

People's Democratic Republic of Algeria

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية وزارة التعليم العالي

Ministry of Higher Education and Scientific
Research

والبحت العلمي جامعة المسيلة

Mohamed Boudiaf University of M'sila

كلية التكنولوجيا

Faculty of Technology



Département de Génie Mécanique
Université Mohamed Boudiaf - M'sila

MEMOIRE DE FIN D'ETUDE

En vue de l'obtention du diplôme de :

MASTER

En Génie Mécanique

Option : Génie des matériaux

Présenté par :

ROUIBEH LAID et DEBBAH HOUSSAM

Thème

Étude de l'influence des matériaux à base de sélénium (Se) sur les
performances des cellules solaires à double pérovskite.

Devant le jury composé de :

NOM et Prénom

Qualité

Zemmamouche Redouane

MCB

Président

Bechane Leila

MCB

Encadreur

Boukhari Ammar

MCB

Examinateur

Année Universitaire : 2024/2025

N° d'ordre : GM/ 2024/2025

إهداء

إلى من غرسوا في قلوبنا حب العلم، وزرعوا في دروبنا الدعاء والدعم، إلى من كان
فضلهم بعد الله لا حصر، ولا يحصى

إلى الوالدين الحبيين، نبض القلوب، وسراج الطريق

لكما نهدي هذه الثمرة، عرفاناً ووفاء

إلى إخوتنا وأصدقائنا، من شاركوا العلم، وتحملوا معنا مشقة الطريق

كنتم العون في لحظات الضعف، والفرح في مواسم النجاح، لانجاز لكم منا كل الامتنان

إلى إخوتنا وأخواتنا في درب الدعوة، من حملوا هممنا في القلوب وزرعوا في

أرواحنا بذور المعنى والبصيرة والثبات

وإلى من يعدون لنا لمة كرامتها بنضجياتهم

إلى المرابطين في غزوة، درعنا لمة، وأهل الثغور الصامدين

لكم كل الاحترام، وكل ما في القلب من دعاء وعرفان نهديكم

هذه المذكرة المتواضعة، من تخصص هندسة المواد

عزما تكون لنا في صرح البناء والعزة

اللهم اجعل هذا العمل خالاً اصلاً لوجهك الكريم، وسبيلاً إلى نفع الخلق وخدمة لمة.

شكر وتقدير

نتقدم بخلص الشكر وعظيم الامتنان ،إلى مشرفتنا الفاضلة إ لس تاذة ليلي بشأن،
من كلية التكنولوجيا - قسم هندسة المواد بجامعة محمد بوضياف بالمسيلة، التي لم تبخل
علينا بوقتها وجهدها، وكانت لنا س.ن ادا في كل مراحل هذا العمل لقد كان لتوجيهاتها السديدة،
وملاحظاتها الدقيقة، وصبرها الدائم، إ ثر البالغ في
إنجاز هذه المذكرة، فكل كلمات الشكر لا تفيها حقها
كما نتوجه بجزيل الشكر والامتنان ،إلى أعضاء لجنة المناقشة، على تشریفهم لنا بقبولهم أن يكونوا من يمين لهذا العمل.
جزى الله الجميع خير الجزاء، وبارك في علمهم، ووفقهم لما فيه نفع البلاد والعباد.

Sommaire

Introduction général	2
Chapitre I : Généralités sur les cellules photovoltaïques:	
I. 1. Introduction	5
I. 2. Historique.....	5
I. 3. Le principe de la conversion Photovoltaïque	6
I. 4. Notions préliminaires sur le rayonnement solaire	6
I. 5. Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque.....	8
I. 6. Caractéristique électrique et paramètres de la cellule photovoltaïque.....	9
I. 7. Les différentes filières photovoltaïques	12
I. 7. 1. La filière silicium cristallin	12
I.7.1. 1. Le silicium monocristallin	12
I.7.1. 2. Le silicium multicristallin	12
I. 7. 2. La filière couches minces	13
I. 7. 2. 1. La filière silicium microcristallin/silicium amorphe	13
I. 7. 2. 2. Couches minces de tellure de cadmium (CdTe).....	13
I.7. 2. 3. Couches minces de di-séléniure de cuivre-indium (CIS/CIGS)	14
I.7. 3. La filière Organique.....	14
I.7. 4. La filière des pérovskites.....	15
I.8. Références	17
Chapitre II : Propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs (ZnSe, CdSe, Cs₂AgInBr₆, CuO):	
II. Introduction.....	20
II.1. Matériaux Pérovskite	20
II.1.1. Double perovskites Based on In (V) and Ag (I)	21
II. 2. Propriétés des matériaux pérovskites (Cs₂AgInBr₆)	22
II. 2.1 Coefficient d'absorption	24
II. 3. Propriétés de dioxyde d'étain (SnO₂)	25
II. 3. 1. Propriétés électriques dioxyde d'étain (SnO₂).....	25
II. 3. 2. Propriétés optiques l'dioxyde d'étain (SnO₂)	25
II.4. propriétés Séléniure de zinc (ZnSe)	26
II.4 .1Propriétés électriques du ZnSe	26
II.4 .2 Propriétés optiques du ZnSe	26
II.5 Propriétés Séléniure de cadmium (CdSe).....	27
II.5.1. Propriétés optiques de CdSe.....	27
II.5.2. Propriétés électroniques de CdSe.....	28
II.6 Propriétés Oxyde de cuivre (CuO).....	28
II.6.1. Propriétés électriques du CuO	28
II.6.2 Propriétés optiques du CuO.....	29
II. 6. Références.....	32

Chapitre III : Logiciel de simulation AMPS-1D:

IV. 1. Introduction.....	35
III. 2. Présentation du simulateur AMPS-1D.....	35
III. 2. 1. Définition.....	35
III. 2. 2. Le but d'utiliser l'AMPS-1D.....	36
III. 2. 3. L'équation de Poisson.....	37
III. 2. 4. Les équations de continuité.....	38
III. 2. 4. 1. Densité de courant d'électron et de trou.....	39
III. 2. 4. 2. Les mécanismes de recombinaison.....	40
III. 2. 5. Aperçu sur le fonctionnement de l'AMPS.....	40
III. 2. 6. Liste des paramètres à introduire.....	41
III. 2. 6. 1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier.....	41
III. 2. 6. 2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière.....	42
III. 2. 6. 3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination.....	47
III. 2. 7. Le panneau de différents résultats obtenus.....	48
III. 3. Références.....	50

Chapitre IV : Résultats et Discussion de simulation:

IV.1. Introduction.....	52
IV.2. Simulation de la cellule solaire double Pérovskite.....	53
IV. 2. 1. Présentation de la cellule.....	53
IV. 2. 2. Paramètres de la cellule Pérovskite.....	53
IV. 3. Résultats et discussion.....	54
IV. 3. 1. Caractéristique courant tension.....	54
IV. 3. 2. Impact de l'épaisseur sur les performances (JSC, Eff, FF, Voc).....	54
IV. 3. 2. 1. Effet de l'épaisseur de la couche Cs ₂ AgInBr ₆	54
IV. 3. 2. 2. Effet de l'épaisseur de la couche de dioxyde d'étain (SnO ₂).....	56
IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur de la couche oxyde de cuivre (CuO).....	57
IV. 3. 3. Influence Dopage NA (Cs ₂ AgInBr ₆ , CuO) sur le rendement.....	58
IV. 3. 4. Effet de la température sur les performances de la cellule.....	59
IV. 3. Évaluation comparative des matériaux (SnO ₂ , CdSe, ZnSe) dans les cellules photovoltaïques à base de Cs ₂ AgInBr ₆	60
IV. 3. 2. Effet de l'épaisseur de la couche Cs ₂ AgInBr ₆ sur les trois cellules.....	61
IV.6. Références.....	63
Conclusion générale.....	65

Liste des figures :

Chapitre I : Généralités sur les cellules photovoltaïques :

Figure I.1 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après..... 7

Figure I.2 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque 8

Figure I.3 : Structure d'une cellule (à gauche) et son diagramme de bande (à droite)9

Figure I.4: Caractéristiques courant-tension de la cellule photovoltaïque sous éclairément et sous obscurité 10

Figure I.5 : Cellules du silicium monocristallin et multicristallin..... 12

Figure I.6: Structure d'une cellule solaire à base de CdS/CdTe..... 15

Figure I.7 :Structure d'un cristal de pérovskite générique ABX₃.14... 16

Chapitre II : Propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs (ZnSe, CdTe, Cs₂AgInBr₆, Cs₂AgBiBr₆, CuO) :

Figure II.1 : Représentation de la structure stable de pérovskite des éléments à travers le tableau périodique..... 21

Figure II.2 : Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs₂AgInBr₆. Cs(Verts) occupant les sites A-cristallographiques.....21

Figure II.3 : Structure de bande électronique pour Cs₂AgInBr₆... 23

Figure II.4 : Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs₂AgInBr₆..... 23

Figure II.5 : Spectre du coefficient d'absorption de la pérovskite cubique double Cs₂AgInBr₆..... 24

Figure II.6 : Structure cristalline du ZnSe (Séléniure de Zinc)..... 26

Figure II.7 : Le séléniure de cadmium (CdSe)..... 27

Figure II.8 : Spectre d'absorption UV-Visible d'un réseau de nanofils de CuO..... 30

Chapitre III : Logiciel de simulation AMPS-1D :

Figure III.1 : Bande de diagramme énergétique de la barrière de schottky a l'équilibre thermodynamique..... 38

Figure III.2 : différentes fenêtres pour introduire les paramètres 41

Figure III.3 : différentes paramètres pour la couche Cs₂AgInBr₆... 43

Figure III.4 : Défauts donneurs discrets et continues pour la couche Cs₂AgInBr₆... 44

Figure III.5 : Défauts accepteur discrets et continues pour la couche CuO.....47

Figure III.6 : coefficients d'absorption pour la couche Cs₂AgInBr₆... 48

Figure III.7 : le panneau des courbes 49

Chapitre IV : Résultats et Discussion de simulation:

Figure IV. 1 : Structure de la cellule solaire Pérovskite..... 53

Figure IV. 2 : Caractéristique Courant-Tension 54

Figure IV. 3 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC}, J_{SC}, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche Cs₂AgInBr₆55

Figure IV.4: Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC}, J_{SC}, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche SnO₂..... 56

Figure IV.5 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC}, J_{SC}, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche CuO57

Figure IV.6 : Variation du rendement en fonction du dopage NA..... 59

Figure IV. 7 : Effet de la température sur les paramètres caractéristiques (J_{SC}, Eff, FF, V_{OC}) de la

Cellule.....	59
Figure IV. 9 : Caractéristique Courant-Tension.....	60
Figure IV. 8 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC} , J_{SC} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur dans les trois cellules.....	61
Liste des Tableaux :	
Tableau. 1 : Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure	53
Tableau.2 : Paramètres simulés optimaux pour une couche de $Cs_2AgInBr_6$ d'une épaisseur de 400nm.....	55
Tableau.3 : Paramètres optimaux simulés pour CuO (600 nm) / $Cs_2AgInBr_6$ (400 nm)	58

Introduction Générale

Introduction Générale:

La croissance rapide de la population mondiale, l'industrialisation et l'épuisement progressif des ressources fossiles ont entraîné une augmentation significative de la demande énergétique. Dans ce contexte, les énergies renouvelables, et en particulier l'énergie solaire, apparaissent comme des alternatives durables, propres et abondantes. L'énergie solaire photovoltaïque, qui permet de convertir directement le rayonnement solaire en électricité à l'aide de dispositifs appelés cellules solaires, joue un rôle de plus en plus central dans la transition énergétique mondiale [1].

Traditionnellement, les cellules photovoltaïques ont été dominées par le silicium cristallin, un matériau semi-conducteur efficace mais dont la production reste énergivore et coûteuse. Afin de dépasser les limitations associées aux technologies classiques, de nouvelles générations de cellules solaires ont émergé, basées sur des matériaux organiques, hybrides ou entièrement inorganiques. Parmi celles-ci, les cellules solaires inorganiques suscitent un intérêt croissant en raison de leur stabilité chimique, leur durabilité à long terme, et leur compatibilité avec des procédés de fabrication à faible coût[2].

Les cellules solaires inorganiques utilisent des semi-conducteurs tels que le CuO, ZnO, SnO₂, CdSe, ZnSe ou encore les pérovskites inorganiques comme le Cs₂AgInBr₆, qui combinent de bonnes propriétés optoélectroniques à une faible toxicité. Contrairement aux cellules solaires organiques ou hybrides, les dispositifs inorganiques présentent généralement une meilleure résistance aux conditions environnementales extrêmes (température, humidité, UV), ce qui les rend particulièrement attrayants pour des applications extérieures à long terme [3].

L'optimisation de ces cellules passe par une ingénierie fine des matériaux, notamment en ce qui concerne les couches de transport de charges (électrons et trous), l'absorbant photoactif, et les interfaces. Ainsi, l'étude et la simulation de différentes architectures de cellules inorganiques permettent de mieux comprendre les mécanismes de conversion photovoltaïque et d'identifier des combinaisons de matériaux plus performantes et plus stables.

Les cellules solaires à base de Cs₂AgInBr₆, un halogénure pérovskite unique, présentent un potentiel significatif pour l'innovation dans le domaine des technologies photovoltaïques. Ces cellules exploitent la structure cristalline particulière du Cs₂AgInBr₆, qui combine des éléments tels que le césium, l'argent, l'indium et le brome, afin d'optimiser les propriétés optiques et électroniques essentielles à la conversion de l'énergie solaire en électricité. Grâce à leur bande interdite relativement large et leur capacité à absorber efficacement la lumière visible, ces cellules solaires peuvent atteindre des rendements intéressants. Cependant, les rendements expérimentaux varient en fonction des conditions de fabrication et de la qualité des matériaux. Bien que ces cellules montrent des performances prometteuses, elles doivent encore surmonter des défis liés à la stabilité et au coût pour rivaliser avec les technologies photovoltaïques plus établies, telles que celles en silicium ou en

pérovskites hybrides. Les recherches en cours visent à améliorer ces aspects afin d'optimiser le rendement et la durabilité des cellules solaires à base de $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$.

L'objectif principal de ce mémoire est de simuler la cellule solaire $\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$ à l'aide de l'outil AMPS-1D, reconnu pour son efficacité dans la modélisation des structures photovoltaïques en couches minces. L'étude se divise en deux volets.

Dans un premier temps, elle vise à analyser l'impact de paramètres clés tels que l'épaisseur des couches, la température de fonctionnement et le niveau de dopage sur les performances de la cellule.

Dans un second temps, elle s'intéresse à l'effet du remplacement de la couche de transport d'électrons SnO_2 par d'autres matériaux semi-conducteurs alternatifs, notamment CdSe et ZnSe , afin d'évaluer les possibilités d'optimisation du rendement.

Ce mémoire est organisé comme suit : après une introduction générale, le premier chapitre est consacré aux généralités sur les cellules photovoltaïques. Le deuxième chapitre présente les propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs utilisés dans cette étude, à savoir : SnO_2 , CdSe , ZnSe , $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ et CuO . Le troisième chapitre décrit l'outil de simulation AMPS-1D, ses fonctionnalités ainsi que son intérêt pour la modélisation des structures photovoltaïques. Le quatrième chapitre est dédié à la simulation de la cellule solaire, à l'analyse des résultats obtenus et à leur interprétation. Enfin, une conclusion générale viendra clore ce travail, accompagnée de quelques perspectives pour des recherches futures.

Références

- [1] Zhao, Y., et al. Inorganic perovskite solar cells: Recent advances and future prospects. *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 10, 2021, pp. 5776–5796.
- [2] A. C. Lazaroïu, M. G. Osman, C.V. Strejoiu and G. Lazaroïu, "A Comprehensive Overview of Photovoltaic Technologies and Their Efficiency for Climate Neutrality." *MDPI Sustainability*, 2023.
- [3] Kumar, M., et al. "Inorganic Perovskite Solar Cells: Recent Advances and Future Prospects." *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, no. 10, 2021, pp. 5776–5796.

Chapitre I :

Généralités sur les cellules photovoltaïques

I. 1. Introduction :

Le soleil est une source énergétique quasiment illimitée, il pourrait couvrir plusieurs milliers de fois notre consommation globale d'énergie. C'est pourquoi, l'homme cherche depuis longtemps à mettre à profit cette énergie importante et diffusée sur l'ensemble de la planète, il est arrivé à réaliser ce but par le moyen dit cellule photovoltaïque.

La conversion de l'énergie solaire par processus appelé couramment l'effet photovoltaïque nous permet d'avoir de l'énergie électrique dans une installation photovoltaïque.

Le photovoltaïque fut utilisé pour l'alimentation en énergie de petites maisons isolées et d'équipements de télécommunications.

Aujourd'hui, grâce à sa fiabilité et à son concept respectueux de l'environnement, le photovoltaïque prend une place prépondérante.

Pour comprendre ce phénomène, nous avons rappelé dans ce chapitre quelques notions de base sur le rayonnement solaire et les propriétés des semi-conducteurs ; matériaux de base des cellules photovoltaïques[1].

I. 2. Historique :

Le terme "Photovoltaïque" trouve son origine dans le grec, où il est composé de deux éléments : "Photos" signifiant lumière et "Volt", unité de mesure de la tension électrique, nommée ainsi d'après Alessandro Volta. En plaçant deux électrodes métalliques dans un matériau conducteur et en exposant l'ensemble à la lumière solaire, on observe une faible tension, ce qui mena à la découverte de l'effet photovoltaïque en 1839 par le physicien français Antoine Becquerel. C'était la première fois que l'énergie solaire était transformée en énergie électrique. Dans les années 1880, l'américain Charles Fritts développa les premières cellules solaires en utilisant du sélénium. Les recherches sur le silicium, visant à l'isoler, le purifier et exploiter ses propriétés physiques, commencèrent bien avant 1910. Albert Einstein expliqua les mécanismes sous-jacents en 1912, mais ce n'est qu'entre 1930 et 1945 qu'un premier procédé industriel de purification du silicium par refroidissement progressif fut mis au point. En 1954, deux chercheurs des laboratoires Bell aux États-Unis, Darryl Chapin et Carl Fuller, annoncèrent la fabrication de cellules solaires en silicium avec un rendement de 6 % [2].

Bien que ces deux scientifiques aient par la suite réussi à fabriquer des cellules avec un rendement de 15 % en laboratoire, ils se heurtèrent à des obstacles économiques, et les laboratoires Bell cessèrent leurs recherches pour réduire les coûts de production. L'intérêt pour

l'énergie photovoltaïque se raviva dans les années 1950, notamment lors des premiers lancements spatiaux de satellites comme Vanguard I en 1958. Les crises économiques des années 1970, en particulier la hausse des prix du pétrole en 1973, ainsi que les accidents nucléaires comme ceux de Three Mile Island (USA, 1979) et de Tchernobyl (URSS, 1986), accentuèrent l'intérêt pour les énergies renouvelables, et notamment pour l'énergie photovoltaïque, considérée comme l'une des sources d'énergie renouvelables les plus prometteuses. Aujourd'hui, deux technologies dominent le marché mondial : les cellules photovoltaïques à couches minces et celles à base de silicium cristallin. Les cellules à couches minces utilisent principalement du silicium amorphe hydrogéné, tandis que celles cristallines se composent de silicium monocristallin et polycristallin.

Actuellement, plusieurs axes de recherche émergent dans le domaine de l'énergie photovoltaïque, tels que l'utilisation de nanotubes de carbone pour améliorer le rendement, l'exploration de nouveaux nanomatériaux pour optimiser l'absorption de la lumière solaire, et la création de cellules solaires flexibles [3].

I. 3. Le principe de la conversion Photovoltaïque :

Une cellule solaire est un dispositif semi-conducteur qui transforme la lumière incidente en énergie électrique. Ce processus, appelé effet photoélectrique, crée une différence de potentiel en générant des porteurs de charge via l'excitation lumineuse près d'une jonction. La cellule solaire repose sur une jonction PN et fonctionne grâce à l'absorption de la lumière solaire. L'effet photovoltaïque, exploité dans les cellules solaires, permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité en produisant et en transportant des charges électriques positives et négatives dans un matériau semi-conducteur sous l'influence de la lumière[4] .

I. 4. Notions préliminaires sur le rayonnement solaire :

Le développement, l'optimisation et la caractérisation de cellules photovoltaïques impliquent une certaine connaissance de la source d'énergie utilisée : le soleil. La surface de celui-ci se comporte comme un corps noir à la température d'environ 5800 K. Ceci conduit un pic d'émission situé à une longueur d'onde de 0,5 μm pour une puissance d'environ 60 MW/m², soit un total de $9,5 \cdot 10^{25}$ W [5]. En tenant compte de la surface apparente du soleil et de la distance entre celui-ci et la terre, cela conduit à un éclairage moyen dans l'année de 1,36 kW/m² hors atmosphère. Cette irradiance est pondérée par divers facteurs à la surface de la terre : absorption par les molécules des différentes couches de l'atmosphère, conditions climatiques, latitude du lieu

d'observation et saison. Des gaz comme l'ozone (O_3), pour des longueurs d'ondes inférieures à $0,3 \mu\text{m}$, le dioxyde de carbone (CO_2) et la vapeur d'eau (H_2O), pour les infrarouges au-dessus de $2 \mu\text{m}$, absorbent les énergies proches de leur énergie de liaison, ce qui conduit à des « trous » dans le spectre solaire visible au sol. Par ailleurs, les poussières et aérosols présents dans l'atmosphère conduisent à une absorption répartie quasiment sur toute la gamme spectrale, ce qui conduit à une baisse globale de la puissance incidente. Afin de comparer et d'unifier les performances des cellules photovoltaïques élaborées dans les différents laboratoires du monde, il a été institué la notion d'Air Mass (AM). Elle quantifie la quantité de puissance absorbée par l'atmosphère en fonction de l'angle θ du soleil par rapport au zénith :

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

Si le soleil est au zénith du lieu d'observation, $\theta=0^\circ$, $AM=1$: la notation utilisée est AM1.

AM0 correspond à l'irradiance hors atmosphère, et est surtout utilisée pour prédire le comportement des cellules pour applications spatiales. Le spectre standard le plus étudié est AM1.5G, G signifiant global car il tient compte à la fois des radiations directes et diffuses, par opposition à AM1.5D qui ne tient compte que des directes. AM1.5G donne une irradiance de 970 W/m^2 , mais a été arrondi à 1 kW/m^2 . L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée grâce à la formule empirique suivante [5] :

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

Avec I_D en kW/m^2 , pour une surface perpendiculaire aux rayons incidents. Les spectres AM0 et AM1.5 sont représentés sur la figure (I.1).

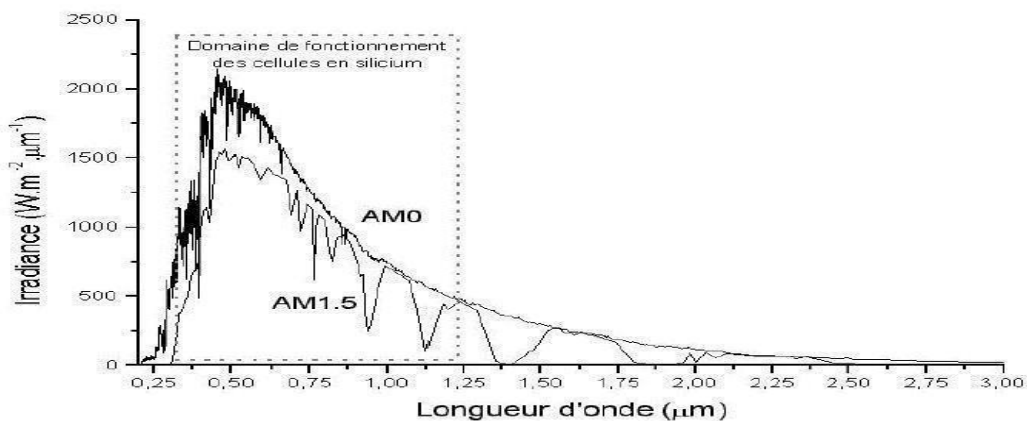


Figure I. 1 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après [3].

Le domaine spectral utile aux cellules en silicium est mis en évidence. Il apparaît que la partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la terre concerne le domaine du visible et du 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 présente ainsi de grandes disparités dans la répartition de la puissance solaire : les ensoleillements moyens sur l'année

peuvent atteindre 7 kWh/m²/jour dans le nord de l'Australie et au Botswana. En Europe occidentale, la puissance se situe autour de 3 kWh/m²/jour pour les pays comme l'Espagne, à moins de 1 kWh/m²/jour pour le sud de la Suède. La France est soumise à une moyenne annuelle comprise entre 1,5 et 3 kWh/m²/jour selon les régions.

I. 5. Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque :

Le principe d'une cellule photovoltaïque est de transformer des photons absorbés par un semi-conducteur en porteurs de charges électriques (électrons et trous). Cette création de charges va entraîner la création d'une différence de potentiel aux bornes d'électrodes et d'un courant électrique dans un circuit connecté aux électrodes. La Figure I.2 présente le principe de fonctionnement d'un générateur photovoltaïque d'électricité.

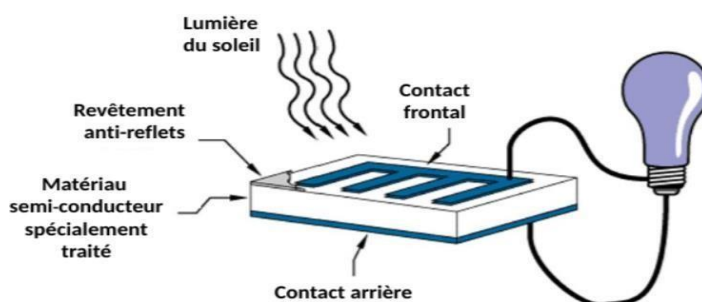


Figure I. 2 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

Une cellule photovoltaïque comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électron, dites respectivement dopée n et dopée p. Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau n diffusent dans le matériau p. La zone initialement dopée n devient chargée positivement et la zone initialement dopée p chargée négativement, il se crée donc entre elles un champ électrique qui tend à repousser les électrons dans la zone n et les trous dans la zone p. Une jonction dite (p-n) a été formée. En ajoutant des contacts métalliques sur les zones n et p, une diode est obtenue. Lorsque la jonction est éclairée, les photons d'énergie supérieurs ou égale à la largeur de la bande interdite E_g (1,12 eV pour le silicium) communique leurs énergies aux atomes où chacun fait passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction et laisse aussi un trou capable de s'émouvoir. Ce dernier, engendre ainsi une paire électron/trou [6].

Si une charge est placée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n rejoignent les trous de la zone p via la connexion extérieure donnant naissance à une différence de potentiel : le courant électrique circule (Figure I.3).

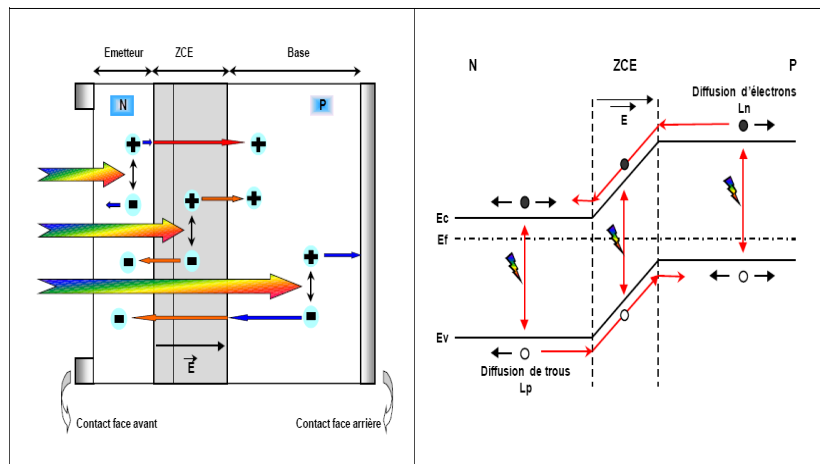


Figure I. 3 : Structure d'une cellule (à gauche) et son diagramme de bande (à droite) [6].

I.6. Caractéristique électrique et paramètres de la cellule photovoltaïque :

La partie principale d'une cellule photovoltaïque est une jonction PN [6,7]. C'est l'éclairement de cette jonction qui va générer des porteurs de charges et permettre de récupérer une puissance électrique. On distingue deux régimes de fonctionnement qui dépendent de la polarisation de la diode : la polarisation directe qui correspond au régime passant (si le potentiel appliqué est supérieur à celui de la barrière de potentiel V_0) et la polarisation inverse qui correspond au régime bloqué (Figure I. 7) : courbe sous obscurité). En régime passant, la barrière de potentiel est levée, les porteurs majoritaires peuvent traverser la jonction sans être bloqués, un courant apparaît. En régime bloqué, seuls les porteurs minoritaires peuvent créer un courant dans la diode car ils n'ont pas de barrière de potentiel qui les retiennent. Ce courant est le courant I_0 ou courant de saturation. Sous éclairement :

Les photons incidents vont générer des paires électron/trou dont le comportement va différer selon la zone d'absorption :

- Dans la zone de charge d'espace (ZCE) engendrée par la jonction p-n, les paires électron/trou créées sont dissociées par le champ électrique. Les électrons sont accélérés puis injectés dans la zone n (émetteur) et les trous dans la zone p (base). Un courant photo-courant de génération est créé ;
- Dans les zones de base et d'émetteur, les porteurs minoritaires générés (trous dans l'émetteur et électron dans la base) vont diffuser vers la ZCE. S'ils atteignent cette dernière avant de se recombiner, ils sont injectés dans la zone n pour les électrons et dans la zone p pour les trous et deviennent majoritaires. Un photo-courant de diffusion est créé.

Ces deux contributions s'ajoutant pour donner le photo-courant de porteurs minoritaires résultant

I_{ph} . Qui est proportionnel à l'intensité lumineuse.

Sous obscurité :

Le courant dans une telle structure de type jonction p-n est appelé courant d'obscurité et il a la forme suivante :

$$I_{obs} = I_0 \cdot (1 - e^{-\frac{qV}{nKT}}) \tag{I.3}$$

Avec:

q est la charge élémentaire ($q = 1.6 \cdot 10^{-19}$ C),

V est la tension aux bornes de la jonction,

K est la constante de Boltzmann ($k = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J.K⁻¹) et T est la température (K) n facteur d'idéalité de la diode.

Ce courant d'obscurité correspond au courant de diode (I_d), le courant délivré sur une charge par une cellule photovoltaïque éclairée s'écrit alors :

$$I(V) = I_{ph} - I_{obs}(V) \tag{I.4}$$

Soit:

$$I(V) = I_{ph} - IS \tag{I.5}$$

cellule solaire, deux courants s'opposent : le courant d'éclairement et le courant d'obscurité. La caractéristique d'une cellule sous obscurité est identique à celle d'une diode tandis que sous éclairement la caractéristique à l'allure présentée sur la Figure (I. 4).

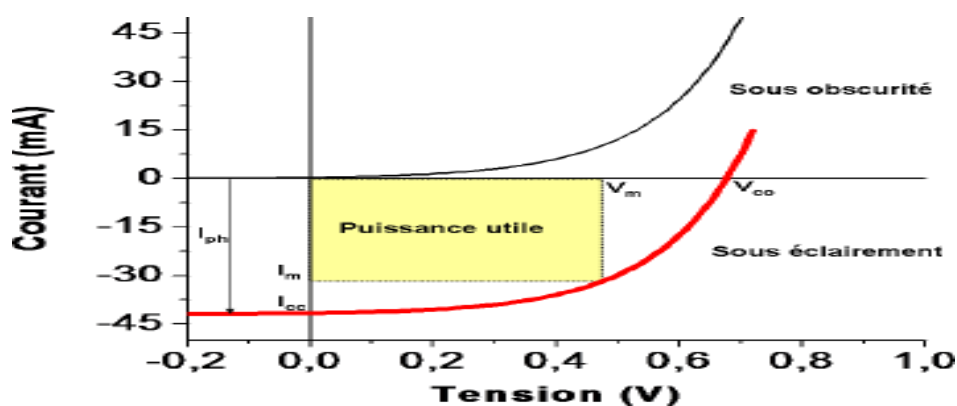


Figure I. 4 : Caractéristiques courant-tension de la cellule photovoltaïque sous éclairement et sous obscurité.

L'intersection de la caractéristique courant-tension du dipôle associé à la cellule solaire avec la droite de charge définit le point de fonctionnement de ce circuit. Les deux régimes extrêmes sont la tension de circuit (V_{OC}) ouvert mesurée aux bornes de la cellule sous éclairement et sans circuit de charge et le courant de court-circuit (I_{CC}) mesuré sous éclairement et en annulant la tension aux bornes de la cellule. Quand on se place au plus près du point de la caractéristique courant-tension pour lequel la puissance électrique (P_m) délivrée à la charge est maximum.

$$P_m = V_m I_m \quad (I. 6)$$

Avec I_m et V_m : courant et tension qui correspondent à la puissance maximale. Cette puissance s'accroît d'autant plus que le rapport de facteur de forme (FF) augment.

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{OC} I_{CC}} \quad (I. 7)$$

Une autre caractéristique électrique importante est le rendement de conversion (η) qui est le rapport entre la puissance électrique maximale fournie par la cellule solaire et la puissance incidente (P_i) qu'elle reçoit :

$$\eta\% = \frac{V_m I_m}{P_i S} 100 \quad (I. 8)$$

S : la surface totale de la cellule solaire

Le rendement de conversion dépend du spectre solaire. En fonction des caractéristiques d'absorption du matériau semi-conducteur, une partie plus

ou moins importante de ce spectre sera utilisable pour la conversion photovoltaïque. En effet, les photons dont l'énergie est inférieure à la largeur de la bande interdite ne sont pas absorbés par le semi-conducteur. L'énergie en excès des photons absorbés se transforme en énergie cinétique, puis se perd thermiquement par collision avec les atomes de réseau cristallin. D'autres facteurs tels que les pertes par réflexion sur la surface éclairée malgré la texturisation et le dépôt d'une couche antireflet constitue une source importante de perte, les caractéristiques électriques propre à la jonction comme le facteur de diode et la résistance série diminuent encore le rendement de conversion des cellules solaires.

Rendement Quantique (QE)

Le rendement de collecte correspond au rapport entre le nombre de porteurs de charge effectivement collectés et le nombre total photo-générés. Ce terme tient donc compte des

recombinaisons de porteurs survenant dans le volume et en surface de la cellule, et il dépend directement de la durée de vie des porteurs minoritaires (le temps moyen entre la génération et la recombinaison d'un porteur minoritaire).

$$QE(\lambda) = \frac{\text{nombre d'électrons collectés}}{\text{nombre de photons incidents}} = \frac{N_e}{N_v} = \frac{I(\lambda)/q}{\varphi(\lambda)} \quad (\text{I.9})$$

I. 7. Les différentes filières photovoltaïques :

I. 7. 1. La filière silicium cristallin :

C'est la filière dominante. L'élément du silicium est le plus abondant dans la croûte terrestre après l'oxygène, il a l'avantage de pouvoir être produit à partir d'une ressource naturelle quasi inépuisable, la silice, un composant de granit, des sables et des grès.

Il a été étudié pendant plus de 30 ans afin d'en améliorer le rendement, la première cellule solaire au silicium a été fabriquée en 1954 aux laboratoires Bell aux Etats-Unis avec un rendement de 6%. Cette filière à base de silicium cristallin comprend le monocristallin et le multicristallin (figure I-5).



Figure I. 5 : Cellules du silicium monocristallin et multicristallin

I.7.1. 1. Le silicium monocristallin :

Il est obtenu par croissance ou tirage d'un lingot cylindrique à partir d'un monocristal « souche » selon le procédé Czochralski (CZ). Les cellules à base de Si monocristallin ont un bon rendement mais la méthode de production est laborieuse et coûteuse [8].

I.7.1. 2. Le silicium multicristallin :

Il est obtenu par coulage en lingotière dans laquelle s'opère un refroidissement lent, de l'ordre de quelques dizaines d'heures. Sa mise au point est moins énergivore. C'est un matériau moins pur. Par comparaison entre les deux, on trouve que la cellule de silicium

monocristallin a un rendement de conversion des cellules légèrement supérieur à celui du multicristallin, mais le coût est élevé pour le premier par rapport au deuxième et le plus utilisé est le Si multicristallin [8].

I. 7. 2. La filière couches minces:

I. 7. 2. 1. La filière silicium microcristallin/silicium amorphe :

Le potentiel des cellules photovoltaïques en couches minces n'est aujourd'hui plus à démontrer. Un rendement maximal de conversion de 21,5% a en effet été obtenu par l'équipe de Zhao [9] sur une cellule de 47 μm d'épaisseur. Ce résultat est proche du rendement de conversion record de 24,7% obtenu avec la même technologie sur des plaques de silicium plus épaisses [10]. D'autres résultats sont venus par la suite confirmer la viabilité de cette voie technologique.

Dans un premier temps, la recherche s'est orientée vers la fabrication de cellules photovoltaïques basées sur du silicium microcristallin ($\mu\text{c-Si}$), avec une taille de grains inférieure à 1 μm , élaborées sur verre. Les rendements de conversion obtenus sont voisins de 10%. Puis les études se sont dirigées, dans un second temps, vers l'utilisation de silicium polycristallin (poly-Si) à large grain déposé sur des substrats résistants à haute température (graphite ou céramique). Les rendements de conversion sont alors de l'ordre de 15% (16,6% par exemple, pour le procédé Silicon Film développé par la société Astropower [11]). Ces substrats permettent, en effet, une plus haute température de dépôt donc une plus grande taille des grains.

Il faut noter, dans ce cas, que l'utilisation du silicium sous sa forme cristalline en couches minces a relevé un handicap majeur, à savoir son faible coefficient d'absorption optique dû à son gap indirect. Sous cette forme, il ne se prête pas à jouer un rôle concurrentiel. C'est sous sa forme amorphe, que le silicium est généralement utilisé en couches minces. Néanmoins, il faut noter que le silicium cristallin n'a jamais été délaissé. En effet, plusieurs travaux de recherche ont succédé pour surmonter ses handicaps. On cite par exemple, les travaux de Redfield, Spitzer et al. et Barnett [10] qui se sont basés sur le principe des pièges de la lumière à travers la structure pour compenser la faible absorption optique de ce dernier. Malheureusement, ces méthodes alourdissent la conception et la réalisation des cellules solaires à faible coût.

I. 7. 2. 2. Couches minces de tellure de cadmium (CdTe) :

Jusqu'à une date récente, la filière CdS/CdTe représentait l'approche la plus prometteuse des cellules solaires à couches minces. Le CdTe est un semi-conducteur à bande interdite directe $E_g = 1,45$ eV, qui est une valeur idéale pour la conversion photovoltaïque du spectre solaire puisqu'elle s'approche de l'optimum théorique $E_g = 1.4$ eV [12]. En raison de la méthode de fabrication relativement facile et un bon coefficient d'absorption dans le spectre solaire visible, le rendement de la cellule CdS / CdTe a été amélioré significativement au cours de la dernière décennie. En fait, le

rendement de conversion maximal est de 18.7% [13]. Comparé aux autres technologies couches minces, le CdTe est plus facile à déposer et donc, plus approprié à la production de module PV de surface importante. Toutefois, l'inconvénient majeur actuel repose sur la toxicité reconnue du Cadmium, qui empoisonne les tentatives de développement de cette filière, bien qu'il ait été démontré que les risques environnementaux liés aux cellules PV en CdTe sont minimes [14].

I.7. 2. 3. Couches minces de di-séléniure de cuivre-indium (CIS/CIGS) :

Malgré leur nature polycristalline, les cellules solaires en couches minces à base de Cu(In,Ga) Se₂ (CIGS) ont atteint étonnamment un rendement de conversion élevé qui s'approche de 20.8 % [15] au laboratoire pour un ensoleillement AM1.5 et de 25 % par simulation [16] . Ces résultats positionnent le CIGS comme le CdTe au-dessus des cellules de silicium en termes de compromis coût-rendement. Bien que la filière chalcogénure ternaire (CIS) et quaternaire (CuInGaSe₂) et ses nombreuses variantes n'a pas eu la croissance explosive du CdTe, elle reste encore la plus pertinente pour se lancer aujourd'hui dans les couches minces car elle combine le meilleur compromis de haut rendement, de bonne stabilité et de faible coût potentiel sans offenser l'environnement. Les principales améliorations sont venues de l'élargissement de la bande interdite du CuInSe₂ par l'utilisation d'alliages du type CuInSe₂ et du CuGaSe₂ (diséléniure de cuivre et de gallium), avec des gaps, respectivement,

1.02 eV et de 1,67 eV [17,18]. En plus cette filière possède certaines caractéristiques exceptionnelles telles que: le coefficient d'absorption qui a presque le même seuil que celui du c-Si mais il est 100 à 1000 fois plus fort dans la gamme 1,1 à 2,6 eV, ce qui permet une épaisseur d'absorbant de 1 à 2 μm , la longueur de diffusion des porteurs minoritaires particulièrement liées aux applications photovoltaïques, et surtout la tolérance aux défauts qui permet une production à très grande échelle.

En outre, il existe d'autres matériaux basés sur des alliages et qui sont extrêmement performants, mais aussi extrêmement chers (comme l'arséniure/indium de gallium InGaAs). Ils sont utilisés beaucoup plus pour les applications spatiales à l'aide de concentrateurs de lumière.

I.7. 3. La filière Organique :

Si l'effet photovoltaïque a été observé dans les matériaux organiques depuis plus de 30 ans, les premières cellules présentaient des rendements de conversion en énergie faible, de l'ordre de 10–5 %. Dès 1978, Merritt prévoyait que les valeurs de ne pourraient dépasser les 1 % [19], mais ce n'est qu'en 1986 que ce rendement a été atteint avec les travaux de Tang (0,95 %). Pendant les années qui suivirent, cette valeur a parfois été reproduite avec des matériaux différents mais elle n'a

jamais été améliorée. Ce n'est que depuis le début du XXI^e siècle que le rendement a recommencé à croître, atteignant 2,5 % avec les travaux publiés par Shaheen [20], 3,6 % avec ceux de Peumans [21] sous éclairement AM 1,5 avec une puissance lumineuse de 100 mW.cm^{-2} et enfin 4,2 % avec une double hétérostructure de C60 et de phthalocyanine de cuivre [22]. Aujourd'hui, le record au niveau industriel est détenu par la

firme Konarka avec un rendement qui dépasse les 5 % [23]. L'équipe de Heeger a même obtenu un rendement de 6,7 % avec des cellules de type « Tandem ». Cette valeur reste encore très faible si on la compare aux rendements obtenus par les autres technologies. En effet, les cellules organiques peuvent être mises en forme facilement, avec des techniques issues de l'industrie de la microélectronique, afin de fabriquer des cellules à différentes structures (Fig. (I.6)) telles que la structure monocouche (jonction Schottky) et la structure bicouches (hétérojonction PN). Les structures monocouches sont formées d'un polymère conjugué unique, déposé entre deux électrodes (métal ou ITO) (Fig. (I.6) (a)), tandis que la structure bicouche est composée de deux matériaux de natures différentes (donneur et accepteur d'électrons) mis en contact entre deux électrodes (Fig. (I.6) (b)).

De plus, les quantités des matériaux utilisés sont relativement faibles, les films ayant des épaisseurs de 100 nm. L'ingénierie moléculaire permet, en outre, d'adapter les valeurs de la bande interdite et des niveaux d'énergie.

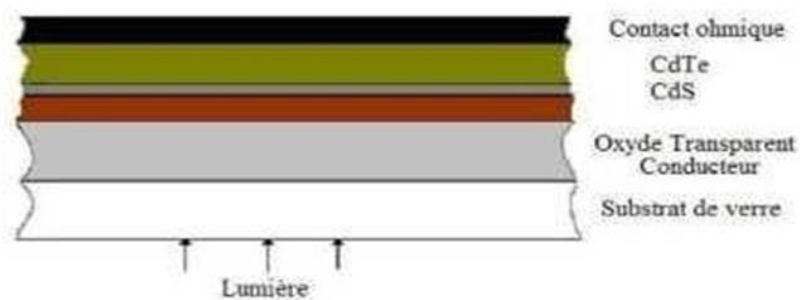


Figure I. 6 : Structure d'une cellule solaire à base de CdS/CdTe [17].

I.7. 4. La filière des pérovskites :

C'est un nouveau type des cellules photovoltaïques. Elle n'est pas encore sortie des laboratoires. La pérovskite est une structure cristalline calquée sur celle du titanate de calcium CaTiO_3 . Cette molécule est formée de 8 octaèdres dont le centre de chacun est occupé par un cation (le calcium) et les sommets par des anions (l'oxygène), le titane se trouvant au centre du cristal. Ses qualités photovoltaïques, la capacité d'absorption des photons 10 fois supérieure au silicium, la

bonne séparation des charges électriques et leur mobilité, sont en revanche le fruit d'une découverte très récente. Cette découverte revient à deux experts du domaine : Michael Graetzel, de l'École polytechnique de Lausanne, et Henry Snaith, de l'université d'Oxford L'université de Toin au Japon a inventé la première cellule photovoltaïque avec un rendement de 3,8 % en 2009 [24]. Et le record mondial de cette filière a été obtenu par l'École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) [25]. Mais le grand défi pour les cellules solaires pérovskite est la stabilité à long terme et la présence de plomb dans sa molécule.

Les cellules solaires en pérovskite sont une alternative diablement séduisante aux cellules en silicium qui dominent aujourd'hui le marché, mais dont les limites – performances, rigidité... – sont connues depuis plusieurs années. Par comparaison entre le silicium et les pérovskites, le premier a besoin de 30 ans pour atteindre le record 25,7%, mais les pérovskites ont besoin que 6 ans pour atteindre à 20% (figure I-7).

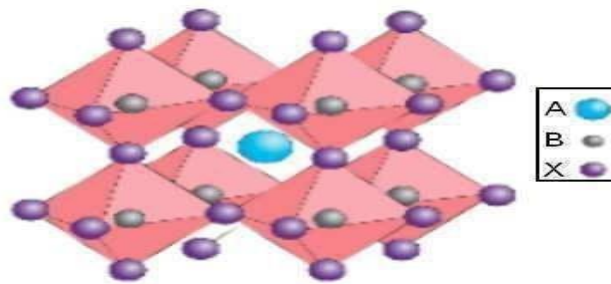


Figure I.7 : Structure d'un cristal de pérovskite générique ABX₃.

Conclusion :

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

Une industrie majeure est en cours de constitution comme le montre l'analyse de la situation et des évolutions. De façon intéressante et exemplaire, les possibilités d'innovation sont très grandes, portées par le bouillonnement des recherches en vue d'améliorer les filières existantes, d'en consolider de nouvelles et de préparer les prochaines ruptures, notamment en matière de matériaux et de rendements.

I.8. Références

- [1] Fraunhofer ISE (2023). Photovoltaics Report. Fraunhofer Institute for Solar Energy Systems.
- [2] Becquerel, A. E. (1839). Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires. *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences*.
- [3] International Energy Agency (IEA). (2020). Trends in Photovoltaic Applications
- [4] Nelson, J. (2003). The Physics of Solar Cells. Imperial College Press.
- [5] Honsberg C., Bowden. Photovoltaics: Devices, Systems and Applications [CDROM]. Sydney (Aus) : Univ. of New South Wales, 1998.
- [6] Fatima 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.
- [7] Oleksiy Nichiporuk / Thèse en physique / 2005 / INSA de Lyon.
- [8] J. Sakai, T. Taime, K. Saito. *Organic Electronics*, 9, 582-590 (2008).
- [9] J. Zhao, A. Wang, S.R. Wenham, Proc. 13th European PV Solar Energy Conference, Nice, France (1995), pp. 1566-1569.
- [10] I. Bouchama, "Contribution à l'amélioration des performances des cellules solaires $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ", Thèse de doctorat, Université de Sétif (2012).
- [11] A.M. Barnett, D.H. Ford and J.C. Chechich, Proc. 14th European PV Solar Energy Conference, Barcelona, Spain (1997), pp. ppp-1002.
- [12] W. N. Shafarman and L. Stolt, « $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ Solar Cells », In Antonio Luque and Steven Hegedus (editors), « Handbook of Photovoltaic Science and Engineering », chap. 13, John Wiley & Sons Inc., 2003, pp. 567–616.
- [13] CH. Huang, « Effects of Ga content on $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ solar cells studied by numerical modeling *J. Phys. Chem. Solids* », Vol. 69, 2008, pp. 330.
- [14] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley and S. A. Campbell, « Structure optimization for a high Efficiency CIGS solar cell », Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference, 2010, pp. 2488.
- [15] J. Song, S. Li. Sheng, C. H. Huang, O. D. Crisalle and T. J. Anderson, « Device modeling and simulation of the performance of $\text{Cu}(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x)\text{Se}_2$ solar cells », *Solid- State Electronics*, Vol. 48, 2004, pp. 73.
- [16] K. Decock, S. Khelifi and M. Burgelman. « Analytical versus numerical analysis of back grading in CIGS solar cells », *Solar Energy materials and solar cell*, vol. 95, 2011, pp. 1550.

-
- [17] A. Morales-Acevedo, « Variable band-gap semiconductor as the basis of new solar cells », *Solar Energy*, Vol. 83, 2009, pp. 66.
- [18] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley and S. A. Campbell.
« Structure optimization for a high Efficiency CIGS solar cell », *Conference Record of the IEEE Photovoltaic Specialists Conference*, 2010, pp.2488.
- [19] V.Y. Meritt, *IBM Journal of Research and Development* 22 (1978) 353.
- [20] S.E. Shaheen, C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, F. Padinger, T. Fromherz et J.C. Hummelen, *Applied Physics Letters* 78 (2001) 841.
- [21] P. Peumans et S.R. Forrest, *Applied Physics Letters* 79 (2001) 126.
- [22] J. Xue, S. Uchida, B.P. Rand et S.R. Forrest, *Applied Physics Letters* 84 (2004) 3013.
- [23] M.A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa et W. Warta, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 16 (2008) 61.
- [24] K. Akihiro, T. Kenjiro, Y. Shirai, T. Miyasaka. *Journal of the American Chemical Society*, 131 (17), 6050–6051 (2009).
- [25] <http://www.nrel.gov> in A. Green. 24% efficient perl silicon solar cell: Recent improvements in high efficiency silicon cell research. *Solar En.Mat.&Sol.Cells*, 1996, Vol. 41/42, pp. 87-99.

Chapitre II :
Propriétés fondamentales des
matériaux semi-conducteurs
(ZnSe, CdSe, SnO₂, Cs₂AgInBr₆, CuO)

II.1. Introduction:

L'énergie photovoltaïque est générée par la conversion directe d'une partie du rayonnement solaire en électricité. Ce processus repose sur des cellules photovoltaïques (PV), qui exploitent un phénomène physique appelé effet photovoltaïque. Ces cellules sont fabriquées à partir de matériaux semi-conducteurs, principalement du silicium. Ce matériau présente une conductivité électrique intermédiaire entre celle des isolants et des conducteurs, ce qui lui permet de faciliter le passage du courant, surtout lorsqu'il est dopé (enrichi en charges positives ou négatives).

Dans ce chapitre, nous étudierons les propriétés fondamentales des matériaux utilisés dans la fabrication des cellules PV, en abordant leurs caractéristiques électriques, optiques et structurales. Depuis quarante ans, d'importants efforts de recherche ont été consacrés au développement de cellules photovoltaïques à haut rendement et faible coût. Nous nous concentrerons plus particulièrement sur les matériaux suivants, sélectionnés pour nos travaux:

- Pérovskite (Cs₂AgInBr₆).
- dioxyde d'étain (SnO₂).
- Oxyde de cuivre (CuO).
- Séléniure de cadmium (CdSe).
- Séléniure de zinc (ZnSe).

II.2. Matériaux Pérovskite:

Récemment, les pérovskites doubles halogénées exemptes de plomb (HDPs) [1], de formule générale A₂BIBIIX₆, ont attiré l'attention en tant que candidats prometteurs pour les absorbeurs photovoltaïques (PV), offrant une alternative aux MAPbI₃ en raison de leur moindre toxicité et de leur meilleure stabilité. Au-delà de leurs applications photovoltaïques classiques, ces HDP se distinguent également comme matériaux fonctionnels polyvalents, notamment pour la détection des rayons X.

Dans cette optique, nous avons consulté le tableau périodique afin d'identifier les éléments les plus appropriés à l'élaboration de structures de pérovskites doubles à faible toxicité (LFDP) stables, comme illustré par Sun et al. [2] dans la figure II.1.

$A_2B(I)B(III)X_6$

■ A-site
 ■ B(I)-site
 ■ B(III)-site
 ■ X-site

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

Le composé Cs₂AgInBr₆ est une pérovskite double, également classée parmi les halogénures métalliques, qui se distingue par une structure cristalline particulière. Dans cette structure, les cations de césium (Cs), d'argent (Ag) et d'indium (In) sont agencés de manière ordonnée, formant un réseau cristallin stable. Ce matériau suscite un intérêt croissant en raison de ses propriétés électroniques et optiques remarquables, le positionnant comme un candidat prometteur pour diverses applications technologiques avancées telles que les cellules photovoltaïques, les dispositifs optoélectroniques et d'autres technologies émergentes.

Comparé aux pérovskites conventionnelles, Cs₂AgInBr₆ présente des avantages potentiels en termes de stabilité chimique accrue et d'amélioration des performances.

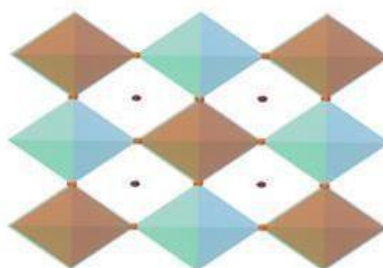


Figure II. 2 : Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs₂AgInBr₆.Cs(Verts) occupant les sites A-cristallographiques.

II. 2. 2. Propriétés des matériaux pérovskites (Cs₂AgInBr₆) :

II. 2. 2.1. Propriétés électroniques :

Le Cs₂AgInBr₆, également connu sous le nom de dibromure d'argent et d'indium de césium, est une pérovskite double qui suscite un intérêt croissant en raison de ses propriétés électroniques prometteuses, notamment pour les applications photovoltaïques et optoélectroniques. Parmi ses caractéristiques électroniques majeures, on peut citer :

1. Structure de bande :

Cs₂AgInBr₆ présente une structure de bande interdite directe ou quasi-directe, ce qui est particulièrement favorable pour les applications photovoltaïques, car cela facilite l'absorption efficace de la lumière et la génération de porteurs de charge.

2. Largeur de bande interdite :

La bande interdite de ce matériau est comprise entre 1,9 et 2,2 eV, ce qui la rend appropriée pour des applications dans les cellules solaires et autres dispositifs optoélectroniques nécessitant une absorption dans le visible.

3. Mobilité des porteurs de charge :

Bien que la mobilité des porteurs de charge (électrons et trous) soit inférieure à celle observée dans certains semi-conducteurs traditionnels, elle reste néanmoins suffisante pour assurer un transport efficace des charges dans les dispositifs photovoltaïques.

4. Densité des états électroniques :

La densité des états au niveau des bords de la bande de valence et de conduction est relativement faible, contribuant ainsi à limiter les phénomènes de recombinaison des porteurs de charge et à améliorer l'efficacité globale de la conversion énergétique.

5. Conductivité électrique :

La conductivité intrinsèque du Cs₂AgInBr₆ demeure modérée par rapport à d'autres semi-conducteurs, mais elle peut être optimisée grâce à des stratégies telles que le dopage ou l'ingénierie des défauts.

6. Stabilité :

Ce matériau se distingue également par une meilleure stabilité thermique et chimique en comparaison avec d'autres pérovskites halogénées, un atout essentiel pour garantir la durabilité et la fiabilité des dispositifs optoélectroniques.

Grâce à cet ensemble de propriétés, Cs₂AgInBr₆ apparaît comme un matériau prometteur pour diverses applications, notamment dans les cellules solaires, les photodétecteurs et d'autres dispositifs optoélectroniques avancés [4-5].

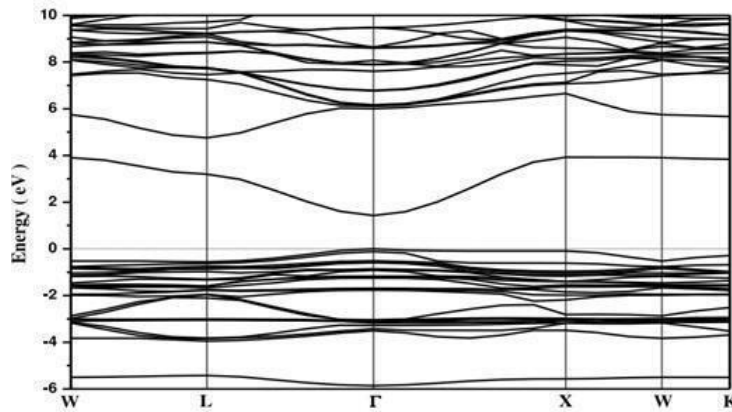


Figure II. 3 : Structure de bande électronique pour Cs₂AgInBr₆ [6].

La Figure II.4 illustre les densités partielles d'états (PDOS) du matériau pérovskite double Cs₂AgInBr₆, en correspondance avec les structures de bandes électroniques présentées dans la Figure II.3. Le niveau de Fermi est fixé à l'énergie zéro.

L'analyse du diagramme PDOS permet d'identifier les contributions orbitales à la bande de valence et à la bande de conduction, ainsi que de déterminer les orbitales dominantes dans chacune de ces bandes. On observe ainsi que la bande de valence est majoritairement constituée par les orbitales p du brome (Br), tandis que la bande de conduction est dominée par les orbitales p de l'indium (In), avec une contribution plus modeste des orbitales s de l'argent (Ag).

Par ailleurs, la présence notable des états 4d de l'argent dans la bande de valence participe à la réduction de la largeur de la bande interdite et contribue, en partie, au caractère indirect de la bande interdite observée dans ces phases.

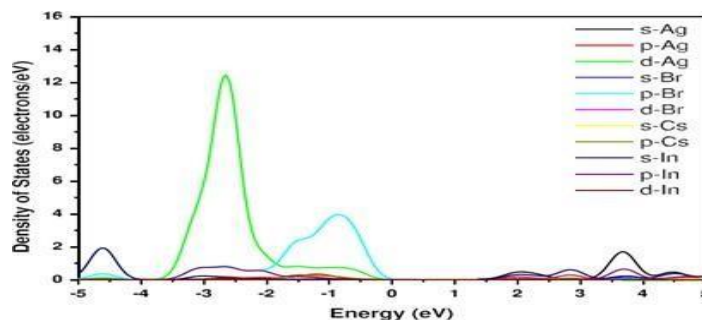


Figure II. 4 : Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs₂AgInBr₆ [6].

II. 2. 2.2. Coefficient d'absorption :

Le Cs₂AgInBr₆ est un composé couramment désigné comme **halogénure d'alliage à base d'argent**, largement exploré dans le domaine des matériaux semi-conducteurs et des dispositifs optoélectroniques. En particulier, ses propriétés d'absorption sont étroitement liées à la manière dont ce matériau interagit avec la lumière dans différentes gammes de longueurs d'onde.

Ces propriétés optiques découlent directement de sa structure électronique et de ses interactions avec le rayonnement électromagnétique. Plusieurs études ont mis en évidence le potentiel de Cs₂AgInBr₆ dans des applications telles que les cellules photovoltaïques, les photodétecteurs et d'autres dispositifs optoélectroniques.

L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons incidents est représentée dans la **Figure II.5**. On observe qu'aux énergies inférieures au seuil d'absorption fondamental, le coefficient d'absorption reste quasi nul, avant d'augmenter de manière significative. Cette augmentation traduit la croissance du nombre d'électrons disposant de l'énergie suffisante pour interagir avec les photons incidents.

De manière générale, l'amplitude du coefficient d'absorption optique est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. Concernant le Cs₂AgInBr₆, le matériau démontre une absorption efficace dans la région du spectre visible. Comme illustré par la **Figure II.5**, il présente une absorption optique particulièrement élevée dans la partie haute du spectre solaire, avec un coefficient d'absorption atteignant des valeurs de l'ordre de 10^4 cm^{-1} , ce qui le rend favorable pour des applications photovoltaïques et optoélectroniques performantes.

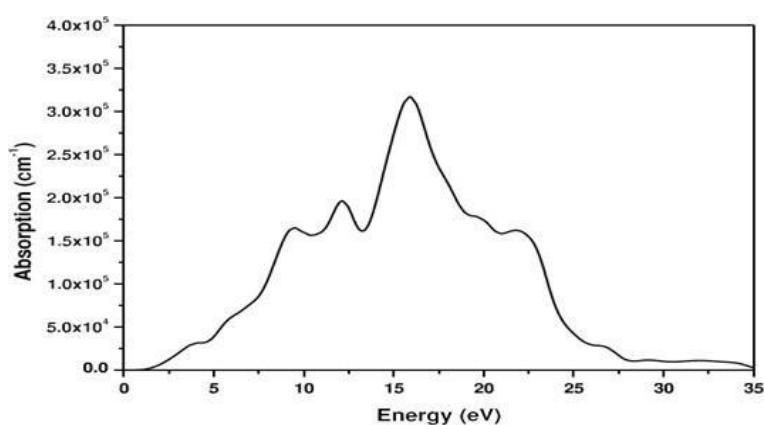


Figure II. 5 : Spectre du coefficient d'absorption de la pérovskite cubique double Cs₂AgInBr₆ [6].

II. 3. Propriétés de dioxyde d'étain (SnO₂) :

II. 3. 1. Propriétés électriques dioxyde d'étain (SnO₂) :

Parmi les oxydes métalliques les plus usuels, l'oxyde d'étain est le plus représentatif des semi-conducteurs à large bande interdite $E_g = (3,6- 4,0 \text{ eV})$. Les configurations électroniques de bande de l'oxygène et d'étain sachant que les numéros atomiques de Sn et O seront respectivement 50 et 8 sont [7] :

Sn⁴⁺: 1s² 2s² 2p⁶ 3s² 3p⁶ 4s⁴ 3d¹⁰ 4p⁶ 4d¹⁰

(5s⁰5p⁰...) O²⁻ : 1s² 2s² 2p⁶ (3s⁰...)

Sous sa forme stoechiométrique, SnO₂ est un isolant, mais dans sa forme déficiente en oxygène, le dioxyde d'étain se comporte comme un semi-conducteur de type n avec un gap de 3,6 eV. Bien que la conductivité semble être due à la formation de défauts intrinsèques, le mécanisme exact n'est pas totalement bien compris. La déficience en oxygène est peut être due à la présence de lacunes d'oxygène ou bien à l'existence d'atomes d'étain interstitiels, associée à la réduction de quelques ions Sn(IV) en ions Sn(II) afin de compenser le déséquilibre de charge. La conductivité électronique pourrait alors se produire en raison de la mobilité des électrons à partir des sites de Sn(II) vers les sites de Sn(IV). Les données expérimentales suggèrent que la cause de la non-stoechiométrie dans SnO₂ est plutôt due aux lacunes d'oxygène qu'aux atomes d'étain interstitiels.

Dans la gamme de température 200-1350 °C, Mizusaki et al. ont mis en évidence l'existence d'un déficit d'oxygène par rapport à la composition stoechiométrique. La densité de lacunes dépend fortement de la température et de la pression partielle d'oxygène. Elle varie en général entre 10⁻³ et 10⁻² % at. La concentration d'électrons dans SnO₂ pur est directement proportionnelle à celle des lacunes. De plus, si l'on considère les lacunes d'oxygène doublement ionisées comme défaut majoritaire, la conductance électrique est proportionnelle à la pression partielle d'oxygène[8].

II. 3. 2. Propriétés optiques l'dioxyde d'étain (SnO₂) :

Les propriétés optiques du SnO₂ dépendent de l'interaction des ondes électromagnétiques avec les électrons du semi-conducteur. Une onde électromagnétique interagissant avec ce matériau sera complètement absorbée par celui-ci si l'énergie associée $E=h\nu=hc/\lambda$ est capable de transférer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction c'est à dire d'être au moins égale à la largeur de la bande interdite (gap). Ainsi, si l'on veut que le matériau soit transparent dans toute

l'étendue du visible, il est nécessaire que le gap soit au moins aussi large que la plus grande des énergies associées aux fréquences du spectre visible (400 nm à 800nm). Une bonne transparence dans tout le spectre du visible sera donc assurée par une valeur de la bande interdite au moins égale à 3.1eV. Donc sous la forme de couche mince, le SnO₂ est un bon matériau transparent dans le domaine optique du visible [9].

II.4. Propriétés Séléniure de zinc (ZnSe) :

Le séléniure de zinc (ZnSe) est un composé chimique formé de zinc (Zn) et de sélénium (Se). C'est un semi-conducteur de type II-VI, couramment utilisé dans les applications optiques et infrarouges en raison de sa transparence dans une large gamme de longueurs d'onde, allant du visible à l'infrarouge lointain. Il se présente généralement sous forme d'un cristal jaune à orange pâle, souvent utilisé dans les lentilles et fenêtres pour les lasers infrarouges [10]

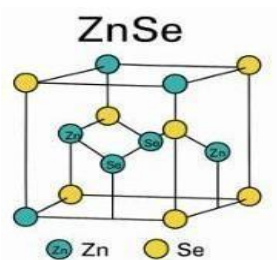


Figure II.6; Structure cristalline du ZnSe (Séléniure de Zinc).

II. 4. 1 Propriétés électriques du ZnSe :

- Semi-conducteur de type II-VI
- Porteurs de charge : électrons (type n) ou trous (type p) selon dopage
- Largeur de bande interdite (band gap) : environ 2,7 eV à température ambiante
- Conductivité faible à l'état pur, améliorée par dopage
- Applications : cellules photovoltaïques, lasers bleus/UV, détecteurs infrarouges[11].

II.4 .2. Propriétés optiques du ZnSe :

- Transparence spectrale : de 0,5 à 21 μm (visible à infrarouge lointain)
- Indice de réfraction : $\sim 2,4$ à 10,6 μm
- Absorption optique : très faible dans la gamme infrarouge
- Résistance élevée au laser, idéal pour lasers CO₂
- Applications : lentilles, fenêtres laser, prismes, imagerie thermique [12]

II.5 Propriétés Séléniure de cadmium (CdSe) :

Le séléniure de cadmium (CdSe) est un composé du sélénium et du cadmium. Le cadmium est un métal lourd toxique et des précautions appropriées doivent être prises lors de sa manipulation et celle de ses composés. Les séléniures sont toxiques en grande quantité.

Le séléniure de cadmium est une substance cancérigène connue pour les humains et l'attention médicale doit être recherchée en cas d'ingestion ou si le contact avec la peau ou les yeux se produit.

Le CdSe est transparent aux radiations infrarouges et est parfois utilisé dans la photorésistance et dans les fenêtres pour les instruments utilisant la lumière infrarouge. Le matériau est également hautement luminescent. Ce semi-conducteur est un redresseur de courant. Il sert dans les cellules photoélectriques, mais aussi sur les écrans TV, les écrans fluorescents et les posemètres [13].



Figure II.7; Le séléniure de cadmium (CdSe)

II. 5. 1. Propriétés optiques de CdSe :

1. Bande interdite directe :

- CdSe a une bande interdite directe (direct band gap), ce qui le rend très efficace pour l'absorption et l'émission de lumière.
- Valeur de la bande interdite :
 - 1,74 eV pour le CdSe en vrac (bulk) à température ambiante.

- Elle peut varier en fonction de la taille des particules (effet de confinement quantique), atteignant jusqu'à 2,4 eV pour des quantum dots de très petite taille.
2. Effet de confinement quantique :
 - Dans les nanocristaux de CdSe (quantum dots), la taille influence directement les propriétés optiques :
 - Plus la particule est petite, plus la bande interdite est grande.
 - Cela permet de moduler la couleur d'émission (du rouge au bleu) selon la taille des nanoparticules.
 3. Fluorescence et photoluminescence :
 - Forte émission de photoluminescence dans le visible.
 - Utilisé dans des LEDs, biomarqueurs fluorescents, et dispositifs optoélectroniques[14].

II. 5. 2. Propriétés électroniques de CdSe :

4. Type de semi-conducteur :
 - Généralement n-type, mais peut être p-type selon les dopants et conditions de croissance.
5. Mobilité des porteurs de charge :
 - Mobilité modérée des électrons et des trous :
 - Électrons : $\approx 450 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
 - Trous : $\approx 40 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$
6. Applications électroniques :
 - Photodétecteurs : sensible à la lumière visible.
 - Cellules solaires : utilisé dans certaines cellules photovoltaïques hybrides ou à jonctions multiples.
 - Transistors à effet de champ (FET) à base de nanofils de CdSe.
7. Structure cristalline :
 - Deux phases principales :
 - Wurtzite (hexagonale) — la plus stable à température ambiante.
 - Blende de zinc (cubique) — peut exister selon les conditions de synthèses[15]

II.6. Propriétés Oxyde de cuivre (CuO) :

III. 6. 1. Propriétés électriques du CuO :

L'étude fondamentale des propriétés électriques d'oxyde de cuivre CuO est essentielle pour ses futures applications électroniques et optoélectroniques. En effet, l'oxyde de cuivre est un semi conducteur de type p avec un band-gap E_g compris entre 1,2 et 2,01 eV [16]. Cette énergie appelée également gap correspond à celle qui fait passer un électron de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC). Pour les semi-conducteurs de type p, les porteurs de charges basées sur une

concentration considérable des trous libres existant dans leurs bandes 18 de valence (BV) sont largement acceptés. La concentration des trous libres dans ces matériaux est principalement déterminée par la concentration de déficit en métal (ou excès d'oxygène) dans les sites cristallites des matériaux [17]. Ce phénomène est attribué à la déviation par rapport à la stœchiométrie (ou défauts dans la structure), qui peut être dû aux lacunes d'anions ou à un excès de cations en position interstitielle, ou bien être induit en régulant les conditions de préparation du matériau [18]. La nature exacte des défauts de structure dans la plupart des cas reste encore incertaine. Les mobilités des trous dans des couches minces de CuO rapportées sont typiquement de l'ordre de 20 à 30 cm²/V·s [19]. Étant donné que les cristaux d'oxyde ne peuvent généralement pas accommoder de gros ions oxyde, la non-stœchiométrie du CuO de type p est supposée être due à des lacunes de cations [20]. Ce composé présente une faible quantité d'impuretés ainsi qu'une bonne stabilité thermique dans une atmosphère à faible pression partielle d'oxygène [21]. La concentration de trous, et donc la concentration en porteurs électriques ainsi que la conductivité du CuO, peut être contrôlée par la pression partielle d'oxygène au cours de la croissance. Elle est également très sensible à la présence de molécules absorbées, ce qui confère au CuO un grand potentiel pour des applications de détection chimique et environnementale [22].

II. 6. 2. Propriétés optiques du CuO :

L'interaction de la lumière (onde électromagnétique) avec la matière (électrons du matériau) peut expliquer clairement les propriétés optiques d'un matériau. Lors de l'application de la théorie de dispersion sur un matériau, il convient de séparer l'absorption fondamentale de l'absorption des porteurs libres. Si seule la première contribution est présente, le matériau a la qualité d'un diélectrique. Le cas échéant, le matériau est un métal. Pour les semi-conducteurs, les deux contributions sont importantes. La première correspond au seuil d'absorption inter bandes et sépare la zone d'absorption dans l'ultraviolet de la zone à forte transparence dans le visible. La seconde repère le front de la montée de la réflectivité dans l'infrarouge correspondant aux oscillations de plasma des électrons de conduction. En effet, une onde électromagnétique interagissant avec le semi-conducteur sera complètement absorbée par celui-ci si l'énergie associée à l'onde électromagnétique est capable de transférer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction, c'est-à-dire, si cette énergie est au moins égale à celle de la largeur de la bande interdite. Plusieurs études notamment théoriques et expérimentales ont rapporté que l'étude des propriétés optiques d'oxyde de cuivre dans la région du visible fournissait des informations sur la absorption de ce matériau[23] .

En effet, la **figure II.8** illustre le spectre d'absorbance de l'oxyde de Cuivre.

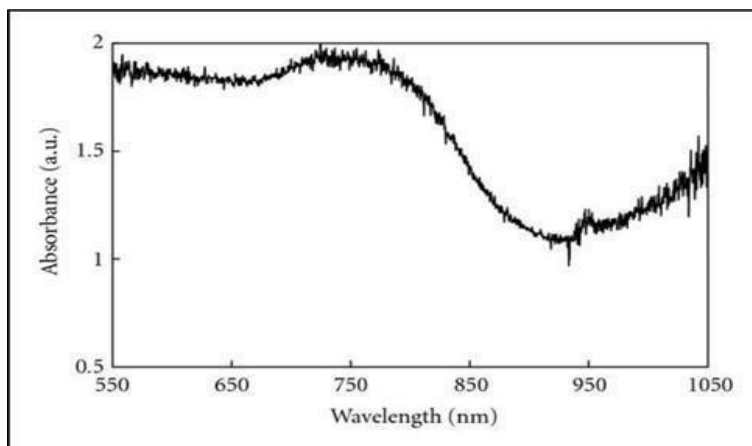


Figure II.8 : Spectre d'absorption UV-Visible d'un réseau de nanofils de CuO .

Conclusion :

Les composés **CdSe**, **ZnSe**, **SnO₂**, **CuO** et **Cs₂AgInBr₆** sont des matériaux semi-conducteurs ou à large bande interdite, utilisés dans des domaines variés en optoélectronique, photovoltaïque et détection de gaz. Leurs **propriétés fondamentales** (structure cristalline, bande interdite, mobilité des porteurs, absorption optique, etc.) les rendent adaptés à des usages spécifiques :

CdSe (Séléniure de cadmium) :

Semi-conducteur II-VI à bande interdite directe (~1,7 eV), il est très utilisé en optoélectronique, en particulier pour les boîtes quantiques et les diodes électroluminescentes (LEDs). Il offre une forte absorption dans le visible et une bonne efficacité de luminescence.

ZnSe (Séléniure de zinc) :

Aussi un semi-conducteur II-VI, avec une bande interdite plus large (~2,7 eV), il est transparent dans une large gamme du visible à l'infrarouge. Il est couramment utilisé pour les fenêtres optiques infrarouges, les lasers bleus, et comme couche tampon dans les cellules solaires.

SnO₂ (Dioxyde d'étain) :

Un oxyde conducteur de type n, avec une grande bande interdite (~3,6 eV). C'est un transparent conducting oxide (TCO), utilisé dans les électrodes transparentes, les capteurs de gaz et les cellules solaires à couches minces. Il combine transparence optique et bonne conductivité.

CuO (Oxyde de cuivre(II)) :

Semi-conducteur de type p, avec une bande interdite indirecte (~1,2-1,7 eV). Il est étudié pour les photocatalyseurs, les cellules photovoltaïques et la détection de gaz, bien que sa faible mobilité

électronique soit un défi.

Cs₂AgInBr₆ (pérovskite double) :

Pérovskite sans plomb, à bande interdite large (~2 eV), prometteuse pour des applications optoélectroniques non toxiques. Elle combine stabilité thermique et potentiel pour les cellules solaires ou photodétecteurs, bien que les performances optoélectroniques soient encore en développement comparées aux pérovskites au plomb.

II. 7. Références :

- [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] Slavney, A. H., Hu, T., Lindenberg, A. M., & Karunadasa, H. I. (2016). A Bismuth-Halide Double Perovskite with Long Carrier Recombination Lifetime for Photovoltaic Applications. *Journal of the American Chemical Society*, 138(7), 2138-2141. DOI: 10.1021/jacs.5b13294.
- [5] Filip, M. R., & Giustino, F. (2018). Computational Screening of Homovalent Lead Substitution in Organic-Inorganic Halide Perovskites. *Journal of Physical Chemistry C*, 122(7), 3706-3719. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b12348.
- [6] Adel, M. (2023). Electronic properties and stability of Cs₂AgInBr₆ for photovoltaic applications. *Journal of Renewable Energy Materials*, 12(4), 345-360. DOI: 10.1016/j.jrenmat.2023.04.001.
- [7] F. Ng-Cheng-Chin, M. Roslin, Z.H. Gu. T.Z. Fahidy, *J. Phys. D: Appl. Phys* L71.
- [8] K. Tominaga, T. Murayama, I. Mori, T. Ushiro, *Films*, 386 (2001) 267. 3518. s., 31 (1998) T. Moriga, I. Nakabayashi, *Thin Solid*
- [9]. Minami, T. (2005). Transparent conducting oxide semiconductors for transparent electrodes. *Semiconductor Science and Technology*, 20(4), S35–S44.
- [10] Smith, D. Y., & Shiles, E. (1985). Optical properties of semiconductors. In: E. D. Palik (Ed.), *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press.
- [11] Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). *Physics of Semiconductor Devices* (3rd ed.). Wiley- Interscience.
- [12] Malitson, I. H. (1965). Refractive Index of Zinc Selenide. *Journal of the Optical Society of America*, 55(10),.
- [13] IARC (International Agency for Research on Cancer)..
- [14] Alivisatos, A. P. (1996). *Semiconductor Clusters, Nanocrystals, and Quantum Dots*.
- [15] Yu, P. Y., & Cardona, M. (2003). *Fundamentals of Semiconductors: Physics and Materials Properties* (3rd ed.). Springer.
- [16] A. Ates, M. A. Yildirim, M. Kundakçi, and M. Yildirim, *Chinese Journal of Physics*. vol. 45,

.NO. 2-I, April 2007

[17] A.E. Rakhshani, A.S. Al-Azab, J. Phys. Condens. Matter. 12 (2000) 8745.

[18] Joel Pantoja Enríquez, Xavier Mathew, Solar Energy Materials & Solar Cells. 76 (2003) 313-322.

[19] M. Pattabi, J. Uchil, Solar Energy Mater. Solar Cells 63 (2000) 309.

Fox, M. (2010).

[19] S. Gnanam & K. C. Patil, *Materials Letters*, 1990.

[20] • R. D. Shannon, *Acta Crystallographica*, 1976.

[21] • H. Ullmann et al., *Journal of Solid State Chemistry*, 1999.

[22] • Z. L. Wang, *Nanostructures of CuO for gas sensing applications, Sensors and Actuators B*, 2004.

[23] Fox, M. (2010). *Optical Properties of Solids* (2nd ed.). Oxford University Press.

Chapitre III :

Logiciel de simulation AMPS-1D

III.1. Introduction :

Dans le cadre de la recherche de viabilité économique des systèmes photovoltaïques pour des applications terrestres à grande échelle, le développement de cellules solaires combinant trois critères essentiels s'avère impératif : haute efficacité, faible coût de production et utilisation de matériaux facilement disponibles. L'objectif principal de la recherche consiste à maximiser l'efficacité de conversion énergétique de ces cellules jusqu'à leurs limites théoriques. Pour atteindre cet objectif, l'analyse des facteurs limitant la performance des cellules photovoltaïques revêt une importance cruciale, nécessitant :

- Une compréhension approfondie des mécanismes de perte d'énergie
- Une optimisation précise des processus de transport des charges

La modélisation informatique représente un outil central dans ce domaine, où un modèle électro-optique avancé peut fournir :

- Une analyse spatiale des propriétés de transport des charges
- Une évaluation précise des performances des matériaux absorbants
- Une identification exacte des zones de pertes dans le dispositif

Dans ce contexte, un modèle de simulation unidimensionnel a été développé, offrant une solution pratique à ces défis en permettant aux chercheurs de :

- Simuler le comportement des cellules sous différentes conditions de fonctionnement
- Optimiser systématiquement leur conception
- Réduire l'écart entre les performances théoriques et pratiques [1].

II. 2. Présentation du simulateur AMPS-1D :

II. 2. 1. Définition :

L'AMPS-1D (analysis of Microelectronic and Photonic Structures in one Dimension) est un logiciel de simulation pour l'analyse et la conception des phénomènes de transport en microélectronique et dans les structures photoniques. Il diffère des autres logiciels d'analyse de transport tel que SPICE et SCAPS, à savoir, sa capacité de mener tout type de défaut, l'énergie du gap et la distribution spéciale, son incorporation de la recombinaison S-R-H et bande à bande, son incorporation des statique de Boltzmann et de Fermi-Dirac, sa capacité de définir les propriétés variables des matériaux, son traitement globale des contacts et sa capacité de manier le transport dans les dispositifs sous polarisation, sous éclairage ou les deux à la fois.

II. 2. 2. Le but d'utiliser l'AMPS-1D :

Ce logiciel est un programme informatique unidimensionnel pour simuler la physique de transport dans les dispositifs à semi-conducteur. Il résout numériquement les trois équations du dispositif (l'équation de poisson, équation de continuité pour les trous libres et celle pour les électrons libres) sans faire à priori des suppositions à propos des mécanismes de transport dans ces dispositifs. Il est élaboré pour analyser, concevoir et optimiser des structures projetées pour les applications microélectronique, photovoltaïque optoélectronique. Une comparaison de l'AMPS avec les autres programmes connus montre que l'AMPS est le seul programme disponible qui incorpore toute la physique suivante [2]:

1. Un traitement de contact qui permet à l'émission thermoïonique et à la recombinaison d'avoir lieu aux contacts de dispositif.
2. Un modèle très généralisé d'état de la bande interdite qui peut s'adapter à n'importe quelle densité de distribution des états dans la couche ou à l'interface.
3. Les deux recombinaisons: bande-à-bande et Shockley-Read-Hall.
4. La statistique complète de Fermi-Dirac et pas seulement celle de Boltzmann.
5. Un modèle de la charge piégée qui explique la charge dans n'importe quelle distribution d'état du gap.
6. La mobilité des porteurs qui peut varier avec la position.
7. Les affinités des électrons et des trous qui peuvent varier avec la position.
8. La capacité de calculer des caractéristiques du dispositif en fonction de la température sous polarisation directe et inverse, aussi bien qu'avec ou sans illumination.
9. La capacité d'analyser des structures du dispositif fabriqué en utilisant les matériaux monocristal, les polycristallins et ou amorphes ou tous les trois à la fois.

III. 2. 3. L'équation de Poisson :

L'équation de Poisson Lie la population des porteurs libres, la population des charges piégées, et les populations dopé ionisées au champ électrostatique présent dans un système matériel. Dans l'espace unidimensionnel, l'équation de Poisson est donnée par [2]:

$$\frac{d}{dx} \left(-\epsilon(x) \frac{d\psi'}{dx} \right) = q \cdot \left[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + pt(x) - nt(x) \right] \quad (\text{III-1})$$

Où désigne le potentiel électrostatique, n est la concentration des électrons libres, p la concentration des trous libres, le N_D la concentration des électrons piégés, pt la concentration des trous piégés, la concentration ionisée de donneur et la concentration ionisée d'accepteur. Ces concentrations sont toutes des fonctions de la coordonnée de position x , ϵ est la permittivité et q est la charge d'un électron.

Puisque les diagrammes de bande montrent les énergies permises aux électrons et puisque le potentiel électrostatique est défini pour une particule positive d'unité, l'utilisation de dans l'équation ci-dessus peut être incommode. Le niveau de vide qui est l'énergie de dessus ou d'évasion de la bande de conduction, varie seulement en raison de la présence d'un champ électrostatique [2]. Son dérivé est donc proportionnel au fait de champ électrostatique, donc on a:

$$\xi = \frac{d\psi}{dx} \quad (\text{III-1})$$

AMPS choisit toujours une référence pour que ξ et non ψ soit la position du niveau de vide dans le contact au côté droit de n'importe quelle structure générale de dispositif. Avec cet exemple particulier dans la figure III-1 d'une barrière de Schottky, c'est vu pour être une quantité négative dans une grande partie de n^+ en arrière-prennent contact avec la couche et une quantité positive essentiellement par le reste du dispositif. Cette manière est utilisée pour localiser le niveau local de vide et de se rappeler que son dérivé spatial est le champ électrostatique, donc nous réécrivons l'équation de Poisson En termes de niveau local de vide mesuré en E_v . Ceci donne :

$$\frac{d}{dx} \left(-\varepsilon(x) \frac{d\psi}{dx} \right) = q \cdot \left[p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x) + pt(x) - nt(x) \right] \quad (\text{III-2})$$

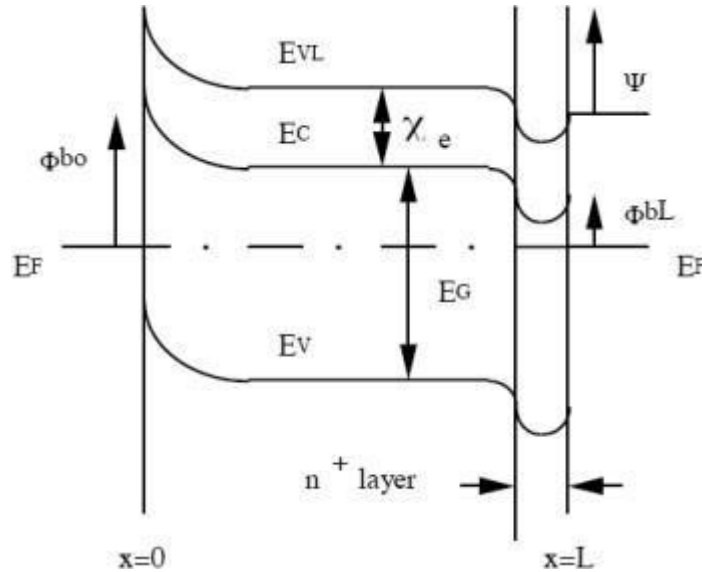


Figure III-1 : Bande de diagramme énergétique de la barrière de schottky a l'équilibre thermodynamique.

L'équation (III-2) est la forme de l'équation de Poisson que l'AMPS utilise. Après avoir arrangé sur une formulation de l'équation de Poisson qui sera commode, nous nous rendons compte maintenant que AMPS a besoin des expressions pour les six nouvelles variables dépendantes n , p , nt , pt , n_t , et p_t , et présenté dans l'équation (III-2).

IV.2.4. Les équations de continuité:

La section précédente a fourni des expressions pour toutes les quantités contribuant à la charge en équation de Poisson. Une inspection minutieuse de ces expressions prouve qu'elles sont toutes finalement définies en termes de populations libres n et p de porteur. Nous avons besoin maintenant de plus d'informations sur n et p pour déterminer comment ils changent à travers un dispositif et sous différentes polarisations. Les équations qui maintiennent les électrons de bande de conduction et les trous de bande de valence sont les équations de continuité. A l'équilibre le taux de temps de changement des concentrations en porteur libres est égal à zéro. En conséquence, l'équation de continuité pour les électrons libres dans les états délocalisés de la bande de conduction a la forme

$$\frac{1}{q} \left(\frac{dj_n}{dx} \right) = -G_{op}(x) + R(x) \quad (\text{III-3})$$

Et l'équation de continuité pour les trous libres dans les états délocalisés de la bande de valence a la forme:

$$-\frac{1}{q} \left(\frac{dj_p}{dx} \right) = G_{op}(x) - R(x) \quad (\text{III-4})$$

Ou j_n et j_p désignent respectivement les densités de courant des électrons et des trous. La limite $R(x)$ désigne le taux de recombinaison résultant de bande à bande et la recombinaison S-R-H (indirect). Les équations de continuité incluent aussi la limite $G_0(x)$ qui est le taux optique de génération en fonction de x dû à l'illumination extérieurement imposée [2].

III. 2. 4.1. Densité de courant d'électron et de trou :

De nouveau, nous devons développer des expressions pour les limites dans une équation principale. Avant elle était l'équation de Poisson, maintenant c'est les deux équations de continuité. Revenons à j_n et j_p , la théorie admet que, même dans les cas où la population d'électron peut être dégénérée où les propriétés matérielles peuvent varier avec la position, la densité de courant d'électron peut toujours être exprimée comme

$$j_n(x) = q\mu_n n \left(\frac{dEf_n}{dx} \right) \quad (\text{III-5})$$

De même, dans les cas où les populations de trou peuvent être dégénérées ou les propriétés matérielles peuvent varier avec la position, la densité de courant de trou peut être toujours simplement exprimée par [2]:

$$j_p(x) = q\mu_p p \left(\frac{dEf_p}{dx} \right) \quad (\text{III-6})$$

Il est important de noter que les équations (III-5) et (III-6) sont des formulations très générales qui incluent la diffusion, dérive, et font signe en raison des champs efficaces résultant de l'espace de bande, de l'affinité d'électron, et des gradients de densité d'état. Par conséquent, comme nous l'avons remarqué, l'AMPS est formulé pour traiter des structures avec la variation des propriétés matérielles

comprenant les structures des hétérojonctions [3].

III. 2. 4. 2. Les mécanismes de recombinaison :

Il y a deux processus de base par lesquels les électrons et les trous peuvent recombinaison les uns avec les autres. Dans le premier processus, les électrons dans la bande de conduction font des transitions directes aux états vides dans la bande de valence. Ce processus est marqué comme bande-à-bande ou recombinaison directe RD (également connue sous le nom de recombinaison intrinsèque). Dans le deuxième processus, les électrons et les trous recombinaison par les états intermédiaires d'espace connus sous le nom de centres de recombinaison. Ce processus, à l'origine étudié par Shockley et Hall, est marqué la recombinaison indirecte RI où la recombinaison de S-R-H (également connue sous le nom de recombinaison extrinsèque) [4]. Le modèle utilisé en AMPS pour la limite nette R de recombinaison en fonction de x , dans les équations de continuité prend en compte tous les deux processus tels que :

$$R(x) = R_D(x) + R_I(x) \quad (\text{III-7})$$

III. 2. 5. Aperçu sur le fonctionnement de l'AMPS :

En donnant un bref aperçu sur les méthodes de modélisation des dispositifs microélectroniques et optoélectroniques, nous notons d'abord que la physique de transport de dispositif peut être gouverné par trois équations : l'équation de Poisson, l'équation de continuité pour les trous libres, et l'équation de continuité pour les électrons libres. La détermination des caractéristiques de transport deviennent alors une tâche qui consiste à résoudre ces trois équations différentielles non linéaires, chacune a deux conditions aux limites associées. Dans l'AMPS, ces trois équations associées, avec les conditions aux limites, sont résolues simultanément pour obtenir un ensemble de trois variables d'état inconnues à chaque point du dispositif: le potentiel électrostatique, le quasi- niveau de Fermi de trou, et le quasi- niveau de Fermi d'électron. Pour ces trois variables d'état, les concentrations des porteurs, les champs, les courants, etc. peuvent être alors calculés. Pour déterminer ces variables d'état, la méthode aux différences finies et la technique de Newton-Raphson sont incorporées par l'ordinateur. La méthode de Newton-Raphson trouve la racine d'une fonction d'une manière itérative ou les racines d'un ensemble de fonctions si une estimation initiale et adéquate pour ces racines est donnée. Dans l'AMPS, le dispositif unidimensionnel étant analysé est divisée en segments par une maille des points d'une grille, dont l'utilisateur décide du nombre. Les trois

ensembles d'inconnus sont alors résolus pour chaque point particulier de la grille. Nous notons que dans l'AMPS la maille permet d'avoir un espacement variable de la grille à la discrétion de l'utilisateur. Comme noté, une fois que ces trois variables d'état sont obtenues comme une fonction de x , le bord de la bande, le champ électrique, la charge des défauts, les populations des porteurs, les densités de courant, les profils de recombinaison, et toute autre information de transport peuvent être obtenus.

III. 2. 6. Liste des paramètres à introduire :

La figure IV-2, est une liste de paramètres d'entrée que L'AMPS a besoin pour résoudre l'ensemble des équations de transport et de conditions aux limites. En général, cette liste s'appliquera à toutes les versions du programme en cours à quelque exception mineurs. Les différences dans la liste des paramètres entre chaque version de programme seront mentionnées comme elles sont discutées.

Les paramètres peuvent se trouver dans l'une des trois 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)

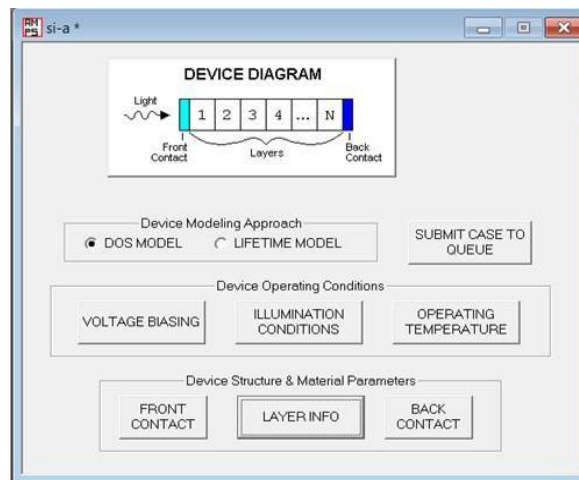


Figure III. 2: différentes fenêtres pour introduire les paramètres

III. 2. 6. 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 :

1. conditions aux limites :

- $PHIBO = b_0 = EC - EF$ pour $x=0$ (eV)

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

2. 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)

3. 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)

4. La température T(k):

Ces paramètres sont entrés seulement une fois, et appliquent en général au dispositif entier [5].

III. 2. 6. 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) dans la bande de conduction à la température T.

NV : densité d'états effective des trous NV (cm) dans la bande de valence à la température T.

c. EG: largeur de la bande interdite (Ev) a la température T.

d. EGOP : largeur de la bande interdite optique.

e. CHI : l'affinité d'électron.

- f. MUN : mobilité des électrons (cm/V.sec)
- g. MUP : mobilité des trous (cm/V.sec)

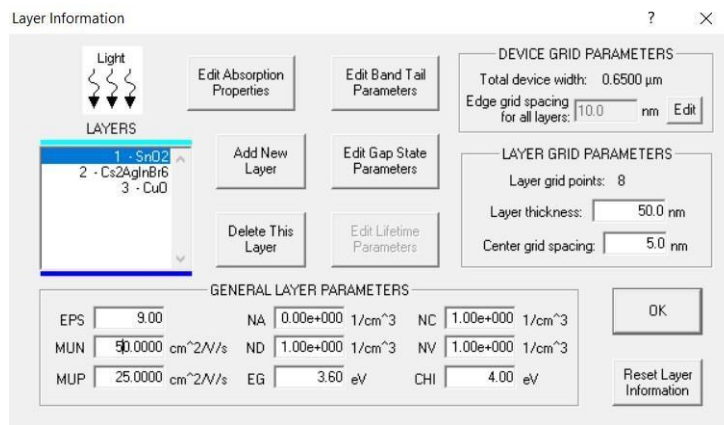


Figure III.3 différentes paramètres pour la couche Cs2AgInBr6.

1. 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 $i^{ème}$ 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 $i^{ème}$ niveau donneur.

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

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

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

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

h. 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 $i^{ème}$ niveau accepteur

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

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

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

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

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

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

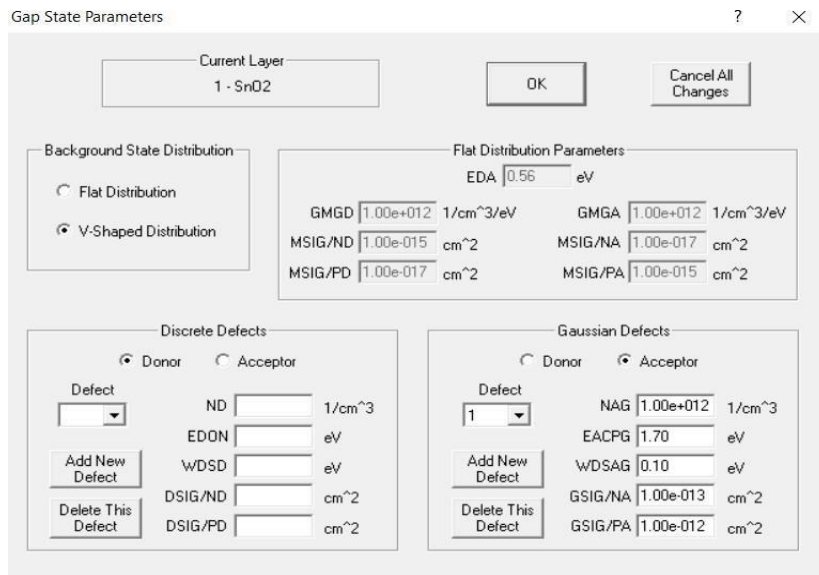


Figure III.4 : Défauts donneurs discrets et continues pour la couche Cs2AgInBr6.

3. 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: $gd= Gdo\exp(E-EV/Ed)$
- GAO = Prefacteur ($1/\text{cm}^{-3}/\text{eV}$) dans l' equation: $ga= Gao\exp(E-EC/Ea)$;
- 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 queue accepteur (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 $i=DLVSG \leq 2$ niveaux donneurs Gaussien.

- b. NDG(i) = densité d'état de donneur de Gaussien expose $(1/\text{cm}^{-3})$ pour la $i^{\text{ème}}$ donneur Gaussien.
- EDONG(i)=énergie de donneur Gaussien au sommet (eV) mesuré positif à partir de E_c pour la $i^{\text{ème}}$ donneur Gaussien.
 - GSIG/ND(i)* = section droite de capture du $i^{\text{ème}}$ état donneur Gaussien pour les électrons (cm^2).
 - WSDSG(i)=écart standard (Ev) du $i^{\text{ème}}$ niveau de donneur Gaussien.
 - GSIG/PD(i)*= section droite de capture du $i^{\text{ème}}$ état donneur gaussien pour les trous (cm^2)

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

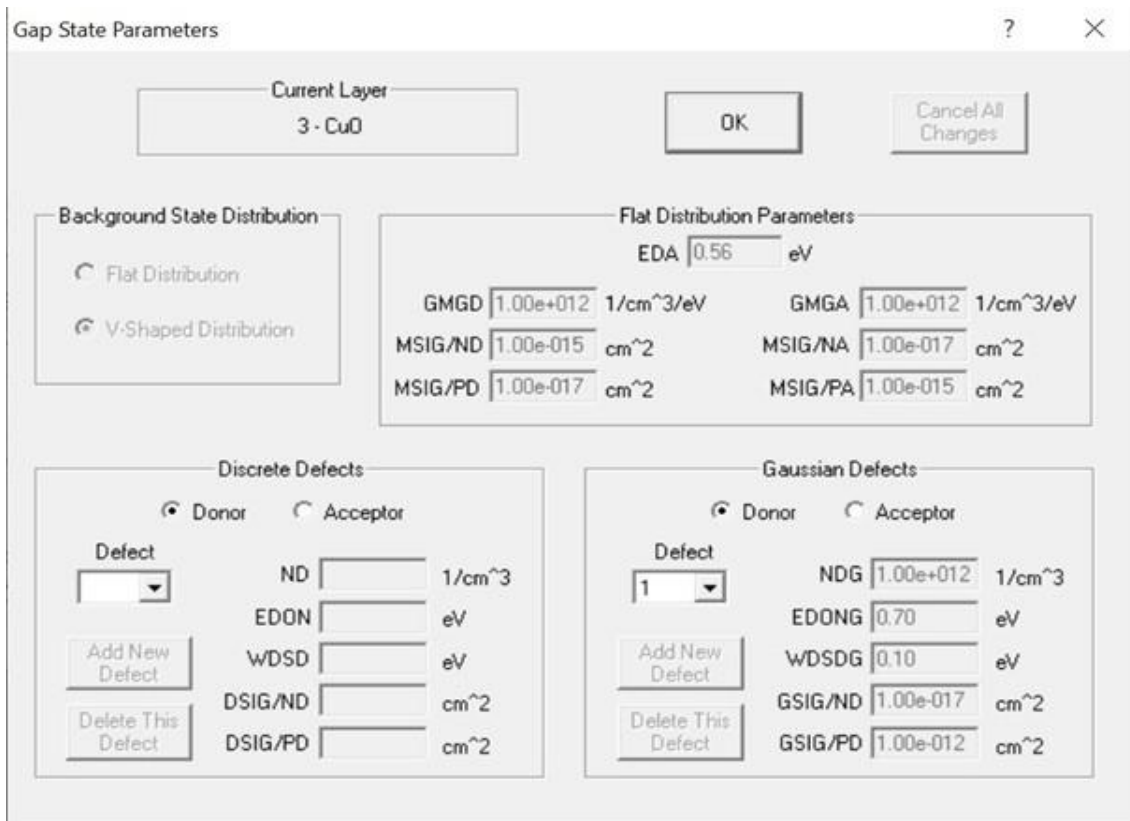


Figure III.5 : Défauts accepteur discrets et continues pour la couche CuO.

III. 2. 6. 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 suivants doivent être définis (les unités entre parenthèses) :

1. La longueur d'onde LAMBDA .
2. Le FLUX incident à cette longueur d'onde (1/ cm/s).

Le coefficient d'absorption ALFA (1/ cm) à cette longueur d'ondes dans chaque région de la structure [2].

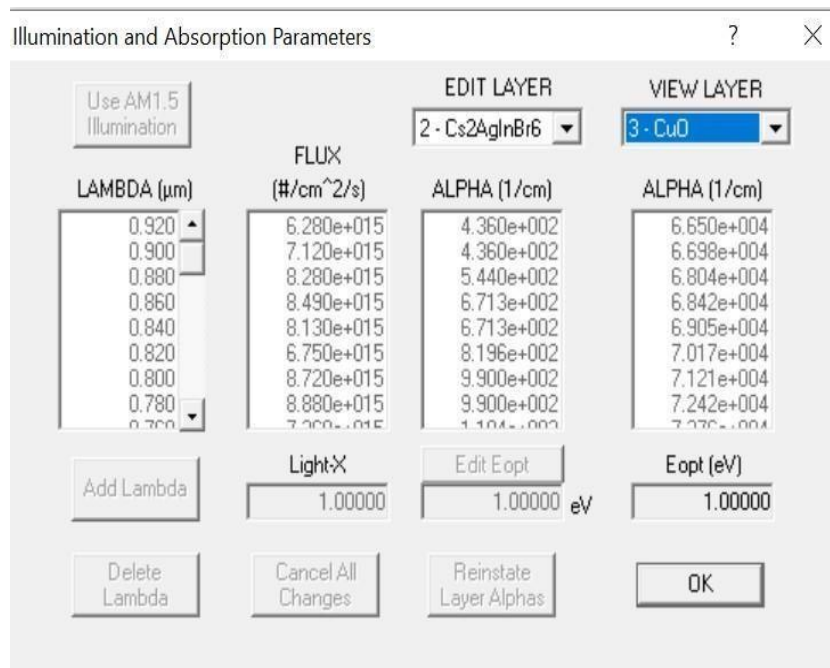


Figure III-6 : coefficients d'absorption pour la couche Cs2AgInBr6.

III. 2. 7. Le panneau de différents résultats obtenus :

Le panneau suivant (voir figure III-7) indique les différentes courbes obtenues lors de la simulation il contient les points suivants :

Ec : la bande de conduction

Ef : niveau de fermi

Ev : la bande de valence

EI : les électrons libres

HI : les trous libres

Jd : caractéristique I-V à l'obscurité,

Jl : caractéristique I-V à la lumière

Jn : courant d'électrons

Jp : courant de trous

Ra : la recombinaison d'accepteurs

Rd : la recombinaison de donneurs

Rt : la recombinaison totale

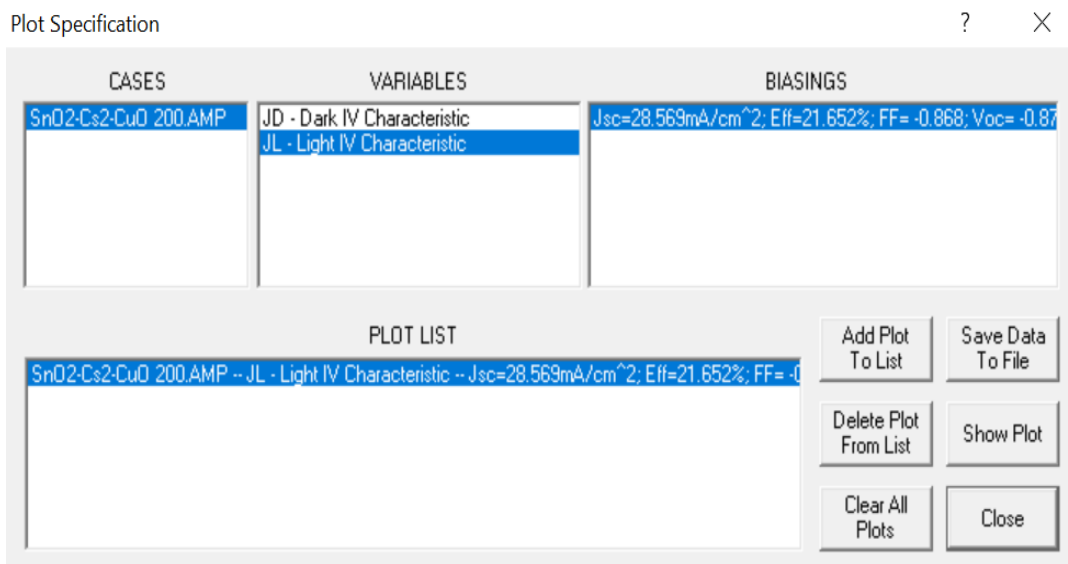


Figure III.7 : le panneau des courbes.

Conclusion :

L'AMPS est un logiciel de simulation très efficace pour le traitement de données, c'est le logiciel le plus utilisé aux laboratoires dans le domaine photovoltaïque. Il est facile à utiliser, en plus, il présente la possibilité d'ouvrir plusieurs fenêtres simultanément qui nous donne avantage d'effectuer plus qu'une tâche, selon la puissance du PC et la stabilité de ce logiciel. Ce logiciel diffère des autres comme le SCAPS du faite qu'on peut ajouter jusqu'au trente couches (LAYERS), et c'est un bon avantage pour AMPS, le seul inconvénient qu'on peut citer sur ce logiciel, se réside dans son vitesse d'exécution, car il peut faire plus d'une heure avant d'exécuter, et il arrive parfois qu'il n'exécute pas, sans donner une telle notice pour indiquer une erreur numérique entrée par l'utilisateur.

III. 3. Références

- [1].S. Fonash, "AMPS-1D: Analysis of Microelectronic and Photonic Structures," Penn State University
- [2].F.GHALEB, K. Eddine BENDJBAR & S. HAOUARI « Polycopié des Travaux Pratiques : LUMIERE ET CELLULE SOLAIRE -Faculté de Physique Licence L3 : Energie Renouvelable 2014-2015
- [3] *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd Edition, Wiley, 2006
- [4].Martin A. Green – Solar Cells: Operating Principles, Technology, and System Applications
- [5].S. Fonash, J. Arch., J. Hou, W. Howland, P. Mcelheny,A. Moquin, M. Rogosky, T. Tran, H. Zhu, F. Rubinelli, "A Manual for AMPS-1D for Windows 95/NT a One-Dimensional Device Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures", The Pennsylvania State University, (1997).

Chapitre IV:

Résultats et Discussion de

simulation

IV. 1. Introduction

Pour optimiser les performances des cellules solaires à pérovskite, le choix des matériaux utilisés pour les couches de transport revêt une importance capitale. La structure typique $\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$ repose sur l'utilisation de SnO_2 comme couche de transport d'électrons (ETL – Electron Transport Layer) et de CuO comme couche de transport de trous (HTL – Hole Transport Layer). Bien que le SnO_2 soit largement utilisé en raison de sa bonne transparence optique et de l'alignement favorable de ses bandes d'énergie, il présente certaines limites, notamment une mobilité électronique modérée et la présence de défauts à l'interface avec la pérovskite [1].

Dans cette étude, nous proposons de simuler la cellule solaire $\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}/\text{Au}$ afin d'évaluer, dans un premier temps, l'influence de plusieurs paramètres sur ses performances, tels que l'épaisseur des différentes couches, le niveau de dopage et la température de fonctionnement.

Dans un second temps, nous examinons l'impact du remplacement de SnO_2 par d'autres matériaux semi-conducteurs alternatifs, en particulier CdSe et ZnSe , en tant que couches de transport d'électrons. Ces matériaux présentent des propriétés électroniques et optiques intéressantes, avec des bandes interdites et des niveaux d'énergie susceptibles d'être mieux alignés avec ceux de $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$. Une telle optimisation pourrait favoriser une collecte plus efficace des porteurs de charge, améliorant ainsi les performances globales de la cellule.

Grâce à des simulations numériques réalisées à l'aide du logiciel AMPS-1D, cette recherche vise à comparer les caractéristiques photovoltaïques de la cellule en fonction du matériau utilisé pour la couche ETL. L'objectif est de mettre en évidence les effets de ce changement sur des paramètres clés tels que le courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (PCE) [2].

IV. 2. Simulation de la cellule solaire double Pérovskite Cs₂AgInBr₆ :

IV. 2. 1. Présentation de la cellule:

La structure de la cellule solaire à base du composé Pérovskite est constituée par : une couche de Oxyde d'étain (SnO₂) a été utilisé comme matériau de transport d'électrons, de la pérovskite (Cs₂AgInBr₆) qui a été utilisé comme matériau absorbant et (CuO) comme un matériau de transport de trous. (Voir Figure IV.1).

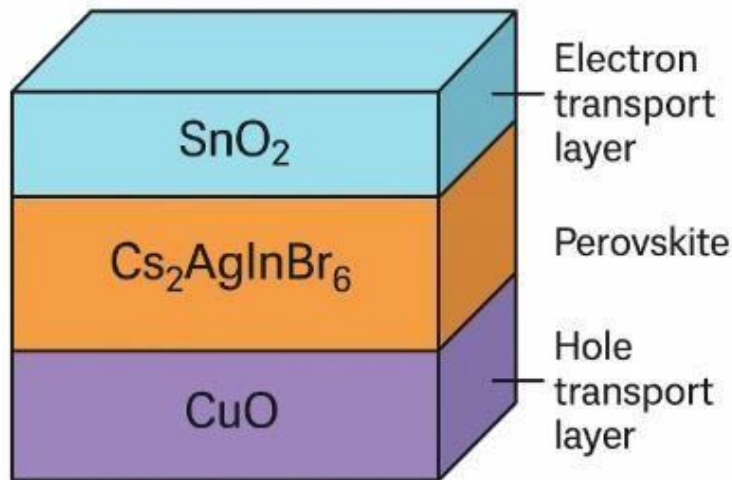


Figure IV. 1 : Structure de la cellule solaire Pérovskite.

V. 2. 2. Paramètres de la cellule Pérovskite :

Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure de la Figure IV.1 sont illustrés dans le tableau IV.1 [3-6]

Parameters		SnO ₂ (n)	Cs ₂ AgInBr ₆ (I)	CuO (p)
Thickness (nm)	L	40-200	200-1000	50-1800
Dielectric constant	EPS	9,0	4.37	18,10
Electron mobility (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	MUN	100	89.4	100
Hole mobility (Cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	MUP	25	3.3	1× 10 ¹⁵
Effective conduction band density (cm ⁻³)	NC	2,2× 10 ¹⁸	1.26 × 10 ¹⁸	2,2× 10 ¹⁹
Effective valence band density (cm ⁻³)	Nv	1.8 × 10 ¹⁹	1.73 × 10 ¹⁸	5.50 × 10 ²⁰
Acceptor concentration (cm ⁻³)	NA		1 × 10 ¹⁵	1× 10 ¹⁵
Donor concentration (cm ⁻³)	ND	1× 10 ¹⁶	1 × 10 ¹⁵	
Band gap (eV)	EG	3.6	1.47	1.42
Electron affinity (eV)	CHI	4.5	4.1	4.07
Gaussian density of states (cm ⁻³)	NDG, NAG	1× 10 ¹⁵	1× 10 ¹⁵	1× 10 ¹⁵

Tableau. 1 : Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure.

IV. 3. Résultats et discussion:

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

IV. 3. 1. Caractéristique courant tension:

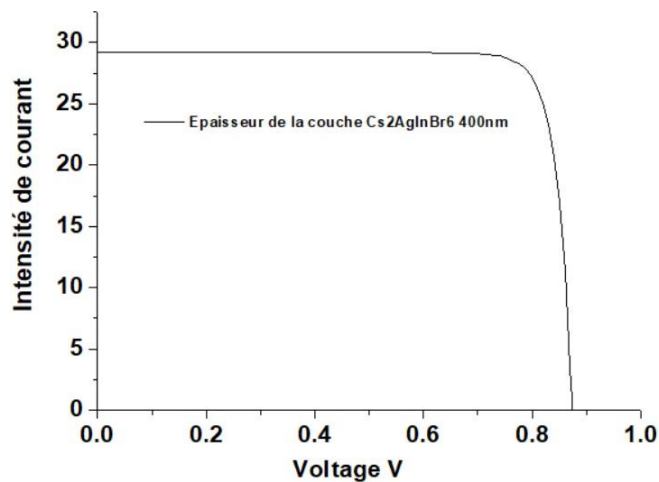


Figure IV. 2 : Caractéristique Courant-Tension

IV. 3. 2. Impact de l'épaisseur sur les performances (J_{sc} , Eff , FF , V_{oc}) :

IV. 3. 2. 1. Effet de l'épaisseur de la couche $Cs_2AgInBr_6$:

Le $Cs_2AgInBr_6$, un composé de la famille des pérovskites doubles, suscite un intérêt croissant en raison de ses propriétés prometteuses et de son potentiel d'application dans les cellules solaires. Il appartient à la classe des pérovskites halogénées à double cation, et se caractérise par une structure cristalline intégrant le césium (Cs), l'argent (Ag), l'indium (In) et le brome (Br).

La Figure IV.3 illustre l'évolution des principaux paramètres photovoltaïques, la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (J_{sc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (Eff), en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante $Cs_2AgInBr_6$, dans une plage comprise entre 100 et 1000 nm.

- Courant de court-circuit (J_{sc}) : Le J_{sc} augmente progressivement avec l'épaisseur de la couche absorbante, atteignant un maximum aux alentours de 900 nm, avant de diminuer par la suite.

-Rendement de conversion (Eff) : Le rendement global de la cellule croît jusqu'à une épaisseur d'environ 400 nm, où il atteint son maximum, puis commence à décroître.

- Facteur de forme (FF) : Le FF reste relativement stable aux faibles épaisseurs, mais subit une diminution notable au-delà de 600 nm.

- Tension en circuit ouvert (Voc) : La Voc augmente progressivement avec l'épaisseur de la couche absorbante, puis tend à se stabiliser à partir de 800 nm.

Ces observations indiquent qu'il existe une épaisseur optimale de la couche $Cs_2AgInBr_6$ assurant un bon compromis entre absorption lumineuse et transport efficace des charges. Au-delà de cette épaisseur, les performances photovoltaïques se dégradent, probablement en raison de pertes accrues par recombinaison et d'un transport de charge moins efficace[7].

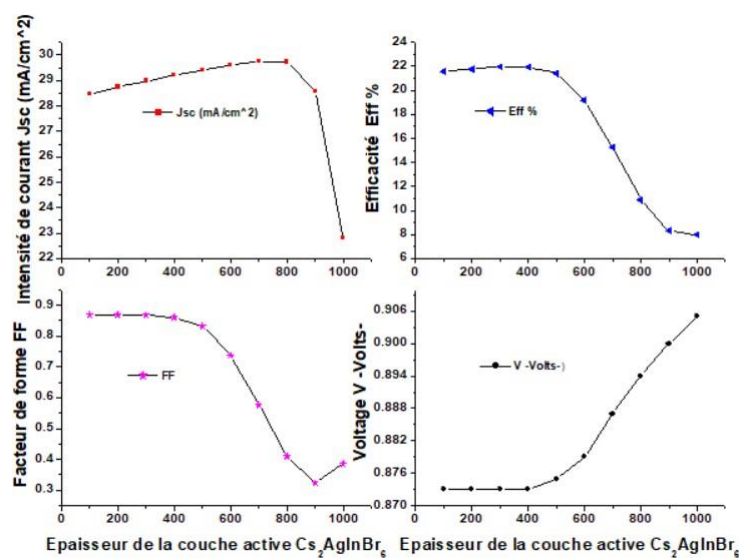


Figure IV. 3 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC} , J_{SC} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche $Cs_2AgInBr_6$.

Les paramètres photovoltaïques de la cellule, optimisée pour un rendement maximal et intégrant une couche de pérovskite d'une épaisseur de 400 nm, sont présentés dans le tableau IV.2.

V_{oc} (Volt)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	Eff (%)
0.873	29.141	0.863	21.964

Tableau.2 : Paramètres simulés optimaux pour une couche de $Cs_2AgInBr_6$ d'une épaisseur de 400 nm.

IV. 3. 2. 2. Effet de l'épaisseur de la couche de dioxyde d'étain (SnO_2) :

Le dioxyde d'étain (SnO_2) est un composé inorganique formé d'étain (Sn) et d'oxygène (O_2). Il s'agit d'un semi-conducteur de type n, transparent dans le domaine du visible, caractérisé par une large bande interdite d'environ 3,6 eV.

La figure IV.4 présente l'évolution des principaux paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et rendement, Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche de SnO_2 , variant de 40 à 200 nm.

- On constate une diminution du courant de court-circuit (J_{sc}) ainsi que du rendement de conversion (Eff) à mesure que l'épaisseur augmente.
- La tension en circuit ouvert (V_{oc}) augmente dans un premier temps, puis se stabilise.
- Le facteur de forme (FF) diminue progressivement avec l'augmentation de l'épaisseur.

Ces résultats mettent en évidence l'influence notable de l'épaisseur de la couche de SnO_2 sur les performances de la cellule photovoltaïque, notamment en termes de collecte des porteurs de charge et de pertes optiques.

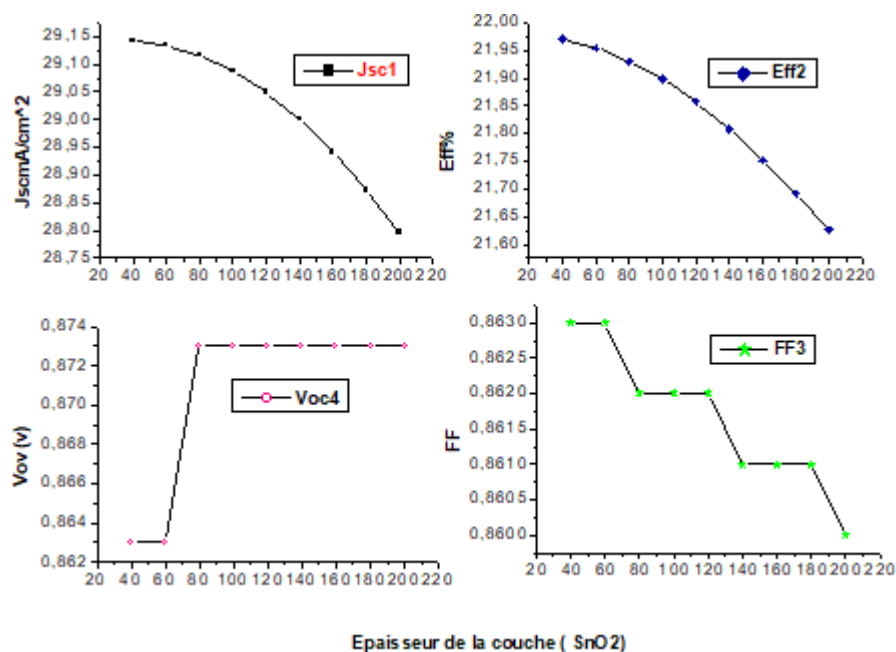


Figure IV.4: Variation du paramètre photovoltaïque (V_{oc} , J_{sc} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche SnO_2 .

IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur de la couche oxyde de cuivre (CuO) :

La couche de CuO est une fine couche d'oxyde de cuivre (II) formée à la surface du cuivre. Ce composé chimique, de formule CuO, est un semi-conducteur de type p couramment utilisé dans diverses applications, notamment les cellules solaires, les capteurs et les batteries.

La Figure IV.5 montre l'évolution des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche de CuO, dans une plage comprise entre 50 et 1800 nm.

Lorsque l'épaisseur augmente de 50 à 400 nm, on observe une amélioration significative de tous les paramètres : tension en circuit ouvert (V_{oc}), courant de court-circuit (J_{sc}), facteur de forme (FF) et rendement de conversion (Eff).

Au-delà de 50 nm, jusqu'à 1800 nm, ces grandeurs restent globalement stables, indiquant que l'augmentation supplémentaire de l'épaisseur n'apporte pas de gain notable en performance.

Ces résultats suggèrent qu'une épaisseur d'environ 400 nm constitue un seuil optimal pour la couche de CuO dans cette configuration, au-delà duquel les performances photovoltaïques cessent de s'améliorer de manière significative.

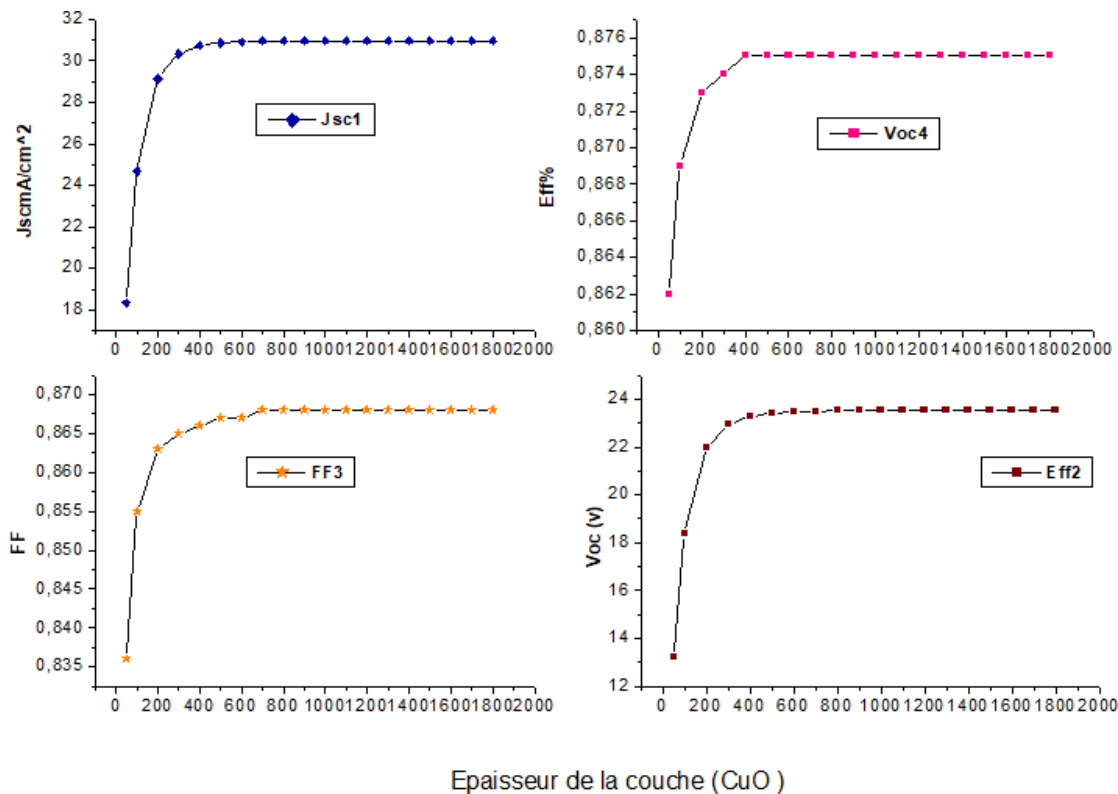


Figure IV.5 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{oc} , J_{sc} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche CuO.

Les paramètres photovoltaïques de la cellule, comportant une couche de pérovskite d'une épaisseur de 400 nm, et d'une épaisseur de la couche CuO de 600nm sont présentés dans le Tableau IV.2.

V_{oc}(Volt)	J_{sc} (mA/cm²)	FF (%)	Eff (%)
0.875	30.927	0.867	23.467

Tableau 3 : Paramètres optimaux simulés pour CuO (600 nm) / Cs₂AgInBr₆ (400 nm).

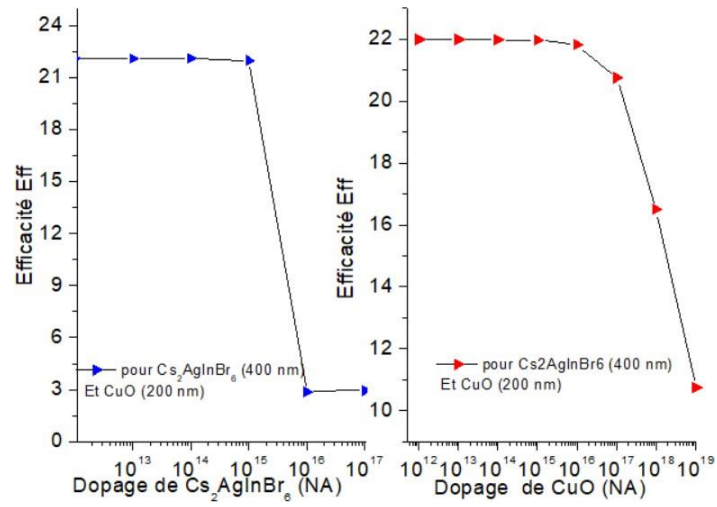
IV. 3. 3. Influence Dopage NA (Cs₂AgInBr₆, CuO) sur le rendement :

La concentration en accepteurs (NA) dans un matériau semi-conducteur influence de manière déterminante les performances des cellules solaires.

Pour les matériaux CuO (200 nm) et Cs₂AgInBr₆ (400 nm), un faible niveau de dopage permet d'atteindre un rendement optimal, car les porteurs de charge (électrons et trous) circulent plus librement, avec une recombinaison limitée [8].

En revanche, lorsque NA dépasse un seuil critique, l'augmentation des défauts cristallins et des phénomènes de recombinaison entraîne une dégradation significative du rendement global de la cellule.

- Cs₂AgInBr₆ se montre particulièrement sensible aux fortes concentrations de dopage, avec une dégradation rapide de l'efficacité dès que $NA \approx 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.
- CuO, en revanche, présente une meilleure tolérance, conservant une efficacité satisfaisante jusqu'à $NA \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ avant de connaître une diminution notable des performances.



La Figure IV.6 : Variation du rendement en fonction du dopage NA.

IV. 3. 4. Effet de la température sur les performances de la cellule :

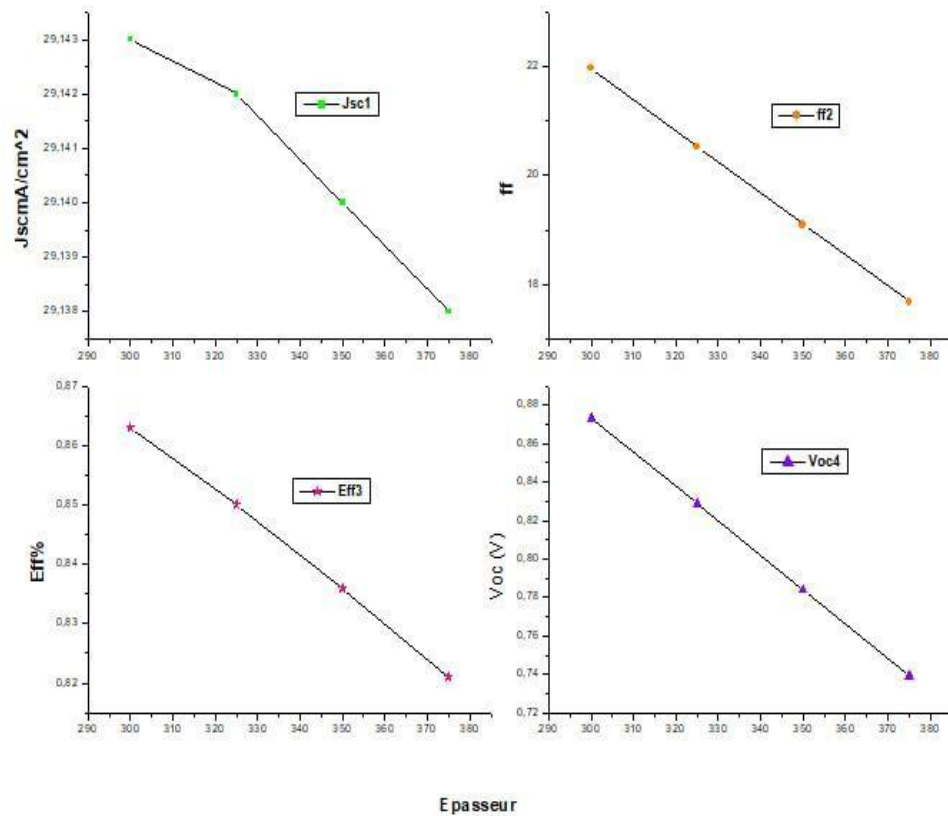


Figure IV. 7 : Effet de la température sur les paramètres caractéristiques (J_{sc}, Eff, FF, V_{oc}) de la Cellule.

Nous avons analysé l'influence de la température, dans la plage de 300 à 450 K, sur les paramètres caractéristiques (J_{sc} , FF , FF et V_{oc}) d'une cellule solaire à pérovskite double, avec une épaisseur optimale de 400 nm.

Les résultats montrent une diminution progressive de toutes les grandeurs électriques, courant de court-circuit (J_{sc}), facteur de forme (FF), rendement de conversion (Eff) et tension en circuit ouvert (V_{oc}) à mesure que la température augmente.

Cette tendance confirme que l'élévation de la température impacte négativement les performances des cellules solaires, principalement en raison des phénomènes suivants :

- La dégradation des propriétés physiques du matériau actif,
- L'augmentation de l'agitation thermique des électrons, entraînant des courants de fuite plus importants,
- Une élévation du taux de recombinaison des porteurs de charge.

IV. 3. Évaluation comparative des matériaux (SnO_2 , $CdSe$, $ZnSe$) dans les cellules photovoltaïques à base de $Cs_2AgInBr_6$:

IV.3.1. Caractéristique courant tension les trois cellules :

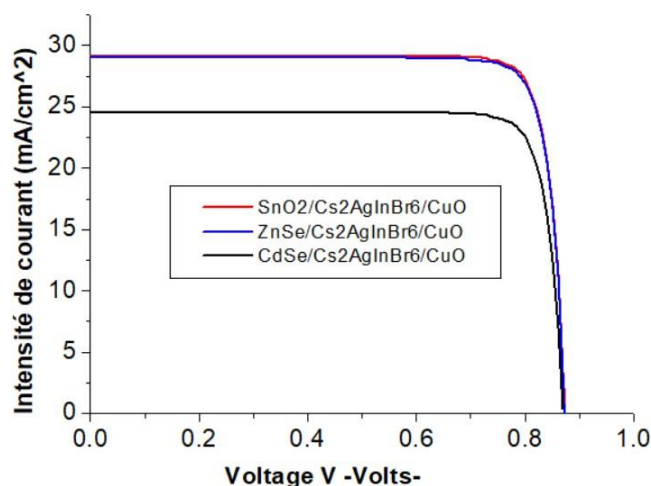


Figure IV. 9 : Courant-Tension

IV. 3. 2. Effet de l'épaisseur de la couche Cs₂AgInBr₆ sur les trois cellules :

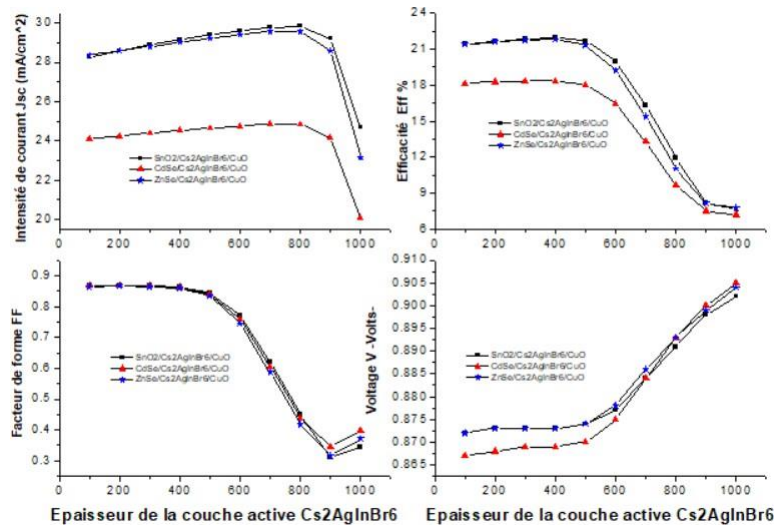


Figure IV. 8 : Variation du paramètre photovoltaïque (V_{OC} , J_{SC} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur dans les trois cellules.

La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) augmente progressivement avec l'épaisseur de la couche active, atteignant un maximum aux alentours de 800 nm, avant de diminuer légèrement au-delà de cette valeur. Parmi les structures étudiées, celle à base de CdSe/Cs₂AgInBr₆/CuO présente la densité de courant la plus faible. Concernant l'efficacité (Eff), elle atteint son niveau optimal pour une épaisseur de couche active comprise entre 400 et 800 nm. La structure CdSe se distingue par une efficacité relativement basse, tandis que celles basées sur SnO₂ et ZnSe affichent des performances plus élevées et proches l'une de l'autre. Cependant, lorsque l'épaisseur dépasse 800 nm, une baisse notable de l'efficacité est observée dans toutes les structures. Le facteur de forme (FF) reste stable à des valeurs élevées jusqu'à environ 600 nm, après quoi il commence à diminuer progressivement. La structure à base de ZnSe montre les valeurs de FF les plus faibles par rapport aux autres substrats. En ce qui concerne la tension de sortie (V), elle augmente régulièrement avec l'épaisseur de la couche active. Toutefois, la structure ZnSe/Cs₂AgInBr₆/CuO affiche la tension la plus basse, tandis que les structures à base de SnO₂ et de ZnSe présentent des valeurs similaires. En résumé, les meilleures performances des cellules solaires analysées sont obtenues pour une épaisseur de couche active située entre 400 et 800 nm. Parmi les substrats étudiés, SnO₂ se démarque comme celui offrant les meilleures performances globales sur l'ensemble des paramètres

(J_{sc} , Eff, FF, V), suivi par ZnSe, tandis que CdSe se positionne en dernier. Une épaisseur supérieure à 800 nm entraîne une dégradation significative des performances, principalement due à des pertes accrues liées au transport des charges et à une absorption moins efficace de la lumière.

Conclusion

Nous avons d'abord étudié l'influence des variations d'épaisseur et de température sur les principaux indicateurs de performance des cellules solaires, notamment le courant de court-circuit (J_{sc}) le rendement (Eff), le facteur de forme (FF) et la tension en circuit ouvert (V_{oc}), ainsi que sur le comportement courant-tension (J-V), en analysant les différentes couches du dispositif ($Cs_2AgInBr_6$, SnO_2 et CuO). L'effet du dopage sur le rendement a également été évalué pour les couches $Cs_2AgInBr_6$ et CuO. Enfin, nous avons examiné l'impact du remplacement de la couche SnO_2 par d'autres matériaux alternatifs (CdSe, ZnSe) sur ces mêmes paramètres de performance.

D'après la simulation de la structure $SnO_2 / Cs_2AgInBr_6 / CuO$, le rendement maximal obtenu est de 23.467%. Ce résultat correspond à une configuration optimale avec :

- Une épaisseur de **400** nm pour la couche absorbante $Cs_2AgInBr_6$,
- Et **50** nm pour la couche tampon SnO_2 .
- Et **600** nm pour la couche tampon CuO.
- Et avec un dopage $Na\ 10^{15}\ Cm^{-3}$ pour les deux couches ($Cs_2AgInBr_6$ et CuO).
- Et avec une température de **300** K.

- Deuxièmement, nous avons étudié l'effet du remplacement du SnO_2 par d'autres matériaux semi-conducteurs, notamment le CdSe et le ZnSe, en tant que couches de transport d'électrons (ETL). Pour une épaisseur de 400 nm de l'ETL et de 200 nm pour la couche de CuO, les rendements de conversion obtenus sont les suivants :

1. $SnO_2 / Cs_2AgInBr_6 / CuO$: Eff = 21,964 %
2. $CdSe / Cs_2AgInBr_6 / CuO$: Eff = 18,363 %
3. $ZnSe / Cs_2AgInBr_6 / CuO$: Eff = 21,794 %

IV.6. Références

- [1] Menedjhi A., Bouarissa N., Saib S., Bouamama K., Halide double perovskite Cs₂AgInBr₆ for photovoltaic's applications: Optical properties and stability, *Optik*, Vol. 243, October 2021, 167198
- [2] Wang, Z., Lin, Q., Chmiel, F. P., Sakai, N., & Snaith, H. J. (2020). Efficient and stable Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cells via control of film formation and energetics. [3] *Journal: Advanced Functional Materials*, 2020
- [4] *Title: Lead-Free Halide Double Perovskites: A Review of the Structural, Optical, and Electronic Properties*
- [5] *Reference: Ginley, D. S., & Bright, C. (2000). Transparent conducting oxides.*
- [6] *Journal: MRS Bulletin*, 2000
- [7] Maughan, A. E., Ganose, A. M., Bordelon, M. M., Miller, E. M., Scanlon, D. O., & Neilson, J. R. (2018).
- [8] Wang, C. et al. (2021). Investigation of defect tolerance and doping influence on lead-free double perovskites solar absorbers.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Les cellules solaires à base de matériaux pérovskites représentent une avancée qualitative dans le domaine des technologies photovoltaïques, en raison des propriétés électroniques et optiques exceptionnelles de ces matériaux. Cette étude a montré que les matériaux pérovskites, grâce à leur structure cristalline unique, permettent une absorption efficace de la lumière sur une large gamme spectrale, ainsi qu'une grande capacité de séparation et de transport des porteurs de charge, ce qui se traduit directement par des rendements de conversion énergétique compétitifs, voire supérieurs dans certains cas, à ceux des cellules solaires traditionnelles à base de silicium.

Les cellules solaires à base de $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ représentent une alternative prometteuse aux pérovskites traditionnelles contenant du plomb, en raison de leur non-toxicité, leur stabilité chimique et leur potentiel optoélectronique. Cette double pérovskite halogénée offre une large bande interdite (~ 2 eV), ce qui le rend particulièrement adapté comme couche supérieure dans des architectures tandem. Toutefois, les performances photovoltaïques actuelles restent limitées par des défauts cristallins, une faible mobilité des porteurs de charge et une absorption insuffisante dans le spectre visible.

Pour améliorer l'efficacité de ces dispositifs, des efforts doivent être concentrés sur :

- L'ingénierie de la structure de bande (par dopage ou substitution d'ions),
- L'optimisation des procédés de fabrication pour améliorer la cristallinité,
- Et l'intégration dans des architectures multicouches avancées.

En résumé, bien que $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ ne soit pas encore prêt à concurrencer les pérovskites au plomb en termes de rendement, il ouvre la voie à une nouvelle génération de cellules solaires stables, respectueuses de l'environnement et potentiellement durables à long terme.

Dans ce chapitre, nous avons utilisé l'outil de simulation performant AMPS-1D afin d'optimiser les paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire à base de pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$.

Notre étude a porté :

- premièrement sur l'impact de plusieurs paramètres clés tels que :

- L'épaisseur des différentes couches de la cellule ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$, SnO_2 et CuO),
- La température de fonctionnement,
- Ainsi que le niveau de dopage des couches absorbante ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$) et collectrice (CuO).

Conclusion Générale

L'analyse des performances photovoltaïques, notamment le courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de remplissage (FF) et le rendement de conversion (Eff), a permis d'identifier les conditions optimales pour maximiser l'efficacité du dispositif.

D'après la simulation de la structure $\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$, le rendement maximal obtenu est de 23.467%. Ce résultat correspond à une configuration optimale avec :

- Une épaisseur de **400 nm** pour la couche absorbante $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$,
- Et **50 nm** pour la couche tampon SnO_2 .
- Et **600 nm** pour la couche tampon CuO .
- Et avec un dopage Na 10^{15} Cm^{-3} pour les deux couches ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ et CuO).

- Deuxièmement, nous avons étudié l'effet du remplacement du SnO_2 par d'autres matériaux semi-conducteurs, notamment le CdSe et le ZnSe , en tant que couches de transport d'électrons (ETL). Pour une épaisseur de 400 nm de l'ETL et de 200 nm pour la couche de CuO , les rendements de conversion obtenus sont les suivants :

1. $\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 21,964 %
2. $\text{CdSe} / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 18,363 %
3. $\text{ZnSe} / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 21,794 %

Ces résultats montrent que le ZnSe constitue une alternative prometteuse au SnO_2 , affichant un rendement très proche de celui obtenu avec ce dernier. En revanche, l'utilisation du CdSe conduit à une diminution notable de l'efficacité. Cette différence de performance peut être attribuée à des facteurs tels que l'alignement des bandes d'énergie, la mobilité électronique ou la qualité de l'interface entre l'ETL et le matériau absorbant. Ainsi, bien que le ZnSe se révèle compétitif, le CdSe semble moins adapté en tant que couche de transport d'électrons dans cette configuration.

Conclusion et perspectives

Dans ce chapitre, nous avons utilisé l'outil de simulation performant **AMPS-1D** afin d'optimiser les paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire à base de pérovskite sans plomb $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$. Notre étude s'est articulée autour de deux axes principaux :

1. Optimisation des paramètres physiques et électriques

Nous avons examiné l'influence de plusieurs paramètres clés sur les performances du dispositif, notamment :

Conclusion Générale

- L'épaisseur des différentes couches ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$, SnO_2 et CuO),
- La température de fonctionnement,
- Le niveau de dopage des couches absorbante ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$) et collectrice (CuO).

L'analyse des paramètres photovoltaïques, courant de court-circuit (J_{sc}), tension en circuit ouvert (V_{oc}), facteur de remplissage (FF) et rendement de conversion (Eff) a permis d'identifier la configuration optimale suivante :

- **400 nm** pour la couche absorbante **$\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$** ,
- **50 nm** pour la couche de transport d'électrons **SnO_2** ,
- **600 nm** pour la couche de transport de trous **CuO** ,
- Et un dopage de $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ pour les deux couches dopées.

Dans ces conditions, le rendement maximal simulé atteint **23,467 %**, démontrant le potentiel élevé de cette architecture.

2. Substitution du SnO_2 par d'autres matériaux pour la couche ETL

Nous avons ensuite étudié l'effet du remplacement du SnO_2 par deux matériaux semi-conducteurs alternatifs : **CdSe** et **ZnSe** , en tant que couches de transport d'électrons (ETL). Pour une épaisseur fixe de **400 nm** pour l'ETL et de **200 nm** pour la couche de CuO , les rendements obtenus sont les suivants :

- **$\text{SnO}_2 / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 21,964 %**
- **$\text{CdSe} / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 18,363 %**
- **$\text{ZnSe} / \text{Cs}_2\text{AgInBr}_6 / \text{CuO}$: Eff = 21,794 %**

Ces résultats montrent que le **ZnSe** se positionne comme une alternative viable au **SnO_2** , offrant une efficacité quasi équivalente. À l'inverse, le **CdSe** entraîne une diminution notable du rendement, ce qui peut s'expliquer par un alignement des bandes moins favorable, une mobilité électronique plus faible ou une interface de moindre qualité avec le matériau absorbant.

Perspectives

Pour améliorer davantage l'efficacité de ces dispositifs et rapprocher les performances de celles des cellules à base de pérovskites au plomb, plusieurs pistes peuvent être explorées :

- **L'ingénierie de la structure de bande**, par dopage ou substitution ionique, afin d'optimiser l'alignement énergétique entre les couches.

Conclusion Générale

- **L'optimisation des procédés de fabrication**, notamment pour améliorer la cristallinité des matériaux et réduire les défauts aux interfaces.
- **Le développement d'architectures multicouches avancées**, intégrant des couches intermédiaires pour faciliter le transport des charges et réduire les recombinaisons.

En résumé, bien que la pérovskite **Cs₂AgInBr₆** ne soit pas encore prête à concurrencer pleinement ses homologues au plomb en termes de rendement, elle constitue une alternative prometteuse. Sa stabilité environnementale, son absence de toxicité et son potentiel de durabilité à long terme en font un matériau de choix pour une nouvelle génération de cellules solaires écologiques et fiables.

Resume

Résumé

Dans cette étude, nous avons évalué les performances d'une cellule solaire basée sur la double pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ à l'aide du simulateur **AMPS-1D**.

Dans un premier temps, l'objectif principal était d'analyser l'influence de plusieurs paramètres sur les performances de la cellule, notamment l'épaisseur des différentes couches, le niveau de dopage et la température de fonctionnement.

Dans un second temps, nous avons étudié l'effet du remplacement de SnO_2 par d'autres matériaux semi-conducteurs alternatifs, en particulier CdSe et ZnSe , utilisés comme couches de transport d'électrons.

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

ملخص :

في هذه الدراسة، قمنا بتقييم أداء خلية شمسية تُعد على بيروفسكايت $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ مزدوج النوع من باستخدام برنامج المحاكاة AMPS-1D. في المرحلة الأولى، كان الهدف الأساسي هو تحليل تأثير عدد من العوامل على أداء الخلية، مثل سماكة الطبقات المختلفة، ومستوى التطعيم، ودرجة حرارة التشغيل. أما في المرحلة الثانية، فقد درسنا تأثير استبدال SnO_2 بمواد شبيهة موصلة بديلة، وخاصة CdSe و ZnSe ، لاستخدامها كطبقات لنقل الإلكترونات.