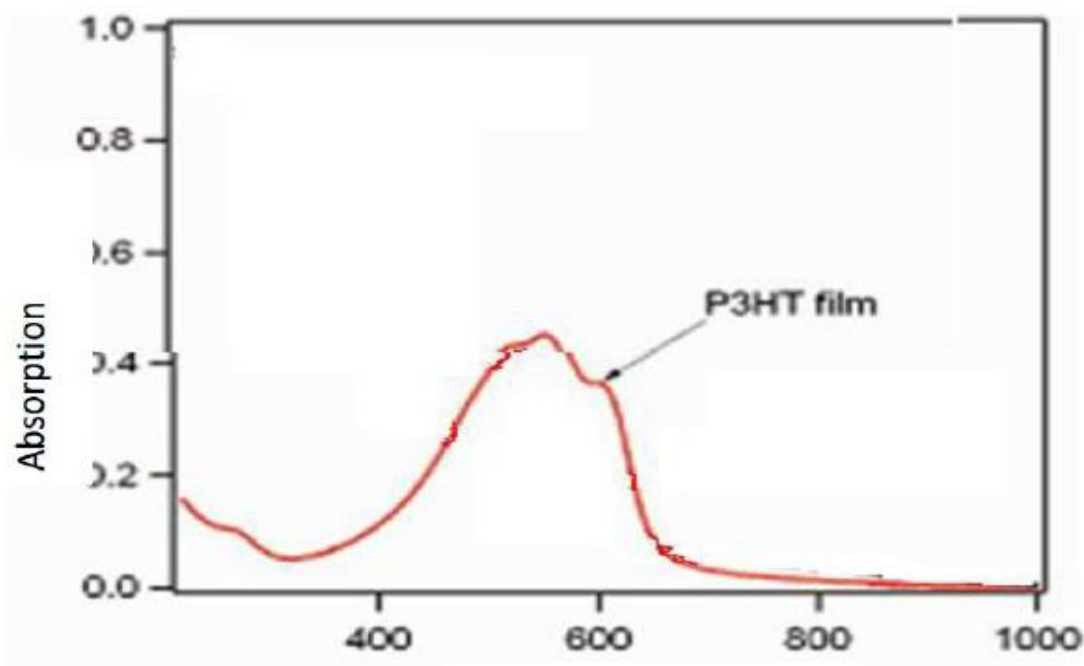


Figure II.16: Coefficient d'absorption de P3HT en fonction de l'énergie des photons absorbés.

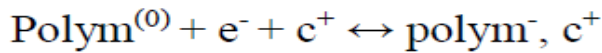
II.6.2. Propriétés électrochimiques :

La principale caractéristique des polythiophènes est leur capacité à adopter différents états électroniques en fonction du potentiel auquel ils sont soumis. À l'état neutre, ils présentent des propriétés isolantes avec une conductivité de l'ordre de $\sigma \approx 10^{-11} \text{ S.cm}^{-1}$. Une fois dopés, leur structure se modifie et ils redeviennent d'excellents conducteurs électroniques, avec une conductivité pouvant atteindre jusqu'à 10^3 S.cm^{-1} . Le dopage des polythiophènes peut être réalisé en injectant des électrons dans la chaîne de polymère ou en arrachant des électrons de celle-ci. Cela entraîne une délocalisation de charges négatives (électrons) ou de charges positives (trous).

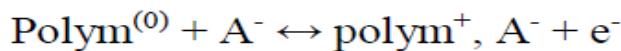
Plus la longueur de conjugaison n'est grande, plus la délocalisation des électrons est importante, ce qui favorise une meilleure conductivité. De plus, la planéité de la chaîne polymérique est également cruciale pour assurer une hybridation optimale des orbitales π et ainsi permettre une

délocalisation efficace des charges sur toute la longueur de la chaîne.

Le dopage négatif du polymère se produit lors de l'injection d'électrons dans les chaînes polymériques. Pour maintenir l'électro-neutralité, des cations provenant de l'électrolyte s'insèrent dans le polymère dopé, ce qui conduit à une augmentation de la conductivité. On dit alors que le polymère est dopé n de manière négative.



En effet, le dopage de type p se réfère à l'extraction d'électrons des chaînes polymériques et à l'insertion d'anions le long de ces chaînes pour maintenir l'électro-neutralité. Lorsque cela se produit, la structure du polymère change et une conduction se crée par la délocalisation de charges positives le long des chaînes. Cela permet au polymère de devenir conducteur en transportant des charges positives.



Le dopage négatif est beaucoup plus difficile à obtenir. Il est également moins réversible et moins stable que le dopage positif.

II.7. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude bibliographique sur les propriétés fondamentales du Matériaux ZnO, Cs₂AgBiBr₆, P3HT, C-Si, a-Si, à savoir sa structure cristalline, son diagramme d'équilibre et ses propriétés électrique et optiques. Nous avons ensuite donné des brèves définitions des différents défauts ponctuels (lacunes, atomes interstitiels, défauts substitutionnels, impuretés, etc.) et des défauts cristallins (dislocations, défauts d'empilement, macles, etc.).

Grace à ces caractéristiques, les matériaux sont devenus un semi-conducteur promoteur pour les applications photovoltaïques, ceci permet d'utiliser ce semi-conducteur comme matériaux de base dans la fabrication des composants électroniques et/ou des matériaux photovoltaïques pour satisfaire des besoins industriels spécifiques.

REFERENCES

- [1]. Xu, J., et al., Unique ion diffusion properties in lead-free halide double perovskites: A first-principles study. *Journal of Power Sources*, 2019. **412**: p. 689-694.
- [2]. Sun, Q. and W.-J. Yin, Thermodynamic stability trend of cubic perovskites. *Journal of the American Chemical Society*, 2017. **139**(42): p. 14905-14908.
- [3]. Dave, K., et al., Recent Developments in Lead-Free Double Perovskites: Structure, Doping, and Applications. *Chemistry—An Asian Journal*, 2020. **15**(2): p. 242-252.
- [4]. Zhang, Z., et al., Improvement of Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cell by rubidium doping. *Organic Electronics*, 2019. **74**: p. 204-210.
- [5] Fu, R., et al., Pressure-induced structural transition and band gap evolution of double perovskite Cs₂AgBiBr₆ nanocrystals. *Nanoscale*, 2019. **11**(36): p. 17004-17009.
- [6]. García-Espejo, G., et al., Mechanochemical synthesis of three double perovskites: Cs₂AgBiBr₆, (CH₃NH₃)₂TlBiBr₆ and Cs₂AgSbBr₆. *Nanoscale*, 2019. **11**(35): p. 16650-16657.
- [7]. Greul, E., et al., Highly stable, phase pure Cs₂AgBiBr₆ double perovskite thin films for optoelectronic applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 2017. **5**(37): p. 19972-19981.
- [8]. Bouarissa, N., Optoelectronic properties of InAs_{1-x}P_x semiconducting alloys. *Materials Science and Engineering: B*, 2001. **86**(1): p. 53-59.
- [9]. Martin, R.M., *Electronic structure: basic theory and practical methods*. 2020: Cambridge university press.
- [10]. Bouarissa, N., Pressure dependence of optoelectronic properties of GaN in the zincblende structure. *Materials chemistry and physics*, 2002. **73**(1): p. 51-56.
- [11]. Bouarissa, N. and F. Annane, Electronic properties and elastic constants of the ordered Ge_{1-x}Sn_x alloys. *Materials Science and Engineering: B*, 2002. **95**(2): p. 100- 106.
- [12]. Bouarissa, N., Effects of compositional disorder upon electronic and lattice properties of GaIn_{1-x}As. *Physics Letters A*, 1998. **245**(3-4): p. 285-291.
- [13]. Hannachi, L. and N. Bouarissa, Band parameters for cadmium and zinc chalcogenide compounds. *Physica B: Condensed Matter*, 2009. **404**(20): p. 3650-3654.
- [14]. McClure, E.T., et al., Cs₂AgBiX₆ (X= Br, Cl): new visible light absorbing, lead-free halide perovskite semiconductors. *Chemistry of Materials*, 2016. **28**(5): p. 1348-1354.
- [15]. Mezrag, F., W.K. Mohamed, and N. Bouarissa, The effect of zinc concentration upon

optical and dielectric properties of Cd_{1-x}Zn_xSe. *Physica B: Condensed Matter*, 2010. **405**(9): p. 2272-2276.

[16]. Saib, S., et al., Structural and dielectric properties of AlN under pressure. *Physica B: Condensed Matter*, 2008. **403**(21-22): p. 4059-4062.

[17]. Djaili, S., et al., Temperature dependence of the optical properties of MgO: Ab initio molecular dynamics calculations. *Optik*, 2020. **200**: p. 163421.

[18]. Khaldi, A., N. Bouarissa, and L. Tabourot, First-principles study of pressure dependence of optical spectra of MnS. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2018. **31**(5): p. 1643-1647.

[19]. P. Norton, T. Braggins et H. H. Levinstein, « Impurity and Lattice Scattering Parameters as Determined from Hall and Mobility Analysis in n-Type Silicon », *Physical Review B*, 1973.

[20]. C. Canali, C. Jacoboni, G. Ottaviani et A. Alberigi-Quaranta, « High field diffusion of electrons in silicon », *Applied Physics Letters*, 1975.

[21]. G. Masetti, M. Severi et S. Solmi, « Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-phosphorus, and boron-doped silicon », *IEEE Transactions on Electron Devices*, 1983.

[22]. F. Mazen, T. Baron, G. Bremond. *J. Electrochem. Soc.* 150, 243 (2003).

[23]. A. Touil. *Étude des Transformation de phase dans le silicium*, Thèse de Magister, Université de Constantine, 2007.

[24]. International Centre of Diffraction Data, Powder Diffraction File, JCPDS File N° 00-036-1451.

[25]. R.T. Girard, O. Tjernberg, G. Chiaia, S. Söderholm, U.O. Karlsson, C. Wigren, H. Nysten, I. Lindau, *Surface Science*, **373** (1997) 409.

[26]. K. Ozawa, K. Sawada, Y. Shirotori, K. Edamoto, M. Nakatake, *Physical Review B*, **68** (2003) 125417.

[27]. T. Minami, H. Sato, H. Nanto, and S. Takata, *Japanese Journal of Applied Physics*, **25** (1986) 776-779.

[28]. M. Rebien, W. Henrion, M. Bär, Ch.-H. Fischer, *Applied Physics Letters*, **80** (2002) 3518.

[29]. F. Ng-Cheng-Chin, M. Roslin, Z.H. Gu. T.Z. Fahidy, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **31** (1998) 19.

[30]. Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Do! An, V. Avutin, S.-J. Cho, and H. Morkoç, *Journal of Applied Physics*, **98** (2005) 041301.

[31] E. Baur, J. Tobler, *Zeitschrift für Elektrochemie* **6** (1933) 169.

[32]. B. Lin, Z Fu, Y. Jia, *Applied Physics Letters* **79** (2001) 943.

[33]. C. Kittel, *Physique de l'état solide* 5e édition. Paris : Dunod Université, Bordas (1983)
ISBN 2-04-010611-1.

[34]. H. Sirrighaus, P.J. Brown, R.H. Friend, M.M. Nielsen, K. Bechgaard, B.M.W. Langeveld-Voss, A.J.H. Spiering, R.A.J. Janssen, E.W. Meijer, P. Herwing, *Two dimensional charge transport in self-organized, high-mobility conjugated polymers. Nature* 685-688, octobre 1999.

Chapitre III
Logiciel de simulation
AMPS-1D

III.1. Introduction

En résolvant les trois équations fondamentales qui régissent le comportement des porteurs de charge, les caractéristiques courant-tension (I-V) des cellules solaires peuvent être calculées avec d'autres paramètres physiques tels que le champ électrique et le potentiel, fournissant des informations utiles sur les cellules solaires. Performances améliorées Parce que les solutions analytiques sont complexes et peu pratiques, nous avons recours à des solutions numériques qui nécessitent de nombreuses itérations.

Avec le développement du domaine de la recherche sur le photovoltaïque et les cellules solaires, nous avons constaté un besoin croissant de développer des ressources de recherche, y compris des logiciels de simulation. Il existe plusieurs logiciels de simulation d'une cellule photovoltaïque, on peut citer : AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, Silvaco etc. Dans ce travail nous allons utiliser le logiciel AMPS-1D.

III.2. Présentation du simulateur AMPS-1D

III.2.1. Définition

L'AMPS-1D (analysis of Microelectronic and Photonic Structures in one Dimension) développé à l'université de Pennsylvanie par l'équipe du Professeur Fonash [1]. Est Notre logiciel de simulation pour l'analyse et la conception des phénomènes de transport Microélectronique et structures photoniques. Sa capacité à provoquer un défaut de toute nature, Énergie interstitielle et distribution spéciale, qui combine recombinaison S-R-H et bande à bande, qui combine la statique de Boltzmann et de Fermi-Dirac, il est capable de Définir les propriétés variables des matériaux, la manipulation globale des contacts et leur Capable de gérer la transmission sous polarisation, sous éclairage ou dans l'appareil Deux à la fois.

III.2.2. Le but d'utiliser l'AMPS-1D

Ce logiciel est un programme informatique unidimensionnel pour simuler des transmissions dans les dispositifs semi-conducteurs. Il résout numériquement trois équations de l'appareil (l'équation de continuité pour les trous libres et celle pour les électrons libres, équation de poisson) sans faire d'hypothèses a priori sur le mécanisme de transport dans ces appareils. Il a été développé pour analyser, concevoir et optimiser les structures Conçu pour la microélectronique, les applications photovoltaïques.

III.2.3. Liste Des Paramètres Introduire

La figure III.1 est la liste des paramètres d'entrée que l'AMPS doit résoudre. Un ensemble d'équations de transport et de conditions aux limites. Dans l'ensemble, cette liste fonctionnera avec toutes les versions du programme actuel, à quelques exceptions mineures près. Cette différence de liste de paramètres entre chaque version de programme sera mentionnée dans la discussion [2].

Les paramètres peuvent se trouver dans l'une des 3 catégories générales suivantes :

- 1-paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.
- 2-paramètres qui s'appliquent à une région particulière du dispositif.
- 3-paramètres qui définissent les spectres d'illumination (pour le cas de la lumière).

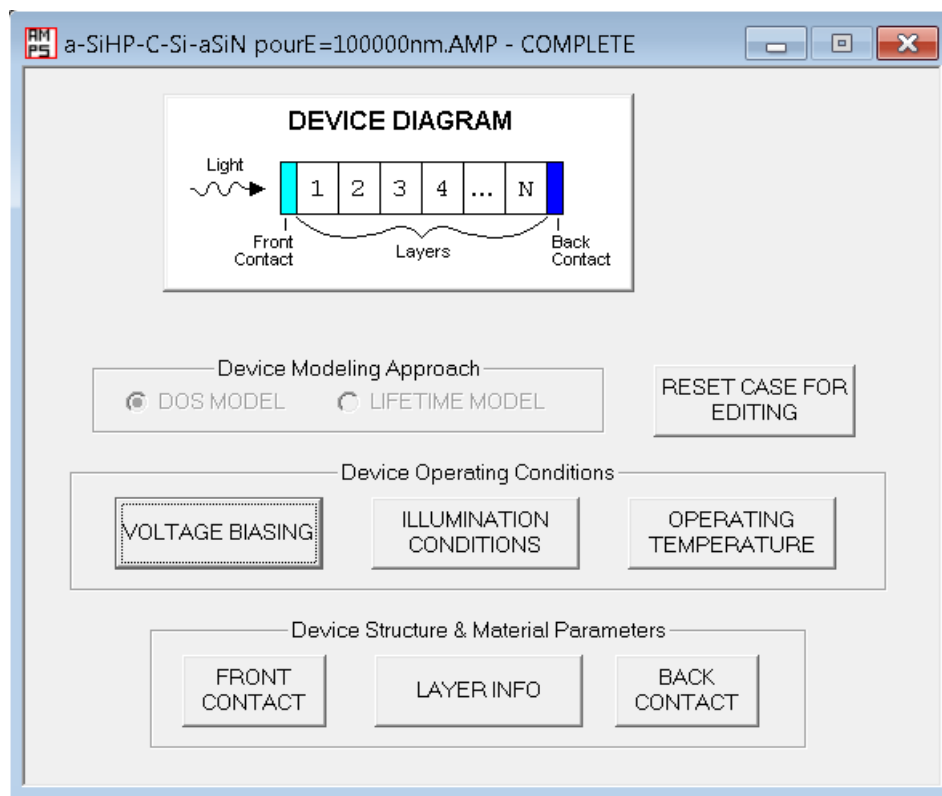


Figure III.1 : différentes fenêtres pour introduire les paramètres.

III.2.3.1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier

Les Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier incluent (les unités utilisées dans l'AMPS sont entre parenthèse) ce qui suit :

a) Conditions aux limites :

- $\text{PHIBO} = \phi_{b0} = E_C - E_F$ pour $x=0$ (eV)

- PHIBL = $\phi bL = EC - EF$ pour $x=L$ (eV)

b) vitesse de recombinaison en surface :

- SNO = SNO : pour les électrons interface $x=0$ (cm/sec)
- SPO = SPO : pour les trous interface $x=0$ (cm/sec)
- SNL = SNL : pour les électrons interface $x=L$ (cm/sec)
- SPL = SPL : pour les électrons interface $x=L$ (cm/sec)

c) Coefficient de réflexion de la lumière entrant sur les surfaces avant et arrière :

- RF = RF = coefficient de réflexion à $x=0$ (réflexion sur surface avant).
- RB = RB = coefficient de réflexion à $x=L$ (réflexion sur surface arrière).

d) La température T(k):

Ces paramètres sont entrés seulement une fois, et appliquent en général au dispositif entier.

III.2.3.2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière

Les paramètres dans la figure III.3, peuvent avoir différentes valeurs pour les différentes couches. Ces les paramètres incluent (les unités sont entre parenthèses) :

1. La largeur W ou XLAYER (A) d'une région.

2. Propriétés du matériau.

- a) EPS: la constante diélectrique ϵ_r à la température T tels que $\epsilon = \epsilon_r * \epsilon_0$ ou ϵ_0 est la constante diélectrique du semi-conducteur.
- b) NC: densité d'états effective des électrons NC (cm⁻³) dans la bande de conduction à la température T.
- c) NV: densité d'états effective des trous NV (cm⁻³) dans la bande de valence à la température T.
- d) EG: largeur de la bande interdite (Ev) a la température T.
- e) EGOP: largeur de la bande interdite optique.
- f) CHI: L'affinité d'électron.

- g) MUN : mobilité des électrons ($\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$).
- h) MUP: mobilité des trous ($\text{cm}^2/\text{V} \cdot \text{sec}$).

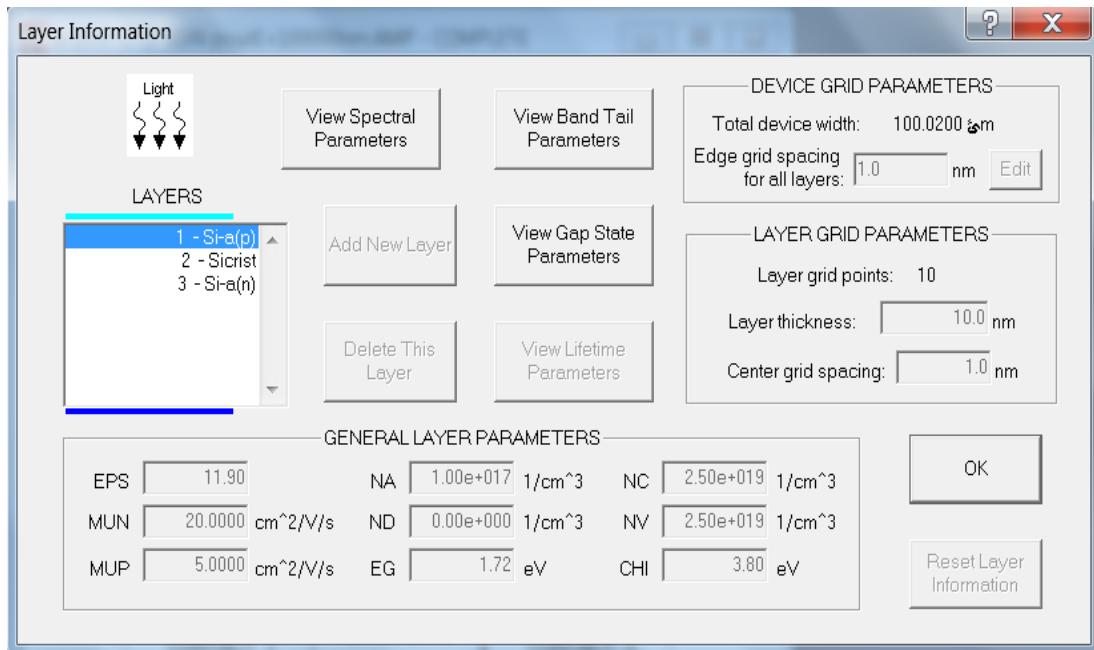


Figure III.2: différentes paramètres pour la couche Si-a

3. États de défaut discret

DLVS est le nombre de niveaux de donneurs discrets comme : $(0 \leq DLVS \leq 25)$ et ALVS est le nombre de niveaux d'accepteurs discrets comme : $(0 \leq ALVS \leq 25)$.

a. Concentrations du niveau donneur discret et énergies d'ionisation

i. pour l'ionisation total DVLS=0 et :

a) $ND(i) = ND$, $i =$ Concentration (cm^{-3}) au $i^{\text{ème}}$ niveau donneur.

ii. si $DLVS > 0$ (ionisation partielle), ainsi l'entrée pour chaque $i = DLVS$ (niveaux discrets)

a) $ND(i) = ND, i =$ concentration (cm^{-3}) au $i^{\text{ème}}$ niveau donneur.

b) $EDON(i) =$ énergie d'ionisation (eV) du $i^{\text{ème}}$ niveau donneur mesuré positivement du bord de la bande de conduction E_c .

c) $WSD(i) = WD, i =$ largeur (eV) du $i^{\text{ème}}$ donneur dopant.

d) $DSIG/ND(i)^* =$ section droite de capture de l'électron (cm^2) pour la $i^{\text{ème}}$ niveau donneur discret.

e) $DSIG/PD(i)^* =$ section droite de capture trou (cm^2) pour le $i^{\text{ème}}$ niveau donneur discret.

b. Concentration du niveau accepteur et énergies d'ionisation

i. pour l'ionisation total DVLS=0 et :

a) $NA(i) = NA$, $i =$ Concentration (cm^{-3}) au $i^{\text{ème}}$ niveau accepteur

ii. si ALVS>0 (ionisation partielle), et pour $i=1$ à ALVS.

a) $NA(i) = NA$, $i =$ Concentration (cm^{-3}) au $i^{\text{ème}}$ niveau accepteur

b) EACP(i) = énergie d'ionisation (eV) du $i^{\text{ème}}$ niveau accepteur mesuré positivement du bord E_v de la bande de valence.

c) WDSA (i) = WA, $i =$ largeur (eV) du $i^{\text{ème}}$ accepteur dopant.

d) DSIG/NA(i)*= section droite de capture de l'électron (cm^2) pour le $i^{\text{ème}}$ niveau accepteur discret.

e) DSIG/PA(i)*= section droite de capture trou (cm^2) pour le $i^{\text{ème}}$ niveau accepteur discret.

Figure III.3: Défauts donneurs discrets et continues pour la couche Si-a

4. Défauts localisés aux queues et aux états moyens (forme ``V`` ou ``U``)

a. Si forme en V, donc

- GDO=prefacteur ($1/\text{cm}^{-3}/\text{eV}$) dans l' equation: $gd= Gdoexp(E-EV/Ed)$.
- GAO = Prefacteur ($1/\text{cm}^{-3}/\text{eV}$) dans l' equation: $ga= Gaoexp(E-EC/Ea)$.
- ED = énergie Caractéristique Ed (eV) pour donneur dans les queues.
- EA = énergie Caractéristique Ea (eV) pour accepteur dans les queues.
- TSIG/ND*=section droite de capture des électrons dans les états de queue de donneur (cm^2).
- TSIG/PD*=section droite de capture des trous dans les états de queue de donneur (cm^2).
- TSIG/NA*=section droite de capture pour les électrons dans les états de queueaccepteur (cm^2).
- TSIG/PA*=section droite de capture pour les trous dans les états de queue accepteur (cm^2).

b. Si forme en U, alors, en plus des paramètres V en forme

- GMGA = densité d'états accepteur moyenne à GMGa ($1/\text{cm}^{-3}/\text{eV}$)
- GMGD = densité d'états donneur moyenne à GMGd ($1/\text{cm}^{-3}/\text{eV}$).
- EDA = énergie de basculement 'EDA (eV) mesurée positivement a partir de Ev.
- MSIG/ND* = section droite de capture pour des électrons dans les états donneur moyennes (cm^2).
- MSIG/PD* = section droite de capture pour des trous dans les états donneur Moyennes (cm^2).
- MSIG/NA* = section droite de capture pour des électrons dans les états accepteurs moyennes (cm^2).

5. Niveaux gaussiens (0,1 ou 2 niveaux accepteurs et 0,1 ou 2 niveaux donneurs)

a. Nombre de niveau d donneur Gaussien, si $DLVSG > 0$, pour chaque $i=DLVSG \leq 2$ niveauxdonneurs Gaussien.

- NDG(i) = densité d'état de donneur de Gaussien expose ($1/\text{cm}^{-3}$) pour la i' ème donneur Gaussien.
- EDONG(i)=énergie de donneur Gaussien au sommet (eV) mesuré positif à partir de Ec pour la i' ème donneur Gaussien.
- GSIG/ND (i)* = section droite de capture du i' ème état donneur Gaussien pour les

électrons (cm^2).

- WSDSG (i)=écart standard (Ev) du i' ème niveau de donneur Gaussien.
- GSIG/PD(i)*= section droite de capture du i' ème état donneur gaussien pour les trous (cm^2).

b. nombre de niveaux accepteur Gaussien, si $ALVSG > 0$, pour chacun du $i=DLVSG \leq 2$ niveaux accepteur Gaussien.

- NAG(i) = densité d'état accepteur Gaussien ($1/\text{cm}^{-3}$) pour le i' ème accepteur Gaussien
- EACPG (i) =énergie accepteur Gaussien au sommet (eV) mesuré positif à partir de E_c pour la i' ème accepteur Gaussien.
- WDSAG (i) =écart standard (eV) du i' ème niveau accepteur Gaussien.
- GSIG/NA(i) 4 =section droite de capture du i' ème état donneur Gaussien pour les électrons (cm^2).
- GSIG/PA (I)*= section droite de capture du i' ème état donneur Gaussien pour les trous (cm^2).

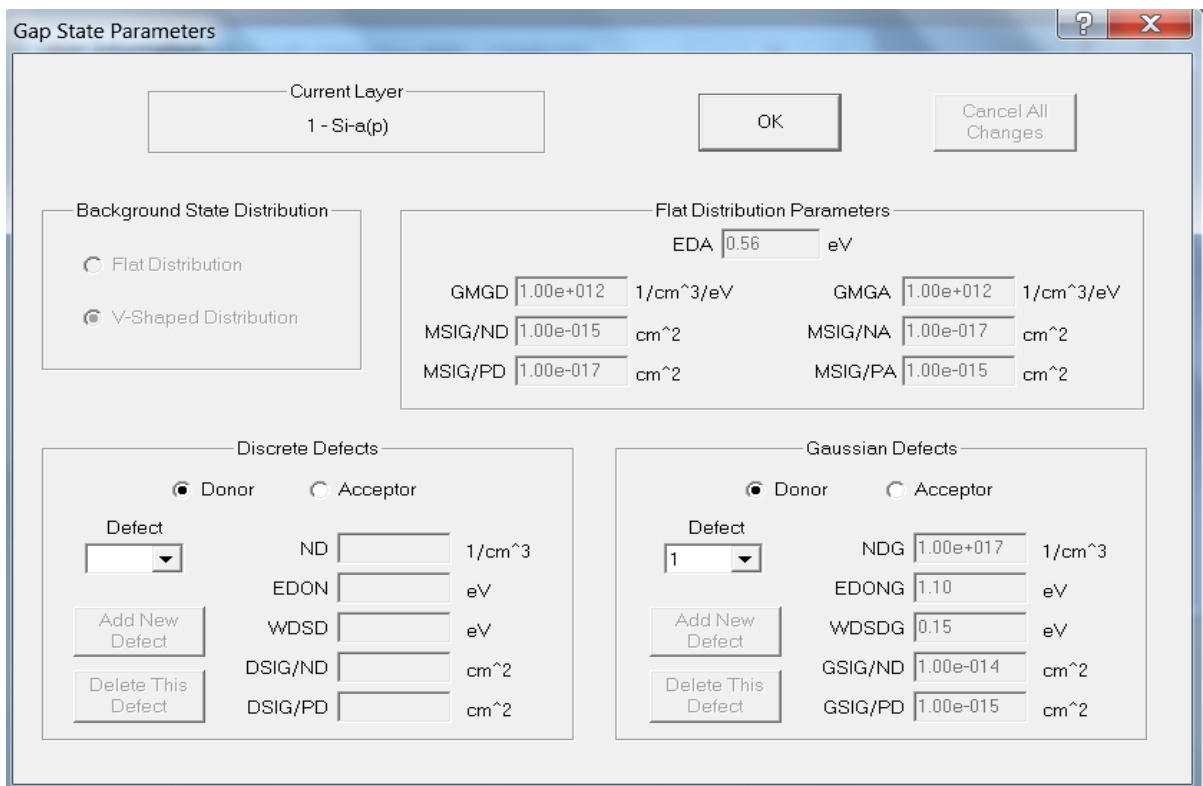


Figure III.4: Défauts accepteur discrets et continues pour la couche Si-a

III.2.3.3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination

Le premier de ces paramètres appelés LIGHT dans le programme détermine si la lumière est désirée dans le programme. Si LIGHT=NO, donc aucun spectre ne doit être défini et l'utilisateur est seulement intéressé par les caractéristiques du dispositif dans l'obscurité sous polarisation. Si cependant l'utilisateur veut voir le dispositif sous illumination, donc pour chaque longueur d'onde dans le spectre, les paramètres suivant doivent être définis (les unités entre parenthèses) :

1. La longueur d'onde LAMBDA (μm).
2. Le FLUX incident à cette longueur d'onde ($1/\text{cm}^2/\text{s}$).
3. Le coefficient d'absorption ALFA ($1/\text{cm}^2$) à cette longueur d'ondes dans chaquerégion de la structure.

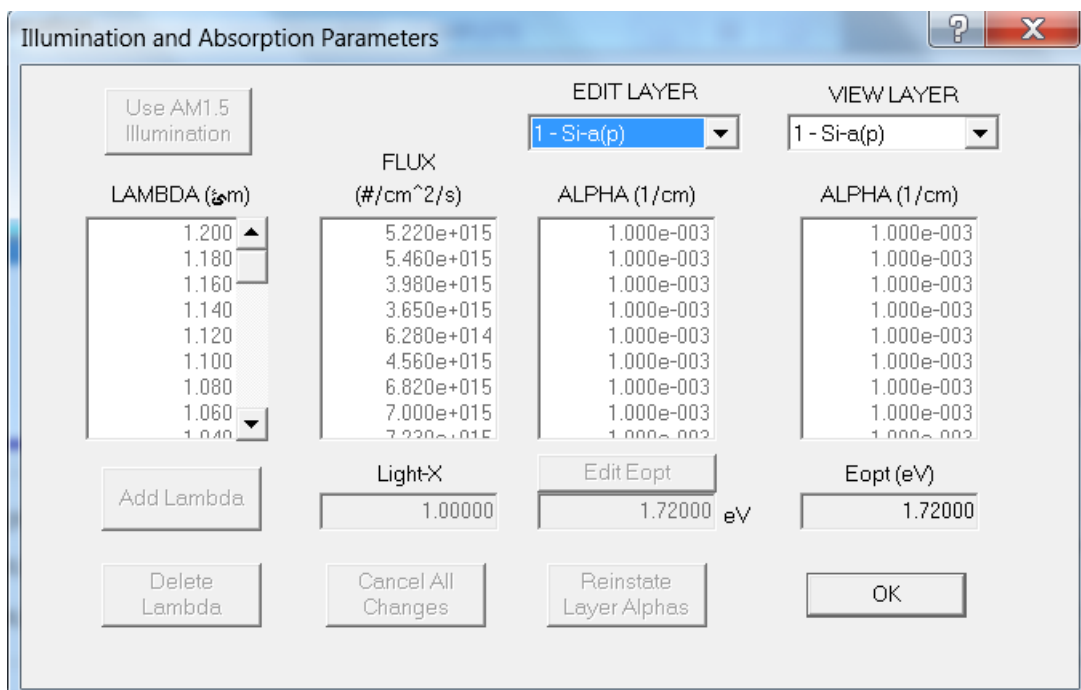


Figure III.5 : coefficients d'absorption pour la couche Si-a

III.2.4. le panneau de différents résultats obtenus

Le panneau suivant (voir figure III.6) indique les différentes courbes obtenues lors de la simulation il contient les points suivants :

Ec : la bande de conduction

Ef : niveau de fermi

E_v : la bande de valence

E_l : les électrons libres

H_l : les trous libre

J_d : caractéristique I-V à

L'obscurité

J_l : caractéristique I-V à la lumière

J_n : courant d'électrons

J_p : courant de trous

R_a : la recombinaison d'accepteurs

R_d : la recombinaison de donneurs

R_t : la recombinaison totale

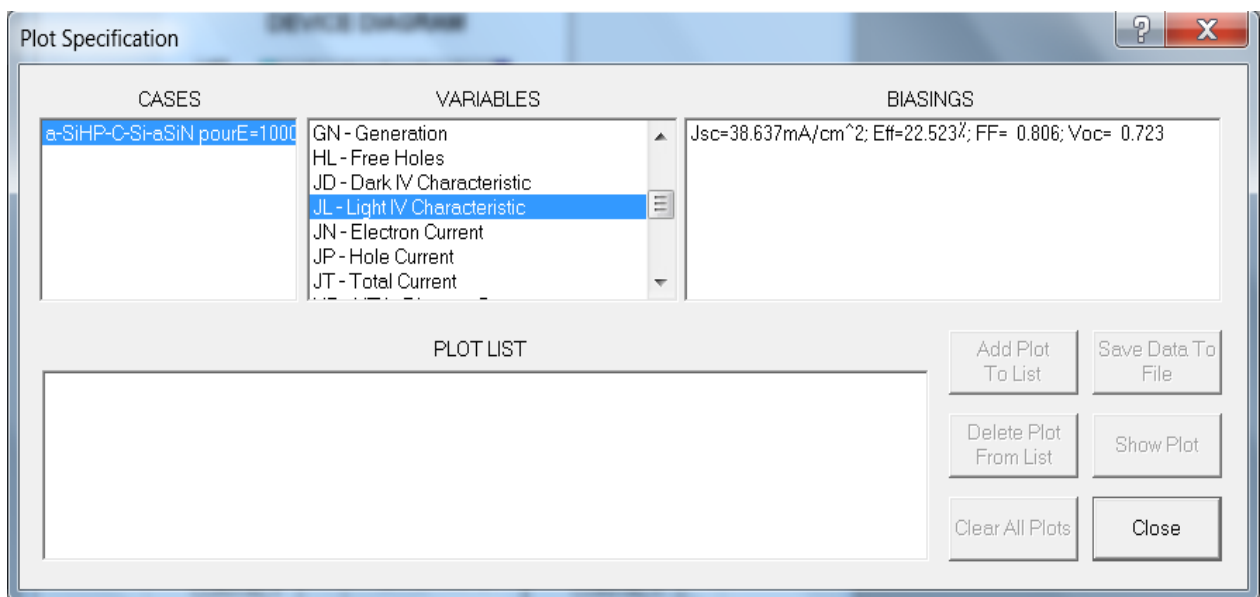


Figure III.6 : le panneau des courbes.

III.3. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle de simulation pour analyser et concevoir de physique de transport dans les dispositifs à semi-conducteur. Ce logiciel diffère des autres comme le SCAPS de la faite qu'on peut ajouter jusqu'au trente couches (LAYERS), et c'est un bon avantage pour AMPS. Le seul inconvénient que je peux mentionner à propos de ce logiciel

est sa vitesse d'exécution. L'exécution peut prendre une heure ou plus et dans certains cas, il ne s'exécutera pas sans générer un message indiquant une erreur numérique saisie par l'utilisateur.

REFERENCES

[1].AMPS-1D Manual for windows 95-NT A One-Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures.

[2].P. Chatterjee, 6th Int'l PVSEC, New Delhi, Feb.10-14(1992) 329.

Chapitre IV

*Résultats et Discussion de
simulation*

IV.1. Introduction

Pour améliorer les performances des cellules solaires à base de silicium cristallin et de pérovskite, des architectures doubles jonctions ont été développées dans notre travail. Ce type des cellules sont inspirées des cellules multi-jonction développées initialement pour l'utilisation spatiale pour bénéficier au maximum du spectre solaire. Elles présentent néanmoins une mise en œuvre plus simple et mieux maîtrisée actuellement pour le marché terrestre. Nous pouvons citer par exemple les cellules tandem à base de Si, CdTe, CdSe et $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS). Les meilleurs rendements atteints actuellement en laboratoire sont de l'ordre de 30% [1] pour ces cellules.

Dans notre cas, Il s'agit d'empiler deux cellules photovoltaïques à base de silicium cristallin et pérovskite, qui absorbent des photons de longueurs d'onde différentes. Par ce mécanisme, l'ensemble tandem composé de l'association de deux cellules, permet d'absorber un plus large spectre lumineux et ainsi produire plus d'énergie qu'une cellule simple jonction. La première cellule à base de pérovskites absorbe une partie du spectre et laisse passer la lumière rouge, alors que l'autre partie du spectre (partie de la lumière rouge), est absorbée par la seconde cellule à base de silicium cristallin.

L'objectif principal de notre simulation est d'étudier l'influence de l'épaisseur de la couche absorbant sur le performances photovoltaïques des cellules solaires substrate à base de composés cristallin silicium (a-Si:H(P)/C-Si/a-Si:H(N)) et de Pérovskite ($\text{ZnO}/\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6/\text{P3HT}$) puis la cellule tandem Pérovskite ($\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$)/C-Si, utilisant un outil de simulation très puissant et très adaptés à ce genre des structures, s'appel: AMPS-1D.

IV.2. Simulation de la cellule solaire a base du Pérovskite individuelle

IV.2.1. Présentation de la cellule individuelle à base de Pérovskite

La structure de la cellule solaire individuelle à base du composé Pérovskite est constituée par: une couche de l'oxyde de zinc (ZnO) a été utilisé comme matériau de transport d'électrons, de la pérovskite ($\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$) qui a été utilisé comme matériau absorbant et le P3HT (poly (3-hexylthiophène)) comme un matériau de transport de trous. (Voir Figure IV.1).

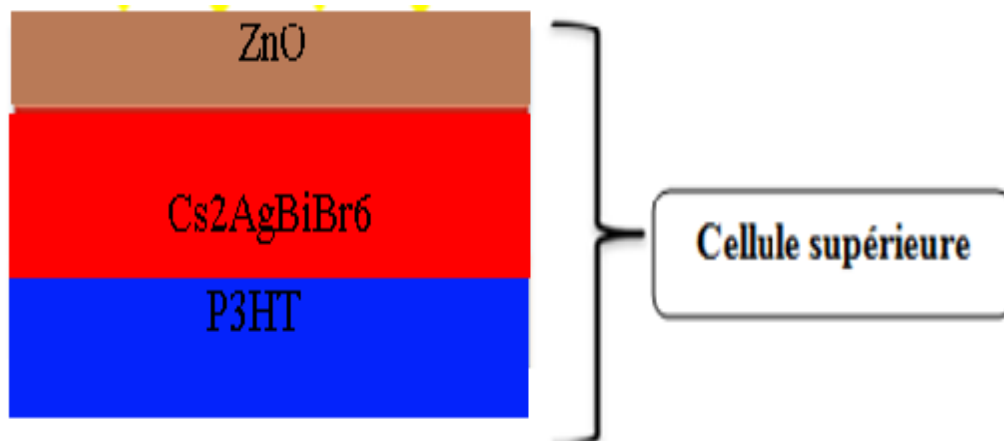


Figure IV.1: Structure de la cellule solaire Pérovskite.

IV.2.2. Paramètres de la cellule Pérovskite individuelle

Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure de la Figure IV.1 sont illustrés dans le tableau IV.1 [2, 3,4] :

Paramètres	Zno	Cs2AgBiBr6	P3HT
Épaisseur (nm)	50	variable	50
Constante diélectrique (EPS)	9.00	5.80	3.40
Mobilité d'électrons (MUN) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	100	11.81	0.0010
Mobilité des trous (MUP) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	25	0.4900	0.0010
Densité d'effective (NC) (cm^{-3})	2.22×10^{18}	1.0×10^{20}	2.20×10^{18}
Densité d'effective (NV) (cm^{-3})	1.78×10^{19}	1.0×10^{20}	1.80×10^{19}
La densité du dopage (NA) (cm^{-3})	0	0	6×10^{15}
La densité du dopage (ND) (cm^{-3})	1×10^{18}	1.0×10^{19}	0
Bande de gap (EG) (eV)	3.40	2.05	2.00
Les affinités des électrons (CHI) (eV)	4.00	4.19	3.80
Densité d'états des gaussiennes (NDG-NAG) (cm^{-3})	1.0×10^{17}	1.00×10^{17}	1.0×10^{14}

IV.2.3. Résultats et discussion

Pour étudier les performances de la cellule individuelle à base de pérovskite, paramètre essentiel doivent être variées et optimisées : L'épaisseur de la couche absorbante.

L'épaisseur de la couche (pérovskite) est donc variée de 100 nm à 800nm, Enfin, nous choisissons l'épaisseur optimale de la cellule éclairée qui vont donner des performances meilleures.

IV.2.4. La caractéristique : courant tension, de la cellule supérieure (ZnO/Cs2AgBiBr6/P3HT) en fonction de l'épaisseur De la couche active

Après les simulations par le code de calcul AMPS- 1D en utilisant les paramètres enregistrés dans le tableau (IV.1) (Propriétés des couches et des interfaces par les défauts gaussiens) on trouve les caractéristiques électriques suivantes sur la figure(IV.2) :

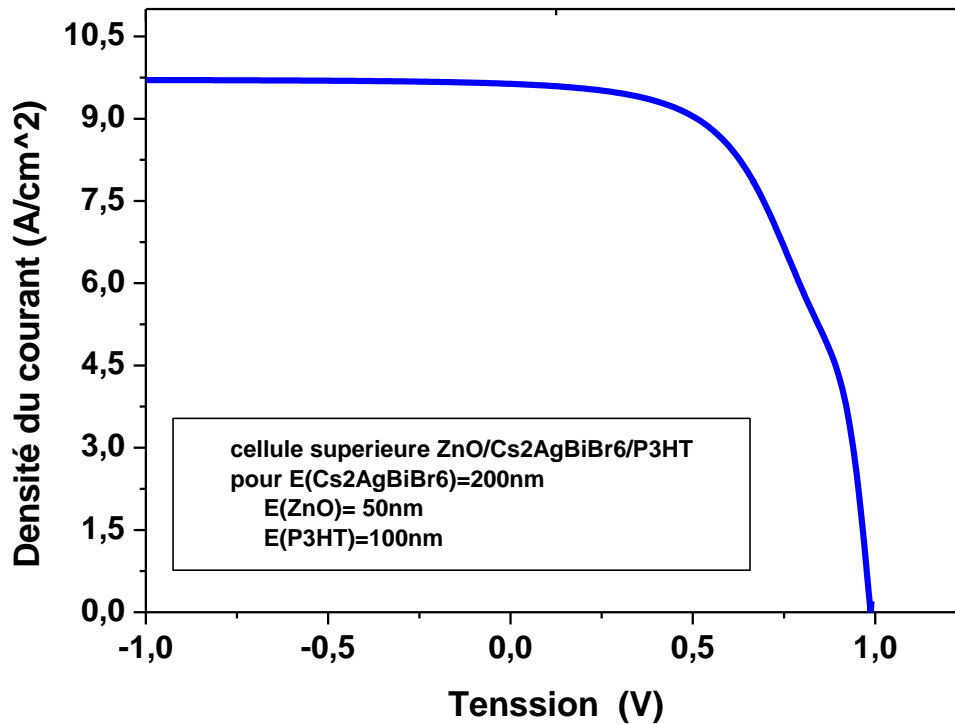


Figure IV.2 : Caractéristiques J(V) de la cellule (ZnO/Cs₂AgBiBr₆/P3HT) en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.

IV.2.5. Effet de l'épaisseur de la couche Cs₂AgBiBr₆ sur les caractéristiques (J_{sc}, Eff, FF, Voc) de la cellule solaire individuelle

La Figure IV.3 présente la variation des paramètres photovoltaïques (V_{CO} , J_{SC} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche pérovskite (E_{perov}). Lorsque l'épaisseur de la couche absorbante augmente entre 100 et 800 nm, on constate une diminution du courant J_{SC} de 11,419 à 4,932 mA/cm², cependant la tension V_{OC} diminue entre 0,988 et 0,987 Volt. En d'autre part, le Facteur de Forme FF diminue légèrement quand l'épaisseur augmente, Concernant le rendement de conversion Eff , il subit une augmentation rapide entre 2,6% et 6,2% quand l'épaisseur de la couche active (pérovskite) varie entre 100 et 800nm. On a remarqué que pour E (pérovskite)= 100nm, le rendement de conversion Eff tend vers une valeur fixée de 6,2%, ce qui donne une optimale de de l'épaisseur (E_{perov}). Est de l'ordre de 100nm. Cette valeur sera utilisée, par la suite, dans le reste de nos calculs.

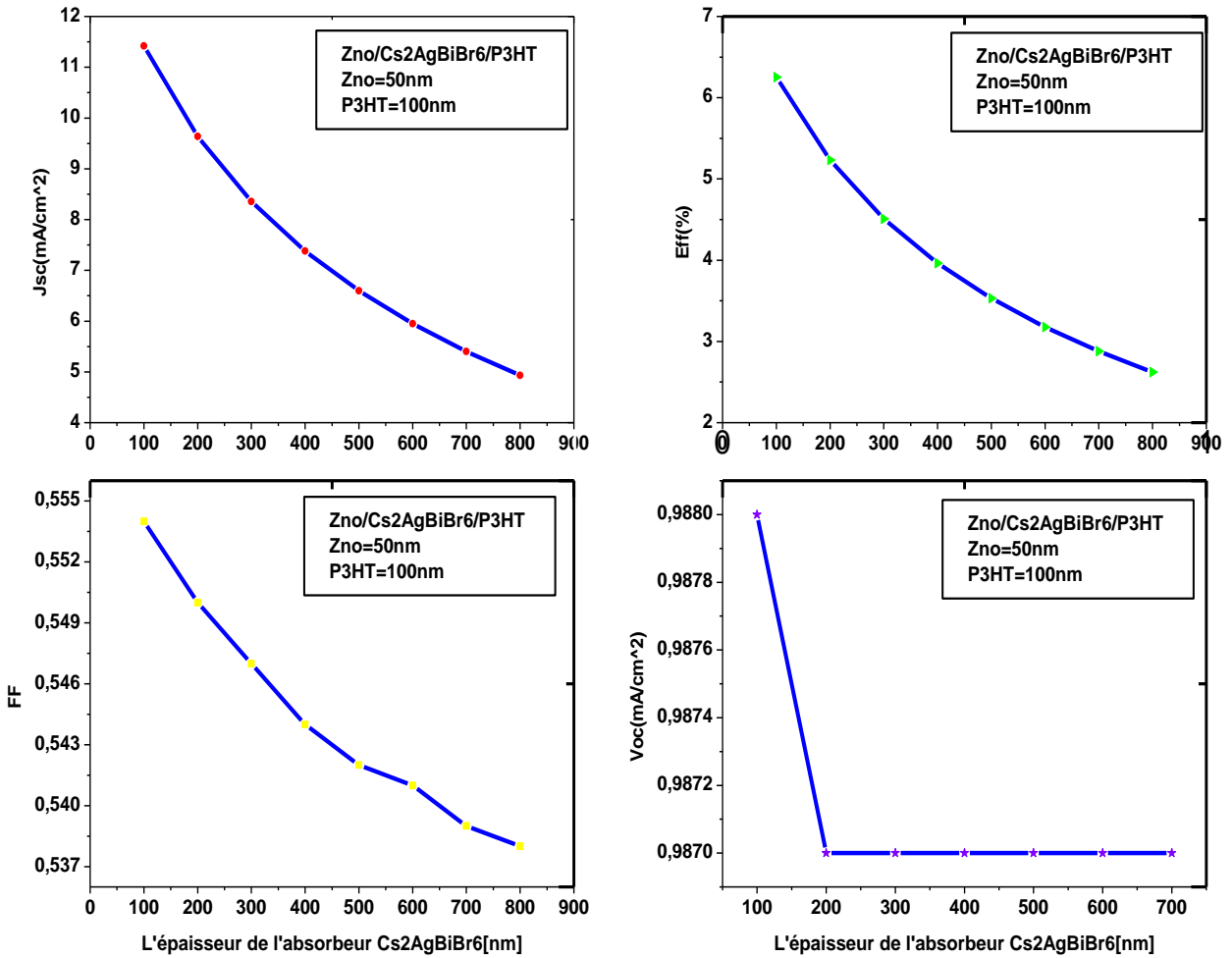


Figure IV.3 : Variation du paramètre photovoltaïque (VCO, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche Cs2AgBiBr6, Eperov.

Les paramètres photovoltaïques de la cellule supérieure à base de Pérovskite sont résumés dans le Tableau IV.2.

Voc (Volt)	Jsc (mA/cm ²)	FF	Eff (%)
0,988	11,419	0,554	6,254

IV.3. Simulation de cellule en silicium inférieure

IV.3.1. Présentation de la cellule individuelle à base du silicium

La structure de la cellule solaire individuelle à base de silicium cristallin contient respectivement les couches suivantes: La couche fenêtre à base de (a-Si:H(P)) de conductivité de type p, la couche absorbante à base de notre matériaux C-Si. Ensuite un couche à base de (a-Si:H(N)) de conductivité de type N. Comme le montre la Figure IV.4.

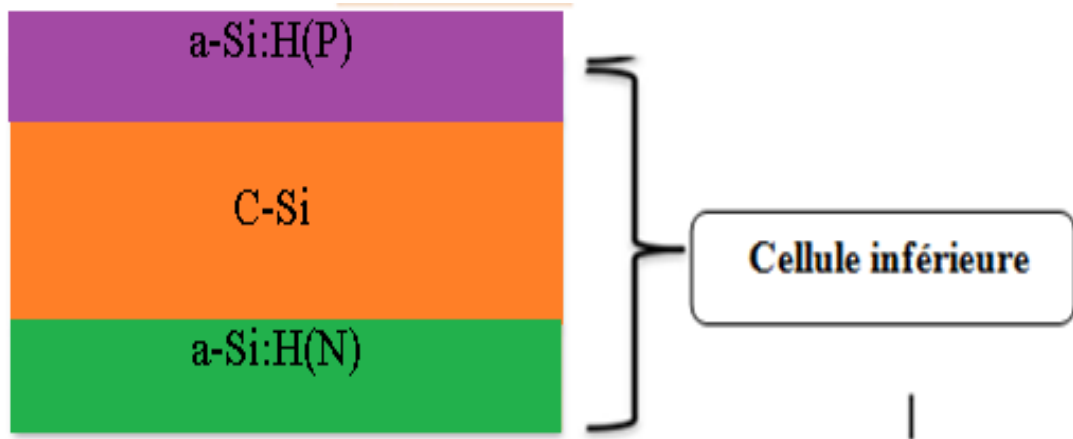


Figure IV.4: Structure de la cellule solaire individuelle à base de silicium cristallin.

IV.3.2. Paramètres de la cellule individuelle à base de silicium cristallin

Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure C-Si sont résumés au Tableau IV.3 [5].

Paramètres	a-Si: H(p)	C-Si	a-Si: H(n)
Épaisseur (nm)	10	variable	10
Constante diélectrique (EPS)	11.9	11.9	11.9
Mobilité d'électrons (MUN) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	20	20	20
Mobilité des trous (MUP) ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$)	5	1040	5
Densité d'effective (NC) (cm^{-3})	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}
Densité d'effective (NV) (cm^{-3})	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}	1.0×10^{20}
La densité du dopage (NA) (cm^{-3})	6.9×10^{19}	0	0
La densité du dopage (ND) (cm^{-3})	0	0	6.9×10^{19}
Bande de gap (EG) (eV)	1.72	1.12	1.8
Les affinités des électrons (CHI) (eV)	3.8	3.8	3.8
Densité d'états des gaussiennes (NDG-NAG) (cm^{-3})	1.0×10^{17}	5.0×10^{15}	8.0×10^{17}

IV.3.3. Résultats et discussion

Pour étudier les performances de la cellule individuelle inférieure à base de silicium cristallin, un paramètre essentiel doit être varié et optimisé : L'épaisseur de la couche absorbante. L'épaisseur de la couche (C-Si) est donc variée de 100 μm à 600 μm , Enfin, nous choisissons l'épaisseur optimale de la cellule éclairée qui vont donner de performance meilleure.

IV.3.3.1. La caractéristique : courant tension, de la cellule inférieure (a-Si/C-Si/a-Si : H) en fonction de l'épaisseur De la couche active

Après les simulations par le code de calcul AMPS- 1D en utilisant les paramètres enregistrés dans le tableau (IV.1) (Propriétés des couches et des interfaces par les défauts gaussiens) on trouve les caractéristiques électriques suivantes sur la figure(IV.5) :

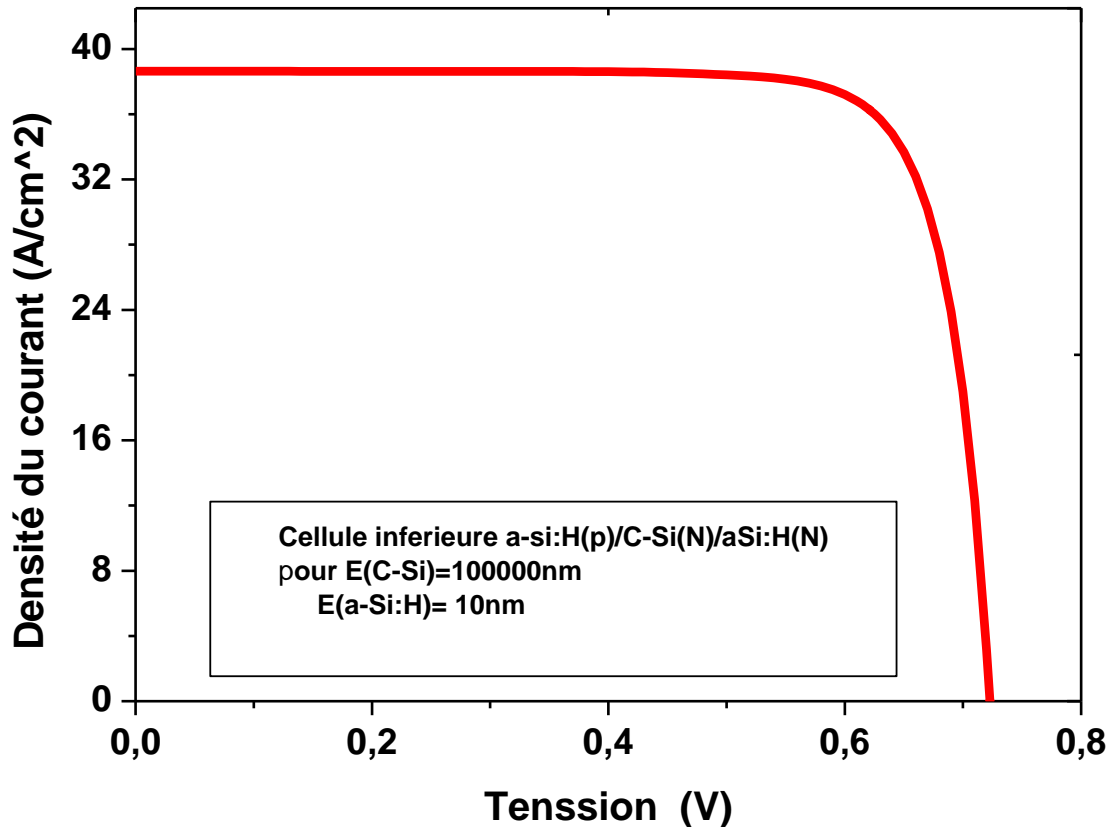


Figure IV.5 : Caractéristiques J(V) de la cellule (a-Si:H(P)/C-Si/a-Si:H(N)) en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.

IV.3.3.2. Effet de l'épaisseur de la couche C-Si sur les caractéristiques (J_{sc} , Eff , FF , V_{oc}) de la cellule solaire individuelle

La Figure(IV.6) présente la variation des paramètres photovoltaïques (V_{CO} , J_{SC} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche du silicium cristallin. Lorsque l'épaisseur de la couche du silicium cristallin (C-Si) augmente entre 100 et 300 μm , une variation rapide est observée: Le courant J_{CC} augmente rapidement entre 38,637 et 40,272 mA/cm^2 , cependant la tension V_{OC} diminue entre 0,723 et 0,709 Volt. En d'autre part, le Facteur de Forme FF subit à une légère variation entre 0,738 à une valeur maximale de 0,806 quand l'épaisseur est de l'ordre de ~ 100 μm . Concernant le rendement de conversion Eff , lui aussi il subit une augmentation rapide entre 20,958 et 22,523% quand C-Si varie entre 100 et 600 μm . On a remarqué lorsque C-Si dépasse 100 μm le rendement de conversion Eff tend vers une valeur presque fixée de 22,523%, ce qui donne une optimale de de l'épaisseur C-Si est de l'ordre de 100 μm . Cette valeur sera utilisée, par la suite, dans le reste de nos calculs.

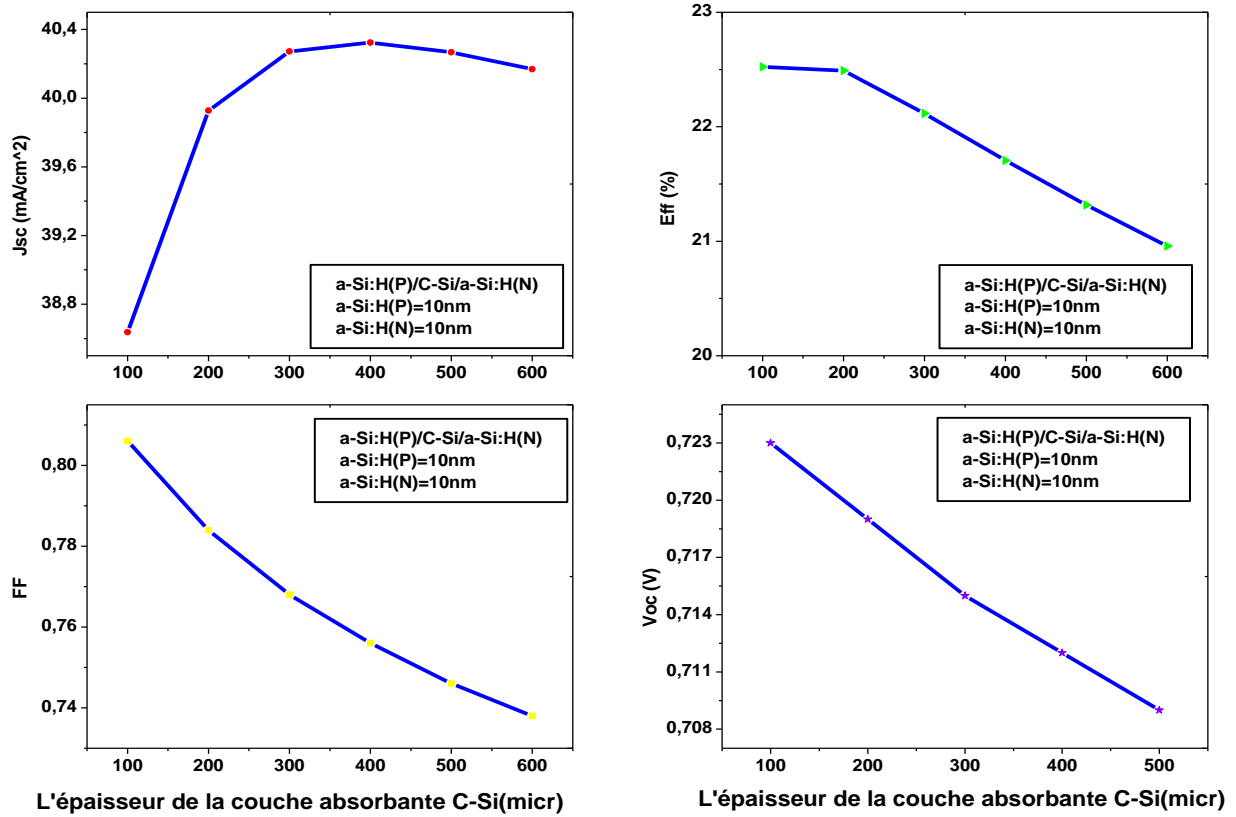


Figure IV.6 : Variation des paramètres photovoltaïques (VCO, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche C-Si

Les paramètres photovoltaïques obtenus de la cellule C-Si individuelle ont été résumés dans le Tableau IV.4.

<i>V_{co}</i> (Volt)	<i>J_{cc}</i> (mA/cm ²)	<i>FF</i>	<i>Eff</i> (%)
0,723	38,637	0,806	22,523

IV.4. Simulation de la cellule tandem pérovskite/Si empilée mécaniquement

IV.4.1. Présentation de la cellule tandem pérovskite/Si

La structure de la cellule solaire en tandem basée sur une cellule inférieure en silicium et une cellule supérieure en pérovskite (couche de transport de trous : ZnO ; absorbeur : Cs₂AgBiBr₆ et une couches de transport d'électrons : P3HT [...]), Comme le montre la figure(IV.7).

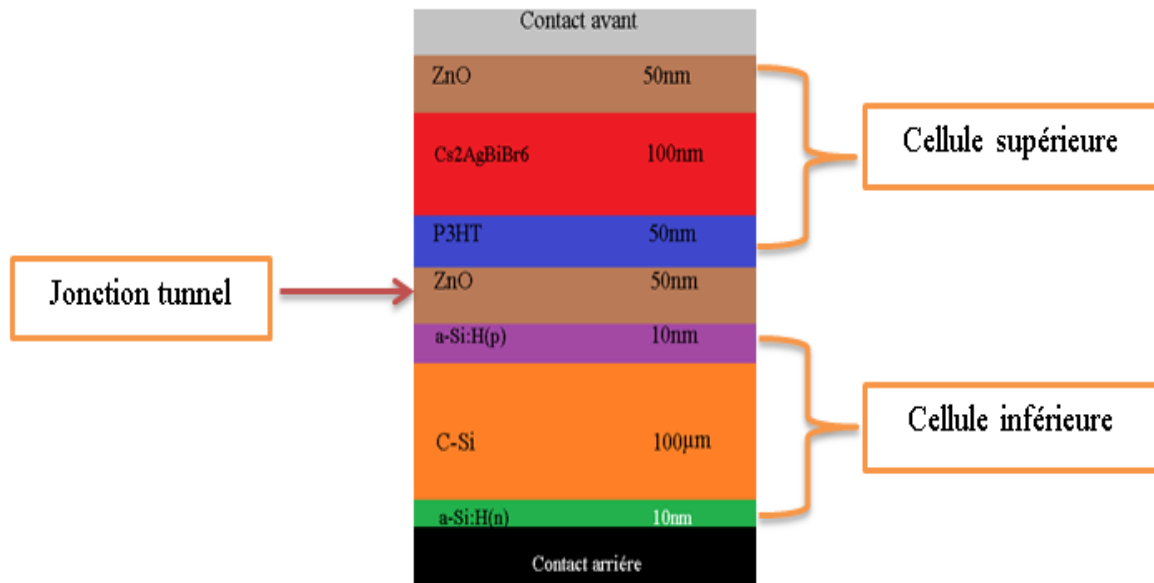


Figure IV.7 : Cellule tandem avec cellule supérieure (ZnO/Cs₂AgBiBr₆/P3HT) et une cellule inférieure (a-Si:H(P)/C-Si/a-Si:H(N))

- ✚ La cellule supérieure est constituée d'un groupe de semi-conducteurs représentés dans la pérovskite qui est la couche absorbante, tandis que la couche de transport des trous est représentée par le ZnO, Le dernière couche (P3HT) représente la couche de transport des électrons.
- ✚ La cellule inférieure est représentée par le silicium cristallin est constituée de trois couches (a-Si:H(p)/C-Si/a-Si:H(n)).Les paramètres électriques de tous les matériaux utilisés dans cette simulation sont résumés dans Tableau IV.1et Tableau IV.3.

IV.4.2. Résultats de simulation de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si

IV.4.2.1. La caractéristique : courant tension, de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si en fonction de l'épaisseur De la couche active

Après les simulations par le code de calcul AMPS- 1D en utilisant les paramètres (Propriétés des couches et des interfaces par les défauts gaussiens) on trouve les caractéristiques électriques suivantes sur la figure(IV.8) :

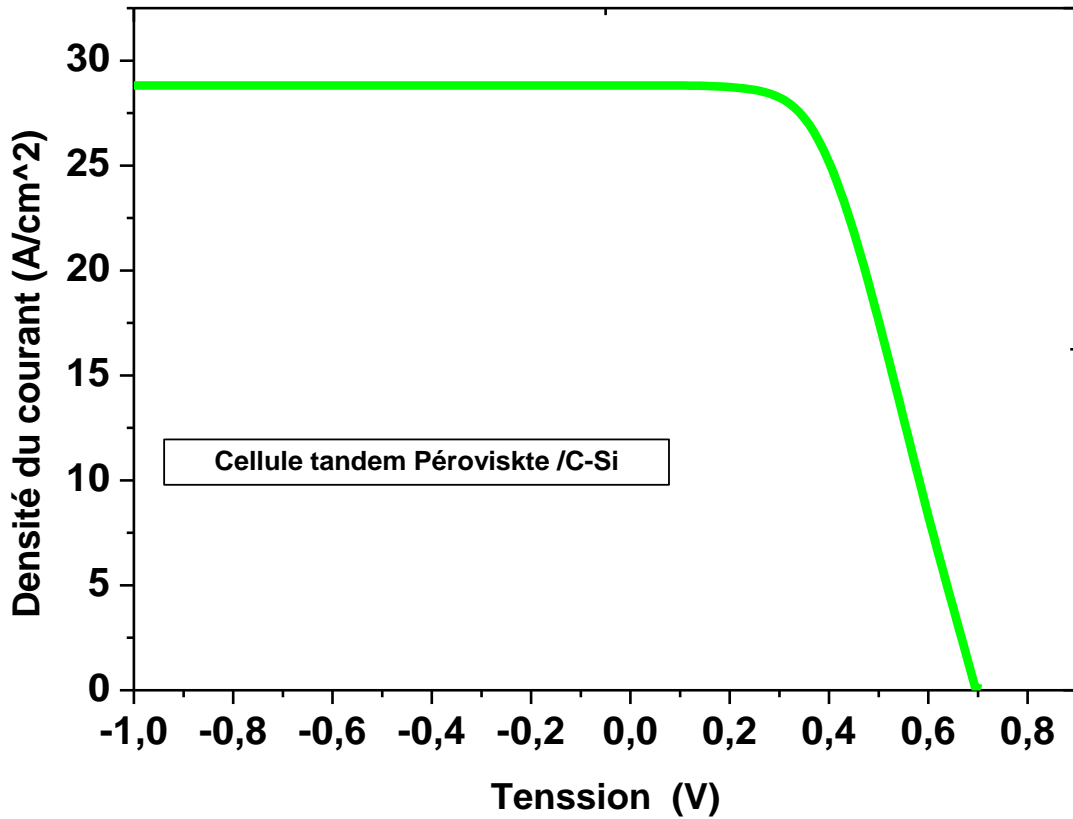


Figure IV.8 : Caractéristiques J(V) de la cellule tandem en illumination AM1.5G simulée à l'aide l'AMPS-1D.

- Après le lancement de la simulation, les paramètres photovoltaïques de la cellule tandem Pérovskite/ C-Si sont résumés dans le Tableau IV.5.

<i>V_{co}</i> (Volt)	<i>J_{cc}</i> (mA/cm ²)	<i>FF</i>	<i>Eff</i> (%)
<i>0.696</i>	<i>28.816</i>	<i>0.502</i>	<i>10.077</i>

IV.5. Rendement quantique.

L'efficacité quantique (EQ) est le rapport entre le nombre de porteurs collectés et le nombre de photons incidents. Il peut être utilisé pour déterminer si l'absorption de photons se produit réellement à une longueur d'onde donnée. La figure (IV.9), présente la réponse spectrale pour les trois cellules.

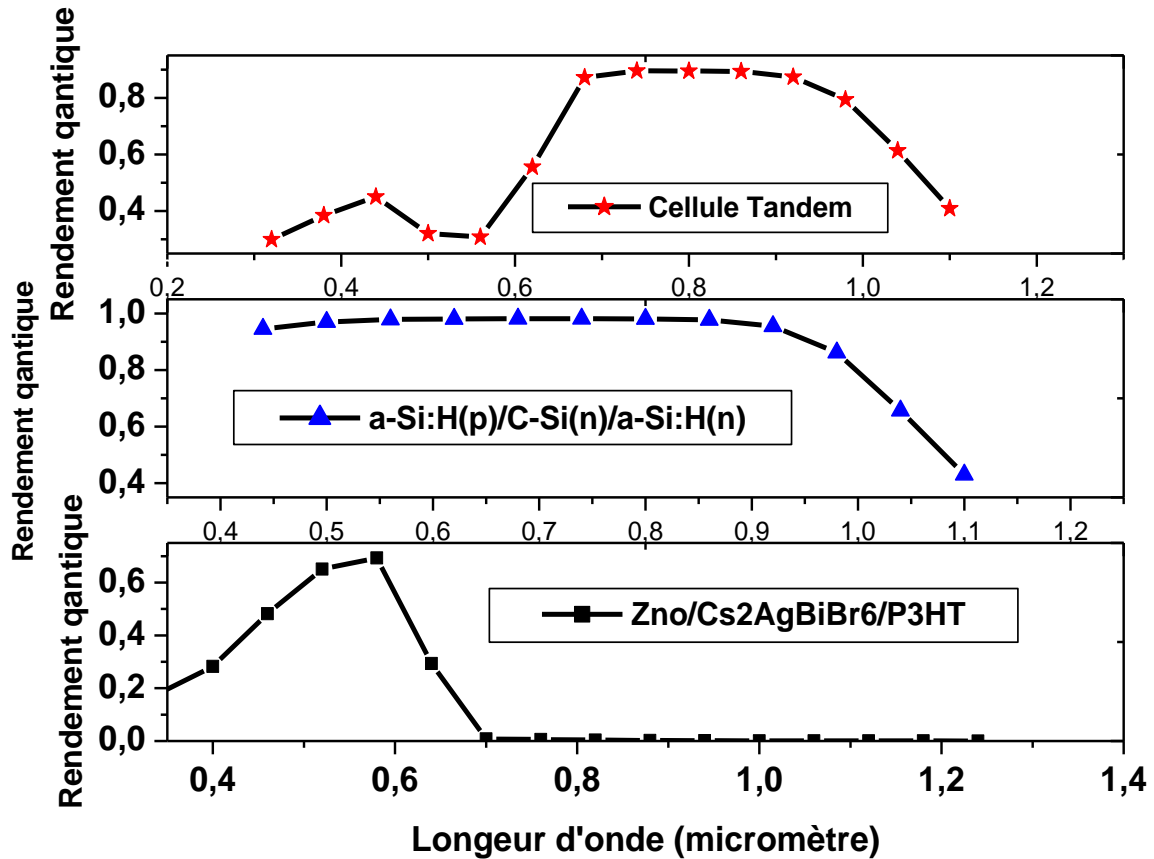


Figure IV. 9: Rendement quantique pour les trois cellules Simulée en conditions de court-Circuit ($V_{oc}=0$) et d'illumination AM1.5G à l'aide de L'AMPS-1D.

D'abord, on voit que

- La cellule supérieure absorbe les longueurs d'onde comprises entre 0.3 μm et 0.6 μm de la partie visible du spectre solaire.
- La cellule inférieure absorbe les longueurs d'onde comprises entre 0.45 μm et 1.1 μm de la partie visible du spectre solaire.
- La cellule tandem absorbe les longueurs d'onde comprises entre 0.35 μm et 1.1 μm de la partie visible du spectre solaire.

IV.6. Conclusion

Dans ce dernier chapitre, nous avons utilisé le logiciel AMPS-1D pour simuler les performances optimales des cellules tandem combinant les matériaux de pérovskite et de silicium. Les résultats de la simulation ont démontré clairement que l'épaisseur des couches absorbantes de la cellule, ainsi que d'autres paramètres tels que l'épaisseur de la couche, jouent un rôle crucial dans les performances des cellules solaires. Les résultats de la simulation ont confirmé nos attentes.

L'efficacité de conversion obtenue pour la cellule à base de pérovskite était d'environ 6,25%, tandis que pour la cellule solaire individuelle à base de silicium, elle était d'environ 22,52%. En combinant ces deux types de cellules dans une configuration tandem, la simulation a abouti à un rendement global de 10,077%. Ces résultats sont prometteurs et indiquent le potentiel d'amélioration des performances des cellules photovoltaïques en utilisant cette approche tandem.

REFERENCES

- [1]. Emiliano Bellini, *Des cellules solaires tandem pérovskite-silicium conservent 80 % de rendement au bout d'un an*, mars 3, 2023.
- [2]. Mohandes, A., Moradi, M., & Nadgaran, H. (2021). Numerical simulation of inorganic Cs₂AgBiBr₆ as a lead-free perovskite using device simulation SCAPS-1D. *Optical and Quantum Electronics*, 53, 1-22.
- [3]. Islam, M. T., Jani, M. R., Al Amin, S. M., Sami, M. S. U., Shorowordi, K. M., Hossain, M. I, & Ahmed, S. (2020). Numerical simulation studies of a fully inorganic Cs₂AgBiBr₆ perovskite solar device. *Optical Materials*, 105, 109957.
- [4]. Alkhamash, H. I., Mottakin, M., Hossen, M. M., Akhtaruzzaman, M., & Rashid, M. J. (2022). Design and defect study of Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cell using suitable charge transport layers. *Semiconductor Science and Technology*, 38(1), 015005.
- [5]. Azzemou, F., Rached, D., & Rahal, W. L. (2020). Optimisation of emitter properties for silicon heterojunction solar cell ITO/pa-Si: H/ia-Si: H/nc-Si/BSF/Al. *Optik*, 217, 164802.

Conclusion générale

Conclusion générale

L'énergie solaire est la source d'énergie la plus prometteuse et la plus puissante parmi les sources d'énergie renouvelables. L'électricité photovoltaïque (PV) est produite en utilisant des cellules PV pour convertir directement la lumière du soleil en énergie électrique. Le but de ce travail est d'étudier l'amélioration des performances des matériaux semi-conducteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques.

Dans le premier chapitre, nous avons présenté un ensemble d'informations générales sur le domaine de la conversion photovoltaïque ainsi que le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs principales caractéristiques et les limites du modèle théorique. Et nous avons fini par les différentes filières photovoltaïques.

Dans le deuxième chapitre, nous avons présenté les propriétés cristallographiques, physiques et optiques des matériaux semi-conducteurs utilisés dans notre simulation.

Le troisième chapitre a été consacré spécifiquement pour le code numérique AMPS-1D utilisé dans notre simulation. Ce code est adapté à la simulation de cellules solaires et conçu sur les équations de base décrivant les changements du potentiel et de la densité de courant des deux porteurs.

Enfin, dans le quatrième chapitre nous avons étudié par simulation, les propriétés électriques et optiques de deux types de cellules (pérovskite et silicium cristallin) et la cellule solaire tandem pérovskite/c-si sous l'éclairement AM1.5G en utilisant le logiciel l'AMPS-1D unidimensionnelle.

Tout d'abord, nous avons optimisé la cellule solaire supérieur à base de pérovskite et la cellule à hétérojonction C-Si, les résultats de simulation pour les deux cellules ont montré que pour :

- La cellule supérieure (ZnO/pérovskite/P3HT) :

Pour une épaisseur de 100 nm de la couche active (pérovskite), les résultats obtenus sont les suivants: $V_{oc} = 0,988$ volt, $J_{sc} = 11,419$ mA/cm², $FF = 0,554$, $Eff = 6,254\%$

- La cellule inférieure (a-Si : H-P/C-Si-N/a-Si : H-N):

Pour une épaisseur de 100000 nm de la couche active (C-Si), les résultats obtenus sont les suivants: $V_{oc} = 0,723$ volt, $J_{sc} = 38,637$ mA/cm², $FF = 0,806$, $Eff = 22,523\%$

Ensuite, nous avons optimisé la cellule solaire (pérovskite / C-Si) et les résultats obtenus sont les suivants: $V_{oc} = 0,696$ volt, $J_{sc} = 28,816$ mA/cm², $FF = 0,502$, $Eff = 10,077\%$