

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



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

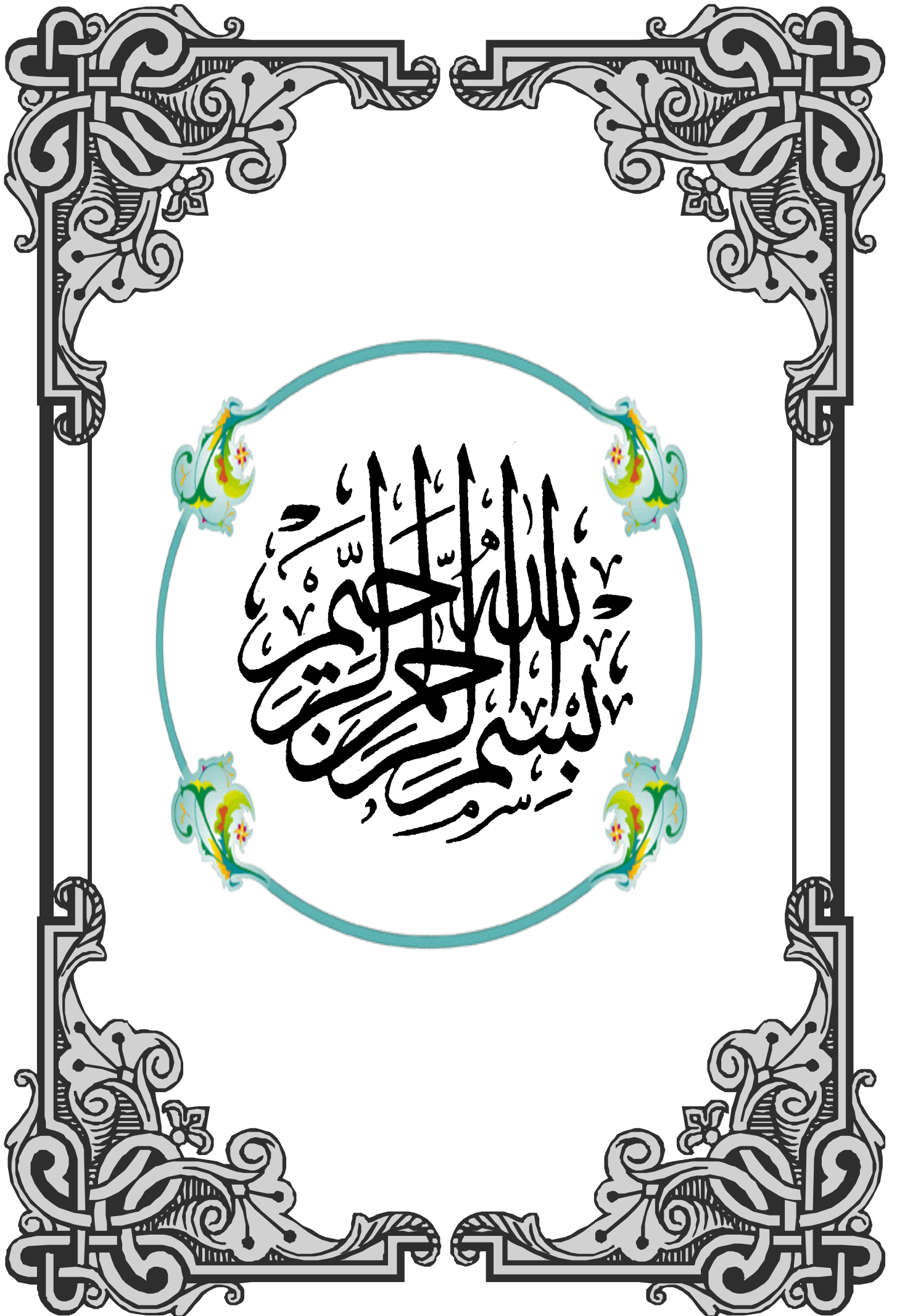
Département de Génie Mécaniques
MEMOIRE DE FIN D'ETUDE
En vue de l'obtention du diplôme de :
MASTER
En Génie Mécanique
Option : Energétique
Présenté par :
Ben Misra Soumia
Thème

**Simulation et optimisation de la cellule solaire inorganique à double
pérovskite à base de Cs₂AgInBr₆**

Devant le jury composé de :

NOM et Prénom	Grade	Qualité
Saib Cherif.	MCA	President
Bechane Leila	MCB	Encadreur
FARSI Chouki	MCA	Co-Encadreur
Amroune Salah	Professeur	Examineur

Année Universitaire :2023/2024



Remerciements

Avant tout, nous remercions Dieu qui nous a aidés et donnés la force et la patience pour accomplir ce modeste travail. Nous tenons à remercier nos encadreurs, Mme Leila Bechane et M. Chouki Farsi, pour leur patience, leur confiance, leurs remarques et leurs conseils.

Nous souhaitons ensuite remercier les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce travail ainsi que pour toutes leurs remarques et critiques. Nous n'oublions pas nos parents et nos familles pour leurs prières et leurs encouragements.

Enfin, nous tenons à remercier toutes les personnes qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail

Merci à vous tous..

SOMMAIRE

Remerciements

SOMMAIRE

Liste des acronymes et abréviations

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale..... 1

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 7

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 I. 7. 2. 1. La filière silicium microcristallin/silicium amorphe..... 13

I.7. 2. 2. Couches minces de tellurure 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 16

I.8. Références 16

Chapitre II : Propriétés fondamentales des matériaux semi-conducteurs (ZnO, Cs₂AgInBr₆, P3HT)

II.1. Introduction.....20

II. 2. Matériaux Pérovskite20

II.2.1. Double perovskites Based on In (V) and Ag (I)	21
II. 2. 2. Propriétés des matériaux pérovskites ($Cs_2AgInBr_6$) □ Propriétés électroniques	22
II. 2. 3. Coefficient d'absorption	24
II. 3. Propriétés de l'oxyde de Zinc (ZnO)	25
II. 3. 1. La structure l'oxyde de Zinc (ZnO)	25
II. 3. 2. Propriétés électriques l'oxyde de Zinc (ZnO)	26
II. 3. 3. Propriétés optiques l'oxyde de Zinc (ZnO)	26
II. 4. Propriétés de poly (3-hexylthiophène) (P3HT)	27
II. 4. 1. Propriétés optiques de poly (3-hexylthiophène) (P3HT)	29
II. 4. 2. Propriétés électrochimiques poly (3-hexylthiophène) (P3HT)	30
II. 5. Conclusion	31
II. 6. Références	31

Chapitre III : Logiciel de simulation AMPS-1D

III.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	35
III. 2. 3. L'équation de Poisson	36
III. 2. 4. Les équations de continuité	37
III.2. 4. 1. Densité de courant d'électron et de trou	38
III. 2. 4. 2. Les mécanismes de recombinaison	39
III. 2. 5. Aperçu sur le fonctionnement de l'AMPS	39
III. 2. 6. Liste des paramètres à introduire	40
III. 2. 6. 1. Paramètres qui s'appliquent au dispositif entier	41
III. 2. 6. 2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière	41
III. 2. 6. 3. Paramètres qui définissent le spectre d'illumination	46
III. 2. 7. Le panneau de différents résultats obtenus	46
III. 3. References	48

Chapitre IV : Résultats et Discussion de simulation

IV. 1. Introduction	51
IV. 2. Simulation de la cellule solaire double Pérovskite $Cs_2AgInBr_6$ IV. 2. 1. Présentation de la cellule	51
IV.2. 2. Paramètres de la cellule Pérovskite	52
IV. 3. Résultats et discussion	52

IV. 3. 1. Caractéristique courant tension	52
IV. 3. 2. Impact de l'épaisseur sur les performances (JSC, Eff, FF, Voc)	53
IV. 3. 2. 1. Effet de l'épaisseur de la couche Cs₂AgInBr₆.....	53
IV. 3. 2. 2. Effet de l'épaisseur de la couche P3HT.....	54
IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur de la couche ZnO	55
IV. 3. 3. Effet de la densité des défauts (Cs₂AgInBr₆, P3HT) sur le rendement.....	56
IV.3. 4. Effet de la température sur le rendement.....	57
IV.4 Conclusion.....	57
IV.5.Références	58
Conclusion générale	61
BIBLIOGRAPHIE.....	64

Liste des acronymes et abréviations

Liste des acronymes et abréviations

E_c : la bande de conduction

E_f : niveau de fermi

E_v : la bande de valence

E_l : les électrons libres

H_l : les trous libres

J_d : caractéristique I-V à l'obscurité,

J_l : caractéristique I-V à la lumière

J_n : courant d'électrons

J_p : courant de trous

R_a : la recombinaison d'accepteurs

R_d : la recombinaison de donneurs

R_t : la recombinaison totale V_{co} :

Tension de circuit ouvert η :

Rendement électrique

FF : Facteur de forme

P_m : Puissance maximale fournie par une cellule λ :

Longueur d'onde

ϕ : éclaircissement reçu par l'échantillon H :

Constante de planck

C : Vitesse de la lumière

P_i : Puissance incidente T :

Température I : Courant de la

cellule I_m : Courant maximale

V_m : Tension maximale Q :

charge élémentaire I_{ph} : Photo-

courant I_0 : Courant inverse de

saturation A : Facteur de qualité

de diode

K : Constante de Boltzmann

R_s : Résistance en série R_{sh} :

Résistance Shunt I_p : Courant

de diode A : Coefficient

d'absorption

E_g : Energie de bande interdite d'un matériau

ν : Fréquence

E_c : Energie du bas de la bande de conduction J ou eV

E_v : Energie du haut de la bande de valence J ou eV

L_n : Longueur de diffusion des électrons

L_p : Longueur de diffusion des trous

G : Taux de génération

E : Energie d'irradiation

TCO : Transparent Conductive oxide

EQE : Rendement Quantique Externe

ZnO : Oxyde de Zinc

P3HT : poly (3-hexylthiophène)

Cs₂AgInBr₃: double pérovskite inorganique (Se₂)

HTM : matériau de transport de trous

N : Densité d'état par unité de volume cm^{-3} $\epsilon_0 \cdot \epsilon_r$

ϵ : La permittivité du semi-conducteur $F \cdot cm^{-1}$

E_F : L'énergie de Fermi E_v

J_n, J_p : densités de courants des électrons et des trous $mA \cdot cm^{-2}$

Liste des acronymes et abréviations

ρ : La densité de charge d'espace $C \cdot cm^{-3}$

VOC : Tension de circuit ouvert

k : La constante de Boltzmann $J \cdot K^{-1}$

E_g : L'énergie du gap eV I_0 : l'intensité lumineuse incidente A N_A : densité des accepteurs

cm^{-3} N_D densité des donneurs cm^{-3} N_c : Densité d'états des électrons cm^{-3}

AMPS-1D : analyse des structures photoniques et microélectroniques à une seule dimension

Courant de court-circuit A

FF : Facteur de forme % η :

Rendement photovoltaïque

ν : Fréquence Hz

N_v : Densité d'états des trous

cm^{-3}

E	:Champ électrique	Vm-1
Ψ	:potentiel électrostatique

Liste des figures

Figure I. 1	: Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après [3].	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) [6].	9
Figure I. 4	: Caractéristiques courant-tension de la cellule photovoltaïque sous éclairement 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 ABX ₃	16
Figure II.1	: Représentation de la structure stable de pérovskite des éléments à travers le tableau périodique [3].	21
Figure II. 2	: Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs ₂ AgInBr ₆ . Cs (Verts) occupant les sites A-cristallographiques.	21
Figure II. 3	: Structure de bande électronique pour Cs ₂ AgInBr ₆ [10].	23
Figure II. 4	: Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs ₂ AgInBr ₆ [10].	24
Figure II. 5	: Spectre du coefficient d'absorption de la pérovskite cubique double Cs ₂ AgInBr ₆ [10].	25
Figure II. 6	: Maille primitive de la phase Würtzite du ZnO [11].	26
Figure II.7	: Dispersion des indices de réfraction n ₀ (a), n _e (b).	27
Figure II. 8	: Unité de répétition monomère de poly thiophène non substitué.	28
Figure II. 9	: Confirmation des triades à base de P3HT.	29
Figure II.10	: Orbitales π conjuguées d'un poly thiophène coplanaire et substituée.	29
Figure II. 11	: Coefficient d'absorption de P3HT en fonction de l'énergie des photons absorbés.	30
Figure III.1	: Bande de diagramme énergétique de la barrière de schottky a l'équilibre Thermodynamique.	37
Figure III.2	: différentes fenêtres pour introduire les paramètres [15].	40
Figure III. 3	: Différents paramètres pour la couche a-Si [15].	42
Figure III. 4	: Défauts donneurs discrets et continues pour la couche a-Si[15].	43
Figure III. 5	: Défauts accepteur discrets et continues pour la couche a-Si.	45
Figure III. 6	: coefficients d'absorption pour la couche a-Si [15].	46

Figure III. 7 : le panneau des courbes	47
Figure IV. 1 : Structure de la cellule solaire Pérovskite.	51
Figure IV. 2 : Caractéristique Courant-Tension	52
Figure IV.4: Variation du paramètre photovoltaïque (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche P3HT.	55
Figure IV. 5 : Variation du paramètre photovoltaïque (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche ZnO.....	56
Figure IV. 6 : Variation du rendement en fonction de la densité de défaut pour les couches (Cs ₂ AgInBr ₆ , P3HT).....	56
Figure IV. 7 : Effet de la température sur les paramètres caractéristiques (JSC, Eff, FF, VOC) de la Cellule.....	57

Liste des tableaux

Tableau. 1 : Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure.....	52
Tableau IV.2 : Paramètres photovoltaïques obtenues de la cellule supérieure à base de Pérovskite Cs ₂ AgInBr ₆	54

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Introduction générale

Depuis le début du 21^{ème} siècle, les enjeux énergétiques et environnementaux à l'échelle mondiale sont devenus de plus en plus cruciaux. L'énergie solaire, inépuisable et propre, se présente ainsi comme une solution efficace aux pénuries d'énergie, à la pollution environnementale et à l'effet de serre. Les dispositifs photovoltaïques, en tant que technologie portable de conversion d'énergie renouvelable, montrent un potentiel prometteur sur le marché commercial. Ils permettent de convertir directement la lumière du soleil en électricité sans intervention de moteurs thermiques.

Aujourd'hui, le marché photovoltaïque est largement dominé par les cellules solaires en silicium cristallin (c-Si), sous ses formes multicristallines et monocristallines. Jusqu'à présent, les cellules solaires en silicium cristallin ont atteint une efficacité supérieure à 25% [1]. Récemment, les cellules solaires à base de pérovskite (PVK) ont émergé, montrant un développement rapide et ouvrant de nouvelles perspectives dans le domaine photovoltaïque. L'efficacité record des dispositifs PVK dépasse désormais les 22% [2].

Le développement des énergies renouvelables et de l'énergie solaire a catalysé l'essor rapide des nouvelles technologies dans le domaine des cellules photovoltaïques. Bien que les cellules au silicium dominent actuellement le marché, les chercheurs considèrent les cellules à pérovskite comme l'avenir de l'énergie solaire. En effet, la pérovskite est un matériau très peu coûteux et plus facile à préparer que le silicium, dont l'extraction et le traitement sont complexes et énergivores. Cette technologie, encore en phase de recherche, s'avère prometteuse pour l'avenir de l'énergie solaire. Avec des rendements en constante augmentation, les cellules à pérovskite pourraient éventuellement surpasser ceux des cellules au silicium, qui restent inégalés jusqu'à présent. Cependant, malgré ses nombreux avantages, la pérovskite nécessite encore plusieurs années de recherche en raison de sa fragilité. Sa faible résistance à l'eau réduit ses performances, et les cellules se dégradent au soleil. Aucune solution n'a encore été trouvée pour permettre l'utilisation des panneaux solaires à pérovskite à grande échelle.

Une nouvelle génération de matériaux pérovskites comme Cs₂AgInBr₆ a été proposée [3]. Ces matériaux sont inorganiques, stables et non toxiques. En outre, ils sont considérés comme des matériaux utiles pour les applications photovoltaïques puisqu'ils ont été synthétisés avec succès.

Le Cs₂AgInBr₆ est un composé chimique qui fait partie des pérovskites halogénées, une classe de matériaux qui ont attiré beaucoup d'attention ces dernières années en raison de leurs propriétés uniques et de leur potentiel dans diverses applications technologiques. Plus précisément, Cs₂AgInBr₆ est une pérovskite double, ce qui signifie qu'elle a une structure

cristalline où deux types de cations métalliques, Ag et In, sont présents de manière ordonnée dans le réseau cristallin avec les anions bromure (Br^-) et les cations césium (Cs^+).

Propriétés et Applications [3- 5]

1. **Propriétés Optoélectroniques** : $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ a des propriétés optoélectroniques intéressantes, telles qu'un large gap d'énergie (band gap), ce qui le rend prometteur pour des applications dans les dispositifs optoélectroniques, comme les cellules solaires et les photodétecteurs.
2. **Stabilité** : Comparé à d'autres pérovskites halogénées contenant du plomb, $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ offre une meilleure stabilité chimique et environnementale. Cela en fait un matériau plus attrayant pour des applications à long terme, particulièrement dans des conditions d'humidité et de température variables.
3. **Absence de Plomb** : L'un des avantages significatifs de $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ est qu'il ne contient pas de plomb, un élément toxique qui pose des problèmes environnementaux et de santé dans d'autres types de pérovskites. Cela rend $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$ plus sûr pour une utilisation à grande échelle.

L'objectif principal de ce mémoire est d'analyser l'influence de certaines propriétés physiques, telles que l'épaisseur, la densité des défauts dans chaque couche, et la température, sur les performances photovoltaïques de notre cellule solaire à base de composés Pérovskite ($\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$). Pour cela, nous utilisons un outil de simulation puissant et particulièrement adapté à ce type de structure, appelé AMPS-1D.

Ce mémoire est organisé de la manière suivante :

Après une introduction générale, le premier chapitre aborde les concepts de base de la conversion photovoltaïque, explique le principe de fonctionnement des cellules solaires, décrit les différents types de cellules, et examine leurs avantages et inconvénients.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les propriétés fondamentales du composé P3HT, ZnO et $\text{Cs}_2\text{AgInBr}_6$. Nous décrirons les propriétés optiques et électriques de ces composées.

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

Dans le quatrième chapitre, des discussions et des interprétations des résultats obtenus par la simulation de notre cellule solaire. Nous clôturerons le travail par une conclusion générale

Reference

- [1] X. Wen, X. Zeng, W. Liao, Q. Lei, S. Yin, "An approach for improving the Carriers Transport properties of a-Si:H/ C-Si heterojunction solar cells With efficiency of more Than 27% ", *Solar energy* 96,168-176,(2013).
- [2] Michele De Bastiani, Rawan Jalmoed, Jiang Liu, Christina Ossig, Aleš Vlk, Karol Vegso, Maxime Babics, Furkan H. Isikgor, Anand S. Selvin, Randi Azmi, Esma Ugur, Swarnendu Banerjee ... "Monolithic Perovskite/Silicon Tandems with >28% Efficiency: Role of Silicon-Surface Texture on Perovskite Properties" 09 December (2022).
- [3] Wang, Z., Lin, Q., Chmiel, F. P., Sakai, N., Herz, L. M., & Snaith, H. J. (2019). Cs₂AgInBr₆: A Lead-Free Bismuth Halide Double Perovskite with Long Carrier Recombination Lifetime. *Journal of the American Chemical Society*, 141(44), 17654-17660. DOI: 10.1021/jacs.9b09654.
- [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] Volonakis, G., Haghighirad, A. A., Milot, R. L., Sio, W. H., Filip, M. R., Weller, M. T., ... & Giustino, F. (2017). Cs₂AgInCl₆: A New Lead-Free Halide Double Perovskite with Direct Band Gap. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(4), 772-778. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b02685

CHAPITRE I

Généralités sur les cellules photovoltaïques

I. 1. Introduction

Le soleil est une source d'énergie pratiquement inépuisable, capable de couvrir plusieurs milliers de fois notre consommation énergétique totale [1]. L'humanité a cherché pendant longtemps à exploiter cette énergie omniprésente sur Terre, et cet objectif a été atteint grâce aux cellules photovoltaïques [2]. L'énergie photovoltaïque résulte de la conversion d'une partie du rayonnement solaire en électricité. Cette conversion s'effectue via une cellule photovoltaïque (PV), utilisant un phénomène connu sous le nom d'effet photoélectrique [3].

Dans ce chapitre, nous allons introduire quelques règles de base dans le domaine des systèmes photovoltaïques (PV). Nous commencerons par expliquer le principe de la conversion photoélectrique. Ensuite, nous aborderons le concept initial du rayonnement solaire, l'absorption du rayonnement par les semi-conducteurs, les caractéristiques de fonctionnement et de sortie d'une cellule photovoltaïque, le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque et les différentes filières photovoltaïques.

I. 2. Historique

La conversion de la lumière en électricité, appelée effet photovoltaïque, a été découverte par le Français Antoine Becquerel en 1839. Cependant, il faudra attendre près d'un siècle pour que les scientifiques approfondissent et exploitent ce phénomène physique. L'énergie photovoltaïque a connu un développement significatif dans les années 1950 pour l'équipement des vaisseaux spatiaux, avec le premier lancement dans l'espace en 1958. À cette époque, c'était le seul procédé non nucléaire d'alimentation des satellites en énergie. Par exemple, les images satellites reçues par nos téléviseurs nous parviennent grâce à l'énergie photovoltaïque. Pendant les années 1970 et 1980, des efforts ont été entrepris pour réduire les coûts afin que l'énergie photovoltaïque soit également utilisable pour des applications terrestres. Depuis lors, la croissance de l'industrie photovoltaïque a été spectaculaire.

Quelques autres dates :

1839 : Découverte de l'effet photovoltaïque par Alexandre Edmond Becquerel. Il avait observé que certains matériaux produisaient des étincelles lorsqu'ils étaient exposés à la lumière. Il démontra qu'il s'agissait d'une conversion directe de la lumière en électricité.

1873: Découverte de la photoconductivité du sélénium par Willoughby Smith.

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

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

1995 : Des programmes de toits photovoltaïques raccordés au réseau ont été lancés, au Japon et en Allemagne, et se généralisent depuis 2001[4].

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.

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 (O₃), pour des longueurs d'ondes inférieures à 0,3 μm , le dioxyde de carbone (CO₂) et la vapeur d'eau (H₂O), pour les infrarouges au-dessus de 2 μm , 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/m², mais a été arrondi à 1kW/m². L'intensité I_D reçue à la surface de la terre peut être calculée grâce à la formule empirique suivante [5] :

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

Avec I_D en kW/m², pour une surface perpendiculaire aux rayons incidents. Les spectres AM0 et AM1.5 sont représentés sur la figure(I.1).

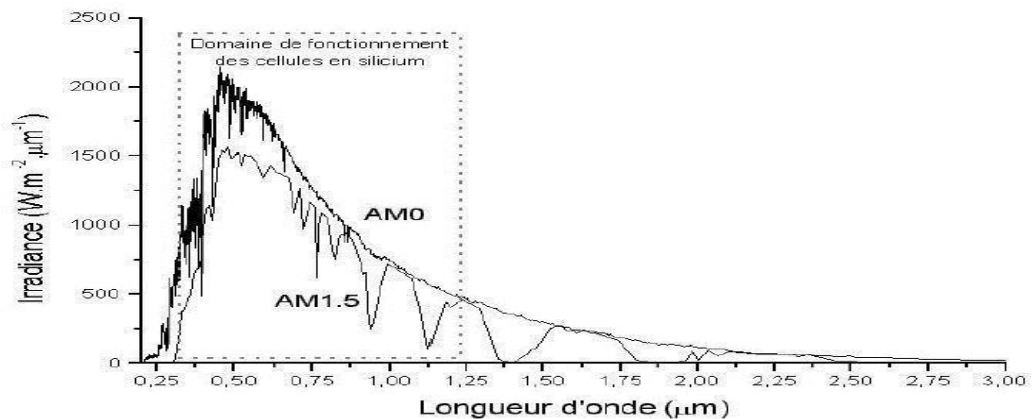


Figure I. 1 : Représentation graphique des spectres AM0 et AM1.5 d'après [3].

Le domainespectral 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 semiconducteur 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.

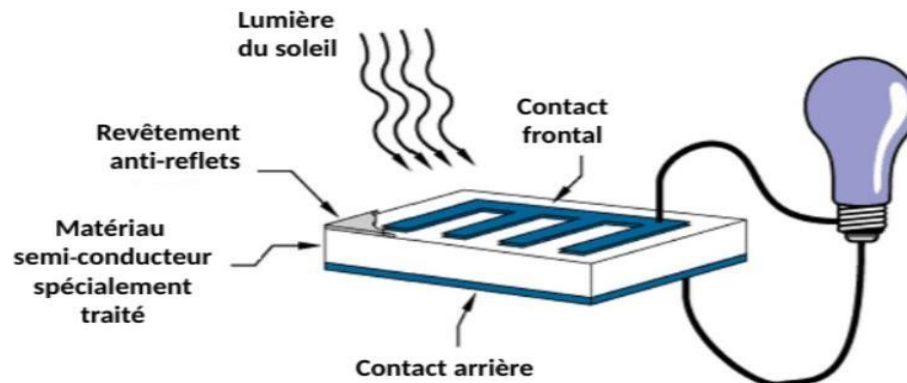


Figure I. 2 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

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).

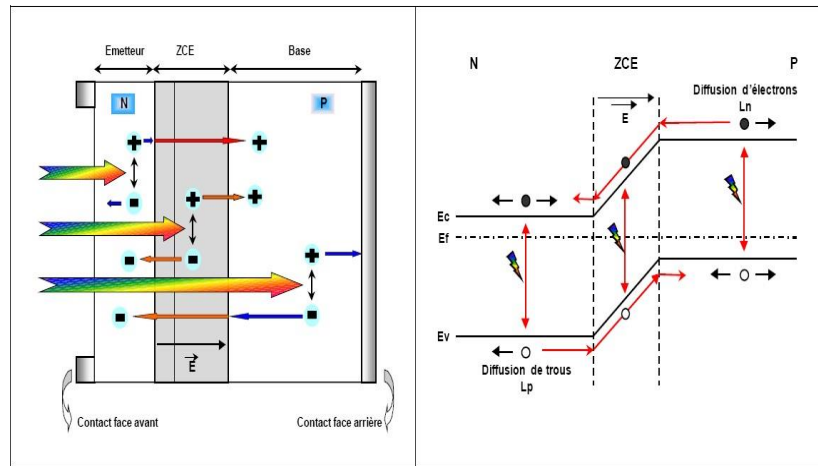


Figure I. 3 : Structure d'une cellule (à gauche) et son diagramme de bande (à droite) [6].

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 photocourant 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'ajoutent 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 :

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

Avec (I. 3)

q est la charge élémentaire (q = 1.6.10⁻¹⁹ C),

V est la tension aux bornes de la jonction,

K est la constante de Boltzmann (k = 1.38.10⁻²³ 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 :

$$I(v) = I_{ph} - I_{obs}(v) \dots\dots\dots (I.4)$$

Soit

$$I(v) = I_{ph} - IS \dots\dots\dots (I. 5)$$

e 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).

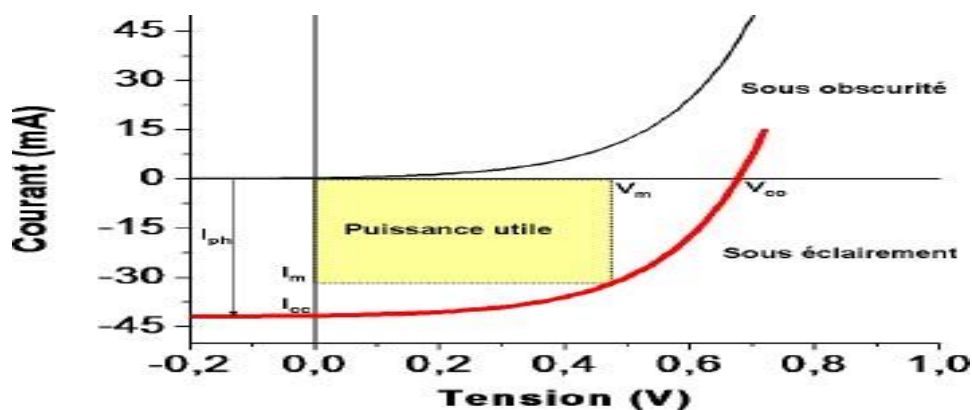


Figure I. 4 : Caractéristiques courant-tension de la cellule photovoltaïque sous éclairement et sous obscurité.

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.

$$P_m = V_m I_m \tag{I. 6}$$

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) augmente.

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

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 :

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

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).

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

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.

7. 2. 2. Couches minces de tellurure 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 $E_g = 1,45 \text{ eV}$, 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 empêche 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'absorbeur 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 éclairage 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.

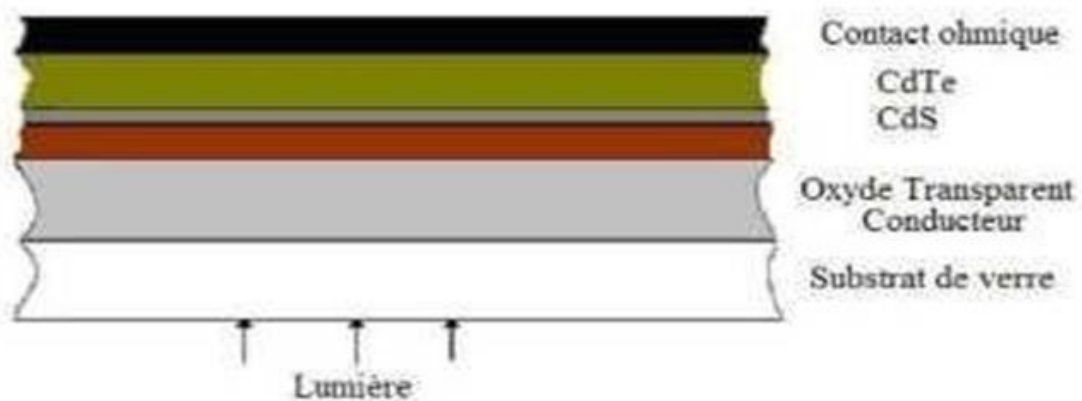


Figure I. 6 : Structure d'une cellule solaire à base de CdS/CdTe [17].

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'Ecole 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).

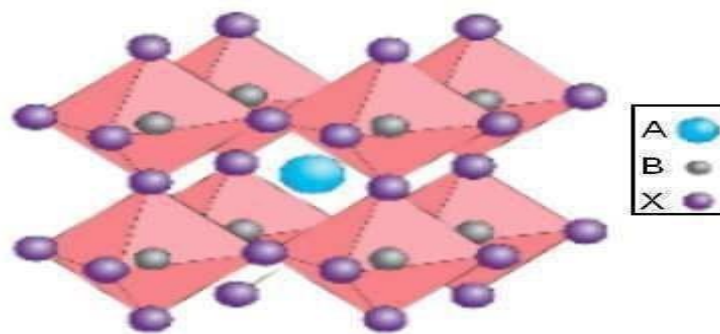


Figure I.7 : Structure d'un cristal de pérovskite générique ABX₃.

I.8. Références

[1] N. Touil, S.Ghenbazi, « Modélisation et simulation d'un système photovoltaïque », Master en Génie Electrique, Université Echahid Hama Lakhder d'El-Oued, 2015.

- [2] N.F.Benhaddouche, « La Commande d'un Système Photovoltaïque d'un Satellite », Master en Automatique. Université de Tlemcen, 2013.
- [3] O. Benseddik, F. Djaloud, « Etude et optimisation du fonctionnement d'un système photovoltaïque », Master en Automatique, Université d'Ouargla, 2012.
- [4] Réalisation de Parc Solaire, Le « Photovoltaïque », M3P Solar : 2009.
- [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 CuIn_{1-x}GaxSe₂ ", Thèse de doctorat, Université de Sétif (2012).
- [11] A.M. Barnett, D.H. Ford and J.C. Chechis, Proc. 14th European PV Solar Energy Conference, Barcelona, Spain (1997), pp. ppp-1002.
- [12] W. N. Shafarman and L. Stolt, « Cu(In,Ga)Se₂ 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 Cu(In,Ga)Se₂ 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 Cu(In_{1-x} Gax)Se₂ 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 (ZnO,
Cs₂AgInBr₆, P3HT)**

II.1. Introduction

L'énergie solaire photovoltaïque est produite par la transformation directe d'une partie du rayonnement solaire en électricité. Cette transformation s'opère grâce à une cellule photovoltaïque (PV) qui utilise un phénomène physique appelé effet photovoltaïque. Les cellules photovoltaïques sont fabriquées à partir d'un matériau semi-conducteur, principalement du silicium. Ce matériau, situé entre les isolants et les conducteurs en termes de conductivité électrique, possède une conductivité électrique moyenne mais suffisante pour permettre le passage d'un courant électrique, notamment lorsqu'il est dopé (c'est-à-dire enrichi en charges positives ou négatives).

Dans ce chapitre, nous examinerons certaines propriétés fondamentales de matériaux utilisés dans la fabrication des cellules photovoltaïques. Nous traiterons des aspects électriques, optiques, structurels et d'autres caractéristiques de matériaux variés. De nombreux efforts de recherche ont été déployés au cours des quarante dernières années pour développer des cellules photovoltaïques offrant un rendement de conversion élevé à moindre coût. Dans ce chapitre, nous présenterons quelques propriétés des matériaux que nous avons choisis lors de la réalisation de nos travaux:

- Pérovskite (Cs₂AgInBr₆).
- L'oxyde de zinc (ZnO).
- Poly (3-hexylthiophène) (P3HT).

II. 2. Matériaux Pérovskite

Récemment, Pb-free halide double pérovskites (HDPs) [1] avec une formule de A₂BIB₃IX₆ ont émergé comme candidats potentiels pour les absorbeurs PV pour surmonter la toxicité et problèmes d'instabilité inhérents à MAPbI₃. Outre les applications PV classiques, les HDP sont également des matériaux fonctionnels prometteurs dans de nombreux autres domaines tels que les rayons X détecteurs.

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

$A_2B(I)B(III)X_6$

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

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

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

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

II.2.1. Double perovskites Based on In (V) and Ag (I)

Cs₂AgInBr₆ est un composé pérovskite double ou halogénure de métal caractérisé par sa structure cristalline unique. Dans cette structure, les cations métalliques césium (Cs), argent (Ag), et indium (In) sont disposés de manière ordonnée pour former un réseau cristallin stable. Ce matériau est étudié pour ses propriétés électroniques et optiques intéressantes, ce qui le rend prometteur pour diverses applications technologiques telles que les cellules photovoltaïques, les dispositifs optoélectroniques, et d'autres technologies avancées. En comparaison avec les pérovskites traditionnelles, Cs₂AgInBr₆ offre des avantages potentiels en termes de stabilité chimique et de performances améliorées.

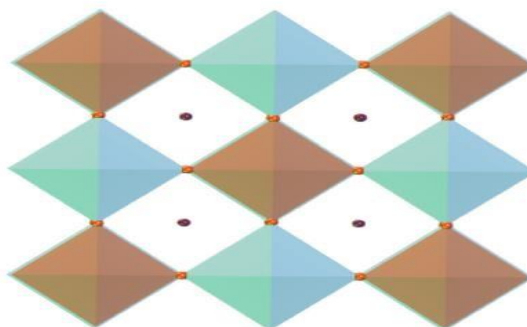


Figure II. 2 : Une cellule unitaire d'un cristal unique de double pérovskite Cs₂AgInBr₆. Cs (Verts) occupant les sites A-cristallographiques.

II. 2. 2. Propriétés des matériaux pérovskites (Cs₂AgInBr₆) □ Propriétés électroniques

Cs₂AgInBr₆ (dibromure d'argent et d'indium de césium) est un matériau pérovskite double qui suscite un intérêt croissant en raison de ses propriétés électroniques prometteuses pour des applications photovoltaïques et optoélectroniques. Voici quelques-unes de ses propriétés électroniques clés :

- 1. Structure de Bande :** Cs₂AgInBr₆ présente une structure de bande interdite directe ou quasi-directe, ce qui est favorable pour les applications photovoltaïques car cela facilite l'absorption de la lumière et la génération de porteurs de charge.
- 2. Largeur de Bande Interdite :** La largeur de bande interdite de Cs₂AgInBr₆ se situe généralement autour de 1,9 à 2,2 eV. Cette large bande interdite est avantageuse pour une utilisation dans des cellules solaires et d'autres dispositifs optoélectroniques.
- 3. Mobilité des Porteurs de Charge :** Bien que la mobilité des porteurs de charge (électrons et trous) dans Cs₂AgInBr₆ ne soit pas aussi élevée que dans certains autres matériaux semi-conducteurs, elle est suffisante pour permettre un transport efficace des charges dans les dispositifs photovoltaïques.
- 4. Densité des États :** La densité des états dans Cs₂AgInBr₆ montre une faible densité au niveau de la bande de valence supérieure et de la bande de conduction inférieure, ce qui réduit la recombinaison des porteurs de charge et améliore l'efficacité de la conversion.
- 5. Conductivité Électrique :** La conductivité électrique de Cs₂AgInBr₆ est relativement faible par rapport à certains autres matériaux semi-conducteurs, mais elle peut être optimisée par des techniques de dopage ou d'ingénierie de défauts.
- 6. Stabilité :** Cs₂AgInBr₆ présente une meilleure stabilité thermique et chimique par rapport à d'autres matériaux pérovskites halogénures, ce qui est crucial pour la durabilité des dispositifs optoélectroniques.

Ces propriétés font de Cs₂AgInBr₆ un matériau prometteur pour une variété d'applications, notamment dans les cellules solaires, les photodétecteurs et d'autres dispositifs optoélectroniques [4- 9].

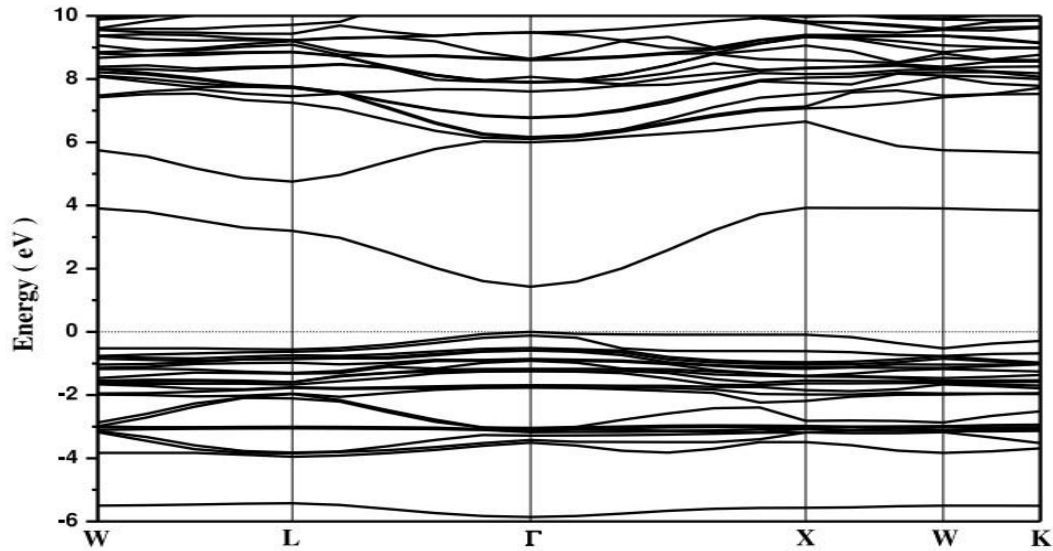


Figure II. 3 : Structure de bande électronique pour Cs₂AgInBr₆ [10].

Figure II.4. Montre les densités partielles d'états (PDOS) du matériau double pérovskite Cs₂AgInBr₆ qui correspondent aux structures de bandes électroniques présentées dans la Figure II.3. Le niveau de Fermi est défini comme étant à l'énergie zéro. Grâce au diagramme de densité partielle des états, nous pouvons connaître les orbitales qui composent la bande de valence et la bande de conduction, ainsi que les orbitales qui dominent dans chaque bande. Nous remarquons que l'orbitale dominante dans la bande de valence est **p-Br**, tandis que l'orbitale **p-In** et dans une moindre mesure l'orbitale **s-Ag** dominant la bande de conduction. La présence des états **Ag 4d** dans la bande de valence contribue à réduire la bande interdite et est en partie responsable de la bande interdite indirecte de ces phases.

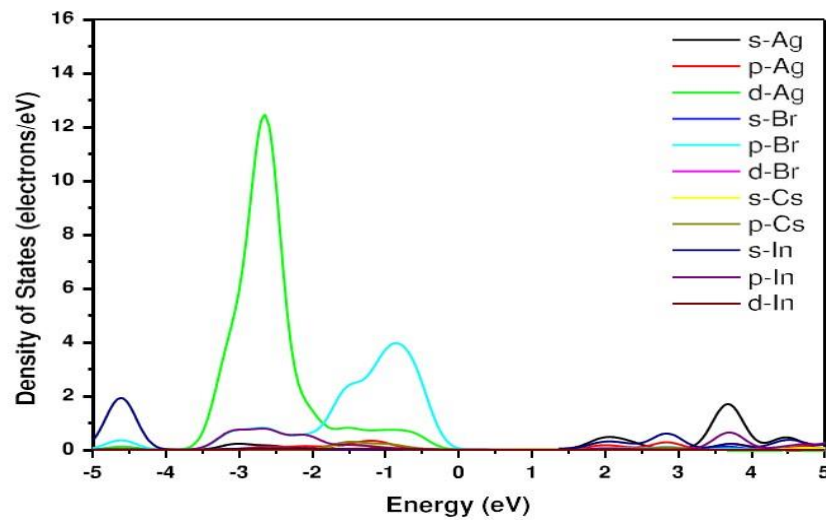


Figure II. 4 : Densité partielle des états (PDOS) de la pérovskite double cubique Cs₂AgInBr₆ [10].

II. 2. 3. Coefficient d'absorption

Le Cs₂AgInBr₆ est un composé connu sous le nom de "halogénure d'alliage à base d'argent", souvent étudié dans le contexte des matériaux semi-conducteurs et des dispositifs optoélectroniques. Concernant son absorption, cela se réfère généralement à la manière dont ce matériau absorbe la lumière dans une certaine gamme de longueurs d'onde.

Les propriétés d'absorption dépendent de la structure électronique du matériau et de ses interactions avec la lumière. Pour Cs₂AgInBr₆, les études montrent qu'il a des propriétés optiques intéressantes, souvent utilisées dans les cellules solaires, les détecteurs et autres applications optiques. Si tu cherches des informations spécifiques sur l'absorption de Cs₂AgInBr₆, comme ses caractéristiques spectrales ou son efficacité, n'hésite pas à préciser!

L'évolution du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie des photons incidents est représentée à la Figure II.5. Il est intéressant de noter que pour les énergies d'incidence des photons inférieures au seuil d'absorption fondamental, le coefficient d'absorption est presque nul avant d'augmenter en amplitude. Cela peut s'expliquer par une augmentation du nombre d'électrons ayant suffisamment d'énergie pour interagir avec les photons. L'amplitude du coefficient d'absorption optique est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. En ce qui concerne le matériau étudié, il présente une bonne absorption de la lumière dans la région du spectre visible. La Figure.II.5 montre que Cs₂AgInBr₆ présente

une très forte absorption optique dans la partie haute du spectre solaire, avec un coefficient d'absorption de l'ordre de 10^4 cm^{-1} .

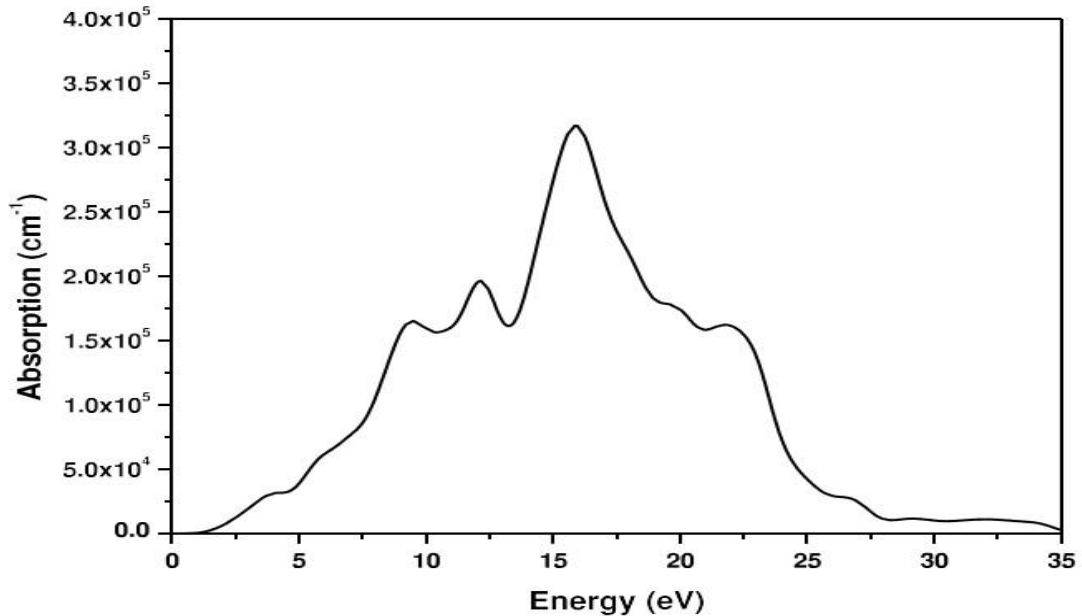


Figure II. 5 : Spectre du coefficient d'absorption de la pérovskite cubique double Cs₂AgInBr₆ [10].

II. 3. Propriétés de l'oxyde de Zinc (ZnO)

II. 3. 1. La structure l'oxyde de Zinc (ZnO)

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

Le ZnO de structure hexagonale compacte Wurtzite peut être décrit par l'alternance de deux réseaux de type hexagonal compact l'un de Zn²⁺ et l'autre de O²⁻ décalés d'un vecteur $u = 0,379 c$ (Figure.II.6). Les paramètres de la maille primitive du ZnO dans les conditions normales de température et de pression sont donnés par $a = 0,32498 \text{ nm}$ et $c = 0,52066 \text{ nm}$.

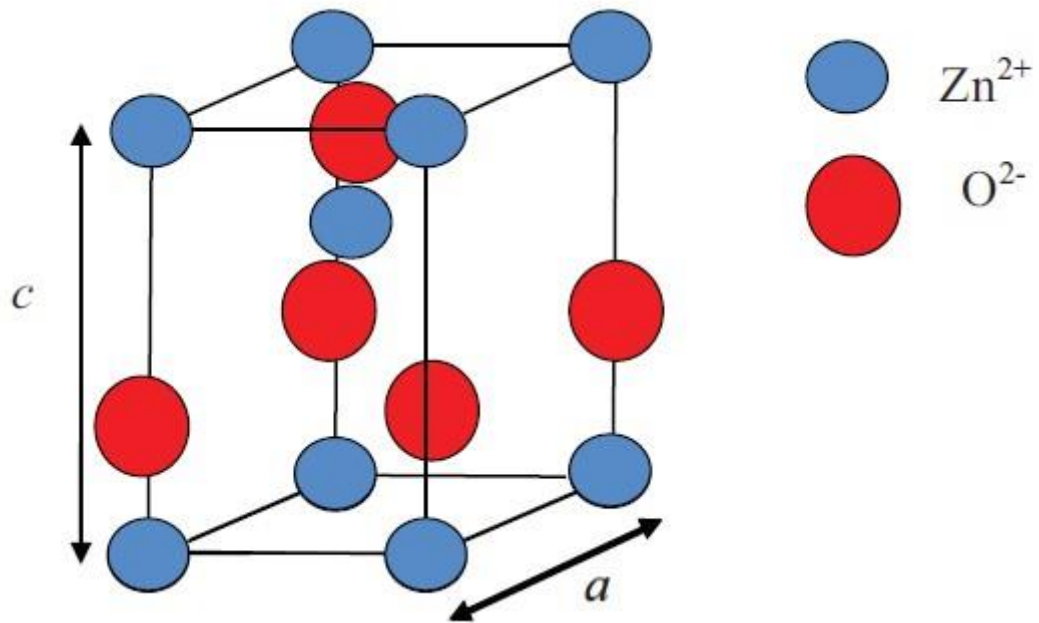


Figure II. 6 : Maille primitive de la phase Wurtzite du ZnO [11].

II. 3. 2. Propriétés électriques l'oxyde de Zinc (ZnO)

L'oxyde de zinc est un semi-conducteur de type II-VI à large bande interdite directe de 3,37 eV à température ambiante [12, 13]. Cette énergie, également appelée "gap" ou "bandgap", correspond à l'énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence (BV) à la bande de conduction (BC).

Le ZnO présente une conductivité électrique naturelle de type n qui est due à la présence des atomes de zinc interstitiels [14]. En faisant varier la valeur de la conductivité par des procédés de dopage, on peut faire passer le gap de 3,30 à 3,39 eV [15, 16]. Les dopants couramment utilisés pour le ZnO appartiennent généralement aux groupes III et IV du tableau de Mendeleïev. Dans ce cas, ils remplacent les atomes de zinc en occupant leurs sites atomiques. Le dopage peut également être réalisé en utilisant des éléments du groupe VII du tableau périodique des éléments. Dans ce cas, le ZnO serait dopé par la substitution des atomes d'oxygène.

II. 3. 3. Propriétés optiques l'oxyde de Zinc (ZnO)

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

En raison de l'anisotropie de sa structure cristalline hexagonale, la lumière se propageant à travers un cristal de ZnO sera soumise au phénomène de biréfringence optique. Dans ce cas, la lumière se propagera selon deux directions : elle se propagera le long de la

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

La Figure II.7 montre la dispersion des indices de réfraction de la lumière en fonction de la longueur d'onde [17].

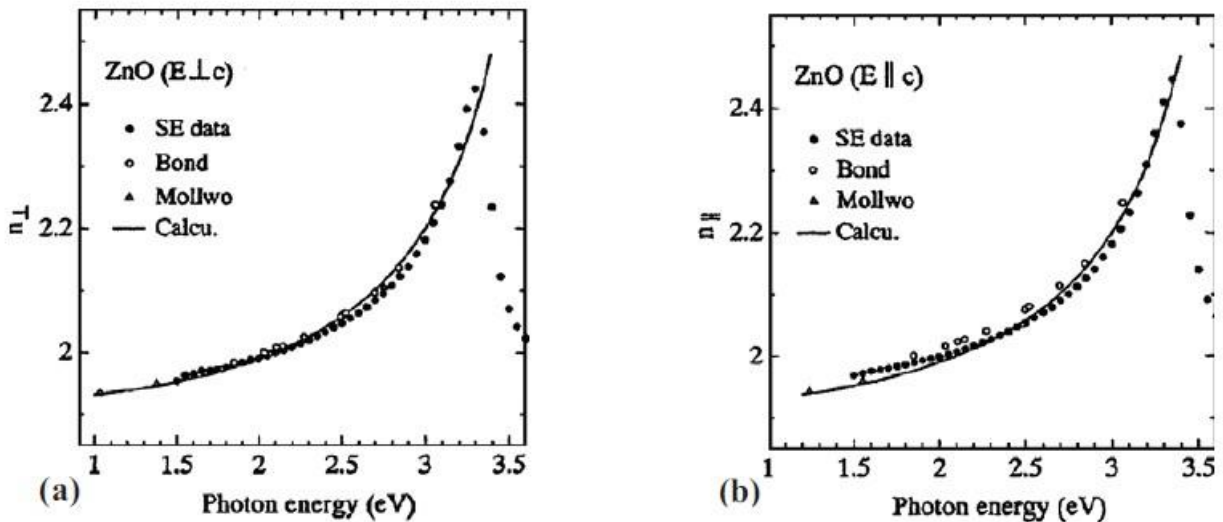


Figure II.7 : Dispersion des indices de réfraction n_o (a), n_e (b).

Le spectre de photoluminescence (PL) du ZnO présente plusieurs branches d'émission allant du proche UV (350 nm) au domaine du visible (400-700 nm). Il se caractérise par une forte énergie du premier et du deuxième excitons qui sont respectivement de 60 meV et de 15 meV

[1831], comparables à l'énergie de l'agitation thermique ambiante de 20 meV.

L'énergie du premier exciton du ZnO est largement supérieure à celle des autres matériaux semiconducteurs: ZnS (20 meV), GaN (21 meV) [32], Si (14,7 meV), AsGa (4,2 meV) [1933], ce qui le rend très prometteur pour les applications dans le domaine des lasers.

II. 4. Propriétés de poly (3-hexylthiophène) (P3HT)

Parmi les nombreux polymères π -conjugués, la famille des poly thiophènes est largement étudiée en raison de son utilisation dans la fabrication de dispositifs électroniques et optoélectroniques. Les polythiophènes sont le résultat de la réaction chimique de polymérisation du thiophène, qui est un hétérocycle sulfuré composé d'une chaîne fermée de cinq atomes, dont un atome de soufre. La Figure II.8 montre l'unité de répétition monomère du poly thiophène non substitué.

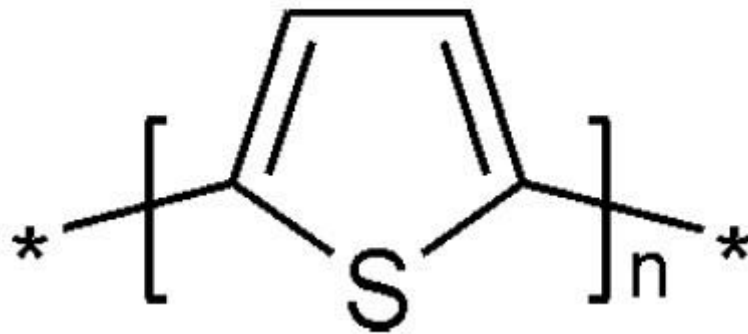


Figure II. 8 : Unité de répétition monomère de poly thiophène non substitué.

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

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

Le poly (3-hexylthiophène), noté aussi P3HT est chimiquement stable, il possède une bande interdite assez faible de l'ordre de 1,9 à 2eV et la mobilité des trous de ce matériau est de $0,1\text{cm}^2/\text{V.S}$ qui est relativement élevée. Au moment de la polymérisation du P3HT, le couplage de deux hexylthiophènes adjacents se produit entre les positions 2 et 5 [20]. On remarque trois sortes de couplages qui donnent lieu à trois différentes triades. L'assemblage de 3 monomères provoque la formation de quatre triades régio-isomères (figure II.9).

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

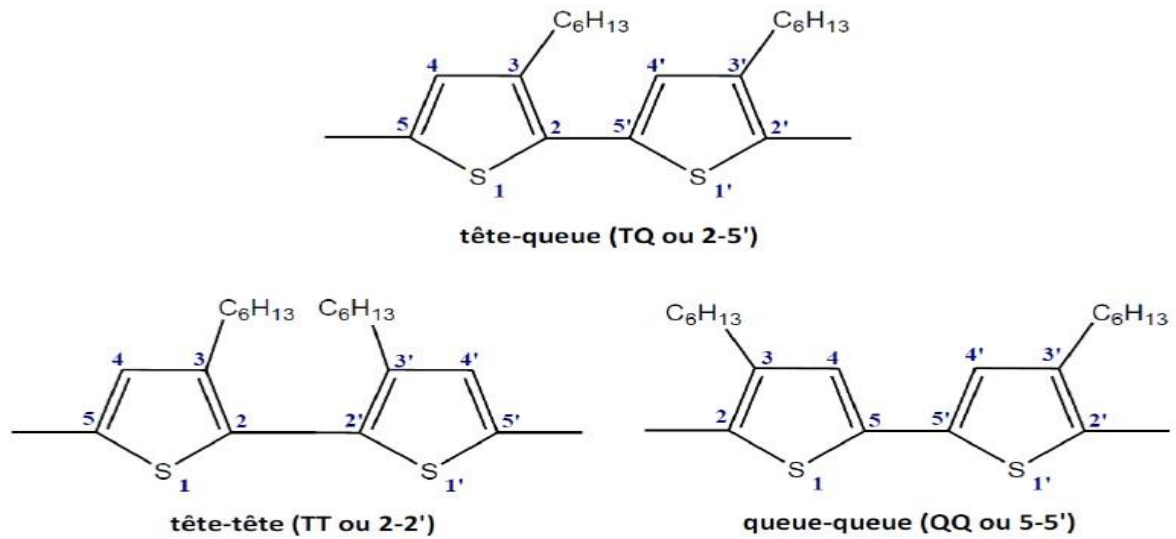


Figure II. 9 : Confirmation des triades à base de P3HT.

II. 4. 1. Propriétés optiques de poly (3-hexylthiophène) (P3HT)

Les synthèses de polymères π -conjugués étendus tels que le P3HT sont à l'origine de l'une de leurs propriétés les plus intéressantes, à savoir leurs propriétés optiques. La conjugaison repose sur la superposition des orbitales π des cycles aromatiques, ce qui nécessite que les cycles thiophènes soient coplanaires les uns par rapport aux autres (voir Figure II.10).

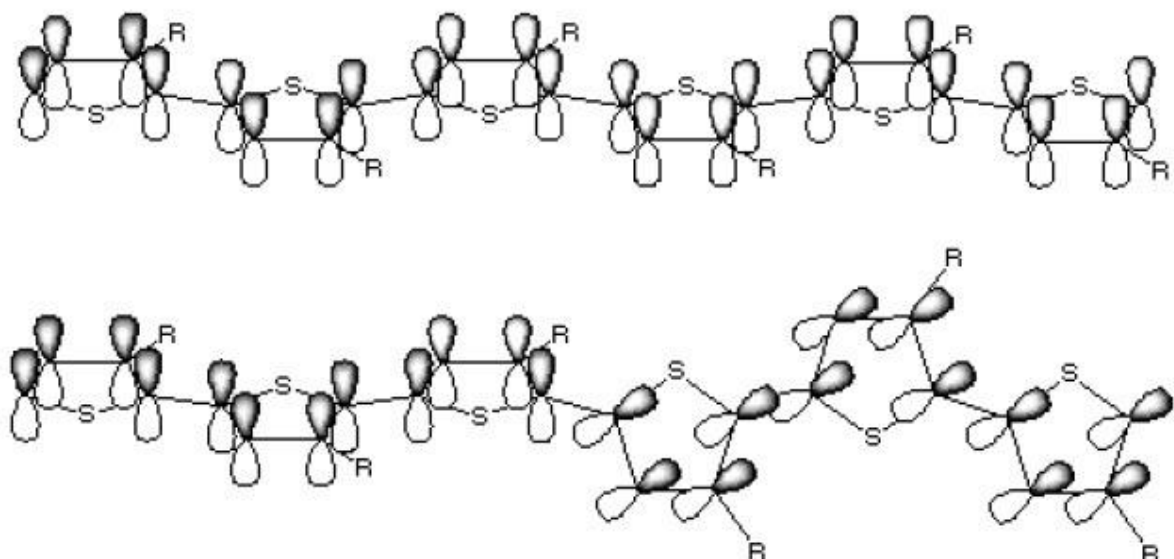


Figure II.10 : Orbitales π conjuguées d'un poly thiophène coplanaire et substituée.

Le nombre de cycles détermine la longueur de conjugaison : plus celle-ci est grande, plus l'écart entre les niveaux d'énergie est faible et plus la longueur d'onde d'absorption est importante. L'absorption se décale vers le rouge du spectre lumineux lorsque la longueur de conjugaison augmente. La Figure II.11 illustre une forte absorbance de la couche mince de P3HT-RR, entre 380 et 650 nm.

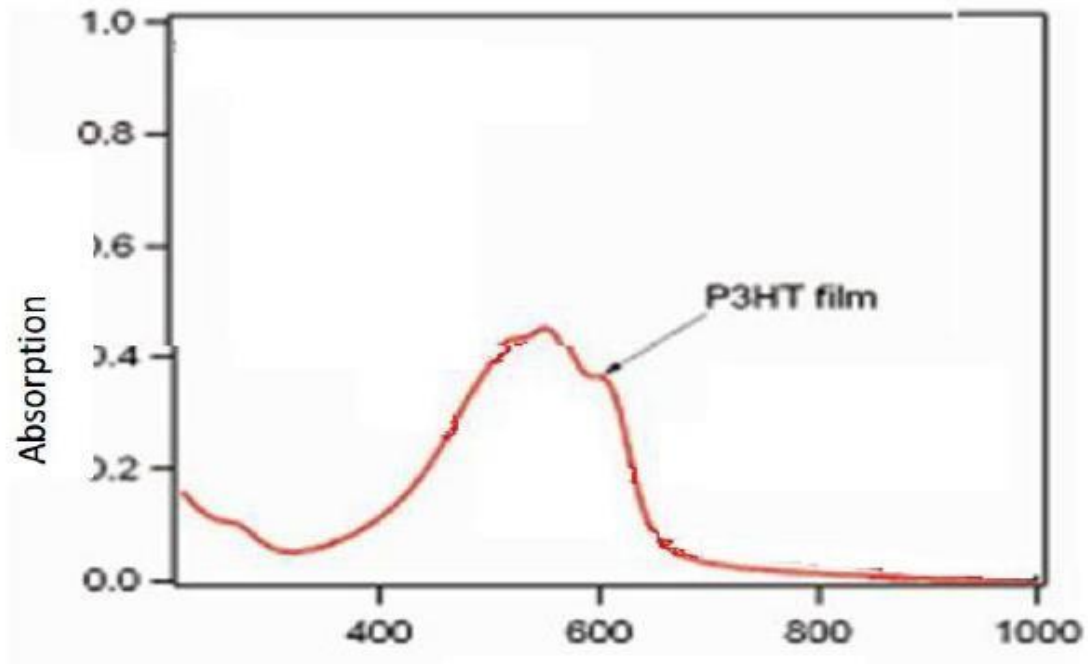


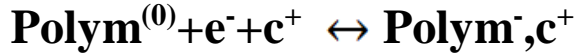
Figure II. 11 : Coefficient d'absorption de P3HT en fonction de l'énergie des photons absorbés.

II. 4. 2. Propriétés électrochimiques poly (3-hexylthiophène) (P3HT)

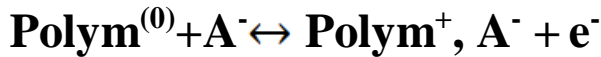
La principale caractéristique des polythiophènes est leur capacité à adopter différents états électroniques en fonction du potentiel auquel ils sont soumis. À l'état neutre, ils présentent des propriétés isolantes avec une conductivité de l'ordre de $\sigma \approx 10^{-11} \text{S.cm}^{-1}$. Une fois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

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

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



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



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

II. 5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude bibliographique sur les propriétés fondamentales du Matériaux ZnO, Cs2AgInBr6, P3HT, à savoir sa structure cristalline, son diagramme d'équilibre et ses propriétés électrique et optiques. Nous avons ensuite donné des brèves définitions des différents défauts ponctuels (lacunes, atomes interstitiels, défauts substitutionnels, impuretés, etc.) et des défauts cristallins (dislocations, défauts d'empilement, macles, etc.).

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

II. 6. 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] McCall, K. M., Stoumpos, C. C., Kostina, S. S., Kanatzidis, M. G., & Wessels, B. W. (2017). Strong electron-phonon coupling and self-trapped excitons in the halide perovskite Cs₂AgInCl₆. *Chemistry of Materials*, 29(10), 4129-4145. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b00904.
- [6] Volonakis, G., Haghghirad, A. A., Milot, R. L., Sio, W. H., Filip, M. R., Weller, M. T., ... & Giustino, F. (2017). Cs₂AgInCl₆: A New Lead-Free Halide Double Perovskite with Direct Band Gap. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(4), 772-778. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b02685.
- [7] Bekenstein, Y., Dahl, J. C., Huang, J., Osowiecki, W. T., Swabeck, J. K., Chan, E. M., & Alivisatos, A. P. (2018). The making and breaking of lead-free double perovskite nanocrystals of cesium silver–bismuth halide compositions. *Nano Letters*, 18(6), 3502-3508. DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b00545.
- [8] Xiao, Z., & Meng, W. (2016). Thermodynamic Stability and Defect Chemistry of Bismuth-Based Lead-Free Double Perovskites. *Chemistry of Materials*, 28(24), 8619-8627. DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b03993.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] Özgür, Ü., Alivov, Y. I., Liu, C., Teke, A., Reshchikov, M. A., Doğan, S., ... & Morkoç,

- H. (2005). A comprehensive review of ZnO materials and devices. *Journal of Applied Physics*, 98(4), 041301. DOI: 10.1063/1.1992666.
- [12]. R.T. Girard, O. Tjernberg, G. Chiaia, S. Söderholm, U.O. Karlsson, C. Wigren, H. Nylen, I. Lindau, *Surface Science*, **373** (1997) 409.
- [13]. K. Ozawa, K. Sawada, Y. Shirotori, K. Edamoto, M. Nakatake, *Physical Review B*, **68** (2003) 125417.
- [14]. T. Minami, H. Sato, H. Nanto, and S. Takata, *Japanese Journal of Applied Physics*, **25** (1986) 776-779.
- [15]. M. Rebien, W. Henrion, M. Bär, Ch.-H. Fischer, *Applied Physics. Letters*, **80** (2002) 3518.
- [16]. F. Ng-Cheng-Chin, M. Roslin, Z.H. Gu. T.Z. Fahidy, *Journal of Physics D: Applied Physics*, **31** (1998) 19.
- [17]. Ü. Özgür, Ya. I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S Do! An, V. Avutin, S.-J. Cho, and H. Morkoç, *Journal of Applied Physics*, **98** (2005) 041301.
- [18] E. Baur, J. Tobler, *Zeitschrift für Elektrochemie* **6** (1933) 169.
- [19]. B. Lin, Z Fu, Y. Jia, *Applied Physics Letters* **79** (2001) 943.
- [20]. C. Kittel, *Physique de l'état solide 5e édition*. Paris : Dunod Université, Bordas (1983) ISBN 2-04-010611-1.
- [21]. H. Sirrighaus, P.J. Brown, R.H. Friend, M.M. Nielsen, K. Bechgaard, B.M.W. Langeveld-Voss, A.J.H. Spiering, R.A.J. Janssen, E.W. Meijer, P. Herwing, Two dimensional charge transport in self-organized, high-mobility conjugated polymers. *Nature* 685-688, octobre 1999..

CHAPITRE III

Logiciel de simulation AMPS-1D

III.1. Introduction

Pour rendre les systèmes photovoltaïques économiquement viables pour des applications terrestres à grande échelle, il est nécessaire de produire des cellules solaires à haut rendement, fabriquées à moindre coût et à partir de matériaux facilement disponibles. L'objectif principal est donc d'optimiser le rendement de conversion de ces cellules au maximum. Il est essentiel d'analyser et de comprendre en profondeur les différents facteurs limitant la performance des cellules. Cela peut être réalisé de manière optimale grâce à un modèle électro-optique capable d'analyser les propriétés de transport en fonction de la position dans des dispositifs utilisant de tels matériaux absorbants. Un modèle de simulation unidimensionnel a été développé à cet effet.

III.2. Présentation du simulateur AMPS-1D

III. 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 éclairnement ou les deux à la fois[1].

III. 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 [1-14]:

- Un traitement de contact qui permet à l'émission thermoïonique et à la recombinaison d'avoir lieu aux contacts de dispositif.
- 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.

- Les deux recombinaisons: bande- à -bande et Shockley-Read-Hall.
- La statistique complète de Fermi-Dirac et pas seulement celle de Boltzmann.
- Un modèle de la charge piégée qui explique la charge dans n'importe quelle distribution d'état du gap.
- La mobilité des porteurs qui peut varier avec la position.
- Les affinités des électrons et des trous qui peuvent varier avec la position.
- 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.
- La capacité d'analyser des structures du dispositif fabriqué en utilisant les matériaux monocristal, les poly cristallins 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]:

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

Où Ψ désigne le potentiel électrostatique, n est la concentration des électrons libres, p la concentration des trous libres, le N_t la concentration des électrons piégés, p_t la concentration des trous piégés, N_D^+ la concentration ionisée de donneur et N_A^- 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 Ψ est défini pour une particule positive d'unité, l'utilisation de Ψ dans l'équation ci-dessus peut être inconfortable. Le niveau de vide E_{VL} 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 [32]. Son dérivé est donc proportionnel au fait de champ électrostatique ξ , donc

on a :

$$\xi = \frac{d\Psi}{dx}$$

AMPS choisit toujours une référence pour que \square et non \square' 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 Ψ de vide mesuré en E_v . Ceci donne :

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

L'équation (III-2) est la forme de l'équation de Poisson que l'AMPS utilise.

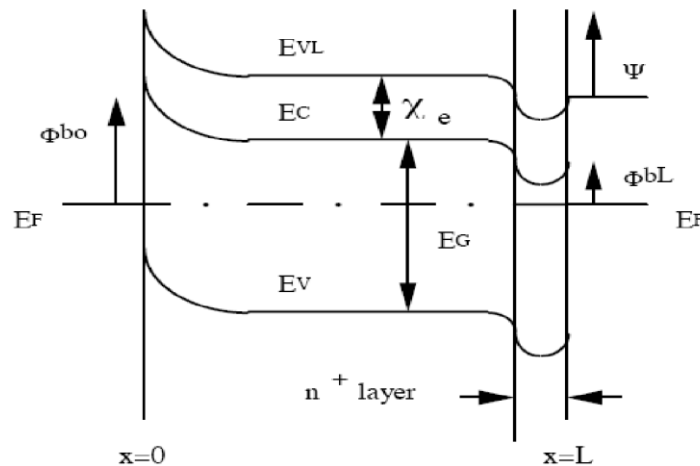


Figure III.1 : Bande de diagramme énergétique de la barrière de schottky a l'équilibre Thermodynamique.

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_D^+ , et N_A^- présenté dans l'équation (III. 2).

III. 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

$$\frac{1}{d} \left(\frac{dj_n}{dx} \right) = -G_{op} (x) + R(x) \dots\dots\dots(III.3)$$

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

$$\frac{1}{d} \left(\frac{dj_p}{dx} \right) = -G_{op} (x) + R(x) \dots\dots\dots(III.4)$$

Où 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.

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 [2]:

$$j_n(x) = q\mu_n n \left(\frac{dEf_n}{dx} \right) \dots\dots\dots(III.5)$$

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]:

$$j_p(x) = q\mu_p n \left(\frac{dEf_p}{dx} \right) \dots\dots\dots(III.6)$$

Il est important de noter que les équations (IV. 5) et (IV. 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 [2]. 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.

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). 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 :

$$R(x) = R_D(x) + R_I(x) \dots\dots\dots (III. 7)$$

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 devient 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 NewtonRaphson 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 III-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)

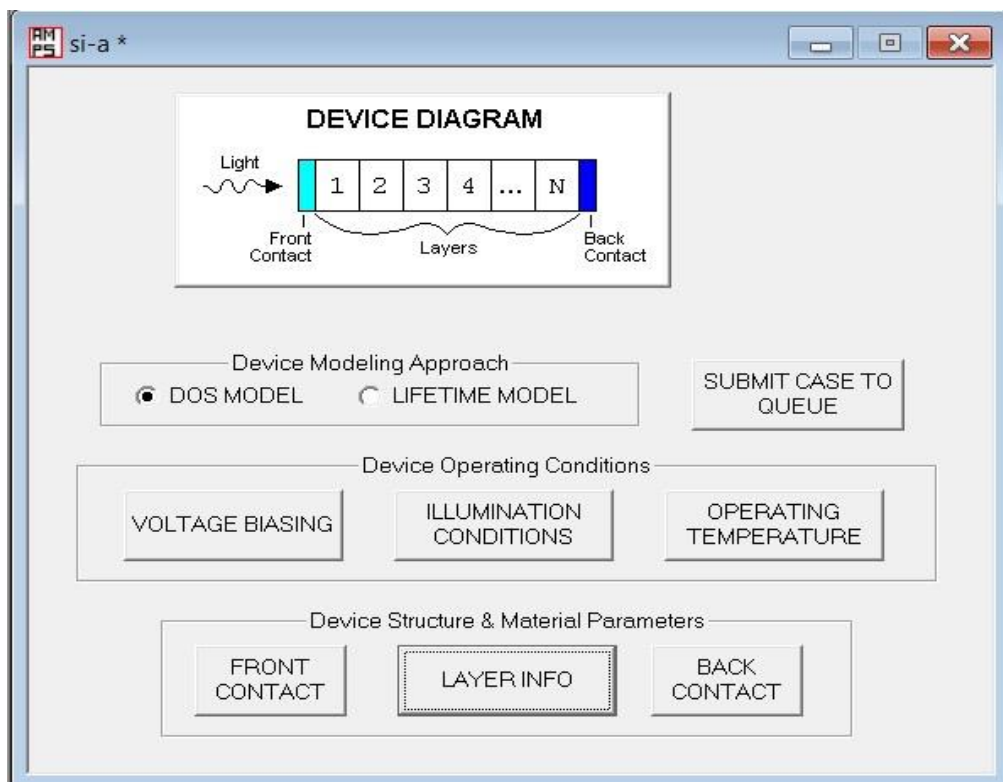


Figure III.2 : différentes fenêtres pour introduire les paramètres [15].

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 = ϕ_{b0} = EC - EF pour x=0 (eV)
- PHIBL = ϕ_{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.

III. 2. 6. 2. Paramètres qui s'appliquent à une région particulière

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

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

1. Propriétés du matériau :

- a) EPS : la constante diélectrique ϵ_r à la température T tels que $\epsilon = \epsilon_r * \epsilon_o$ ou ϵ_o est la constante diélectrique du semi-conducteur
- b) NC : densité d'états effective des électrons NC (cm^{-3}) dans la bande de conduction à la température T
- c) NV : densité d'états effective des trous NV (cm^{-3}) dans la bande de valence à la température T
- d) EG: largeur de la bande interdite (Ev) a la température T
- e) EGOP : largeur de la bande interdite optique
- f) CHI : l'affinité d'électron
- g) MUN : mobilité des électrons ($\text{cm}^2/\text{V}.\text{sec}$)
- h) MUP : mobilité des trous ($\text{cm}^2/\text{V}.\text{sec}$)

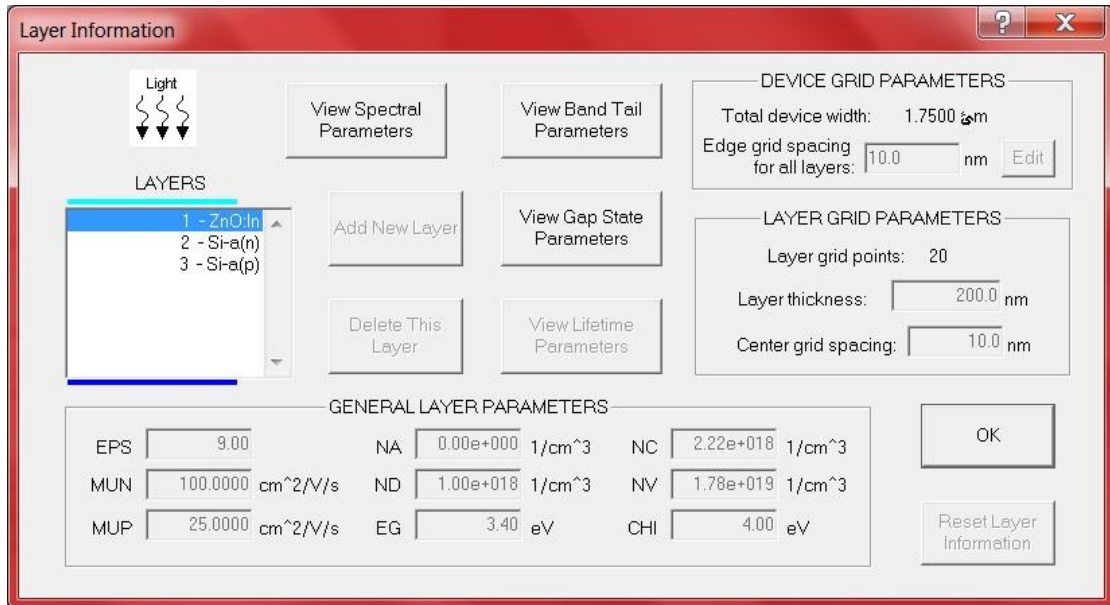


Figure III. 3 : Différents paramètres pour la couche a-Si [15].

3. États de défaut discret :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

b. Concentration du niveau accepteur et énergies d'ionisation :

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

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

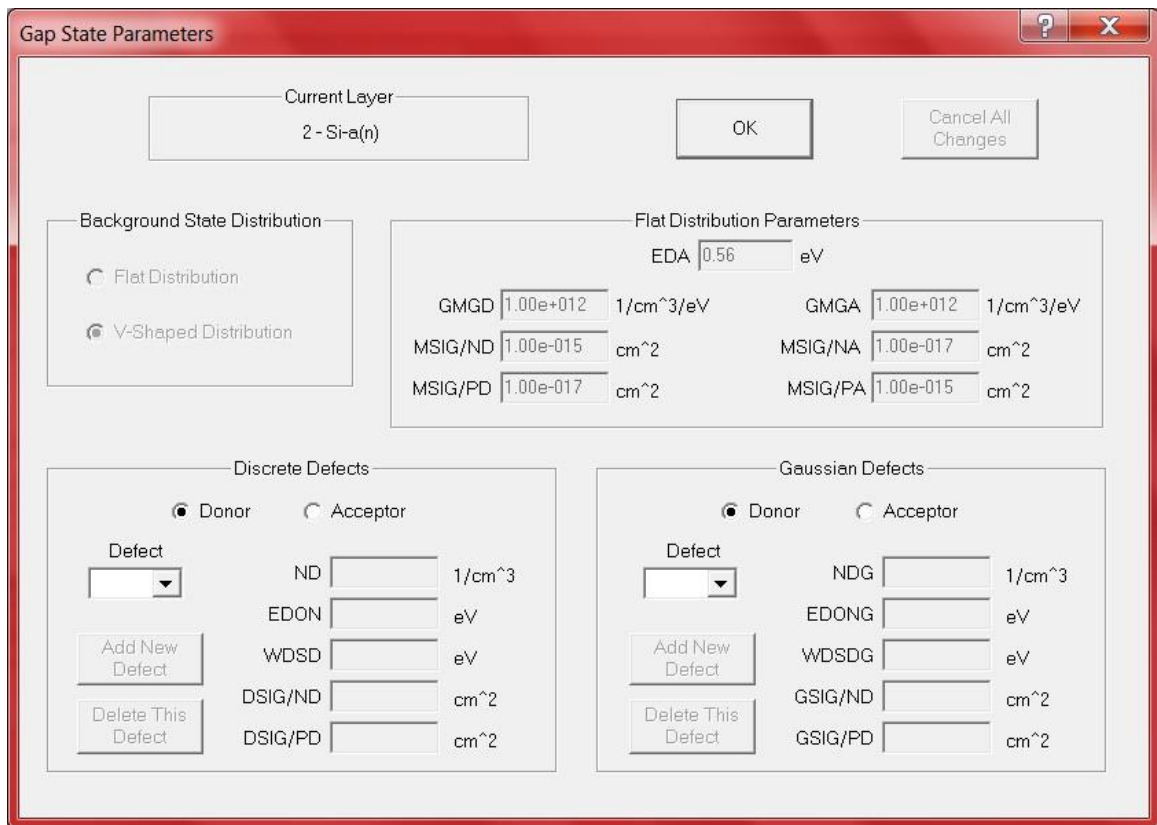


Figure III. 4 : Défauts donneurs discrets et continues pour la couche a-Si[15].

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

a. Si forme en V, donc :

- $GDO =$ prefacteur ($1/cm^{-3}/eV$) dans l' equation: $gd = G_{do} \exp(E - E_v/E_d)$
- $GAO =$ Prefacteur ($1/cm^{-3}/eV$) dans l' equation: $ga = G_{ao} \exp(E - E_c/E_a)$;
- $ED =$ énergie Caractéristique E_d (eV) pour donneur dans les queues

- EA = énergie Caractéristique E_a (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 à partir de E_v .
- 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 $i = DLVSG \square 2$ niveaux donneurs Gaussien.

- 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)

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

- $NAG(i)$ = densité d'état accepteur Gaussien ($1/cm^3$) pour le $i^{ème}$ accepteur Gaussien

- $EACPG(i)$ = énergie accepteur Gaussien au

sommet (eV) mesuré positif à partir de E_c pour la $i^{ème}$ accepteur Gaussien.

- $WDSAG(i)$ = écart standard (eV) du $i^{ème}$ niveau accepteur Gaussien

- $GSIG/NA(i)$ = section droite de capture du $i^{ème}$ état donneur Gaussien pour les électrons (cm^2).

- $GSIG/PA(I)^*$ = section droite de capture du

$i^{ème}$ état donneur Gaussien pour les trous (cm^2).

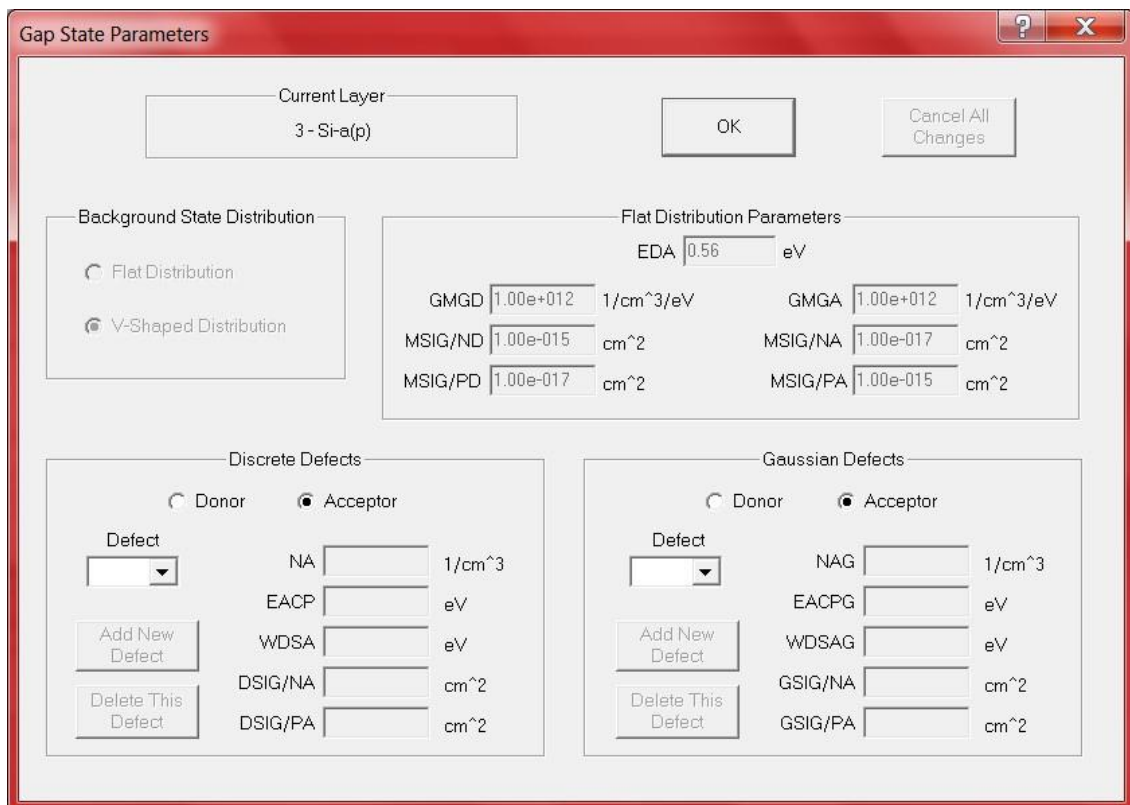


Figure III. 5 : Défauts accepteur discrets et continues pour la couche a-Si.

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** (μm).
2. Le **FLUX** incident à cette longueur d'onde ($1/ cm^2/s$).
3. Le coefficient d'absorption **ALFA** ($1/ cm^2$) à cette longueur d'ondes dans chaque région de la structure [32].

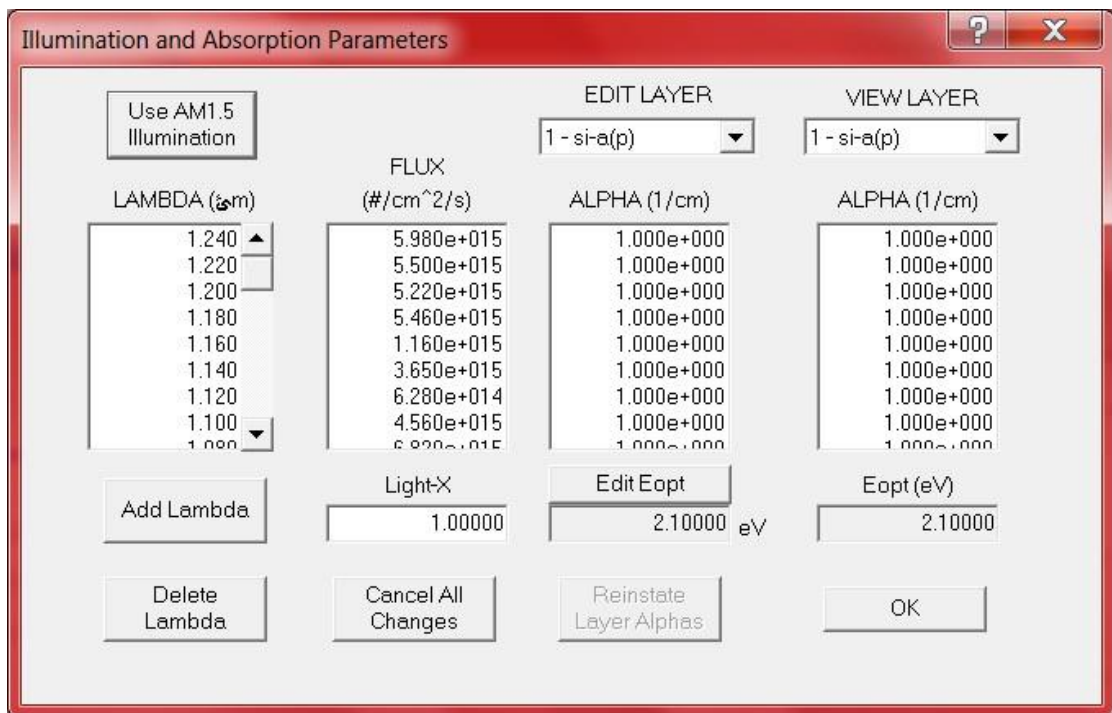


Figure III. 6 : coefficients d'absorption pour la couche a-Si [15].

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 :

E_c : la bande de conduction

E_f : niveau de fermi

E_v : la bande de valence

E_l : les électrons libres

H_l : les trous libres

J_d : caractéristique I-V à l'obscurité,

J_l : caractéristique I-V à la lumière

J_n : courant d'électrons

J_p : courant de trous

R_a : la recombinaison d'accepteurs

R_d : la recombinaison de donneurs

R_t : la recombinaison totale

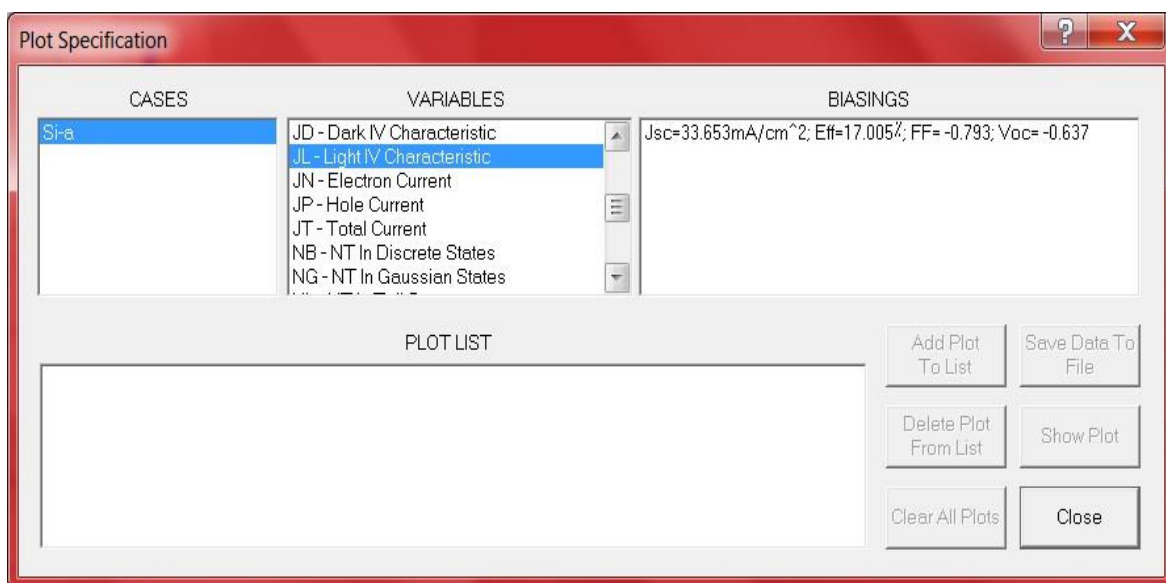


Figure III. 7 : le panneau des courbes

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 de la 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 sa 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. References

- [1] 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
Simulation Program for the Analysis of Microelectronic and Photonic Structures", The
Pennsylvania State University (1997).
- [2] P.J. MCELheny, J. Arch, H.S. Lin, S.J. Fonash, J." Range of validity of the surface
photovoltage diffusion length measurement: A computer simulation", of Appl. Phys., 64
(3), 1254, (1988).
- [3] P. Leblan, J. Perrin," Numerical modeling of the optical properties of hydrogenated
amorphous-silicon-based p-i-n solar cells deposited on rough transparent conducting
oxide Substrates", J. Appl. Phys. 75 , 1074,(1994).
- [4] P. Chatterjee," Computer modeling of the dependence of the J-V characteristics of a-
Si:H solar cells on the front contact barrier height and gap state density", Technical,
Digest of International PVSEC-6, New Delhi, India, Feb. 10-14 ,pp 329-334,(1992).
- [5] P. Chatterjee , " Photovoltaic performance of a-Si:H homo-junction p-i-n solar cells:
A computer simulation study", Journal of Applied Physics, Vol 76 No.2, pp. 1301-
1313, ISSN 0021-8979, (1994).
- [6] N. Palit, "Energy Research, Indian Association for the Cultivation of Sciences", Ph.D.
Thesis ,India, (2000).
- [7] Pierz, K., Fuhs, W. and Mell, H., Philos. Mag. B 63.123,(1991).
- [8] M. Gunes, C.T. Malone, J.L. Nicque, S.J. Fonash and C.R. Wronski,"Proceeding of the
6th International PVSEC", New Delhi, India, Feb.10-14, edited by B.K. Das and
S.N.Singh, (1992).
- [9] P. Chatterjee, "A computer analysis of the effect of a wide-band-gap emitter layer on
the Performance of a-Si:H- based hetero-junction solar cells", Journal of Applied
Physics, Vol 79, No 9, pp. 7339-7347, ISSN (print) 0021-8979,(1996).
- [10] W. Shockley and W. T. Read Statistics of the recombination of holes and electrons.
Physical Review 87 ,pp.835-842,(1952).
- [11] R. Legros, "Les semi-conducteurs (physique des semi-conducteurs technologie-diodes)
", Tome 1, éditions Eyrolles, paris (1974).

- [13] P. Chatterjee, F. Leblanc, M. Favre, and J. Perrin "A global electrical-optical Model of thin film solar cells on textured substrates", Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 426 ,pp. 593-598,(1996).
- [14] N. Palit, P. Chatterjee," computer analysis of a-Si :H based double junction solar cells" Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, volume 467, India,(1997).
- [15] AMPS 1D site web, université de Pennsylvanie : <http://www.emprl.psu.edu/amps>.
- .

CHAPITRE IV

Résultats et Discussion de simulation

IV. 1. Introduction

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 Cs₂AgInBr₆ [1].

Ce chapitre représente la partie la plus importante de notre travail, il est consacré à la simulation numérique de la cellule solaire à hétérojonction (Glass /ITO /ZnO /Cs₂AgInBr₆ /P3HT /métal) par l'utilisation de logiciel de simulation AMPS-1D.

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 l'oxyde de zinc (ZnO) a été utilisé comme matériau de transport d'électrons, de la pérovskite (Cs₂AgInBr₆) qui a été utilisé comme matériau absorbant et le P3HT (poly (3-hexylthiophène)) comme un matériau de transport de trous. (Voir Figure IV.1).



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

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 [1- 14] :

Parameters		ZnO (n)	Cs2AgInBr6(I)	P3HT (p)
Thickness (nm)	L	100	200-1000	200
Dielectric constant	EPS	9	4.37	3.4
Electron mobility (cm²V⁻¹s⁻¹)	MUN	100	89.4	10 ⁻³
Hole mobility (Cm²V⁻¹s⁻¹)	MUP	25	3.3	10-3
Effective conduction band density (cm⁻³)	NC	2.2×10 ¹⁸	1.26 × 10 ¹⁸	2.2×10 ¹⁸
Effective valence band density (cm⁻³)	Nv	1.78×10 ¹⁹	1.73 × 10 ¹⁸	1.78×10 ¹⁹
Acceptor concentration (cm⁻³)	NA	0	1 × 10 ¹⁵	1 × 10 ¹⁵
Donor concentration (cm⁻³)	ND	1 × 10 ¹⁸	1 × 10 ¹⁵	0
Band gap (eV)	EG	3.37	1.47	2
Electron affinity (eV)	CHI	4	4.1	3.8
Gaussian density of states (cm⁻³)	NDG, NAG	1× 10 ¹⁷	1× 10 ¹⁵	6×10 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, densité de défaut, température....

IV. 3. 1. Caractéristique courant tension

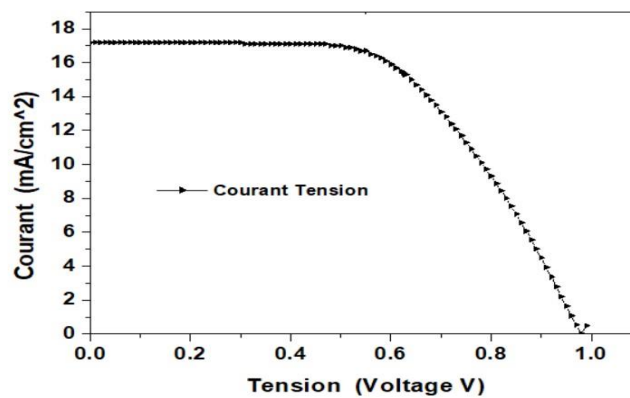


Figure IV. 2 : Caractéristique Courant-Tension

IV. 3. 2. Impact de l'épaisseur sur les performances (JSC, Eff, FF, Voc)

IV. 3. 2. 1. Effet de l'épaisseur de la couche Cs₂AgInBr₆

* Le Cs₂AgInBr₆, un composé de pérovskite double, a attiré un intérêt significatif en raison de ses propriétés avantageuses et de son potentiel d'application dans le domaine des cellules solaires. Il appartient à la catégorie des pérovskites doubles à base d'halogénures et présente une structure cristalline composée de césium (Cs), d'argent (Ag), d'indium (In) et de brome (Br).

La Figure IV.3 présente la variation des paramètres photovoltaïques (VOC, J_{SC}, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante Cs₂AgInBr₆. Lorsque l'épaisseur de cette couche varie entre 200 et 1000 nm, on constate une augmentation du courant J_{SC} de 15,037 à 18,637 mA/cm². Cependant, la tension VOC diminue de 1,025 à 0,97 Volt. D'autre part, le facteur de forme FF diminue de 0,612 à 0,53 quand l'épaisseur augmente. Concernant le rendement de conversion Eff, il subit une augmentation de 9,424 % à 9,571 % lorsque l'épaisseur de la couche active (pérovskite) varie entre 200 et 700 nm, puis diminue au-delà. On remarque que pour une épaisseur optimale de 700 nm, le rendement de conversion Eff tend vers une valeur maximale de 9,615 %. Cette valeur sera utilisée, par la suite, dans le reste de nos calculs.

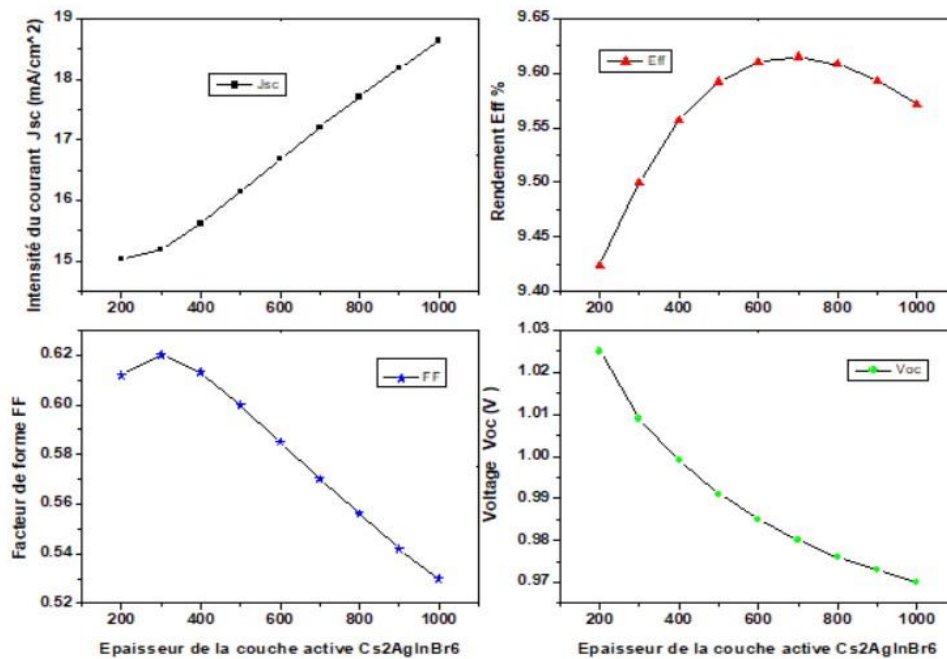


Figure IV. 3 : Variation du paramètre photovoltaïque (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche Cs₂AgInBr₆.

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

V_{oc} (Volt)	J_{sc} (mA/cm ²)	FF (%)	Eff (%)
0.98	17.206	0.57	9.615

Tableau IV.2 : Paramètres photovoltaïques obtenues de la cellule supérieure à base de Pérovskite Cs₂AgInBr₆.

IV. 3. 2. 2. Effet de l'épaisseur de la couche P3HT

*Le P3HT : poly(3-hexylthiophène), un polymère semi-conducteur de type p (donneur d'électrons). Structurellement, il appartient aux poly thiophènes et est activement étudié dans le cadre de la conception de diodes électroluminescentes organiques³ et de cellules photovoltaïques en polymères performantes en mélangeant le P3HT avec un accepteur d'électrons pour avoir la conversion photovoltaïque, notamment avec le PCBM (matériau de type n)⁴, des nanotubes de carbone ou des nanoparticules métalliques.

La Figure IV.4 présente la variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche P3HT. Lorsque l'épaisseur de cette couche varie entre 150 et 350 nm, on constate une augmentation du courant J_{sc} et du voltage V_{oc} . Cependant, le facteur de forme (FF) augmente jusqu'à une épaisseur de 200 à 250 nm, puis diminue au-delà. D'autre part, concernant le rendement de conversion (Eff), il subit une augmentation jusqu'à 250 nm, puis diminue au-delà.

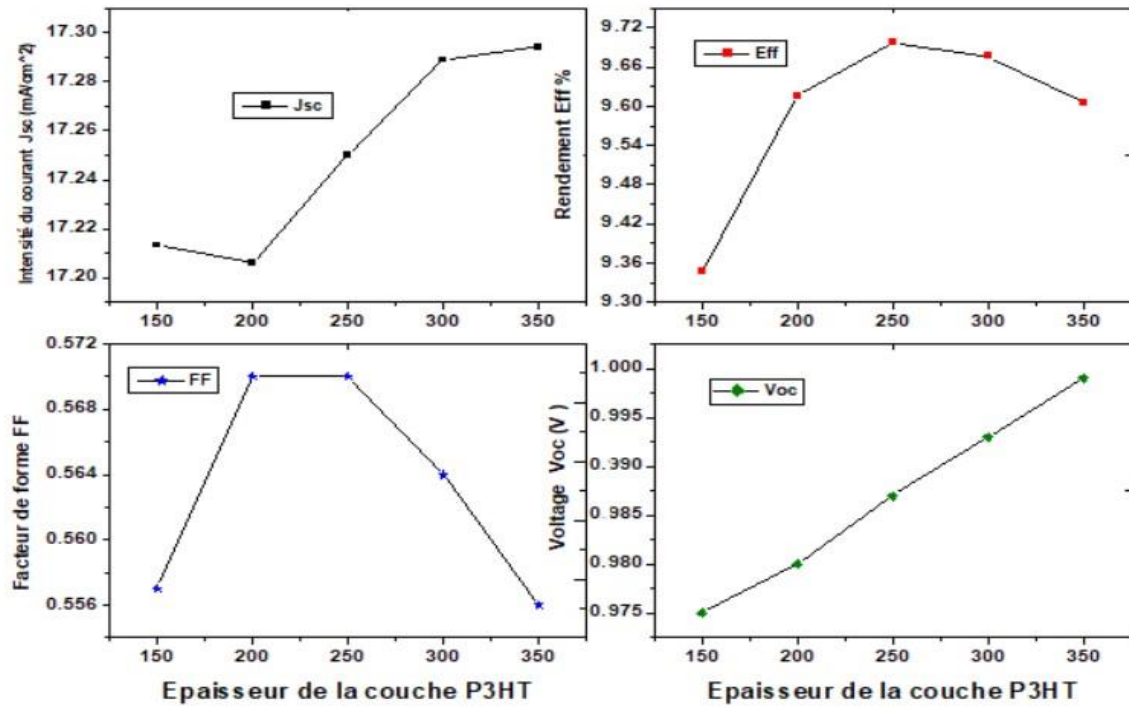


Figure IV.4: Variation du paramètre photovoltaïque (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche P3HT.

IV. 3. 2. 3. Effet de l'épaisseur de la couche ZnO

*Oxyde de zinc ZnO : L'oxyde de zinc (ZnO) est un matériau faisant partie de la famille des oxydes transparents conducteurs (TCO). La non-toxicité et l'abondance sur la terre de ce composant font de lui un candidat idéal comme film fenêtre ou contact électrique transparent pour les cellules solaires en couches minces.

La Figure IV.5 présente la variation des paramètres photovoltaïques (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche ZnO. Lorsque l'épaisseur de cette couche varie entre 50 et 100 nm, on constate une diminution du courant J_{SC} et du rendement Eff. Cependant, la tension V_{OC} et le facteur de forme (FF) restent constants.

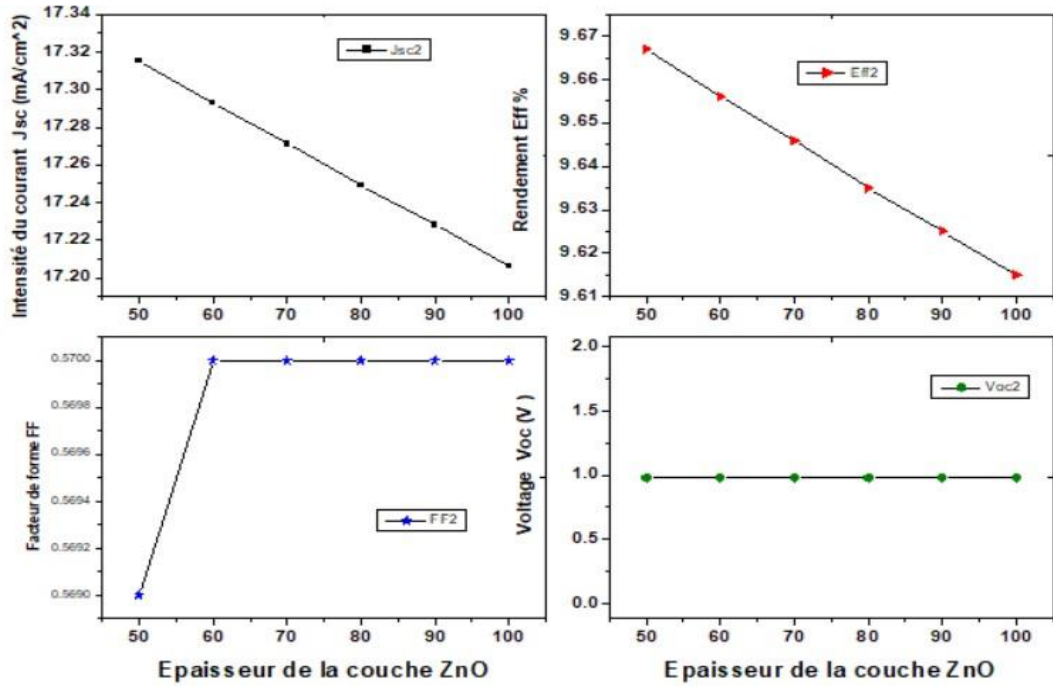


Figure IV. 5 : Variation du paramètre photovoltaïque (VOC, JSC, FF et Eff) en fonction de l'épaisseur de la couche ZnO.

IV. 3. 3. Effet de la densité des défauts (Cs2AgInBr6, P3HT) sur le rendement.

La Figure IV.6 présente la variation de rendement Eff en fonction de la densité des défauts. Lorsque la densité des défauts augmente on constate une diminution du courant rendement Eff.

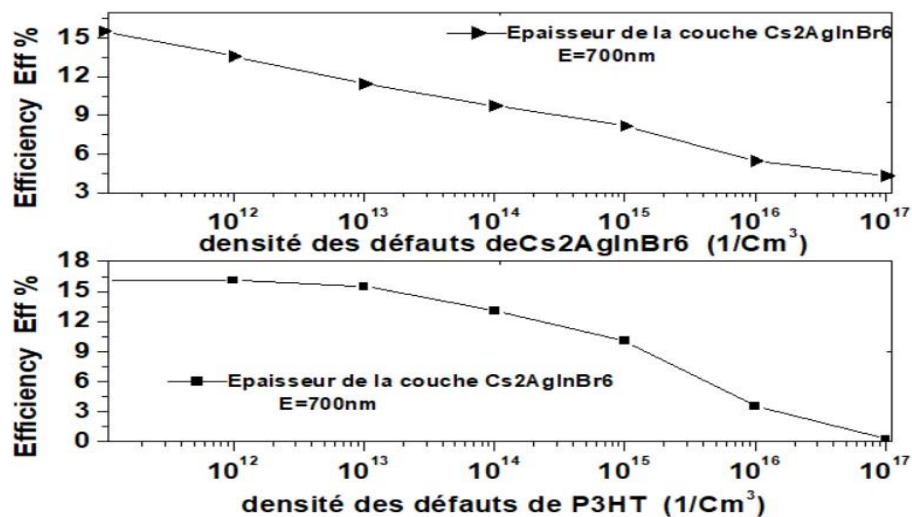


Figure IV. 6 : Variation du rendement en fonction de la densité de défaut pour les couches (Cs2AgInBr6, P3HT)

IV.3. 4. Effet de la température sur le rendement

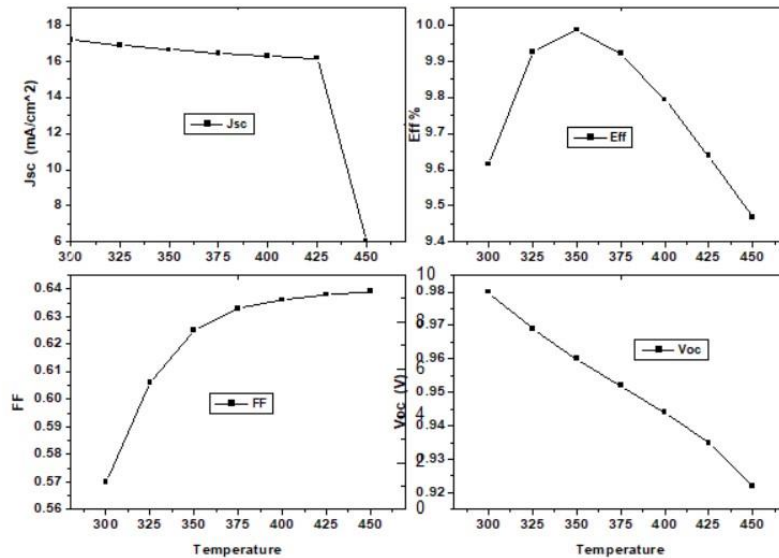


Figure IV. 7 : Effet de la température sur les paramètres caractéristiques (JSC, Eff, FF, VOC) de la Cellule.

Nous analysons les effets des variations de température entre 300 et 450 K sur les paramètres caractéristiques (JSC, Eff, FF et VOC) d'une cellule solaire à pérovskite double avec une épaisseur optimale de 700 nm. Il est observé que l'efficacité (Eff) de la pérovskite augmente jusqu'à 350 K, puis diminue au-delà, comme illustré dans la figure 7(a). À mesure que la température augmente, la densité de courant de court-circuit (JSC) et la tension en circuit ouvert (VOC) diminuent très lentement, comme le montrent les figures 7(b) et 7(d), tandis que le facteur de remplissage (FF) augmente avec l'élévation de la température.

IV.4 Conclusion

Nous avons d'abord examiné l'effet des variations d'épaisseur sur les indicateurs de performance des cellules solaires (JSC, Eff, FF et VOC), leur comportement (J-V), l'efficacité quantique (EQE) et la densité de défauts à travers les différentes couches (Cs₂AgBiBr₆, P3HT et ZnO). Ensuite, nous avons analysé l'impact des variations de température sur ces mêmes indicateurs de performance.

Dans ce travail, avec une épaisseur optimale de la couche Cs₂AgInBr₆ de 700 nm, nos résultats révèlent une efficacité maximale du dispositif (Eff) de 9,615 % (avec VOC = 0,98 V, JSC = 17,206 mA/cm² et FF = 57 %).

Les résultats de la modélisation montrent que l'efficacité diminue avec l'augmentation de la densité des défauts dans la couche de pérovskite double. Une diminution similaire de

l'efficacité est également observée dans les couches ETL et HTL lorsque la densité des défauts augmente. Enfin, il est démontré que la cellule photovoltaïque proposée présente une haute efficacité à la température entre 350 K. Les résultats de l'étude pourraient contribuer à l'avancement de cellules solaires à pérovskite plus fiables et efficaces.

IV.5. 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] Ahmmed S., Aktar A., Rahman Md. F., Hossain J., Ismail A. B. Md., "A Numerical Simulation of High Efficiency CdS/CdTe Based Solar Cell Using NiO HTL and ZnO, TCO", *Optic- International Journal for Light and Electron Optics*, 223(2020),165625
- [3] Alkhamash H. I., Mottakin M., Hossen M. M., Akhtaruzzaman M., and M. Rashid J., Design and defect study of Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cell using suitable charge transport layers, *Semi-cond. Sci. Technol.* 38(2023) ,015005 (11pp)
- [4] Hossain M. K., Arnab A. A., Das R. C., Hossain K. M., Rubel M. H. K., Rahman Md. F., Bencherif H., Emetere M. E., and al, Combined DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS frameworks for design optimization of efficient Cs₂BiAgI₆-based perovskite solar cells with different charge transport layers, *RSC Adv.*,12(2022), 35002-35025
- [5] Islam M. T., Jani M.R., Al Amin S.M., Sami M.S.U., Shorowordi K.M., Hossain M.I., Devgun M., Chowdhury S., Banerje S., Ahmed S., Numerical simulation studies of a fully inorganic Cs₂AgBiBr₆ perovskite solar device, *Opt. Mater.* 105(2020) ,109957
- [6] Cruz A. G. G., Solís M. D., González L. G., Torres J. H., López M. L., and al, Theoretical study of c-GaN/GaAs single heterojunction solar cells, *revista Matéria*, v. 22, n. 4, (2017),15177076
- [7] Benmoussa D., Boukais M., Benslimane H., Simulation of Hetero-junction (GaInP/GaAs) Solar Cell Using AMPS-1D, *J.Nano- and Electronic Physics*, Vol. 8 No 1(2016), 01009(3pp)
- [8] Qasim I., Ahmad O., Rashid A., Zehra T., Malik M. I., Rashid M., Ahmed M. W., Nasir M. F., Numerical optimization of (FTO/ZnO/CdS/CH₃NH₃SnI₃/GaAs/Au) perovskite solar cell using solar capacitance simulator with efficiency above 23% predicted, *Optical and Quantum Electronics* ,53(2021):713
- [9] Singh N., Chaudhary A., Rastogi N., Simulation of Organic Solar Cell at Different Active Layer Thickness, in *International Journal of Material Science Innovations*, (2015), 22-26
- [10] Alam I., Mollick R., Ashraf M.A., Numerical simulation of Cs₂AgBiBr₆-based

perovskite solar cell with, ZnO nanorod and P3HT as the charge transport layers, *Phys. B Condens. Matter.* 618 (2021) ,413187

[11] Adachi S., *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, department of Electronic Engineering, Gunma University, Japan, (2005).

[12] Wetzelaer G. J. A. H., Scheepers M., Sempere A.M., Momblona C., Avila J., Bolink H. J., Trap-assisted non-radiative recombination in organic-inorganic perovskite solar cells, *Adv. Mater.* 27(2015), 1837–1841 a

[12] Sobayel K., Akhtaruzzaman Md., Rahman K.S., Ferdaous M.T., Al-Mutairi Zeyad A., Hamad Alharbi F., Nabeel H. Alharthi, Karim Mohammad R., Hasmady S., Amin N., A comprehensive defect study of tungsten disulfide (WS₂) as electron transport layer in perovskite solar cells by numerical simulation, *Results Phys.* 12(2019), 1097–1103

[14] Fan H. Y., Temperature dependence of the energy gap in semiconductors *Phys, Rev.* 82(1951), 900–905

[15] Chirvase D., Chiguvare Z., Knipper M., Parisi J., Dyakonov V., and Hummelenc J. C., Temperature dependent characteristics of poly(3hexylthiophene)-fullerene based heterojunction organic solar cells, *J. Appl. Phys.* 93(2003), 3376–83

Conclusion générale

Conclusion générale

L'énergie solaire se distingue comme la source d'énergie renouvelable la plus prometteuse et la plus puissante. L'électricité photovoltaïque (PV) est générée à partir de cellules PV qui transforment directement la lumière du soleil en électricité. Ce travail vise à explorer les moyens d'améliorer les performances des matériaux semi-conducteurs employés dans les cellules photovoltaïques.

Les cellules solaires à base de Cs₂AgInBr₆, un composé pérovskite, suscitent un intérêt croissant en raison de leurs propriétés uniques et de leur potentiel pour les technologies photovoltaïques. Ces cellules offrent une stabilité environnementale remarquable, surpassant de nombreux autres matériaux pérovskites, ce qui les rend particulièrement adaptées pour des applications à long terme dans des conditions variées. Les propriétés optiques de Cs₂AgInBr₆, notamment son absorption efficace de la lumière visible, sont essentielles pour maximiser la conversion de l'énergie solaire. En termes de propriétés électroniques, Cs₂AgInBr₆ présente des niveaux d'énergie de bande interdite ($E_g=1.47$) favorables, contribuant ainsi à une performance potentiellement élevée des cellules solaires. Un autre avantage significatif de ce matériau est sa non-toxicité, en contraste avec d'autres pérovskites contenant du plomb, ce qui en fait une option plus respectueuse de l'environnement et durable. Bien que les rendements actuels des cellules à base de Cs₂AgInBr₆ soient encore en phase d'optimisation, les résultats obtenus jusqu'à présent montrent un potentiel prometteur pour atteindre des niveaux d'efficacité compétitifs par rapport aux technologies solaires existantes. En somme, les cellules solaires à base de Cs₂AgInBr₆ représentent une avancée prometteuse, combinant stabilité, efficacité potentielle et respect de l'environnement, bien que des recherches supplémentaires soient nécessaires pour pleinement exploiter leur potentiel.

Dans le premier chapitre, nous avons fourni une vue d'ensemble du domaine de la conversion photovoltaïque, en détaillant le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, leurs caractéristiques principales. Nous avons conclu par une présentation des différentes filières photovoltaïques.

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

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

Conclusion générale:

Enfin, dans le quatrième chapitre, une cellule à pérovskite double halogénure, non toxique et composée de matériaux organiques et inorganiques, a été optimisée en utilisant le logiciel de simulation AMPS-1D, sous des conditions d'éclairage standard (AM1.5G, 100 mW/cm², 300 K). L'argent (Ag) a été employé comme contact arrière, le P3HT comme couche de transport de trou (HTL), le ZnO comme couche de transport d'électrons (ETL), et le Cs₂AgBiBr₆ comme couche d'absorption.

BIBLIOGRAPHIE

BIBLIOGRAPHIE**Reference**

- [1] X. Wen, X. Zeng, W. Liao, Q. Lei, S. Yin, "An approach for improving the Carriers Transport properties of a-Si:H/ C-Si heterojunction solar cells With efficiency of more Than 27% ", Solar energy 96,168-176,(2013).
- [2] Michele De Bastiani, Rawan Jalmoode, Jiang Liu, Christina Ossig, Aleš Vlk, Karol Vegso, Maxime Babics, Furkan H. Isikgor, Anand S. Selvin, Randi Azmi, Esma Ugur, Swarnendu Banerjee ... "Monolithic Perovskite/Silicon Tandems with >28% Efficiency: Role of Silicon-Surface Texture on Perovskite Properties" 09 December (2022).
- [3] Wang, Z., Lin, Q., Chmiel, F. P., Sakai, N., Herz, L. M., & Snaith, H. J. (2019). Cs₂AgInBr₆: A Lead-Free Bismuth Halide Double Perovskite with Long Carrier Recombination Lifetime. *Journal of the American Chemical Society*, 141(44), 17654-17660. DOI: 10.1021/jacs.9b09654.
- [6] 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.
- [7] Volonakis, G., Haghighirad, A. A., Milot, R. L., Sio, W. H., Filip, M. R., Weller, M. T., ... & Giustino, F. (2017). Cs₂AgInCl₆: A New Lead-Free Halide Double Perovskite with Direct Band Gap. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(4), 772-778. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.6b02685

I. Références

- [1] N. Touil, S.Ghenbazi, « Modélisation et simulation d'un système photovoltaïque », Master en Génie Electrique, Université Echahid Hama Lakhder d'El-Oued, 2015.
- [2] N.F.Benhaddouche, « La Commande d'un Système Photovoltaïque d'un Satellite », Master en Automatique. Université de Tlemcen, 2013.
- [3] O. Benseddik, F. Djaloud, « Etude et optimisation du fonctionnement d'un système photovoltaïque », Master en Automatique, Université d'Ouargla, 2012.
- [4] Réalisation de Parc Solaire, Le « Photovoltaïque », M3P Solar : 2009.
- [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 CuIn_{1-x}Ga_xSe₂", 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, « Cu(In,Ga)Se₂ 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 Cu(In,Ga)Se₂ 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 Cu(In_{1-x}Ga_x)Se₂ 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>artin A. Green. 24% efficient perovskite silicon solar cell: Recent improvements in high efficiency silicon cell research. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 1996, Vol. 41/42, pp. 87-99.

II. 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] McCall, K. M., Stoumpos, C. C., Kostina, S. S., Kanatzidis, M. G., & Wessels, B. W. (2017). Strong electron-phonon coupling and self-trapped excitons in the halide perovskite Cs₂AgInCl₆. *Chemistry of Materials*, 29(10), 4129-4145. DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b00904.
- [6] Volonakis, G., Haghghirad, A. A., Milot, R. L., Sio, W. H., Filip, M. R., Weller, M. T., ... & Giustino, F. (2017). Cs₂AgInCl₆: A New Lead-Free Halide Double Perovskite with Direct Band Gap. *Journal of Physical Chemistry Letters*, 8(4), 772-778. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.6b02685.
- [7] Bekenstein, Y., Dahl, J. C., Huang, J., Osowiecki, W. T., Swabeck, J. K., Chan, E. M., & Alivisatos, A. P. (2018). The making and breaking of lead-free double perovskite nanocrystals of cesium silver–bismuth halide compositions. *Nano Letters*, 18(6), 3502-3508. DOI: 10.1021/acs.nanolett.8b00545.
- [8] Xiao, Z., & Meng, W. (2016). Thermodynamic Stability and Defect Chemistry of Bismuth-Based Lead-Free Double Perovskites. *Chemistry of Materials*, 28(24), 8619-8627.

DOI: 10.1021/acs.chemmater.6b03993.

[9] 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.

[10] 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.

[11] Özgür, Ü., Alivov, Y. I., Liu, C., Teke, A., Reshchikov, M. A., Doğan, S., ... & Morkoç, H. (2005). A comprehensive review of ZnO materials and devices. *Journal of Applied Physics*, 98(4), 041301. DOI: 10.1063/1.1992666.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

III.. References

[1] 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).

[12] P.J. MCELheny, J. Arch, H.S. Lin, S.J. Fonash, J." Range of validity of the surface photovoltage diffusion length measurement: A computer simulation", of Appl. Phys., 64 (3), 1254, (1988).

[13] P. Leblan, J. Perrin," Numerical modeling of the optical properties of hydrogenated amorphous-silicon-based p-i-n solar cells deposited on rough transparent conducting oxide Substrates", J. Appl. Phys. 75 , 1074,(1994).

[14] P. Chatterjee," Computer modeling of the dependence of the J-V characteristics of a-Si:H solar cells on the front contact barrier height and gap state density", Technical, Digest of International PVSEC-6, New Delhi, India, Feb. 10-14 ,pp 329-334,(1992).

[15] P. Chatterjee , " Photovoltaic performance of a-Si:H homo-junction p-i-n solar cells: A computer simulation study", Journal of Applied Physics, Vol 76 No.2, pp. 1301-1313, ISSN 0021-8979, (1994).

[16] N. Palit, "Energy Research, Indian Association for the Cultivation of Sciences", Ph.D. Thesis ,India, (2000).

[17] Pierz, K., Fuhs, W. and Mell, H., Philos. Mag. B 63.123,(1991).

[18] M. Gunes, C.T. Malone, J.L. Nicque, S.J. Fonash and C.R. Wronski,"Proceeding of the 6th International PVSEC", New Delhi, India, Feb.10-14, edited by B.K. Das and S.N.Singh, (1992).

[19] P. Chatterjee, "A computer analysis of the effect of a wide-band-gap emitter layer on the Performance of a-Si:H- based hetero-junction solar cells", Journal of Applied Physics, Vol 79, No 9, pp. 7339-7347, ISSN (print) 0021-8979,(1996).

[20] W. Shockley and W. T. Read Statistics of the recombination of holes and electrons. Physical Review 87 ,pp.835-842,(1952).

[21] R. Legros, "Les semi-conducteurs (physique des semi-conducteurs technologie-diodes) ", Tome 1, éditions Eyrolles, paris (1974).

[16] P. Chatterjee, F. Leblanc, M. Favre, and J. Perrin "A global electrical-optical Model of thin film solar cells on textured substrates", Mat. Res. Soc. Symp. Proc. 426 ,pp. 593-598,(1996).

[17] N. Palit, P. Chatterjee," computer analysis of a-Si :H based double junction solar cells" Energy Research Unit, Indian Association for the Cultivation of Science, volume 467, India,(1997).

[18] AMPS 1D site web, université de Pennsylvanie : <http://www.emprl.psu.edu/amps>.

IV.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] Ahmmed S., Aktar A., Rahman Md. F., Hossain J., Ismail A. B. Md., "A Numerical Simulation of High Efficiency CdS/CdTe Based Solar Cell Using NiO HTL and ZnO, TCO", *Optic- International Journal for Light and Electron Optics*, 223(2020),165625
- [3] Alkhamash H. I., Mottakin M., Hossen M. M., Akhtaruzzaman M., and M. Rashid J., Design and defect study of Cs₂AgBiBr₆ double perovskite solar cell using suitable charge transport layers, *Semi-cond. Sci. Technol.* 38(2023) ,015005 (11pp)
- [4] Hossain M. K., Arnab A. A., Das R. C., Hossain K. M., Rubel M. H. K., Rahman Md. F., Bencherif H., Emeteri M. E., and al, Combined DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS frameworks for design optimization of efficient Cs₂BiAgI₆-based perovskite solar cells with different charge transport layers, *RSC Adv.*,12(2022), 35002-35025
- [5] Islam M. T., Jani M.R., Al Amin S.M., Sami M.S.U., Shorowordi K.M., Hossain M.I., Devgun M., Chowdhury S., Banerje S., Ahmed S., Numerical simulation studies of a fully inorganic Cs₂AgBiBr₆ perovskite solar device, *Opt. Mater.* 105(2020) ,109957
- [6] Cruz A. G. G., Solís M. D., González L. G., Torres J. H., López M. L., and al, Theoretical study of c-GaN/GaAs single heterojunction solar cells, *revista Matéria*, v. 22, n. 4, (2017),15177076
- [7] Benmoussa D., Boukais M., Benslimane H., Simulation of Hetero-junction (GaInP/GaAs) Solar Cell Using AMPS-1D, *J.Nano- and Electronic Physics*, Vol. 8 No 1(2016), 01009(3pp)
- [8] Qasim I., Ahmad O., Rashid A., Zehra T., Malik M. I., Rashid M., Ahmed M. W., Nasir M. F., Numerical optimization of (FTO/ZnO/CdS/CH₃NH₃SnI₃/GaAs/Au) perovskite solar cell using solar capacitance simulator with efficiency above 23% predicted, *Optical and Quantum Electronics* ,53(2021):713
- [9] Singh N., Chaudhary A., Rastogi N., Simulation of Organic Solar Cell at Different Active Layer Thickness, in *International Journal of Material Science Innovations*, (2015), 22-26
- [10] Alam I., Mollick R., Ashraf M.A., Numerical simulation of Cs₂AgBiBr₆-based perovskite solar cell with, ZnO nanorod and P3HT as the charge transport layers, *Phys. B Condens. Matter.* 618 (2021) ,413187
- [13] Adachi S., *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, department of Electronic Engineering, Gunma University, Japan, (2005).

- [14] Wetzelaer G. J. A. H., Scheepers M., Sempere A.M., Momblona C., Avila J., Bolink H. J., Trap-assisted non-radiative recombination in organic-inorganic perovskite solar cells, *Adv. Mater.* 27(2015), 1837–1841 a
- [12] Sobayel K., Akhtaruzzaman Md., Rahman K.S., Ferdaous M.T., Al-Mutairi Zeyad A., Hamad Alharbi F., Nabeel H. Alharthi, Karim Mohammad R., Hasmady S., Amin N., A comprehensive defect study of tungsten disulfide (WS₂) as electron transport layer in perovskite solar cells by numerical simulation, *Results Phys.* 12(2019), 1097–1103
- [16] Fan H. Y., Temperature dependence of the energy gap in semiconductors *Phys, Rev.* 82(1951), 900–905
- [17] Chirvase D., Chiguvare Z., Knipper M., Parisi J., Dyakonov V., and Hummelenc J. C., Temperature dependent characteristics of poly(3hexylthiophene)-fullerene based heterojunction organic solar cells, *J. Appl. Phys.* 93(2003), 3376–83

Résumé

Dans cette étude, nous avons examiné les performances d'une cellule solaire à base de double pérovskite Cs₂AgInBr₆ en utilisant le simulateur AMPS-1D.

L'objectif principal était de maximiser l'utilisation du spectre solaire afin d'améliorer les performances de cette cellule, en déterminant les paramètres optimaux pour leur fonctionnement. Dans ce contexte, de nombreux facteurs physiques contribuent à l'amélioration de leur rendement. Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'impact de l'épaisseur, la densité des défauts et la température de chaque couche de la cellule.

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

ملخص :

في هذه الدراسة، قمنا بتحليل أداء خلية شمسية تعتمد على البيروفيسكايت المزدوج Cs₂AgInBr₆ باستخدام محاكي AMPS-1D.

كان الهدف الرئيسي هو تعظيم استخدام الطيف الشمسي لتحسين أداء هذه الخلية، من خلال تحديد المعلمات المثلى لتشغيلها. في هذا السياق، تسهم العديد من العوامل الفيزيائية في تحسين كفاءتها. اهتمنا بشكل خاص بتأثير سمك الطبقة، وكثافة العيوب، ودرجة حرارة كل طبقة من خلايا الشمسية. الكلمات المفتاحية: خلايا شمسية، خلايا تانديم، بيروفيسكايت، محاكاة ، AMPS-1D.