

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE : TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT : GENIE ELECTRIQUE



DOMAINE : SCIENCES ET TECHNOLOGIE

FILIERE : ELECTRONIQUE

OPTION : MICROELECTRONIQUE

**Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique**

**Par : BEN SAOUCHA Zine laabidine**

**DJEHICHE Badereddine**

**Intitulé**

**Simulation numérique de la cellule solaire  
Tandem Pérovskite/CIGS**

**Soutenu devant le jury composé de:**

	Université de M'sila	Président
Prof. BOUCHAMA Idris	Université de M'sila	Encadreur
	Université de M'sila	Examineur
	Université de M'sila	Examineur

**Année universitaire : 2019/2020**

## Dédicace

A mes chers parents, pour tous leurs sacrifices, leur amour, leur tendresse, leur soutien et leurs prières tout au long de mes études,

A mes chères sœurs pour leurs encouragements permanents, et leur soutien moral,

A mes chers frères, pour leur appui et leur encouragement,

A toute ma famille pour leur soutien tout au long de mon parcours universitaire,

Que ce travail soit l'accomplissement de vos vœux tant allégués, et le fruit de votre soutien infaillible,

Merci d'être toujours là pour moi

BEN SAOUCHA Zine laabidine

Djehiche Badereddine

## ***Remerciement***

*Avant tout nous tenons nos remerciements à ALLAH de nos avoir donné la force et le courage.*

*A la suite Nous tenons à remercier vivement :*

***Prof. BOUCHAMA Idris*** *notre encadreur*

*qui a fourni des efforts énormes, par ses informations ses conseils et ses encouragements;*

*Nous tenons également à remercier messieurs les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant de siéger à notre soutenance;*

*Et tous les enseignants du Département d'Electronique et à tous ce qui furent à un moment ou à toute instante partie prenante de ce travail.*

*Nos plus chaleureux remerciements pour tous ceux qui de près et de loin ont contribué à la réalisation de ce mémoire.*

*nous sommes très reconnaissant à notre familles pour les encouragements, la confiance et le soutien moral dont ils ont toujours fait preuve.*

# SOMMAIRE

<b>Liste des Figures</b>	I
<b>Liste des Tableaux</b>	IV
<b>Liste des Symboles et Abréviations</b>	V
<b>INTRODUCTION GÉNÉRALE</b>	1
<b>Chapitre I: <i>Notions générales sur la cellule solaire</i></b>	
I.1 Introduction	4
I.2 Historique	5
I.3 L'énergie solaire	7
I.3.1 La ressource solaire	7
I.3.2 Spectre solaire	7
I.4 Cellule photovoltaïque	9
I.4.1 Conversion photovoltaïque	9
I.4.2 Principe de fonctionnement	10
I.4.3 Absorption optique	12
I.4.4 Schéma électrique équivalent	12
I.4.5 Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque	13
I.5 Types de cellules photovoltaïques	15
I.5.1 Cellules cristallines	15
I.5.2 Cellules à base de couches minces	16
I.5.3 Cellules à haut rendement	17
I.5.4 Cellules organique	20
I.5.5 Cellules solaires sensibilisées par colorant (CSSC)	20
I.6 Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque	21
I.6.1 Avantages	21
I.6.2 Inconvénients	21
I.7 Conclusion	22
<b>Chapitre II: <i>Propriétés des matériaux Cu(In, Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) et pérovskite</i></b>	
II.1 Introduction	24

II.2 Matériaux CIGS	25
II.2.1 propriété fondamental de CIGS	25
II.2.2 Structure cristallographique du composé CIGS	26
II.2.3 Propriétés optiques	27
II.2.3.1 Coefficient d'absorption ( $\alpha$ )	27
II.2.3.2 Constante optique (indice de réfraction)	28
II.2.3.3 Largeur de la bande interdite (GAP)	29
II.2.4 Propriétés électriques	31
II.2.4.1 Les défauts ponctuels	31
II.2.4.2 Les défauts cristallins	32
II.3 Matériaux pérovskite	33
II.3.1 La structure pérovskite $ABO_3$	33
II.3.2 La structure pérovskite $ABX_3$	34
II.3.3 Critère de stabilité de la structure pérovskite	38
II.3.3.1 Facteur de Goldschmidt	38
II.3.3.2 Rapport $V_A/V_B$	40
II.3.3.3 Coordination en fonction du rayon ionique	40
II.3.3.4 L'ionicité des liaisons anions-cations	40
II.4 Propriétés des matériaux pérovskites	40
II.4 .1 Propriétés électriques	41
II.4 .2 Propriétés optique	41
II.5 Défauts dans la structure pérovskite	42
II.5.1 Description des défauts dans les cristaux	43
II.5.2 Défauts ponctuels	43
II.6 Conclusion	44
<b>Chapitre III: Logiciel de simulation wxAMPS</b>	
III.1 Introduction.	47
III.2 Logiciel de simulation AMPS 1D	47
III.2.1 Aperçu	47
III 2.2 Description du modèle wxAMPS	48
III.3 Les caractéristiques de wxAMPS	51

III.4 Description de wxAMPS	53
III.4.1 Conditions environnementales	54
III.4.2 Les propriétés du matériau de chaque couche	54
III.4.3 Les paramètres de modélisation	58
III.5 Conclusion	61
<b>Chapitre IV: RESULTATS ET DESCUSSIONS</b>	
IV.1 Introduction	62
IV.2 Description de la structure tandem proposée	62
IV.2.1 Présentation de la cellule individuelle à base de Pérovskite	63
IV.2.1.1 Paramètres de la cellule Pérovskite individuelle	63
IV.2.1.2 Résultats et discussion	64
IV.2.2 Présentation de la cellule individuelle à base de CIGS	66
IV.2.2.1 Paramètres de la cellule individuelle à base de CIGS	67
IV.2.2.2 Résultats et discussion	68
IV.3 Etude de la cellule Tandem Pérovskite/CIGS	70
IV.3.1 Paramètres des couches intermédiaires (Jonction tunnel)	71
IV.3.2 Résultats de simulation de la cellule tandem Pérovskite/CIGS	72
IV.4 Conclusion	73
<b>Conclusion Général</b>	76

## Liste des Figures

<b>Figure (I.1)</b>	Croissance de la filière photovoltaïque mondiale de 2008 à 2018	4
<b>Figure (I.2)</b>	premiers satellites avec panneaux solaires	5
<b>Figure (I.3)</b>	les Cellules photovoltaïque	6
<b>Figure (I.4)</b>	Spectre d'émission solaire	8
<b>Figure (I.5)</b>	Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	10
<b>Figure (I.6)</b>	Schéma électrique réel d'une cellule solaire	12
<b>Figure (I.7)</b>	Représentation conventionnelle de la courbe I(V) et P(V)	12
<b>Figure (I.8)</b>	Photo d'un substrat de silicium polycristallin (échelle : 10×10 cm <sup>2</sup> )	15
<b>Figure (I.9)</b>	Cellule photovoltaïque à base de silicium monocristallin	15
<b>Figure (I.10)</b>	Schéma d'une structure tandem	17
<b>Figure (I.11)</b>	Principe de la cellule à hétéro-jonctions	18
<b>Figure (I.12)</b>	Schéma de principe d'un concentrateur photovoltaïque	19
<b>Figure (II.1)</b>	Meilleurs rendements (en conditions nominales, cellules mono-jonction) et modules (ou panneaux) des principales technologies commerciales	23
<b>Figure (II.2)</b>	classification périodique des éléments constituant la famille I-III-VI <sub>2</sub>	24
<b>Figure (II.3)</b>	Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du CdTe et du CIGS Structure chalcopyrite d'après	24
<b>Figure (II.4)</b>	Représentation des coefficients d'absorptions de quelques matériaux en fonction de longueur d'onde	26
<b>Figure (II.5)</b>	Représentation des indices de réfraction (réelle et imaginaire) en fonction de l'énergie pour le CIGS, avec x=0 et x=0.2	27
<b>Figure (II.6)</b>	Largeur de bande interdite et paramètre de maille a de certaines chalcopyrites	28
<b>Figure (II.7)</b>	Variation de $(\alpha h\nu)^2$ en fonction de $h\nu$	28
<b>Figure (II.8)</b>	Représentations schématiques des structures cristallines du composé. CaTiO <sub>3</sub> (a), de la pérovskite halogénée CsPbBr <sub>3</sub> (b) , de la pérovskite hybride halogénée MAPbBr <sub>3</sub> (c). Le cation sur le site A se trouve dans la cavité formé par les octaèdres	31
<b>Figure (II.9)</b>	représentations de la structure pérovskite ABO <sub>3</sub>	32

<b>Figure (II.10)</b>	Représentation générale des pérovskites simples $ABX_3$	33
<b>Figure (II.11)</b>	Description schématique de la structure cristalline $ABX_3$	33
<b>Figure (II.12)</b>	Structure cubique de la pérovskite $MAPbI_3$	34
<b>Figure (II.13)</b>	classification du système de pérovskite	35
<b>Figure (II.14)</b>	Maille de la Pérovskite simple $ABO_3$	36
<b>Figure (II.15)</b>	Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires	40
<b>Figure (II .16)</b>	de défauts ponctuels dans un cristal ordonné AB	41
<b>Figure (III.1)</b>	Diagramme de bande d'une cellule solaire à jonction p-i-n à l'équilibre thermodynamique	48
<b>Figure (III.2)</b>	Diagramme de bande d'une cellule solaire à jonction p-i-n sous éclairage	49
<b>Figure (III.3)</b>	Page d'accueil de l'interface utilisateur	51
<b>Figure (III.4)</b>	L'interface des conditions environnementales	52
<b>Figure (III.5)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche	53
<b>Figure (III.6)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (l'épaisseur)	53
<b>Figure (III.7)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (électrical)	54
<b>Figure (III.8)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (Defect )	54
<b>Figure (III.9)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (Optical)	55
<b>Figure (III.10)</b>	L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (Advanced)	55
<b>Figure (III.11)</b>	L'interface de wxAMPS(Settings)	56
<b>Figure (III.12)</b>	L'interface Les paramètres de modélisation	56
<b>Figure (III.13)</b>	Boîte de dialogue pour L'interface de l'exécution	57
<b>Figure (III.14)</b>	Boîte de dialogue pour progression s'affiche	57
<b>Figure (III.15)</b>	Interface des résultats	58
<b>Figure (IV.1)</b>	Structure de la cellule solaire Pérovskite	61

<b>Figure (IV.2)</b>	Variation du paramètre photovoltaïque ( $V_{CO}$ , $J_{SC}$ , $FF$ et $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche $CH_3NH_3PbI_3Cl$ , $E_{p\acute{e}rov}$	63
<b>Figure (IV.3)</b>	Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la concentration des accepteurs de la couche $CH_3NH_3PbI_3Cl$	65
<b>Figure (IV.4)</b>	Structure de la cellule solaire individuelle à base de CIGS	
<b>Figure (IV.5)</b>	Variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{CO}$ , $J_{SC}$ , $FF$ et $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS, $E_{CIGS}$	67
<b>Figure (IV.6)</b>	Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la concentration des accepteurs de la couche CIGS	68
<b>Figure (IV.7)</b>	Structure de la cellule solaire tandem Pérovskite/CIGS	69
<b>Figure (IV.8)</b>	Caractéristiques (I-V) calculées des trois cellules solaires, cellule inférieure (CIGS), cellule supérieure (Pérovskite) et cellule tandem (Pérovskite /CIGS)	71

## Liste des Tableaux

<b>Tableau (II.1)</b>	Évolution des structures cristallines en fonction de la valeur du facteur de tolérance	37
<b>Tableau (II.2)</b>	Les cations les plus communs formant les oxydes de structure pérovskite et leurs rayons ioniques. Spin state (HS: high spin ; LS: low spin)	37
<b>Tableau (III.1)</b>	caractéristiques de quelques simulateurs solaire des couches Minces	51
<b>Tableau (IV.1)</b>	Paramètres électriques des différentes couches de la cellule individuelle à base de Pérovskite	62
<b>Tableau (IV.2)</b>	Paramètres des défauts Gaussiens des différentes couches de la cellule individuelle à base de Pérovskite	62
<b>Tableau (IV.3)</b>	Paramètres photovoltaïques obtenues de la cellule supérieure à base de Pérovskite	64
<b>Tableau (IV.4)</b>	Paramètres électriques des différentes couches de la cellule individuelle à base de CIGS	65
<b>Tableau (IV.5)</b>	Paramètres des défauts Gaussiens des différentes couches de la cellule individuelle à base de CIGS	66
<b>Tableau (IV.6)</b>	Paramètres photovoltaïques de la cellule inférieure à base de CIGS	68
<b>Tableau (IV.7)</b>	Paramètres électriques des couches intermédiaires c-Si(n++) et c-Si(p++)	70
<b>Tableau (IV.8)</b>	Paramètres des défaut Gaussiens des couches intermédiaires c-Si(n++) et c-Si(p++)	70
<b>Tableau (IV.9)</b>	Paramètres photovoltaïques de la cellule tandem Pérovskite/CIGS	70

## Liste des Symboles et Abréviations

<i>Symbole</i>	<i>Signification</i>	<i>Unité</i>
AM	aire Masse	
$I_D$	Intensité reçue à la surface de la terre	$\text{kWm}^{-2}$
$E_p$	Énergie du photon	eV
$h$	Constant de Planck	J.s
$c$	Vitesse de la lumière	$\text{m s}^{-1}$
$\lambda$	Longitude d'onde	$\mu\text{m}$
$\nu$	Fréquence	Hz
$V_{OC}$	Tension de circuit ouvert	V
$k$	La constante de Boltzmann	$\text{J k}^{-1}$
$T$	Température absolue	k
$I_{Ph}$	Le photo-courant	A
$\Phi$	Flux lumineux	lmw
$P_m$	Puissance maximale	w
$I_{cc}$	Courant de court-circuit	A
FF	Facteur de forme	%
$\eta$	Rendement photovoltaïque	%
$V_m$	Tension maximale	V
$I_m$	courant maximal	A
$q$	La charge de l'électron	C
$I_s$	Le courant de saturation	A
$P_{in}$	puissance lumineuse incidente	w
$\alpha$	Coefficient d'absorption	$\text{cm}^{-1}$
$E_g$	L'énergie du gap	eV
$d$	Epaisseur d'une couche mince	
$T$	la transmission de l'échantillon	
R	réflectivité de l'échantillon	

$I_0$	l'intensité lumineuse incidente	A
$N_A$	densité des accepteurs	$\text{cm}^{-3}$
$N_D$	densité des donneurs	$\text{cm}^{-3}$
$N_c$	Densité d'états des électrons	$\text{cm}^{-3}$
$N_v$	Densité d'états des trous	$\text{cm}^{-3}$
$E$	Champ électrique	$\text{Vm}^{-1}$
$\psi$	potentiel électrostatique	V
$J_n, J_p$	densités de courants des électrons et des trous	$\text{mA cm}^{-2}$
$\rho$	La densité de charge d'espace	$\text{C cm}^{-3}$
$\epsilon_0, \epsilon_r$	La permittivité du semi-conducteur	$\text{F cm}^{-1}$
$N$	Densité d'état par unité de volume	$\text{cm}^{-3}$
$E_F$	L'énergie de Fermi	eV
$E_v$	Energie du haut de la bande de valence	J ou eV
$E_c$	Energie du bas de la bande de conduction	J ou eV
$\theta$	angle diffraction	°
$I(x)$	l'intensité lumineuse traversant le matériau dans la direction x	A
$k$	Indice imaginaire	
$J_{cc}$	La densité de courant de court circuit	$\text{mA cm}^{-2}$
<b>n</b>	Les densités d'électrons libres	$\text{cm}^{-3}$
<b>p</b>	Les densités de trous libres	$\text{cm}^{-3}$
<b>L</b>	la longueur du dispositif	cm
$\chi$	affinité électronique de semi-conducteur	
c-Si	Silicium cristallin	
ZnO	Oxyde de Zinc	
CdS	Sulfure de Cadmium	
CIGS	Di-sélénium de galium d'indium de cuivre (Cu (In, Ga) Se <sub>2</sub> )	
CdTe	Tellure de Cadmium	
Si	Silicon	
GaAs	Arsenide Gallium	

AMPS-1D	analyse des structures photoniques et microélectroniques à une seule dimension
Mo	Molybdénium
ETM	matériau de transport d'électrons
CuSCN	thiocyanate de cuivre
HTM	matériau de transport de trous

# *Introduction Générale*

Durant la première moitié du 20<sup>ème</sup> siècle, on distingue l'apparition de plusieurs types de sources d'énergie renouvelables, dont: l'hydroélectrique, la géothermique, l'éolienne, la biomasse et enfin l'énergie photovoltaïque. Toutes ses ressources proviennent presque directement ou indirectement du soleil. Elles sont donc disponibles indéfiniment tant que celui-ci brillera. La technique la plus connue permettant la conversion directe de la lumière en énergie et plus particulièrement en électricité est certainement la technique de la conversion photovoltaïque qui consiste à transformer directement la lumière en électricité. Cette conversion d'énergie s'effectue par le biais d'une cellule dite photovoltaïque basée sur un phénomène physique appelé effet photovoltaïque qui siècle le photovoltaïque a fait très peu de progrès. Le phénomène a été démontré dans d'autres systèmes que le sélénium, mais sans augmenter le rendement de conversion, et ce jusqu'en 1954. Dans cette année, qui marque un grand tournant, Carl Fuller, au sein des laboratoires de la société Bell, cherchait à améliorer les diodes au silicium en y introduisant certains dopants. Son collègue Gerald Pearson a eu l'idée de mesurer le courant produit sous illumination par les diodes de Fuller. A la surprise générale, un courant important fut observé. Ce fut le début d'un véritable projet de cellules solaires au sein de la société Bell où un rendement de 6% fut rapidement démontré. l'année 1954 est aussi le début des cellules en couches minces basées sur des diodes Schottky avec le CdS. A cause de leur prix élevé, la seule véritable, mais très importante, application pour les premières cellules solaires a été dans le domaine spatial qui fut le terrain de développement du photovoltaïque jusqu'au début des années 1970. L'année 1958 voit le lancement de plusieurs satellites équipés de systèmes photovoltaïques [1].

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

Aujourd'hui, le marché photovoltaïque est dominé par les cellules solaires en silicium cristallin (c-Si) sous ses formes multicristallines et monocristallines. Jusqu'à présent, les cellules solaires en silicium cristallin ont atteint une efficacité supérieure à 25%. Les cellules à base de  $\text{Cu(In,Ga)(S,Se)}_2$  (CIGSSe), l'une des cellules solaires en couches

minces les plus compétitives, a atteint un rendement de conversion allant jusqu'à 23.35%. De plus, les cellules solaires à base de pérovskite (PVK) ont récemment émergé, montrant un développement rapide et ouvrant de nouvelles directions dans le domaine photovoltaïque. L'efficacité record des appareils PVK dépasse désormais 22%.

Le matériau CIGS et le Pérovskite sont des semi-conducteurs ayant un gap d'énergie approprié et un coefficient d'absorption optique élevé dans le domaine visible du spectre solaire. Le coefficient d'absorption de films en CIGS et Pérovskite est 100 fois plus grand que celui du Si dans le domaine de visible du spectre solaire.

L'amélioration du rendement de la cellule solaire est aussi venue par l'utilisation des cellules solaires double-jonctions (Tandem), Triple ou Multi-jonctions qui sont composées par plusieurs absorbeurs ayant des énergies du gap différentes afin d'exploiter les différentes régions des énergies du spectre solaire.

L'étude par simulation numérique des cellules solaires en couches minces reste la moyenne la plus performante pour estimer les performances des cellules. Par ces outils de simulation beaucoup de paramètres peuvent être variés pour modéliser les phénomènes expérimentalement observés.

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier l'influence de quelques propriétés physiques, tels que: l'épaisseur de l'absorbeur et la concentration des accepteurs  $N_A$ , sur le performances photovoltaïques des cellules solaires substrate à base de composés CIGS et de Pérovskite puis la cellule tandem CIGS/Pérovskite, utilisant un outil de simulation très puissant et très adaptés à ce genre des structures, s'appel: wxAMPS.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante:

Après une introduction générale, le premier chapitre présente des généralités sur la conversion photovoltaïque, le principe de fonctionnement et leur types, ainsi que les avantages et les inconvénients des cellules solaires.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les propriétés fondamentales du composé CIGS et Pérovskite. Nous décrirons les propriétés optiques et électriques de ces composées.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le logiciel wxAMPS utilisé dans notre étude de simulation.

Dans le quatrième chapitre, des discussions et des interprétations des résultats obtenus par la simulation de notre cellule solaire Tandem à base de CIGS/Pérovskite.

Nous clôturerons le travail par une conclusion générale ainsi que des perspectives de ce travail.

# *Chapitre I*

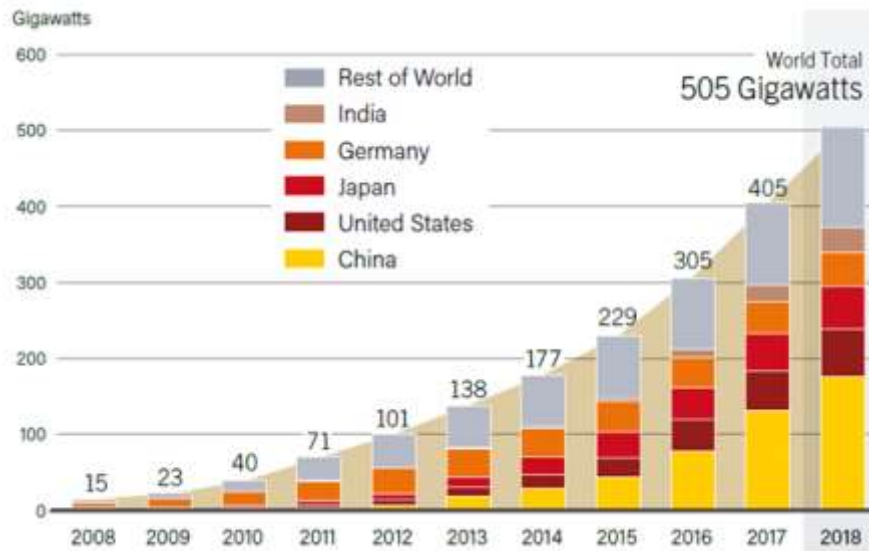
## *Notions générales sur les cellules solaires*

## **I.1 Introduction**

La consommation mondiale d'électricité observée durant ces dernières décennies est fortement liée au développement de l'industrie, du transport et des moyens de communications. De nos jours, une grande partie de la production électrique est produite à partir de ressources non renouvelables comme le charbon, le gaz naturel, le pétrole et l'uranium. Leur vitesse de régénération est extrêmement lente à l'échelle humaine. Ce qui entrainera à plus ou moins courte échéance un risque non nul d'épuisement de ces ressources. D'autant plus que la demande ne cesse de croître et tant dès à présent à être supérieure à l'offre, se traduisant par exemple par une forte fluctuation du prix mondial du pétrole.

L'épuisement attendu des énergies fossiles nous force à rechercher des sources d'énergie renouvelables. Certaines de ces énergies, comme l'énergie solaire et éolienne, sont intermittentes car dépendantes de l'ensoleillement pour la première ou du vent pour la seconde. Notre développement ne peut donc être basé sur une seule source d'énergie, comme il a été question durant le XX<sup>ème</sup> siècle. En 1839, Antoine-César Becquerel constate les effets électriques que produisent les rayons solaires dans une pile. En 1905, Einstein découvre que l'énergie de ces quanta de lumière est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. Au début du siècle et jusqu'à maintenant avec les hydrocarbures. La notion de mixte énergétique fait son apparition. L'équation énergétique des prochaines années se décline en contributions diverses, de la biomasse, de l'éolien, du photovoltaïque, de la géothermie, de l'hydroélectricité... etc. La production d'électricité d'origine photovoltaïque s'est même accrue de manière exponentielle depuis 2001 et les projections sont assez optimistes pour les années à venir, comme le montre la figure 1.

Dans ce chapitre nous allons donner quelques notions fondamentales du rayonnement solaire, nous verrons les phénomènes qui interviennent entre la lumière incidente du soleil et le semi-conducteur (absorption d'une lumière et génération d'une paire électron-trous), nous verrons aussi le principe de fonctionnement de la cellule, Ainsi les différents paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque afin de déterminer les différents types de la cellule photovoltaïque.



**Figure I.1** : Croissance de la filière photovoltaïque mondiale de 2008 à 2018[2].

## I.2 Historique

Considéré dans l'Antiquité comme un dieu, le soleil est aujourd'hui réduit au statut d'énergie, une énergie qu'il nous faut apprendre à capter, transformer, à stocker...

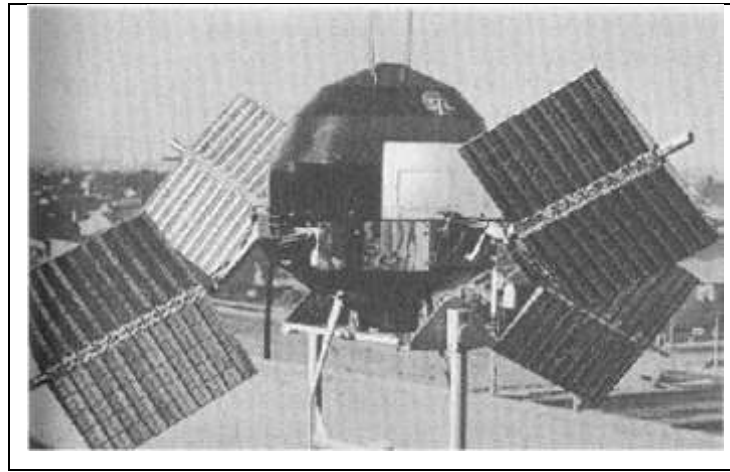
La conversion de la lumière en électricité, appelé effet photovoltaïque, a été découverte en 1839 par un physicien français, Alexandre Edmond Becquerel (en irradiant une électrode en argent dans un électrolyte, il obtint une tension électrique).

En 1875, le physicien Werner Von Siemens expose devant l'Académie des Sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. La première cellule solaire fonctionnelle fut construite en 1883 par Charles Fritts. mais le rendement de sa cellule, étant très faible, empêcha à l'époque son utilisation. Seulement, le phénomène est encore considéré comme anecdotique jusqu'à la Seconde Guerre Mondiale. Les premières vraies cellules sont apparues en 1930 avec les cellules à oxyde cuivreux puis au sélénium.

Les recherches après la guerre ont permis d'améliorer leurs performances et leur taille et ce n'est qu'en 1954 que trois chercheurs américains, Chapin, Pearson et Prince mettent au point une cellule photovoltaïque au silicium dans les laboratoires de la compagnie Bell téléphone. On entrevoit alors la possibilité de fournir de l'électricité grâce à ces cellules. Au même moment, l'industrie spatiale naissante, cherche de nouvelles solutions (autre que le procédé nucléaire) pour alimenter ses satellites.

Le premier satellite scientifique Américain l'Explorer-6 lancé en août 1959 il est équipé de panneaux solaires, il a une masse de 40 Kg et dispose d'une caméra sommaire pour voir la terre.

En 1958, les premiers satellites avec des panneaux solaires sont envoyés dans l'espace et au même moment une cellule avec un rendement de 9% est mise au point. Mais il faudra attendre les années 70 pour que les gouvernements et les industries investissent dans la technologie photovoltaïque. En effet des efforts ont été faits pour réduire les coûts de sorte que l'énergie photovoltaïque soit également utilisable pour des applications terrestres. Et en 1973, la première maison alimentée par des cellules photovoltaïques est construite à l'Université de Delaware.



**Figure I.2:** premiers satellites avec panneaux solaires [2]

Ainsi au cours des années 80, la technologie photovoltaïque terrestre a progressé régulièrement par la mise en place de plusieurs centrales de quelques mégawatts.

La croissance de l'industrie fut spectaculaire, et notamment à travers de nombreux produits de faible puissance fonctionnant grâce à l'énergie solaire, tel que : montres, calculatrices, balises radio et météorologiques, pompes et réfrigérateurs solaires.

En 1983 la première voiture, alimentée par énergie photovoltaïque, parcourt une distance de 4000 km en Australie.

En 1995, des programmes de toits photovoltaïques raccordés au réseau ont été lancés, au Japon et en Allemagne, et se généralisent depuis 2001. Bien que le prix se soit peu stabilisé, la quantité de modules photovoltaïques expédiés chaque année ne cesse d'augmenter [2].



**Figure I.3 :** Les Cellules photovoltaïque [3]

## **I.3 L'énergie solaire**

### **I.3.1 La ressource solaire**

Le soleil émet un rayonnement électromagnétique compris dans une bande de longueur d'onde variant de 0.22 à 10 microns. L'énergie associée à ce rayonnement solaire se décompose approximativement comme suit:

- 9% dans la bande de ultraviolets (< 0.4 cm).
- 47% dans la bande visible (0.4 à 0.8 cm).
- 44% dans la bande des infrarouges (> 0.8 cm).

L'atmosphère terrestre reçoit ce rayonnement à une puissance moyenne de 1.37 kilowatt au mètre carré ( $\text{kW/m}^2$ ) à plus ou moins 3% selon que la terre s'éloigne ou se rapproche du soleil dans sa rotation autour de celui-ci. L'atmosphère en absorbe toute fois une partie de sorte que la quantité d'énergie atteignant la surface terrestre dépasse rarement ( $1.2 \text{ kW/m}^2$ ). La rotation et l'inclinaison de la terre font également que l'énergie disponible en un point donné varie selon la latitude, l'heure et la saison. L'utilisation du rayonnement solaire comme source d'énergie pose donc un problème bien particulier. En effet, le rayonnement solaire n'est pas toujours disponible; on ne peut ni l'emmagasiner ni le transporter. Le concepteur d'un système qui emploie le rayonnement solaire comme source d'énergie doit donc déterminer la quantité d'énergie solaire disponible à l'endroit visé et au moment où cette énergie est disponible [3].

### **I.3.2 Spectre solaire**

Le soleil se comporte comme un corps noir dont la surface est à la température

d'environ 5800 K. A la traversée de l'atmosphère, la lumière est absorbée et dispersée en particulier par les composants atmosphériques importants tels que le CO<sub>2</sub> et la vapeur d'eau (H<sub>2</sub>O), de sorte que le spectre atteignant la surface de la terre soit atténué et changé dans la forme. Une mesure pour le spectre solaire est l'air Mass (noté AM). Elle est définie comme suit :

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

Où  $\theta$  est l'angle entre le soleil et le zénith. Le spectre standard pour la latitude tempérée est AM1.5 qui correspond à l'angle de 48 du vertical [4]. AM 1.5G donne une irradiance de 970 w/m<sup>2</sup>, mais a été arrondi à 1 kW/m<sup>2</sup>.

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

$$I_D = 1.33 (07^{AM})^{0.678} \quad (I.2)$$

Avec  $I_D$  en kW/m<sup>2</sup>

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

La terre présente ainsi de grandes disparités dans la répartition de la puissance solaire: les ensoleillements moyens sur l'année peuvent atteindre 7 kW/m<sup>2</sup>/jour dans le nord de l'Australie et au Botswana. En Europe occidentale, la puissance se situe autour de 3kW/m<sup>2</sup>/jour pour les pays comme l'Espagne, à moins de 1 KW/m<sup>2</sup>/jour pour le sud de la Suède. La France est soumise à une moyenne annuelle comprise entre 1.5 et 3.1kW/m<sup>2</sup>/jour selon les régions [4].

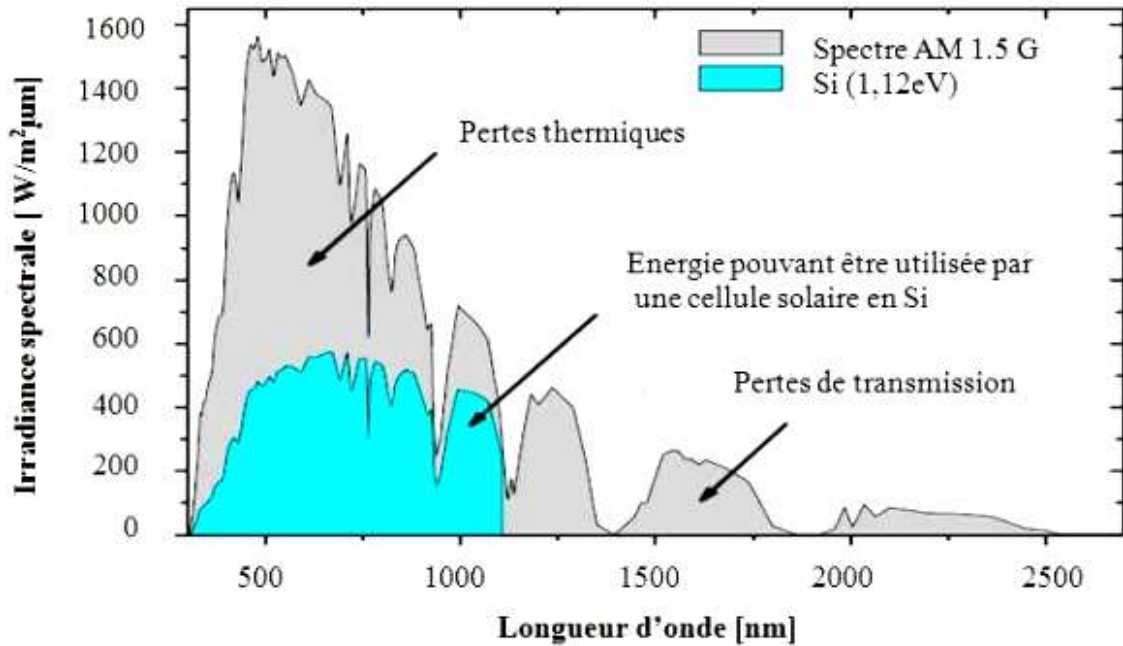


Figure I.4 : Spectre d'émission solaire [3].

## I.4 Cellule photovoltaïque

La cellule photovoltaïque est dispositif électronique destiné à transformer la lumière en électricité, sa structure est une jonction PN c'est-à-dire elle est composée de deux couches : une couche de type P et une couche de type N,. La cellule solaire est basée d'un semi-conducteur qui est en silicium, c'est un convertisseur instantané fournissent de l'énergie électrique s'il reçoit une énergie solaire sous forme de rayonnement. Se comporte alors comme en génération de courant continue [5] .

### I.4.1 Conversion photovoltaïque

La conversion d'une énergie solaire (énergie du photon) en énergie électrique est appelée L'effet photovoltaïque. Ce dernier a été découvert par Antoine Becquerel en 1839 qui mit en évidence l'apparition d'une tension aux bornes de deux électrodes immergées dans une solution électrolytique, lorsque celle-ci était exposée à la lumière naturelle [3].

L'énergie photovoltaïque a suscité un intérêt grandissant et de nombreuses avancées technologiques ont été réalisées jusqu'à présente travers à plusieurs filières technologiques.

La production d'électricité d'origine photovoltaïque est accrue de manière exponentielle depuis 2001 et les projections sont assez optimistes pour les années à venir.

La recherche dans le domaine de l'énergie solaire photovoltaïque est appelée à surmonter le défi suivant: améliorer le rendement de conversion des cellules solaires tout en diminuant le coût de production de l'énergie propre pour assurer une utilisation très large et la rendre accessible à tous [4].

Le développement de l'énergie photovoltaïque passe obligatoirement par une recherche accentuée pour résoudre cette énigme. trois axes essentiels doivent être optimisés séparément par un choix déterminant :

- le matériau;
- la technique de croissance;
- la structure.

En considérant le coût de fabrication, la cellule doit être conçue au moyen de couches minces assurant un gain énorme de matière, ce qui revient à choisir la filière des matériaux photovoltaïques à grand pouvoir d'absorption [5].

#### **I.4.2 Principe de fonctionnement**

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière [6]. Ce matériau comporte deux parties, l'une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type n et dopée de type p. 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 vers 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 égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite communiquent leur énergie aux atomes, chacun fait passer un électron de la bande de valence dans la bande de conduction et laisse aussi un trou capable de se mouvoir, engendrant ainsi une paire électron-trou. 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-4).

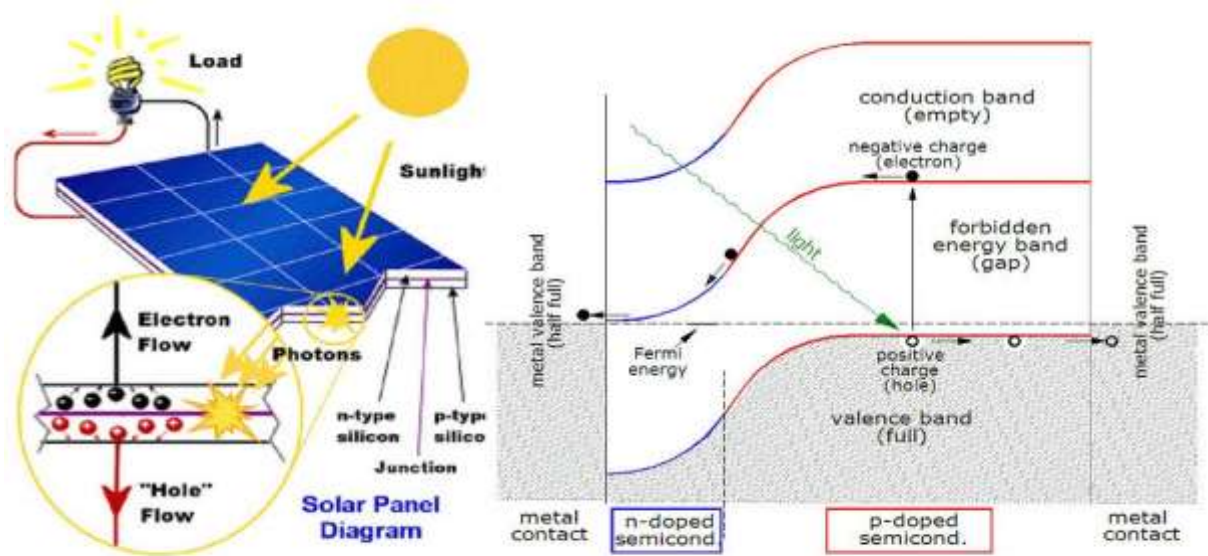


Figure I.5 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [6].

Il convient donc de noter que la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si trois phénomènes physiques de base ont lieu quasi simultanément :

- l'absorption d'un maximum de photons possible.
- La transformation de l'énergie ainsi absorbée en charges électriques libres.
- La collecte, sans perte, de ces derniers vers un circuit électrique extérieur.

Le premier phénomène est l'absorption optique de photons par un matériau semi-conducteur approprié dans la partie la plus intense du spectre solaire [7] (Fig. (I.4)). Si l'on prend un semi-conducteur à grand gap, l'absorption sera limitée aux petites longueurs d'onde, dans l'ultra-violet, alors que la partie la plus importante du spectre solaire se situe dans le visible et le proche infra-rouge. Pour absorber un maximum de photons, il faudrait donc un semi-conducteur possédant un petit gap. Mais alors la tension de sortie est proportionnelle au gap, donc la puissance de la photopile ( $P = I V$ ) seraient trop faibles pour exploiter cette pile. La valeur optimale du gap du matériau utilisé comme absorbeur se situe vers 1.5 eV. Le second concerne la séparation rapide des électrons et des trous avant leur recombinaison. Le troisième porte sur l'entraînement des électrons et des trous vers les électrodes collectrices (collecte des porteurs).

### **I.4.3 Absorption optique**

L'absorption des photons est la première étape nécessaire au processus de conversion photovoltaïque. La plus élémentaire est celle d'un photon d'énergie  $h\nu$  qui excite un électron d'un niveau de basse énergie vers un niveau de plus haute énergie. Ainsi, l'une des propriétés d'un matériau photovoltaïque est son coefficient d'absorption ( $\alpha$ ). L'exploitation du spectre d'absorption permet de calculer toutes les transitions que peut subir un électron et ainsi accéder à la distribution des niveaux énergétiques dans le semi-conducteur. Ce coefficient est donc lié à l'énergie du gap en fonction des énergies des photons incidents, d'après les relations établies par Pankove [8] et qui permettent de déterminer la nature des transitions existantes entre les bandes d'énergies.

Le spectre solaire s'étend de l'ultra-violet à l'infrarouge lointain en passant par le domaine de visible. La partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la Terre concerne le domaine du visible (390-780 nm) et du proche infrarouge (Figure (I.4)). L'énergie de photon correspondant à une radiation donnée est reliée à sa longueur d'onde par la relation :

$$E_p (eV) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.24}{\lambda(\mu m)} \quad (I.3)$$

$\nu$  : Fréquence de la radiation;

$\lambda$  : Longueur d'onde de la radiation en  $\mu\text{m}$ ;

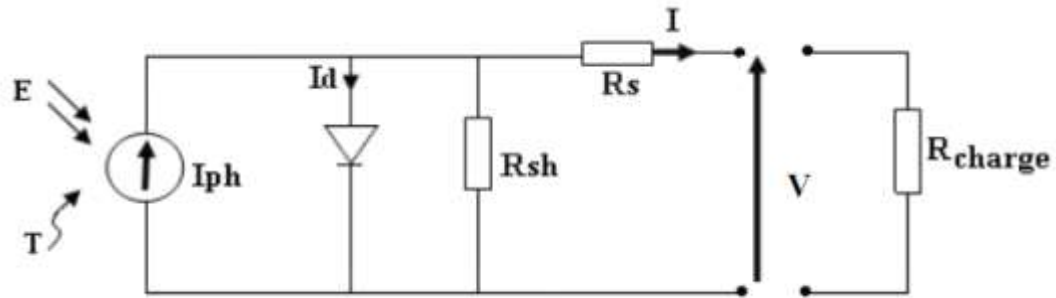
$c$  : Vitesse de la lumière ;

$E_p$  : Énergie du photon en eV;

$h$  : Constant de Planck.

### **I.4.4 Schéma électrique équivalent**

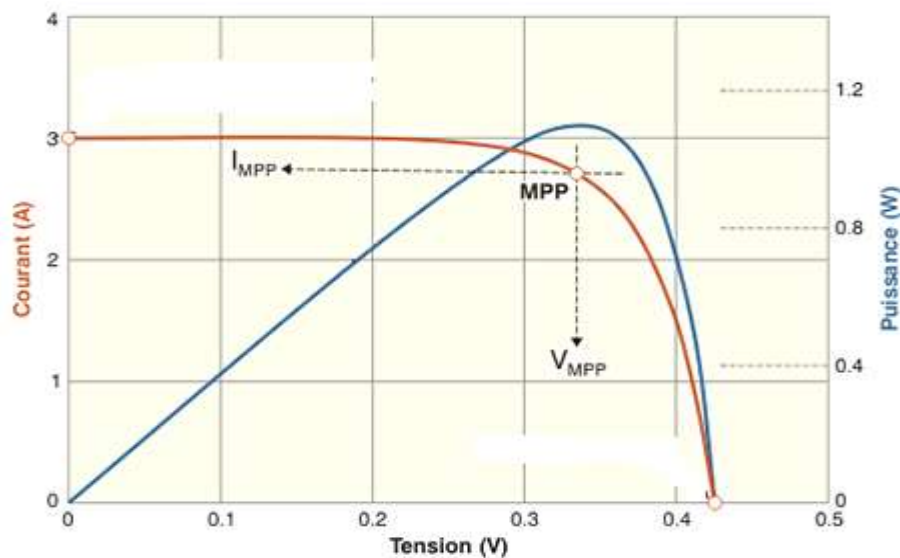
Le schéma équivalent est représenté par une diode idéale montée en parallèle avec une source de courant (figure I.6). Les résistances série  $R_s$  et shunt  $R_{sh}$  modélisent les pertes engendrées par la résistivité des couches et la présence de courants de fuite [9].



**Figure I.6:** Schéma électrique réel d'une cellule solaire [9].

#### I.4.5 Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque

Les paramètres d'une cellule photovoltaïque sont déterminés à partir de la courbe caractéristique courant-tension (I-V) (Figure (I.7)) qui décrit le fonctionnement de la cellule.



**Figure I.7 :** Représentation conventionnelle de la courbe I(V) et P(V) [9].

Les grandeurs caractéristiques principales des cellules solaires sont :

- $V_{CO}$  : Tension de circuit-ouvert, cette valeur représente la tension générée par une cellule éclairée non raccordée.
- $I_{CC}$  : Courant de court-circuit, cette valeur représente le courant généré par une cellule éclairée raccordée à elle-même.
- MPP : point de la puissance maximale, est obtenu pour une tension et un courant optimaux :

$V_{opt}$ ,  $I_{opt}$  (appelés aussi  $V_{mpp}$ ,  $I_{mpp}$ ) [10].

- Le Facteur de Forme :  $FF$ .

- Le rendement de conversion d'énergie :  $\eta$ .

Les paramètres propres à la cellule photovoltaïque ( $V_{co}$ ,  $I_{cc}$ ,  $FF$ ,  $\eta$ ), extraits de la caractéristique I-V, permettent de comparer différentes cellules éclairées dans des conditions identiques.

#### a- Courant de court-circuit, $I_{cc}$

Il s'agit du courant obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule (en prenant  $V=0$  dans le schéma équivalent). Il croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule et dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température.

#### b- Tension de circuit-ouvert, $V_{co}$

La tension à circuit ouvert est obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul. Elle dépend de la barrière d'énergie et de la résistance shunt. Elle décroît avec la température et varie peu avec l'intensité lumineuse.

La tension  $V$  est donnée par la relation :

$$V_{CO} = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right) \quad (I.7)$$

#### c- La puissance maximale, $P_m$

Le point de fonctionnement est imposé par la résistance de charge et non par la cellule elle-même. Un choix judicieux de la résistance de charge permettra donc d'obtenir la puissance maximale, soit :

$$P_m = I_m \times V_m \quad (I.8)$$

Avec :

- $V_m$  : la tension correspondante à la puissance maximale fournie;
- $I_m$  : le courant correspondant à la puissance maximale fournie.

**d- Facteur de forme, FF**

La puissance fournie au circuit extérieure par une cellule photovoltaïque sous éclairement dépend de la résistance de charge (résistance externe placée aux bornes de la cellule). Cette puissance est maximale pour un point de fonctionnement  $P_m$  ( $I_m$  et  $V_m$ ) de la courbe courant- tension. Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_m}{V_{oc} I_{cc}} \quad (I. 9)$$

Dans le cas d'une cellule idéale le facteur de forme FF ne peut pas être supérieur à 0.89 du fait de la relation Exponentielle liant courant et tension.

**e- Le rendement,  $\eta$** 

Le rendement  $\eta$  des cellules photovoltaïques désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre le rapport maximal délivré par la cellule et la puissance lumineuse incidente [10] :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{FF V_{oc} I_{cc}}{P_{in}} \quad (I.10)$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert.

**I.5 Types de cellules photovoltaïques****I.5.1 Cellules cristallines**

Ces cellules, généralement en silicium, ne comprennent qu'une seule jonction p-n.

On distingue deux types de cellules cristallines:

**a- Cellules en silicium polycristallin**

Les techniques de production du silicium polycristallin sont beaucoup plus simples que celles du silicium monocristallin, et donc bien moins chères à mettre en oeuvre. Néanmoins, la qualité de ce matériau est moins bonne à cause de la présence de joints de grains qui introduisent des zones fortement recombinantes et un taux assez élevé des impuretés métalliques et autres. Ces joints sont constitués par les surfaces adjacentes des grains d'orientations cristallographiques différentes et contiennent beaucoup de liaisons pendantes. Ils ont pour effet de réduire la durée de vie globale des porteurs.

En outre, ces joints de gains bloquent le flux de porteurs et ils constituent une voie éventuelle d'un courant de fuite à travers la jonction. Ce genre de cellule est également bleu, mais pas uniforme, on distingue des motifs créés par les différents cristaux [12].



**Figure I.8 :** Photo d'un substrat de silicium polycristallin (échelle :  $10 \times 10 \text{ cm}^2$ ) [7]

#### **b- Cellules en silicium monocristallin**

Les cellules au silicium monocristallin offrent le meilleur rendement parmi les panneaux solaires disponibles dans le marché : entre 13 à 15%. Il faudra donc moins de cellules pour atteindre la puissance désirée, mais comme le silicium monocristallin est aussi le plus cher, son seul avantage est finalement d'utiliser une surface réduite : il faut environ  $7 \text{ m}^2$  pour obtenir 1 kilo-Watt-crête (kWc).



**Figure I.9:** Cellule photovoltaïque à base de silicium monocristallin [7].

### **I.5.2 Cellules à base de couches minces**

#### **a- Cellules en silicium amorphe**

Ses atomes sont donc agencés sans réelle organisation, ce qui leur permet de mieux capter la lumière (par rapport au silicium cristallin).

Problème : les charges générées ont plus de difficulté pour se déplacer à cause de la désorganisation de la matière, ce qui se traduit par un mauvais coefficient de conversion.

Par conséquent, leur rendement est faible. La désorganisation atomique a d'autres conséquences. Les électrons de valence des atomes de Si ne forment pas toujours des liaisons covalentes au sein du semi-conducteur. Il apparaît alors des liaisons pendantes qui peuvent dénaturer les propriétés électroniques du matériau. Pour limiter ce phénomène, les couches de silicium sont régulièrement passivées avec de l'hydrogène (a-Si:H). Des atomes d'hydrogène établissent des liaisons avec les électrons restés libres, et réduisent ainsi le nombre de liaisons pendantes [13].

### **b- Cellules CIGS**

Les cellules CIGS renferment un absorbeur composé de cuivre, de gallium, d'indium et de sélénium. Cette couche de 1 à 2,5  $\mu\text{m}$  d'épaisseur étant dopée p, elle doit être recouverte d'un matériau de type n, par exemple du sulfure de cadmium (CdS).

Tiens donc, du cadmium qui pose un problème à l'environnement à cause de la toxicité de Cd, mais il est le plus utilisé avec des épaisseurs de l'ordre de 0.04 à 0.07  $\mu\text{m}$ . Puisqu'il y a deux semi-conducteurs différents, les cellules CIGS sont donc à base des hétérojonctions. Comme son homologue au silicium amorphe, la cellule CIGS résiste mieux à l'échauffement que les cellules au silicium cristallin, mais moins bien que les cellules au CdTe. En plus, elle capte un peu mieux la lumière en début et en fin de journée (quelques pour cent) [13].

### **c- Cellules CdTe**

Le faible rendement des cellules à base de silicium amorphe ont motivé les scientifiques à chercher des alternatives. Le matériau le plus prometteur est le tellure de cadmium (CdTe) qui offre la possibilité de produire des modules à des coûts plus faibles avec un rendement de 10%, et un avantage qui réside dans la forte absorption du tellure de cadmium. Cependant la toxicité du matériau freine le développement de cette technologie [13].

## **I.5.3 Cellules à haut rendement**

### **a- Cellules à jonction**

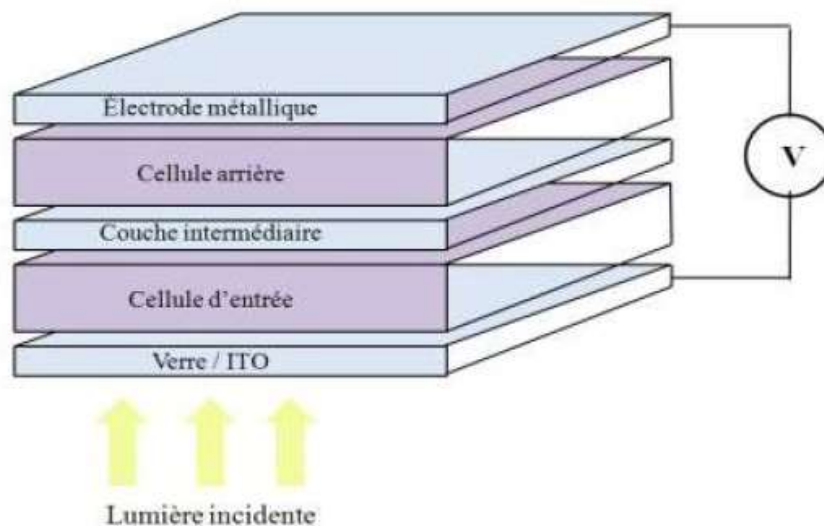
- **Cellules tandem**

Les cellules tandem sont obtenues à partir de deux cellules simples empilées l'une sur l'autre, par exemple, une couche mince de silicium amorphe empilée sur une couche

silicium cristallin. Ce tandem est censée optimiser le rendement comparé à celui produit par des cellules simples seules et ce qu'elles que soient leur caractéristiques, amorphes, cristallines ou microcristallines. Il s'agit de l'empilement de deux cellules l'une sur l'autre. Ces deux cellules sont mises en série grâce à une couche de recombinaison des porteurs de charges.

La tension de circuit-ouvert du dispositif est donc la somme des tensions de circuit ouvert des deux cellules si elles étaient prises seules, et le courant de court-circuit est le plus faible des deux cellules. Cette structure offre l'avantage de pouvoir utiliser deux matériaux dont les bandes interdites (Spectres d'absorption) différentes. Ce dispositif est capable d'absorber la somme des deux spectres d'absorption. Les couches actives peuvent être composées de mélanges polymère/fullerène ou de petites molécules. On peut par ailleurs utiliser différents types de matériaux dans les deux couches, ce qui donne une grande latitude quant à la fabrication de la cellule. La première des cellules tandem était par exemple composée d'une couche de petites molécules évaporées pour la première cellule et d'une couche polymère déposée par voie humide pour la seconde.

Des cellules tandem utilisant différents matériaux ont été testées, qui atteignent des rendements de l'ordre de 6.7% grâce à l'utilisation d'une couche de recombinaison en TiOx et de deux polymères dont les bandes interdites sont différentes [14].



**Figure I.10 :** Schéma d'une structure tandem [9].

Ce type de cellules a commencé à être industrialisé en 2007 au Japon. En Suisse l'entreprise Orlikon considère qu'en 2020, le marché des panneaux à cellules tandem sera

de 30 % de la totalité du marché photovoltaïque et elle en a débuté également la commercialisation en 2007 [18].

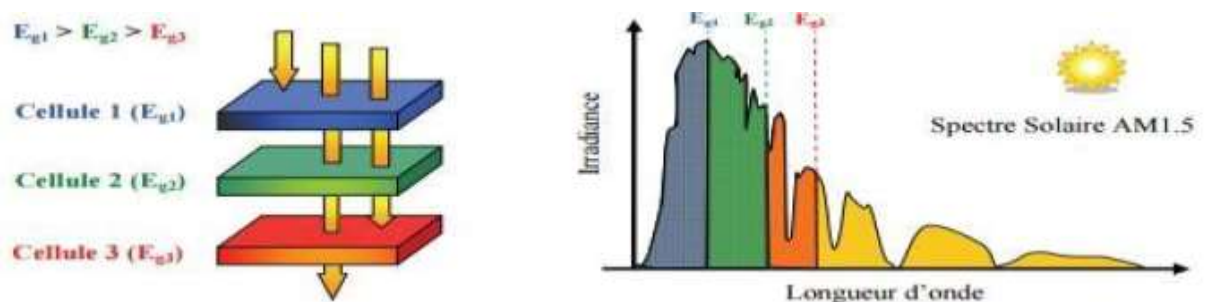
- **Cellules multi-jonctions**

Les cellules multi-jonctions sont constituées à partir de différentes couches minces, ce qui optimise le travail d'absorption de la lumière solaire, et ce qui atteint un meilleur rendement de conversion.

Ce type de cellules n'est pas vendu à des fins commerciales et reste utilisée dans le domaine spatial. Et pour cause, les techniques d'exploitation sont très complexes. On parle de jet moléculaire ou d'épitaxie. Le fonctionnement de ces cellules réside sur le même principe que celui des cellules Tandem. Les cellules multi-jonctions sont composées d'un grand nombre de semi-conducteurs (GaAs, Ge, GaInP<sub>2</sub>...) possédant chacun un spectre limité.

En choisissant des matériaux dont les longueurs d'onde limitées sont les plus proches possibles les unes aux autres, l'ensemble des cellules absorbe un spectre, le plus complet possible donnant à l'ensemble un rendement très élevé pouvant atteindre 50%. Le gros défaut de ces cellules est leur coût de fabrication, car aucune production industrielle n'a encore pu être mise en place.

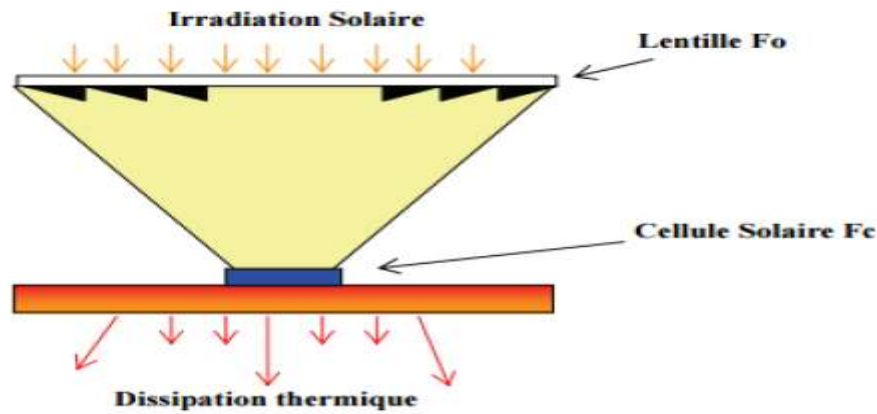
Ces cellules limitent les pertes d'énergie car il suffit d'utiliser des systèmes à plusieurs niveaux, en empilant des jonctions possédant des gaps décroissants, (Figure I.10). Ainsi il est possible d'exploiter le spectre solaire dans sa quasi-totalité avec des rendements de conversion très importants [15].



**Figure I.11** : Principe de la cellule à hétéro-jonctions [10].

En utilisant des concentrateurs solaires, certains pensent pouvoir baisser les prix (moins de surface de cellule utilisée) et prendre une place dans le marché conventionnel terrestre. Ainsi, si on compare le meilleur rendement sans concentrateur d'une triple

jonction GaInP/GaAs/Ge atteignant les 32%, cette même cellule arriverait à 40.7% avec concentrateur. On peut même envisager des rendements encore plus importants avec des cellules complexes de 4 à 6 jonctions [15].



**Figure I.12 :** Schéma de principe d'un concentrateur photovoltaïque [10].

#### **I.5.4 Cellules organique**

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable. L'intérêt de ces cellules vient aussi du fait que, contrairement aux cellules à base de matériaux inorganiques, elles offrent beaucoup d'avantages: la possibilité d'être déposée en grande surface, la facilité de la fabrication et de la manipulation, la possibilité de réaliser ces cellules sur des substrats flexibles, et grâce à des coûts de fabrication et de matériaux plus faibles, ces cellules devraient dans l'ensemble revenir beaucoup moins chères que leurs concurrentes. Elles possèdent en revanche à l'heure actuelle des durées de vie jugées inférieures à celles des cellules inorganiques, et des rendements de conversion plus faibles [16].

#### **I.5.5 Cellules solaires sensibilisées par colorant (CSSC)**

Inspiré par la photosynthèse, l'équipe de Michael Grätzel a développé au début des années 90 des cellules solaires composées d'un électrolyte, d'un colorant et d'un oxyde semi-conducteur inorganique. Le meilleur rendement certifié est de 10,4% pour une cellule de 1 cm<sup>2</sup>, réalisé par la société Sharp [17].

## **I.6 Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque**

### **I.6.1 Avantages**

Cette énergie présente de nombreux avantages, à savoir :

- Les installations photovoltaïques sont en général de haute fiabilité, peu sujettes à l'usure, elles demandent peu d'entretien.
- Le montage des installations photovoltaïques est simple et les installations sont adaptables aux besoins de chaque projet.
- Il s'agit d'une source d'énergie électrique totalement silencieuse ce qui n'est pas le cas, par exemple des installations éoliennes.
- Il s'agit d'une source d'énergie inépuisable.
- L'énergie photovoltaïque est une énergie propre et non-polluante qui ne dégage pas de gaz à effet de serre et ne génère pas de déchets.
- Les systèmes photovoltaïques sont fiables: aucune pièce employée n'est en mouvement. Les matériaux utilisés (silicium, verre, aluminium), résistent aux conditions météorologiques extrêmes.
- Sur les sites isolés, l'énergie photovoltaïque offre une solution pratique pour obtenir de l'électricité à moindre coût.
- Le contrat d'achat est conclu pour une durée assez longue.

### **I.6.2 Inconvénients**

- Un cycle de vie en question : la durée de vie d'une installation photovoltaïque n'est pas éternelle mais de l'ordre de 20 à 30 ans.
- Le rendement des cellules photovoltaïques diminue avec le temps qui passe. On parle en général pour les panneaux photovoltaïques, d'une perte de rendement de 1 % par an.
- De plus, les panneaux solaires contiennent des déchets toxiques: cuivre, chrome, silicium, cadmium et tellure.
- Les rendements des panneaux photovoltaïques sont encore faibles et de l'ordre de 20% (pour les meilleurs). L'énergie photovoltaïque convient donc mieux pour des projets à faible besoins, comme une maison unifamiliale [18].

## I.7 Conclusion

Le monde de la conversion photovoltaïque, aussi bien au niveau de la recherche qu'au niveau industriel, connaît depuis quelques années une mutation profonde associée à l'intérêt croissant pour l'énergie photovoltaïque. Ce chapitre nous a permis d'explorer la relation entre le rayonnement solaire incident et la conversion photovoltaïque dans la cellule solaire éclairée. On a présenté aussi le principe de la conversion photovoltaïque ainsi que les paramètres électriques et les types des cellules photovoltaïques. En fin, nous avons parlé sur les avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque.

Dans le chapitre qui suit on va présenter les propriétés fondamentales de notre matériaux CIGS et de pérovskite qu'ils sont utilisés dans la structure de notre cellule solaire tandem comme des absorbeurs.

### REFERENCES

- [01] MAGISTER en : Génie Electrique. Etude par simulation numérique des propriétés électriques d'une cellule solaire en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). SERDOUK Mohammed Ridha Soutenu publiquement le :13/06/2015
- [02] Ali Sayigh, «Comprehensive Renewable Energy», Elsevier Ltd, UK, 2012.
- [03] J. Royer, T. Djiako, E. Schiler, B. Sadasy, “Le pompage photovoltaïque”, Université d'Ottawa,1998.
- [04] N. Oleksiy, “ Simulation, fabrication et analyse des cellules photovoltaïque à contacts arrières interdigités”, thèse de doctorat, Institut nationale des sciences appliquées, Lyon,2005.
- [05] Nichapour OleKsiy (simulation, fabrication et analyse de cellule photovoltaïque à contacte arrières interdigités) Thèse de doctorat. L'institut national des sciences appliquées de Lyon 2005.
- [06] Kirchartz T, Taretto K, Rau U. Efficiency limits of organic bulk heterojunction solar cells. The J PhysChemC2009;113:17958–66.
- [07] A. Ricaud – Photopiles solaires « De la physique de la conversion photovoltaïque aux filières, matériaux et procédés ». Presses Polytechniques et Universitaires Romandes, Lausanne (1997).

- [08] J. I. Pankove, Prentice-Hall Inc. Englewood N.J. (1971) 36.
- [09] Kateb Mohammed Nadjib, Mokrani zakaria, "Conception et simulation électrique d'une cellule solaire en Si par le logiciel Tcad-Silvaco", mémoire de master, université Biskra, 2011.
- [10] <http://www.energieplus-lesite.be/index.php?id=16696>
- [11] M. LASLAD, simulation numérique des cellules solaires troisième génération pour des applications spatiales, thèse de magister, université de Sétif, 2014.
- [12] N. BANDADLA, optimisation des émetteurs sélectifs et passivables des cellules solaires conventionnelles à base de mc\_si, mémoire de magister, université de Tlemcen, 2012.
- [13] K. AMARA, Contribution à l'étude d'une conception d'une centrale photovoltaïque de puissance (1MW) interconnectée au réseau de distribution électrique moyenne tension, thèse de magister, université de Tizi- Ouzou, 2015.
- [14] M. C. ABDELLI, Etude des cellules photovoltaïques organiques, mémoire de master, université de Tlemcen, 2013.
- [15] S. PETIBON, Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques, thèse de doctorat, université de Toulouse, 2009.
- [16] M. BELARBI, Modélisation des paramètres électriques d'une cellule solaire sensibilisée par colorant, mémoire de master, université de Tlemcen, 2013.
- [17] F. NEMMAR BELHOCINE, Etude et réalisation de cellules solaires photovoltaïques à base de matériaux organiques, thèse de doctorat, université de Tizi-Ouzou.

# *Chapitre II*

## *Propriétés des Matériaux CIGS et Pérovskite*

## **II.1 Introduction**

De très nombreux efforts de recherche ont été réalisés sur un grand nombre de matériaux depuis une quarantaine d'années, afin d'arriver à des cellules photovoltaïques qui possèdent un bon rendement de conversion avec un faible coût.

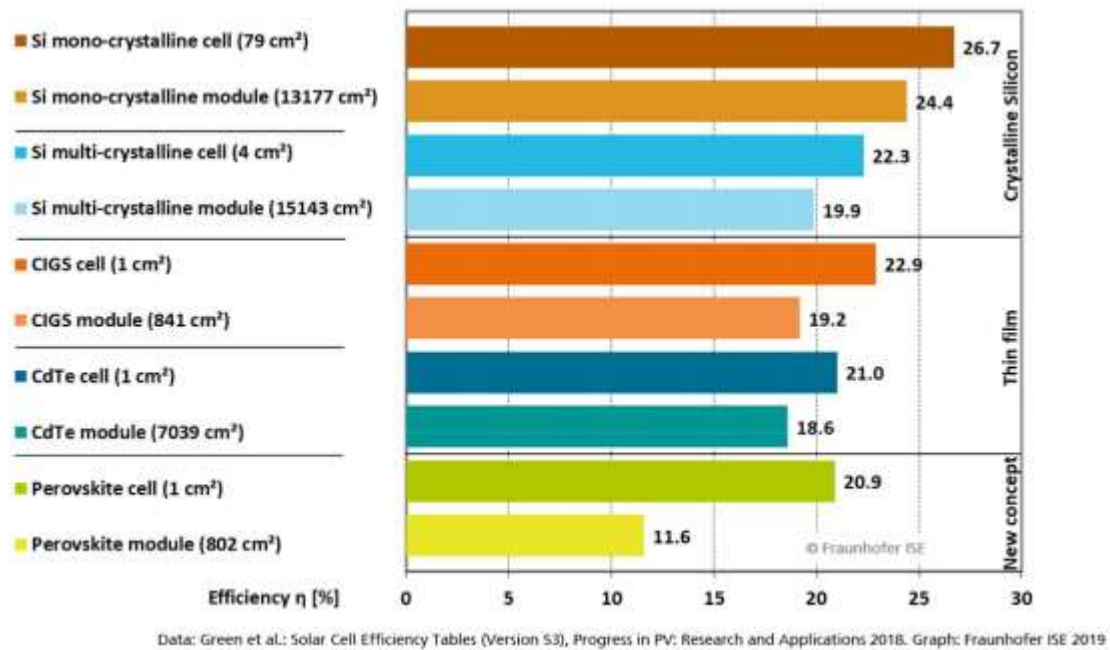
Historiquement, deux matériaux ont été particulièrement étudiés et ont fait l'objet d'une industrialisation: le silicium amorphe et le tellure de cadmium (CdTe). Malgré les efforts entrepris, le rendement maximum de ce type de cellules, pour des tailles significatives, reste malheureusement limité. Ceci est dû à la difficulté d'obtenir ce type de matériau avec une faible densité de défauts et de bonnes propriétés électroniques. Le silicium amorphe souffre en plus d'un effet de vieillissement lié à l'instabilité de l'hydrogène dans sa structure et la présence du cadmium, un métal lourd de toxicité comparable à celle de mercure, rend le CdTe relativement inapproprié à une application à grande surface [01].

Récemment, des avancées remarquables ont été obtenues sur des autres types de matériaux comme  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  et le pérovskite qui sont l'objet de notre étude.

Le premier matériau étudié de filière de matériaux chalcopyrites est le  $\text{CuInSe}_2$ . Il a été synthétisé pour la première fois en 1953 par Hahn. Ce n'est qu'en 1974 qu'il a été proposé pour des applications photovoltaïques [2,3]. C'est dans ces mêmes années 70, qu'un premier examen complet sur ces composés a été donné par Shay et Wernick. Plus tard, Pamplin a édité plusieurs revues au sujet de la thermodynamique des changements de phase [4,5]. Ces travaux étaient presque entièrement consacrés aux monocristaux. Il a été élaboré sous forme de couches minces poly-cristallines comme couche active en 1983. Les premiers rendements obtenus étaient de l'ordre de 10%, enregistrés par la société Boeing Corp, en utilisant le procédé de la Co-évaporation à trois creusets. En 1987, la société Arco Solar a donné un rendement de 10.1%. Ce n'est qu'à partir de 1990 que la substitution du Gallium par l'Indium a été réalisée, pour former les composés quaternaires  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) dans le but d'améliorer les rendements de conversion photovoltaïque déjà obtenus. Il a fallu presque dix ans pour que ce résultat soit concrétisé dans la production industrielle des modules solaires. L'année 1998 marque la date du premier module solaire industrialisé à base de  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  [6].

D'autre part, L'efficacité des cellules photovoltaïques utilisant les matériaux pérovskite est en constante augmentation depuis la fin des années 2000. Elle est passée de 3.8% en 2009 à 24.2% en 2019, et 28% pour le tandem de pérovskite et de silicium, soit une efficacité supérieure aux cellules photovoltaïques à simple jonction en silicium.

Les cellules à pérovskites sont donc en 2016 la technologie solaire ayant eu le développement le plus rapide de l'histoire. À ce jour (en 2016) restent encore des problèmes de stabilité structurale à résoudre. Cependant avec un potentiel encore important d'amélioration de la performance et des coûts de production faibles, les cellules à pérovskite sont devenues commercialement attractives, et des start-up annoncent déjà des modules sur le marché d'ici 2017 [7,8].



**Figure II.1 :** Meilleurs rendements (en conditions nominales, cellules mono-jonction) et modules (ou panneaux) des principales technologies commerciales [08].

## II.2 Matériaux CIGS

### II.2.1 propriété fondamentale de CIGS

Le rendement d'une cellule solaire à base de CIGS est fortement dépendant des propriétés du matériau absorbant. Comme dans le cas d'autres semi-conducteurs, la structure cristalline du CIGS ainsi que sa composition peuvent fortement influencer sur ses propriétés optiques et électroniques. La bonne compréhension de la structure de ce matériau est donc nécessaire dans le but d'optimiser un dispositif à base de CIGS.

Le CIGS est un semi-conducteur composé de quatre matériaux semi-conducteurs (quaternaire), di-sélénure de cuivre, d'indium et de gallium.

Les principaux avantages de ce matériau consistent en une très bonne stabilité et des caractéristiques optoélectroniques performantes, notamment un fort coefficient

d'absorption optique ( $\alpha > 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ). Quelques micromètres d'épaisseur suffisent à absorber la partie utile du spectre solaire. Ce qui se répercute de manière significative sur le coût de fabrication.

Les composés CIGS, possèdent de bonnes propriétés telles qu'un coefficient d'absorption très élevé ( $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) et une bande interdite qui varie dans une gamme de 1 eV à 1.6 eV, ce qui rend les cellules solaires à base de ces composés très utilisées dans le domaine photovoltaïque [09].

## II.2.2 Structure cristallographique du composé CIGS

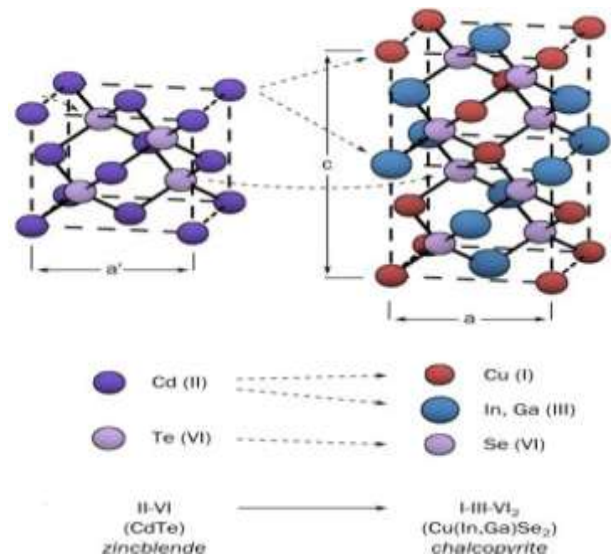
Le matériau à base du CIGS est le CIS ( $\text{CuInSe}_2$ ). C'est un semi-conducteur I-III-VI<sub>2</sub> (Figure I.2) qui possède une structure cristalline chalcopyrite. Cette structure tétragonale peut être décrite comme un empilement de deux structures zinc-blende dans lequel les sites tétraédriques sont occupés par des atomes du groupe III (Se) (anions) et les autres sites sont occupés de manière ordonnée par des atomes des groupes I (Cu) et II (In) (cations). Le ratio des paramètres de maille  $c/a$  est légèrement différent de 2 (distorsion tétraédrique), ce qui est dû à des différences d'énergie entre les liaisons Cu-Se et In-Se.

Dans le cas du CIGS, les sites des atomes du groupe III sont donc occupés par des atomes d'In ou de Ga, dans des proportions dépendant de la composition de l'alliage.

En d'autres termes, le CIGS est une solution solide de  $\text{CuInSe}_2$  et de  $\text{CuGaSe}_2$ . La figure I-3 présente les différences de structure cristalline entre deux matériaux semi-conducteurs utilisés dans le photovoltaïque: le CdTe et le CIGS [10].

																VIIIA	
																He	
																4.003	
		IIIA	IVA	VA	VIA	VIIA										Ne	
		B	C	N	O	F										20.183	
		10.811	12.011	14.007	16.000	18.998										20.183	
		3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar										39.948
63.54	65.37	26.982	28.086	30.974	32.06	35.453	39.948										39.948
29	30	31	32	33	34	35	36										83.80
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr										83.80
107.87	112.40	114.82	118.69	121.75	127.60	126.904	131.30										131.30
47	48	49	50	51	52	53	54										131.30
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe										131.30
107.87	112.40	114.82	118.69	121.75	127.60	126.904	131.30										131.30
79	80	81	82	83	84	85	86										208.980
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn										208.980
196.967	200.59	204.37	207.19	208.980	209	210	222										208.980

**Figure II.2 :** classification périodique des éléments constituant la famille I-III-VI<sub>2</sub> [10].



**Figure II.3 :** Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du CdTe et du CIGS Structure chalcopyrite d'après [11].

## II.2.3 Propriétés optiques

### II.2.3.1 Coefficient d'absorption ( $\alpha$ )

L'absorption optique d'un matériau reflète les bandes d'énergie de celui-ci. Un photon d'énergie  $E$  absorbé par le matériau induit des transitions électroniques entre les différents états. Ainsi, pour chaque photon absorbé, un transfert d'énergie  $E$  est réalisé du faisceau lumineux incident vers le milieu absorbeur. Le coefficient d'absorption  $\alpha(E)$  est défini par [11]:

$$I(x) = I_0 \cdot \exp(-\alpha x) \quad (\text{II.1})$$

où  $I(x)$ : est l'intensité lumineuse traversant le matériau dans la direction  $x$ .

$I_0$ : l'intensité lumineuse incidente.

Une absorption maximale de la lumière sur tout le spectre solaire est l'une des propriétés les plus importantes qui doit posséder un absorbeur pour les cellules solaires. Le CIGS a un coefficient d'absorption très élevé ( $10^5 \text{ cm}^{-1}$ ). Ce coefficient d'absorption se calcule à partir de l'équation:

$$\alpha = \left(\frac{1}{d}\right) \ln \left[ \left(\frac{(1-R^2)}{2T^2}\right) + \left(\frac{(1-R^2)^4}{4T^2} + R^2\right)^{\frac{1}{2}} \right] \quad (\text{II.2})$$

où  $d$ : est l'épaisseur de la couche.

$T$ : la transmission de l'échantillon.

$R$ : la réflectivité de l'échantillon.

Dans les semi-conducteurs, l'absorption fait intervenir en plus des états délocalisés (bande de valence et de conduction), les états localisés des queues de bandes et de la bande interdite. Les spectres d'absorption présentent alors, en fonction de l'énergie, trois régions

- Une queue à faible absorption à basse énergie. Une absorption résiduelle généralement associée à la présence de défauts localisés (impuretés, ...);
- Une queue exponentielle à moyenne énergie. Une absorption qui aurait pour origine des transitions qui impliquent les queues de bandes. Elle varie selon une loi exponentielle:

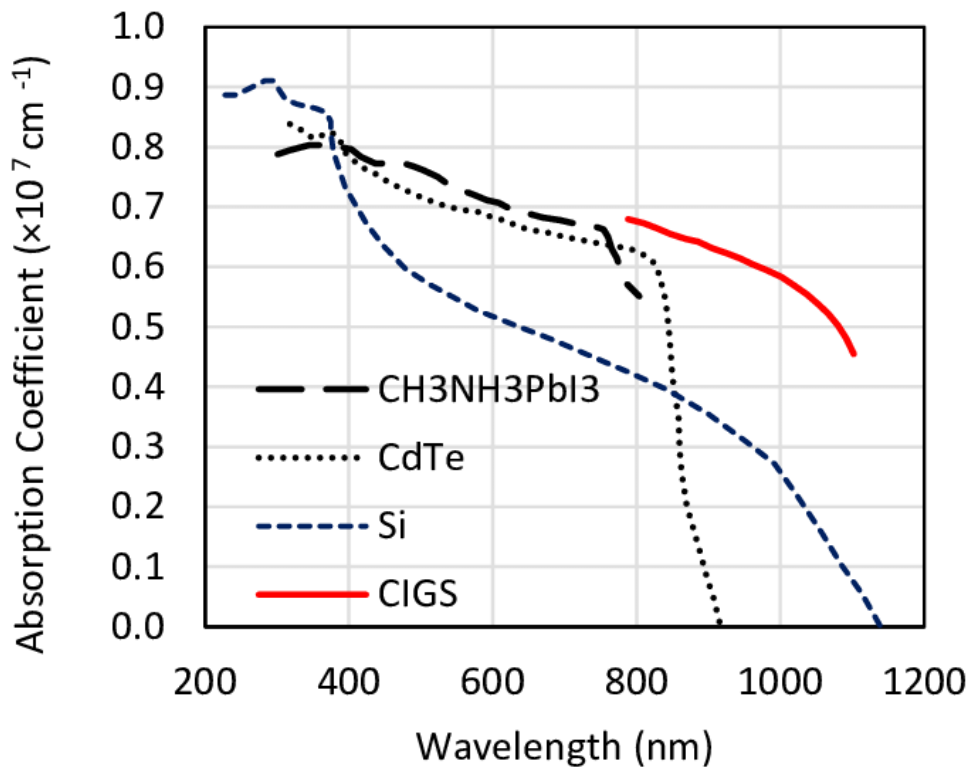
$$\alpha = c \exp \beta(h\nu) \quad (\text{II.3})$$

- Une composante de forte absorption à haute énergie. Le coefficient d'absorption est lié à l'énergie du gap et aux énergies des photons incidents selon la relation:

$$\alpha = \frac{A}{h\nu} (h\nu - E_g)^\beta \quad (\text{II.4})$$

Où  $E_g$  est l'énergie de la bande interdite,  $A$  est une constante,  $h$  la constante de Planck et  $\beta = 1/2, 3/2$  et  $2$ , respectivement pour une transition directe permise, une transition directe interdite et une transition indirecte permise. Dans le cas du CIGS,  $\beta = 1/2$ .

Le coefficient d'absorption  $\alpha$  pour le  $\text{CuInSe}_2$  est très grand. Il est supérieur à  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  pour  $E_g = 1.04 \text{ eV}$  et des énergies de photons plus élevées [12].



**Figure II.4 :** Représentation des coefficients d'absorptions de quelques matériaux en fonction de longueur d'onde [12].

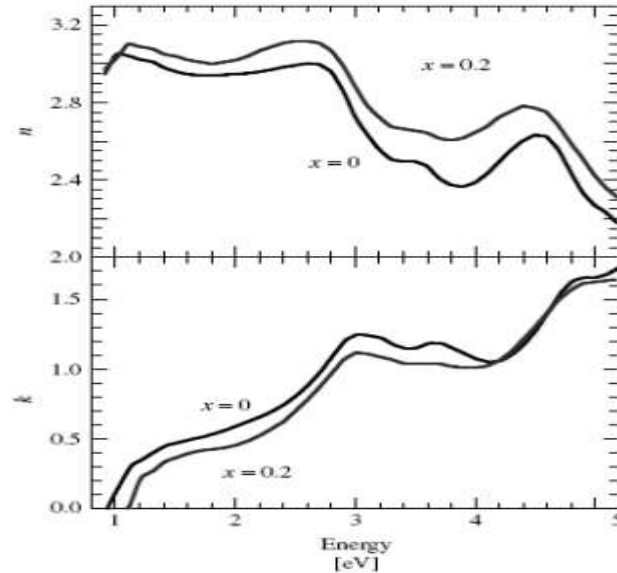
### II.2.3.2 Constante optique (indice de réfraction)

Les Courbes de la Figure I.5 représentent l'indice de réfraction complexe,  $\eta = n + ik$  ( $n$ : indice réel). Pour des échantillons  $x = 0$  et  $0.2$  ( $x$  étant la concentration en Ga dans le CIGS). L'indice de réfraction complexe ( $k$ ) peut être utilisé pour calculer d'autres paramètres optiques comme le coefficient d'absorption.

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (\text{II.5})$$

Avec  $k$ : Indice imaginaire.

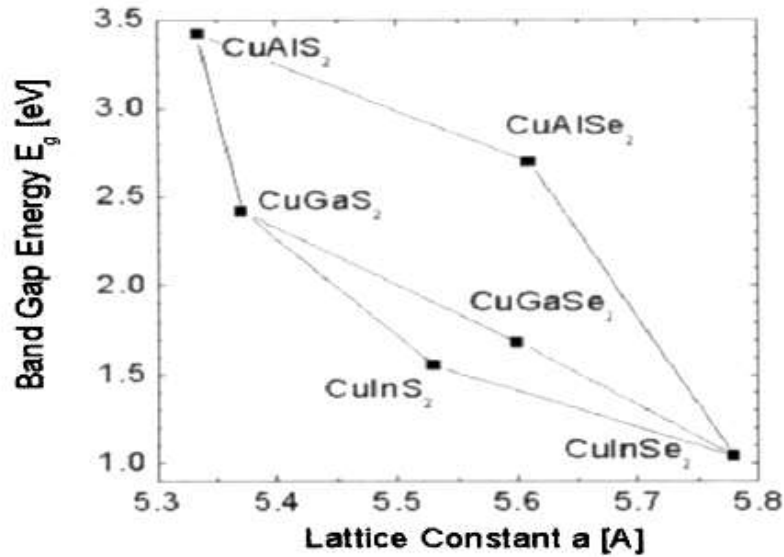
$\lambda$ : Longueur d'onde du photon.



**Figure II.5 :** Représentation des indices de réfraction (réelle et imaginaire) en fonction de l'énergie pour le CIGS, avec  $x = 0$  et  $x = 0.2$  [13].

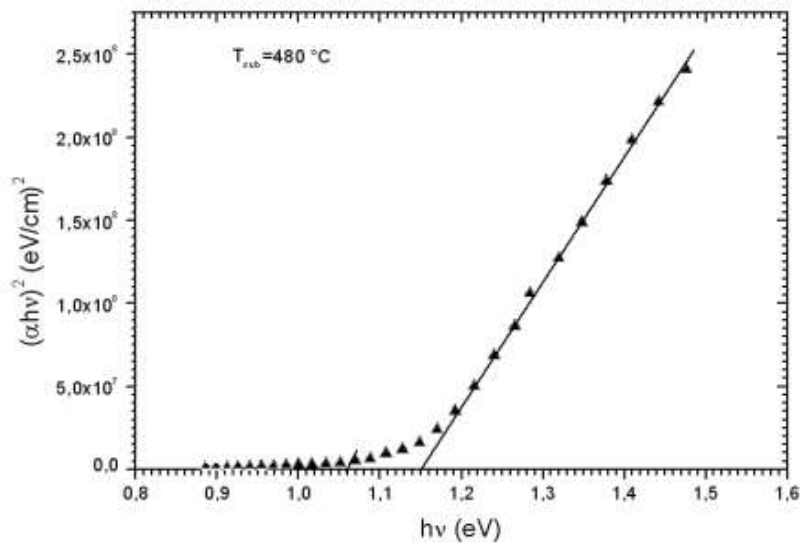
### II.2.3.3 Largeur de la bande interdite (GAP)

Tous ces composés ont une bande d'énergie directe qui occupe une importance dans les matériaux photovoltaïques en couches minces comme des absorbeurs. La Figure (II.6) montre la valeur de la bande interdite en fonction de la valeur du paramètre de maille  $a$  de quelques chalcopyrites.



**Figure II.6 :** Largeur de bande interdite et paramètre de maille  $a$  de certaines chalcopyrites [13].

La valeur de  $E_g$  peut être déterminée à partir de la courbe  $(\alpha hv)^2 = f(hv)$ . L'extrapolation linéaire à  $(\alpha hv)^2 = 0$  de cette courbe permet de déterminer le gap optique  $E_g$ .



**Figure II.7:** Variation de  $(\alpha hv)^2$  en fonction de  $hv$  [14].

La figure II.7 représente le spectre d'absorption de la couche CIGS pour  $x = 0.3$  à la température ambiante. Il est décrit par une dépendance linéaire de 2 en fonction de  $(\alpha hv)$  l'énergie des photons qui est indicatif de la largeur de la bande directe dans le CIS. La largeur de la bande interdite a été estimée par l'intersection de la droite d'extrapolation avec l'axe des énergies, soit:  $E_g = 1.15$  eV [14].

## **II.2.4 Propriétés électriques**

Tout écart à la périodicité du réseau ou à la structure est un défaut. Les défauts ponctuels usuels sont les impuretés, les sites vacants du réseau et les atomes en excès placés en dehors des positions normales du réseau.

Les caractéristiques des matériaux semi-conducteurs sont fortement influencées par les impuretés ou les défauts. Ces derniers sont ajoutés pour pouvoir augmenter la conductivité électrique, mais souvent ces impuretés ou ces imperfections dans le réseau agissent comme facteurs de perte, par conséquent une concentration élevée de défauts diminue la possibilité de transport des porteurs, réduisant ainsi le rendement de conversion.

La nature des défauts usuels pour certains solides est assez bien connue. Beaucoup de propriétés importantes des solides sont déterminées autant par les défauts que par la nature du cristal, qui peut n'intervenir qu'en tant que matrice pour ces défauts. La conductivité de certains semi-conducteurs peut être entièrement due aux impuretés chimiques présentes dans le cristal.

Les défauts et les impuretés sont créés à l'intérieur de la bande interdite, ils peuvent être profonds ou peu profonds. Généralement, un état de défaut est dit peu profond si son niveau d'énergie est proche du minimum de la bande de conduction ou du maximum de la bande de valence. Dans le cas contraire, il est appelé niveau profond. Les niveaux peu profonds dopent le matériau, les niveaux profonds sont des pièges de porteurs libres, ils captent les porteurs apportés par le dopage. Il est nécessaire de connaître et contrôler les défauts et impuretés créant tous ces niveaux d'énergie, pour les introduire dans le matériau dans le cas des niveaux peu profonds, ou pour les éliminer dans le cas des niveaux profonds. L'étude des centres de défauts se fait souvent à partir de la luminescence et de mesures capacitives (Deep Level Transient Spectroscopy, DLTS), celles-ci étant surtout utilisées pour les niveaux profonds. Il existe deux grandes classes de défauts: les défauts ponctuels et les défauts cristallins [15].

### **II.2.4.1 Défauts ponctuels**

#### **a. défauts intrinsèques**

Ces défauts sont liés aux imperfections du réseau cristallin. Ils sont présents dans tous les cristaux quelle que soit la technique employée pour leur croissance. Ils introduisent des niveaux d'énergie peu profonde. Parmi ces défauts on distingue:

- **Les lacunes**

Les lacunes sont des nœuds du réseau où manquent des atomes. Elles se forment surtout à la surface des cristaux, d'où, grâce aux déplacements des atomes, elles diffusent dans le cristal. Dans les ternaires I-III-IV<sub>2</sub>, les lacunes sont présentées par:

- Les vacances de cuivre  $V_{Cu}$  de type accepteur.
- Les vacances d'Indium  $V_{In}$  de type accepteur.
- Les vacances de sélénium  $V_{Se}$  de type donneur (avec une grande énergie de déformation).

- **Les atomes interstitiels**

C'est un type de défaut dans lequel un atome est transféré d'un site du réseau à une position normalement non occupée par un atome. Dans les ternaires, il est représenté par:  $Cu_i$ ,  $In_i$  ou  $Se_i$ .

- **Les défauts substitutionnels**

Ils correspondent à un échange de position entre deux atomes. Dans les ternaires, ces défauts sont représentés par:  $Cu_{In}$ ,  $Cu_{Se}$ ,  $In_{Cu}$ ,  $In_{Se}$ ,  $Se_{Cu}$ ,  $Se_{In}$ .

**b. Les défauts extrinsèques**

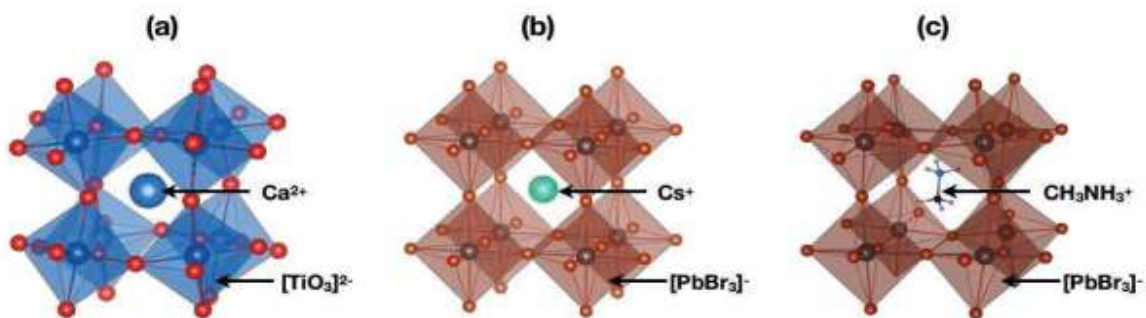
Les défauts extrinsèques ou défauts chimiques sont des impuretés pouvant s'introduire soit involontairement pendant la synthèse cristalline ou le recuit, soit occasionnellement pour effectuer des dopages. Leur présence peut induire des modifications de certaines propriétés physiques du cristal. La présence de ces défauts n'est pas désirable dans le matériau, ils peuvent dégrader ses performances. Leur importance peut être réduite si on utilise des éléments très purs lors de la synthèse cristalline. Les niveaux d'énergie introduits par ces défauts sont profonds.

**II.2.4.2 Les défauts cristallins**

En ce qui concerne les défauts cristallins, on peut citer: dislocations, défauts d'empilement, macles...etc. Les dislocations contribuent à la dégradation des durées de vie des porteurs minoritaires, mais il faut noter que des dislocations ont été observées sur des couches minces de CuInSe<sub>2</sub> ayant servi de matériaux de base des dispositifs présentant des rendements de conversion photovoltaïque supérieurs à 10% [15].

## II.3 Matériaux Pérovskite

La pérovskite a une place privilégiée en chimie du solide, tant par l'éventail de ces applications techniques que par son intérêt fondamental, dont le nom dérive d'un minéral naturel: le titanate de calcium ( $\text{CaTiO}_3$ ), mais elle est également devenue le nom générique des cristaux  $\text{ABO}_3$  possédant la même structure mère. Ce minéral fut découvert pour la première fois en 1839 par le géologue Gustav Rose, et nommé pérovskite en l'honneur du minéralogiste Russe Lev Alekseievitch Perovski (1792-1856). Les formules générales  $\text{ABO}_3$  et  $\text{ABX}_3$  font références à des structures tridimensionnelles (voir Figure II.8), où A et B sont deux cations de rayons ioniques très différents (les atomes A sont plus grands que les atomes B) et X un anion (généralement  $\text{O}^{2-}$ ,  $\text{S}^{2-}$  ou un halogène :  $\text{F}^-$ ,  $\text{Cl}^-$ ,  $\text{I}^-$ ). L'intérêt porté aux oxydes de structure pérovskite  $\text{ABO}_3$ , depuis plus de quatre décennies, résulte dans la facilité de changer la nature des cations A et B présents dans la structure. De ce fait cette modifications des éléments entraîne un changement des propriétés du matériau laissant ainsi la porte ouverte à toutes sortes de propriétés physiques (demi métal-licité, semi-conductivité, conductivité ioniques, métal-licité et supraconductivité) en fonction de la nature chimique et électronique des deux atomes (A et B) [16].



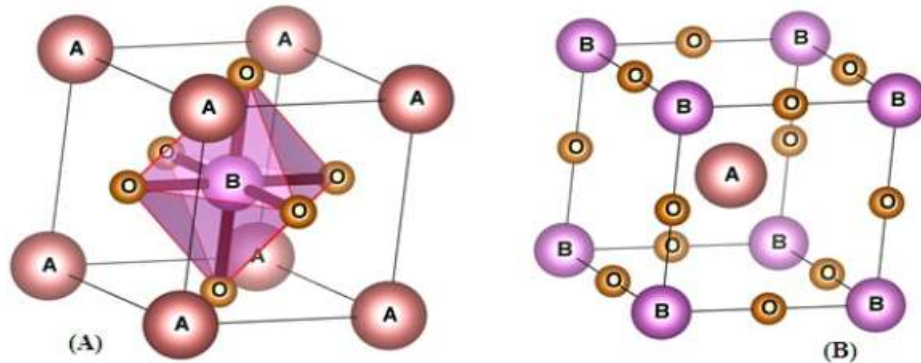
**Figure II.8:** Représentations schématiques des structures cristallines du composé  $\text{CaTiO}_3$  (a), de la pérovskite halogénée  $\text{CsPbBr}_3$  (b), de la pérovskite hybride halogénée  $\text{MAPbBr}_3$  (c). Le cation sur le site A se trouve dans la cavité formé par les octaèdres [16].

### II.3.1 La structure pérovskite $\text{ABO}_3$

Les matériaux pérovskite-oxydes  $\text{ABO}_3$  [17] ont marqué un intérêt grandissant depuis de nombreuses années grâce à la facilité de changer la nature des cations A et B présents dans la structure (selon le besoin) (Figure II.9). Les modifications de ces éléments entraînent un changement des propriétés intrinsèques du matériau produisant ainsi de nouvelles propriétés physiques en fonction de la nature chimique et électronique des

atomes A et B. A ce moment-là, différentes propriétés peuvent être discutées, à titre d'exemple on retrouve:

- La ferroélectricité ( $\text{BaTiO}_3$ ).
- L'anti ferroélectricité ( $\text{PbZrO}_3$ ).
- Le magnétisme ( $\text{LaMnO}_3$ ,  $\text{LaSrMnO}_3$ ).
- Le ferromagnétisme ( $\text{YTiO}_3$ ).
- L'antiferromagnétisme ( $\text{LaTiO}_3$ ).
- La supraconductivité ( $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ ).



**Figure II.9:** représentation de la structure pérovskite  $\text{ABO}_3$  [17].

### II.3.2 La structure pérovskite $\text{ABX}_3$

Cette structure idéale correspondant à la formule  $\text{ABX}_3$  qui est formée d'un empilement de cubes construits avec 3 types d'atomes A, B et X (Figure II.10) où:

- A est typiquement un alcalino-terreux ou cation de terre rare.
- B typiquement un cation de métal de transition.
- X un anion qui peut être oxyde ou fluorure, et dans d'autres cas, chlorure, bromure, iodure, sulfure ou hydruure.

## La formule générale des pérovskites simple $ABX_3$

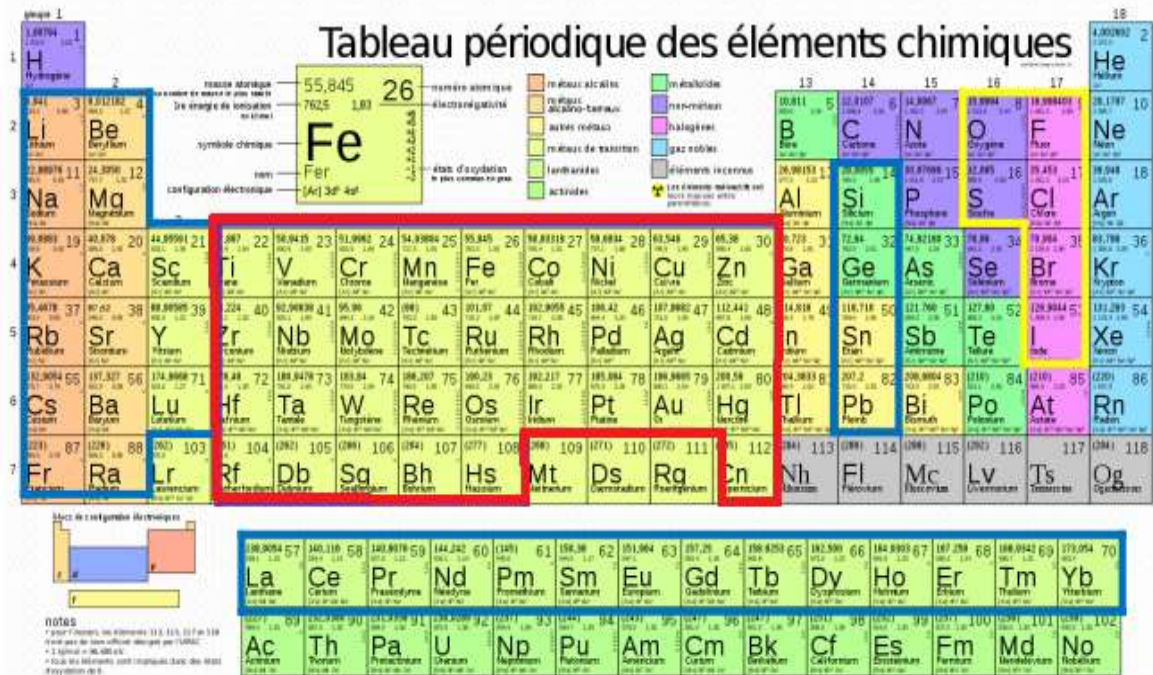


Figure II.10: Représentation générale des pérovskites simples  $ABX_3$  [18].

La figure II.11 décrit schématiquement la structure cristalline  $ABX_3$ . Elle montre clairement que les cations B sont situés dans les sites octaédriques créés par les anions X des couches adjacentes.

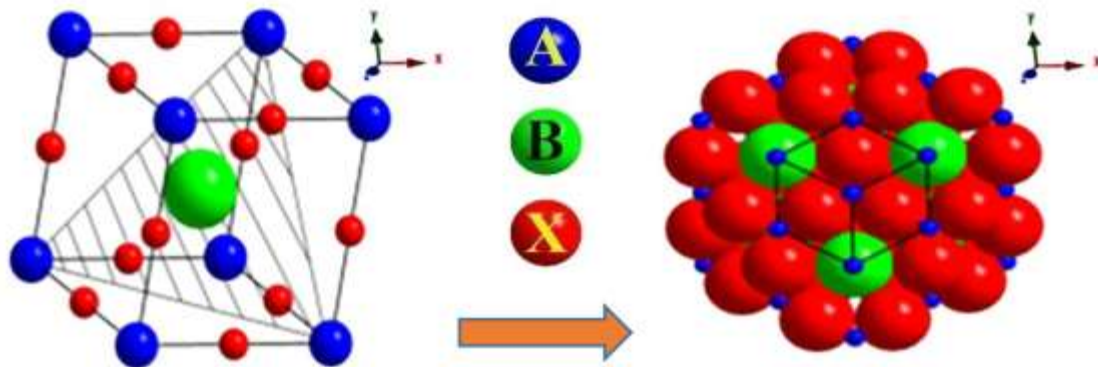


Figure II.11 : Description schématique de la structure cristalline  $ABX_3$  [19].

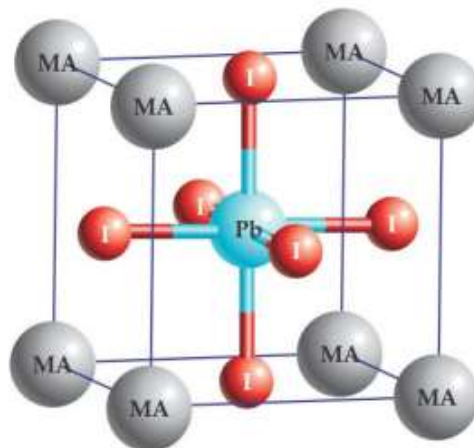
L'anion peut être l'un des ions  $O^{2-}$ ,  $S^{2-}$ ,  $F^-$ ,  $Cl^-$  et  $Br^-$ , d'où les oxydes sont les plus abondants. Cette famille structurale est importante en termes de diversité de composition et

d'abondance. Les statistiques ont montré que plus de 50% du volume terrestre est composé de minéraux pérovskites [18,19].

On distingue généralement quatre types de pérovskites suivant l'occupation des sites A et B:

- Les pérovskites simples dont les sites A et B sont occupés respectivement par un seul type de cation ( $\text{BaLiF}_3$ ,  $\text{AgZnF}_3$ ,  $\text{NaVF}_3$ ,  $\text{NaCoF}_3$ ,  $\text{PbHfO}_3$ , ...).
- Les pérovskites complexes dont l'un des deux sites A ou B est occupé par deux types d'atomes ( $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ ,  $\text{PbSc}_{1/2}\text{Ta}_{1/2}\text{O}_3$ ,  $\text{Na}_{1/2}\text{Bi}_{1/2}\text{TiO}_3$ , ...).
- Les superstructures dont les deux sites A et B sont simultanément occupés par différents types de cations ( $\text{(PbLa)(ZrTi)OLa}_{0.8}\text{Sr}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{Mg}_{0.15}\text{Co}_{0.05}\text{O}_{2.8}$ ).
- Les doubles pérovskites, dénommées parce que le volume de la maille est le double de celui de la pérovskite ( $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ ,  $\text{NdBaCo}_2\text{O}_6$ ).

D'autre part, Si la diversité des structures caractérisées est révélatrice d'une chimie très riche, c'est tout particulièrement grâce au cation occupant le site A. Sa nature chimique conduit à d'autres types de pérovskites. Ainsi, lorsque le cation inorganique sur le site A est remplacé par un cation organique, nous avons affaire à une pérovskite halogénée hybride. Le terme «hybride» reflète le fait de trouver à la fois une partie organique (cation du site A) et une partie inorganique (octaèdres  $\text{MX}_6$ ) au sein d'une même structure. De nombreux cations organiques existent, le méthylammonium ( $\text{MA} = \text{CH}_3\text{NH}_3^+$ ) demeure le plus répandu parmi les pérovskites halogénées hybrides. Avec ce dernier cation, nous pouvons obtenir des structures 3D, comme par exemple  $\text{MAPbI}_3$  (voir la figure II.12) ou  $\text{MAPbBr}_3$  [20].



**Figure II.12** : Structure cubique de la pérovskite  $\text{MAPbI}_3$  [20].

Alors ils existe deux types de pérovskite:

- Oxyde inorganique pérovskite;
- Pérovskite aux halogénures.

Nous souhaitons utiliser l'halogénure organique de métal Pérovskite. Dans le cas des cellules solaires en pérovskite, les dispositifs les plus efficaces jusqu'à présent ont été fabriqués avec la combinaison de matériaux suivante sous la forme habituelle de pérovskite  $ABX_3$ :

- A : Un cation organique – le méthylammonium ( $MA=CH_3 NH^{+3}$ );
- B : Un gros cation inorganique - généralement du plomb (II) ( $Pb^{+2}$ );
- $X_3$  : Un anion halogène légèrement plus petit - généralement du chlorure ( $Cl^-$ ) ou de l'iodure ( $I^-$ ).

La figure II.13 représente le diagramme de la classification du système de pérovskite.

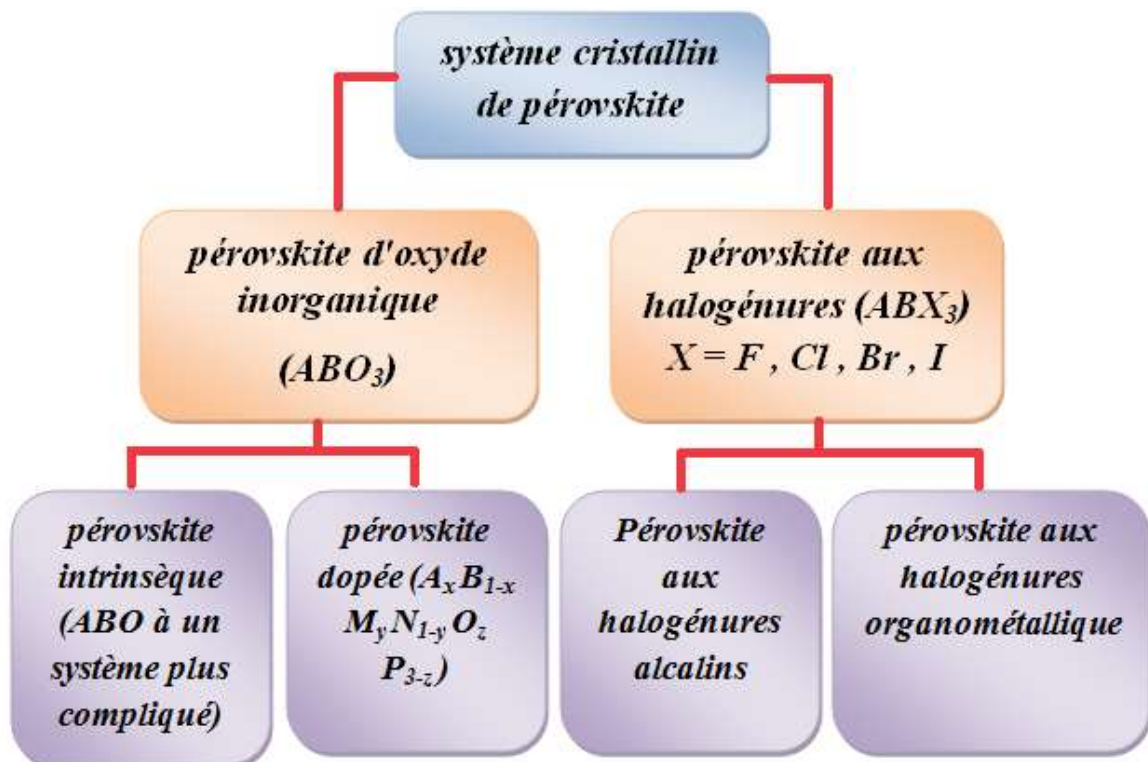


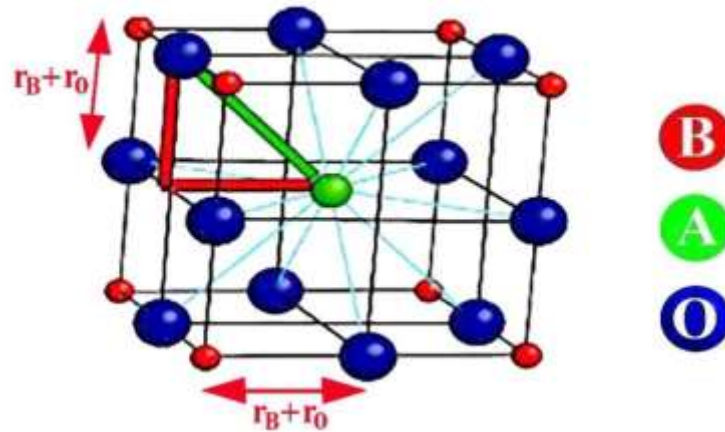
Figure II.13 : classification du système de pérovskite.

### II.3.3 Critère de stabilité de la structure pérovskite

#### II.3.3.1 Facteur de Goldschmidt

Le réseau pérovskite est un ensemble très compact qui ne permet pas la formation des compositions interstitielles. En revanche, de nombreuses combinaisons sont possibles en ce qui concerne la nature des cations A et B conduisant à différents états de valence pour ces cations. Par exemple: I-V pour  $\text{KNbO}_3$ , II-IV pour  $\text{CaFeO}_3$  ou encore III-III pour  $\text{LaCoO}_3$ . Mais, ce ne sont pas toutes les combinaisons qui sont favorables à la structure pérovskite. En effet, un critère dimensionnel a été introduit par V.M. Goldschmidt [21], appelés facteur de Goldschmidt ou facteur de tolérance (t), afin de déterminer si une combinaison est stable ou non. Alors ce facteur est un indicateur de la stabilité et de la distorsion de la structure et il est défini de la manière suivante:

$$t = \frac{(r_A + r_O)}{\sqrt{2} * (r_B + r_O)} \quad \text{ou} \quad t = \frac{d_{A-O}}{\sqrt{2} * d_{B-O}} \quad (\text{II.6})$$



**Figure II.14 :** Maille de la Pérovskite simple  $\text{ABO}_3$  [21].

Où  $r_A$ ,  $r_B$  et  $r_O$  sont respectivement les rayons ioniques des cations A (en coordination 12), B (en coordination 6) et de l'ion oxygène (voir la Figure II.14), relevés dans les tables de Shanon et Prewitt,  $d_A - O$  et  $d_B - O$  les distances cation-oxygène [22].

Cette relation (II.1) a un caractère très général, étant applicable aux pérovskites simples ou doubles (dans ce dernier cas, on remplace  $r_B$  par «  $r_B$  », qui est la valeur moyenne des rayons cationiques B et B'). D'après ce critère, le matériau sera stable dans la structure pérovskite lorsque la valeur du facteur de tolérance (t) est entre  **$0.75 \leq t \leq 1.06$**

[23]. Pour un facteur de tolérance situé dans l'intervalle  $0.75 \leq t \leq 0.95$ , la structure aura une distorsion orthorhombique et lorsqu'il se trouve entre  $0.95 \leq t \leq 0.99$ , la structure sera rhomboédrique. Finalement, pour  $0.99 \leq t \leq 1.06$ , la structure sera cubique [24].

Ainsi, il est à souligner que lorsque  $t$  prend une valeur extérieure aux limites de stabilité de la structure pérovskite, c'est-à-dire  $t < 0.75$  ou  $t > 1.06$  on obtient des structures de symétrie hexagonale, comme dans le cas des composés  $YMnO_3$  [25] et  $BaMnO_3$  [26].

Ainsi chaque distorsion de la structure cubique implique un écart de  $t$  par rapport à sa valeur idéale. En fonction de la valeur du facteur de tolérance, on peut distinguer plusieurs situations, schématisées dans le tableau II.1:

$t < 0.75$ <i>Ilménite</i>	$0.75 < t < 1.06$ <i>Pérovskite</i>			$t > 1.06$ <i>Hexagonal</i> ( <i>BaTiO<sub>3</sub></i> )
	$0.75 < t < 0.95$ <i>Distorsion</i> <i>Orthorhombique</i> ( <i>LaMnO<sub>3</sub></i> )	$0.96 < t < 0.99$ <i>Distorsion</i> <i>Rhomboédrique</i> ( <i>KNbTiO<sub>3</sub></i> )	$0.99 < t < 1.06$ <i>Cubique</i> ( <i>BaZrO<sub>3</sub></i> )	

**Tableau II.1 :** Évolution des structures cristallines en fonction de la valeur du facteur de tolérance [26].

Une liste des cations qui forment la plupart des pérovskites, avec leurs rayons ioniques, est donnée dans le tableau II.2.

<i>Cation A</i> <i>Coordination XII</i>	<i>Rayon ionique</i> (Å)	<i>Cation B</i> <i>Coordination VI</i>	<i>Rayon ionique</i> (Å)
<i>Ba</i> <sup>2+</sup>	1.75	<i>Co</i> <sup>2+</sup>	0.605
<i>Ca</i> <sup>2+</sup>	1.48	<i>Cr</i> <sup>3+</sup>	0.64
<i>Cs</i> <sup>1+</sup>	2.02	<i>Ni</i> <sup>3+</sup>	0.7LS/0.74HS
<i>K</i> <sup>1+</sup>	1.78	<i>Fe</i> <sup>3+</sup>	0.69LS/0.785HS
<i>La</i> <sup>3+</sup>	1.50	<i>Hf</i> <sup>4+</sup>	0.85
<i>Na</i> <sup>1+</sup>	1.53	<i>Mn</i> <sup>3+</sup>	0.72LS/0.785HS
<i>Nd</i> <sup>3+</sup>	1.41	<i>Mo</i> <sup>5+</sup>	0.75
<i>Pb</i> <sup>2+</sup>	1.63	<i>Mo</i> <sup>6+</sup>	0.73
<i>Rb</i> <sup>1+</sup>	1.86	<i>V</i> <sup>3+</sup>	0.78
<i>Sr</i> <sup>2+</sup>	1.58	<i>Zr</i> <sup>4+</sup>	0.86

**Tableau II.2:** Les cations les plus communs formant les oxydes de structure pérovskite et leurs rayons ioniques. Spin state (HS: high spin ; LS: low spin) [26].

### **II.3.3.2 Rapport $V_A/V_B$**

Pour la stabilité de la structure idéale on peut définir le rapport du volume du polyèdre du cation A ( $V_A$ ) à celui du cation B ( $V_B$ ) qui est exactement égal à 5 [27]. Ce rapport  $V_A/V_B$  est une grandeur utile qui permet de caractériser le degré de distorsion de la structure pérovskite. Plus il est petit, plus la distorsion de structure est grande. À titre d'exemple, signalons le cas de  $\text{SrTiO}_3$  dont la structure est très voisine de la structure idéale avec  $a_p = 3.905 \text{ \AA}$ ,  $t = 1.002$  et  $V_A/V_B = 4.9998$  [28].

### **II.3.3.3 Coordination en fonction du rayon ionique**

La stabilité de la structure pérovskite peut aussi être exprimée en termes de coordinence des cations A et B. de ce fait, le cation B doit avoir un rayon ionique supérieur à  $0.51 \text{ \AA}$  pour pouvoir garder la coordinence 6 et le rayon ionique de A doit être supérieur à  $0.9 \text{ \AA}$  pour une coordinence de 12 [29].

### **II.3.3.4 L'ionicité des liaisons anions-cations**

Le dernier paramètre qui définit un critère de stabilité est l'ionicité de la liaison anion-cation. Le caractère ionique moyen de la structure  $\text{ABO}_3$  est quantifié à partir des différences d'électronégativités données par l'échelle de Pauling [30]:

$$\bar{x} = \frac{x_{A-O} + x_{B-O}}{2} \quad (\text{II.7})$$

Où  $x_A$  et  $x_B$  sont respectivement les différences d'électronégativité entre les cations A et B et les oxygènes associés.

La structure pérovskite est d'autant plus stable quand les liaisons mises en jeu présentent un fort caractère ionique. Les pérovskites à base de plomb du type covalent sont moins stables que les pérovskites plus ioniques comme  $\text{BaTiO}_3$  [31].

## **II.4 Propriétés des matériaux pérovskites**

Ces dernières années, des matériaux de type pérovskite sont de plus en plus intéressants et importants car ils ont un grand potentiel pour contribuer à pile à combustible solide, électrolyte solide, résistance fixe, actionneurs, appareils électromécaniques, transducteurs, etc. en raison de la structure cristalline particulière, le magnétisme, la conductivité électrique, Piézoélectrique et propriétés électro-optique, l'activité catalytique et la sensibilité de gaz,...etc. [28,29]. Comme un important matériau fonctionnel,  $\text{LaFeO}_3$  avec

une structure de pérovskite type  $ABO_3$  typique a de nombreux champs d'application, tels que oxydation catalytique, états de surface électroniques et ces caractères sensibles au gaz [30-31] de structure pérovskite de type  $ABO_3$ .

#### **II.4 .1 Propriétés électriques**

Elles sont supraconductrices à des températures relativement élevées, elles transforment la pression mécanique ou la chaleur en électricité (piézoélectricité), accélèrent les réactions chimiques (catalyseurs) et changent soudainement leur résistance électrique lorsqu'elles sont placées dans un champ magnétique (magnétorésistance), de nombreuses études électrochimiques sur les électrodes à base de ces oxydes ont été effectuées en milieu aqueux [32]. Elles ont révèlè un rôle électro catalytique important dans la réaction d'électrode à oxygène à température ambiante.

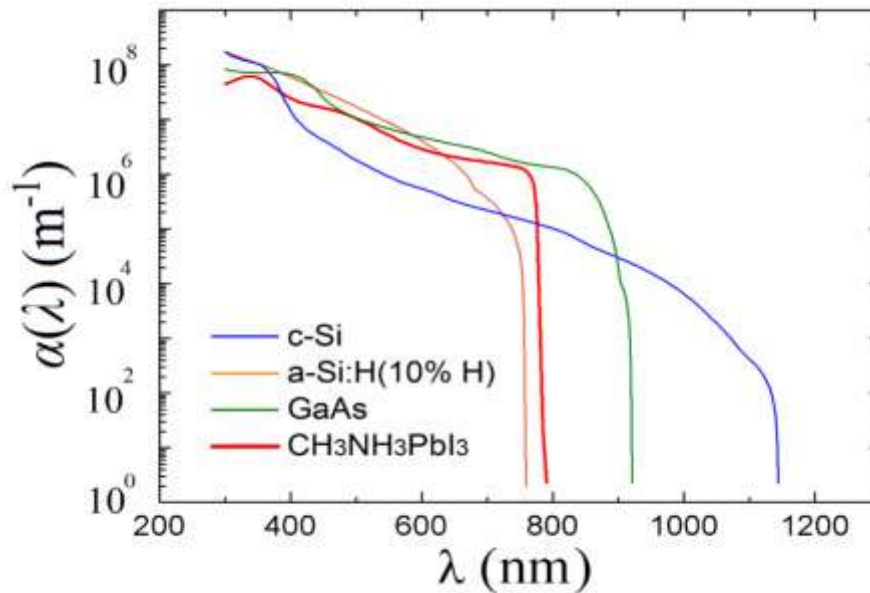
La pérovskite devient ionique et covalente, double nature dans les structures électroniques. Des travaux expérimentaux de recherche montrent les différentes valeurs de bande interdite pour les pérovskites. La bande interdite de la pérovskite dépend du processus de synthèse et de la taille du cation organique/inorganique, des ions métallique et très moins de ion halogénure. La bande interdite de:  $CH_3NH_3PbI_3$ ,  $CH_3NH_3PbBr_3$ ,  $CH_3NH_3PbCl_3$ ,  $CH_3NH_3Pb_3$  sont: 1.49, 1.26, 1.95 et 2.46 eV, respectivement [33,34], Alors que la bande passante la plus utilisée pour  $CH_3NH_3PbI_3$  est 1.57 eV [35].

#### **II.4 .2 Propriétés optique**

La couche absorbante est un élément très important dans la structure de la cellule solaire pour obtenir une meilleure performance. Ainsi, la résistance d'absorption optique est un facteur crucial des matériaux. La pérovskite est un matériau à bande interdite directe et, par conséquent, elle a une force d'absorption optique élevée et une plage plus large pour absorber suffisamment d'énergie solaire pour atteindre une valeur élevée d'efficacité de conversion de puissance.

Dans la cellule solaire, la pérovskite fonctionne comme une couche intrinsèque. Ainsi, dans la cellule solaire de Pérovskite, une jonction p-i-n est formée. Il fonctionne de la même manière que la cellule solaire p-n, sauf que la couche d'épuisement devient plus large en raison de la couche intrinsèque (i.e. la couche de pérovskite fonctionne comme absorbeur de lumière).

Comme la cellule a une couche d'épuisement plus large, elle occupe plus d'espace pour l'absorption de la lumière. La pérovskite a un coefficient d'absorption élevé. Le coefficient d'absorption est comparé à divers matériaux de cellules solaires pour différentes longueurs d'onde à la figure II.15:



**Figure II.15 :** Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires [35].

De la figure II.15 on peut voir qu'à la longueur d'onde visible le coefficient d'absorption de la pérovskite est plus élevé. de sorte que la pérovskite peut absorber plus de photons. Ainsi, le matériau pérovskite convient à l'application de cellules solaires.

La couche de pérovskite agit également comme porteur de charge entre le matériau de type n et de type p. Normalement, la pérovskite est prise en couche mince entre le matériau de type n et de type p. Après avoir absorbé le photon de la paire d'électrons-trous du rayonnement solaire est généré. La pérovskite transporte des électrons vers le matériau de type n et transporte des trous vers les matériaux de type p [35].

## **II.5 Défauts dans la structure pérovskite**

Les défauts en matériaux pérovskites peuvent résulter de l'insuffisance de cation dans les sites de A ou de B aussi bien que de l'insuffisance et/ou excès de l'oxygène. Avant de détailler ce point, un aperçu générale sur les défauts ponctuels dans les cristaux sera nécessaire [36].

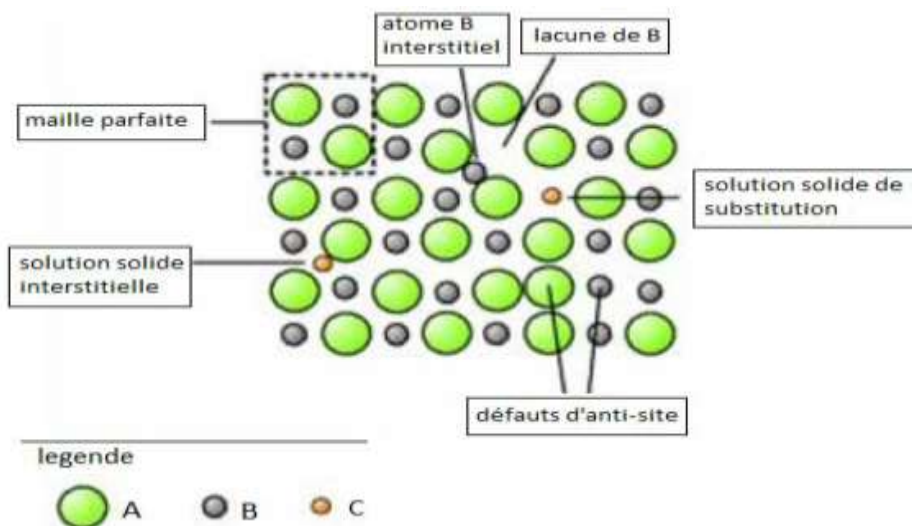
### II.5.1 Description des défauts dans les cristaux

En cristallographie, les défauts ponctuels sont des défauts dans l'organisation des cristaux qui ne concernent que des nœuds isolés.

### II.5.2 Défauts ponctuels

Dans le cas simple d'un cristal ordonné AB on peut décrire plusieurs types de défauts qui sont montrés dans la Figure II.16.

- **Lacune** : une lacune (vacancy); c'est l'absence d'un atome. Par exemple, une lacune cationique a donc une charge négative dans le cristal.
- **Interstitial** : La présence d'un atome du réseau entre les atomes. La présence d'un atome étranger entre les atomes du réseau se nomme solution solide interstitielle.
- **Substitution** : La présence d'un atome étranger à la place d'un atome du réseau se nomme solution solide de substitution.
- **Défaut de charge électrique** : Un site du cristal présente une charge négative (électron libre) ou plus positive (trou d'électron) que les autres sites du même type.
- **Défauts d'anti-site** : Si le cristal est un cristal ordonné, c'est-à-dire formé de plusieurs types d'atomes avec une alternance chimique stricte; alors il peut y avoir des défauts d'anti-site, c'est-à-dire des atomes qui se trouvent bien à un nœud du réseau mais qui rompent la régularité chimique.



**Figure II.16** : Exemple de défauts ponctuels dans un cristal ordonné AB.

## II.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté une étude bibliographique complète sur les propriétés fondamentales du matériaux Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> et de la pérovskite, 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, le matériau CIGS est devenu 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.

Dans le chapitre qui suit on va présenter l'outil de simulation utilisé (wxAMPS) pour la simulation de notre structure de la cellule Tandem CIGS/pérovskite.

### REFERENCES

- [01] O. Peschel, I. Schnell, G. Czycholl, «Ab initio many-body treatment of the electronic structure of metals»: Eur. Phys. J. B, vol. 47, pp. 369-378.
- [02] H. Hahn, G. Frank, W. Klingler, A. D. Meyer and G. Storer, Z. Anorg. Allg. Chem. 271 (1953) 153.
- [03] S. Wagner, J. L. Shay, P. Migliorato, and H.M. Kasper, Appl. Phys. Lett. 25 (1974) 434.
- [04] J.L. Shay and J.H. Wernick, "Ternary Chalcopyrite Semiconductors, Growth, Electronic properties and Applications", Pergamon Press (1975).
- [05] B.R. Pamplin, Progress in Crystal Growth Charact. 1 (1979) 331.
- [06] Idris Bouchama, "Contribution à l'amélioration des performances des cellules solaires CuIn<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>Se<sub>2</sub> ", Thèse de doctorat, Université de Sétif (2012).
- [07] Oxford P.V., « Oxford PV reveals breakthrough in efficiency of new class of solar cell », *Oxford Photovoltaics*, 2013.
- [08] Uclia Wang, « Perovskite Offers Shot at Cheaper Solar Energy », *WSJ*, 28 septembre 2014. (consulté le 18 juin 2016).
- [09] J.Verschraegen, M. Burgelman, «Numerical modeling of intra-band tunneling for heterojunction solar cells in SCAPS», J. Appl. Phys pp: 6277-6278.

- [10] A. Bouloufa, "Étude et Caractérisation des Semi-conducteurs Ternaires et Quaternaires  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  par Spectroscopie Photoacoustique", Thèse de doctorat en électronique, Université Ferhat-Abbas, Sétif. 2007.
- [11] K. YANG, JACK R. EAST and GEORGE I. HADDAD «Numerical modeling of abrupt heterojunctions using a thermionic-field emission boundary condition».
- [12] Ana Kanevce, "ANTICIPATED PERFORMANCE OF  $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$  SOLAR CELLS IN THE THIN-FILM LIMIT", These PhD, Colorado, USA, 2007.
- [13] L. Bailly, "cellules photovoltaïques organiques Souples agrande surface", Thèse de doctorat en Chimie Physique, L'université bordeaux I, 2010.
- [14] Nabil. N., "contribution à la modélisation d'une cellule solaire de la 3<sup>ème</sup> génération à haut rendement", Mémoire de master en instrumentation électronique, université de ferhat abbas - Sétif1, 2017.
- [15] A. Benyoucef, "développement de surfaces à base de dioxyde de titane par PVD pour une application aux cellules solaires", Thèse de doctorat, université Abou-Bakr bekaid, 2018.
- [16] R. Kamel, «Synthèse, caractérisation et propriétés catalytiques des oxydes  $\text{La}_{1-x}\text{M}_x\text{CrO}_3$  (M=Sr et Ce) ». Thèse doctorat, Université Mentouri Canstantine. (2008).
- [17] B. Ilschner et Ch. Janot, Matériaux émergents, 19 (2001) 118.
- [18] B. Ilschner et Ch. Janot, Matériaux émergents, 19,118 (2001).
- [19] P. Coeuré, Solid State Communications, 2 (1968) 129.
- [20] <https://www.solarchoice.net.au/blog/news/perovskites-the-next-solar-pv-revolution-240714>
- [21] V. M. Goldschmidt, Geochemische Verteilungsgesetze der Element VII, VIII (1927/1928).
- [22] R.D. Shannon and C.T. Prewitt, "Acta Crystallogr. A: Found. Crystallogr. 32, 751 (1976).
- [23] Landolt-Bornstein, Springer Verlag (1970).
- [24] J.B. Philipp, P. Majewski, L. Alff, A. Erb, R. Gross, T. Graf, M.S. Brandt, J. Simon, T. Walther, W. Mader, D. Topwal, and D. D. Sarma. Phys. Rev. B, 68 :144431, Oct (2003).
- [25] B. B. Van Aken, A. Meetsma and T. T. M. Palstra, Acta Crystallogr., Sect. C: Cryst. Struct. Commun. 57 (2001) 230.
- [26] M. Parras, J. Alonso, J. M. González-Calbet and M. Vallet-Regí Solid State Ionics, 63 (1993) 614.

- [27] N. W. Thomas, *Acta Cryst. B* 54 (1989) 337.
- [28] J. Hutton and R.J. Nelmes, *Acta Cryst. A* 37 (1981) 916.
- [29] J. B. Goodenough and J. Longo, *Landolt-Börnstein Tabellen Neue Serie III/4a*, Springer Verlag, Berlin (1970).
- [30] L. Pauling, New-York: Cornell University Press. p. 267, (1967).
- [31] T. R. Shrout and A. Halliyal. *Am. Ceram. Soc. Bull.*, 66 [4] 704-711 (1987).
- [32] Zhang, R., Jiang, B. and CAO, W. elastic piezoelectric and dielectric properties of multidomain.  $0.67\text{PB}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.33\text{PbTiO}_3$  single crystals. *Journal of Applied Physics*, 90 (2001) 3471-3475.
- [33] Luo S. and Daud W.A. Recent progress in organic-inorganic halide perovskite solar cells: mechanism and material design. *J. Mater. Chem. A*. 2015. Doi: 10.1039/c4ta04953e.
- [34] Keith T. Butler, Jarvis M. Frost and Aron Walsh, Band alignment of the hybrid halide perovskites  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ ,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ . *Materials Horizons*, 2 (2014) 218-220.
- [35] H. Zhou, Q. Chen, G. Li, S. Luo, T.b. Song, H.S. Duan, Z. Hong, J. You, Y. Liu and Y. Yang, "interface engineering of highly efficient perovskite solar cells", *science*, 345 (2014) 542-546.
- [36] T.R. Shrout, A. Halliyal, «Preparation of lead-based ferroelectric relaxors for capacitors». *Am. Ceram. Soc. Bull.*, 66 (1987) 704 -711.

# *Chapitre III*

## *Logiciel de simulation wxAMPS*

## **III.1 Introduction**

La résolution des trois équations fondamentales qui régissent le comportement des porteurs de charges nous permet de calculer la caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule solaire ainsi que d'autres paramètres physiques tels que le champ  $E$ , le potentiel, ce qui fournit les renseignements utiles des performances d'une cellule solaire. La résolution analytique étant compliquée et pratiquement impossible, nous avons recours à la résolution numérique qui nécessite un grand nombre d'itérations.

Avec le développement du secteur de recherche sur l'énergie photovoltaïque et la cellule photovoltaïque, on a vu croître la nécessité de développer les moyens de recherche, parmi ces moyens les logiciels de simulation. Il existe plusieurs logiciels de simulation d'une cellule photovoltaïque à base de couches minces, on peut citer : AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, Silvaco etc. Dans ce travail nous allons utiliser le logiciel wxAMPS.

## **III.2 Logiciel de simulation wxAMPS-1D**

### **III.2.1 Aperçu**

AMPS est une abréviation de la phrase anglaise: **A**nalysis of **M**icroelectronic and **P**hotonic **S**tructures (analyse unidimensionnelle des structures microélectroniques et photoniques), Ce logiciel a été développé en 1997 par Professeur Stephen Fonashet et *al.*

wxAMPS est une mise à jour de l'outil populaire de simulation de cellules solaires AMPS, il est un logiciel de simulation numérique des cellules solaires unidimensionnelles, conçu à l'Université de l'Illinois à Urbana Champaign, en collaboration avec l'Université de Nankai en Chine [1,2].

L'interface utilisateur de wxAMPS utilise une bibliothèque multiplateforme et permet une saisie rapide des données et une visualisation améliorée. Au-delà du noyau AMPS d'origine, wxAMPS incorpore deux modèles de tunneling et un nouvel algorithme combinant les méthodes de Newton et Gummel. L'incorporation d'un modèle de tunnel assisté par piège permet une simulation plus précise des cellules solaires multi-jonctions. Les solutions combinées des méthodes de Newton et Gummel améliorent la stabilité du code et permettent aux deux modèles de tunneling de bien fonctionner dans l'algorithme. Basée sur l'option d'un nombre illimité de couches dans la simulation, la modélisation de cellules solaires graduées peut être facilement implémentée dans wxAMPS [3,4].

### III 2.2 Description du modèle wxAMPS

Dans le modèle électrique, trois équations différentielles associées: l'équation de Poisson et les deux équations de la continuité des porteurs de charge sont résolus simultanément à l'état d'équilibre et hors équilibre thermodynamique (c'est-à-dire sous l'effet de tension de polarisation ou la lumière, ou les deux). Les équations utilisées sont [5] :

- L'équation de Poisson

il est utilisée pour simuler le diagramme de bande de la cellule solaire en calculant potentiel électrostatique de la cellule ( $\varphi$ ):

$$\frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{q} = \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = p(x) - n(x) + N_D - N_A + \sum_{defauts} p(x) \quad (III.1)$$

- L'équation de continuité des trous et des électrons

Les équations de continuité sont utilisées pour simuler le comportement courant-tension de la cellule en calculant les densités de courant d'électrons et de trous,  $J_n$  et  $J_p$ , respectivement.

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_p(x)}{\partial x} = G_{G_P}(x) - R_p(x) \quad (III.2)$$

$$-\frac{1}{q} \frac{\partial j_n(x)}{\partial x} = G_n(x) - R_n(x) \quad (III.3)$$

La densité de charge est donnée par :

$$p(x) = q [p(x) - n(x) + p_T(x) - n_T(x) + N_{net}^+] \quad (III.4)$$

$$E = -\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \quad (III.5)$$

Où  $p(x)$  est la densité de charge d'espace,  $E$  le champ électrostatique,  $\psi(x)$  représente la position de l'énergie du niveau local du vide (potentiel électrostatique),  $x$  la position dans la cellule,  $G_n$  et  $G_p$  représentent respectivement le taux de génération pour les électrons et les trous.  $R_n$  et  $R_p$  le taux de recombinaison par des défauts et de bande à bande pour les électrons et les trous, respectivement.  $J_n$  et  $J_p$  la densité de courant des électrons et des trous.  $n$  est la densité des électrons libres,  $p$  des trous libres, et le  $\varphi$  potentiel

électrostatique.  $q$  la charge électronique.  $\epsilon_0$  et  $\epsilon_r$  les permittivités absolues et relatives, respectivement. La concentration des donneurs ionisés est  $N_D$  et des accepteurs ionisés  $N_A$ .

Dans nos calculs, trois variables d'états, définissent complètement l'état d'une cellule:  $\psi$  et les quasis niveaux de Fermi  $E_{Fp}$  et  $E_{Fn}$ .

Une fois que ces trois variables dépendantes sont connues en fonction de  $x$ , toutes les autres informations sur le système peuvent être déterminées en fonction de la position dans la cellule. A l'équilibre thermodynamique, le niveau de fermi est constant en tout point du dispositif et le système d'équation (1), (2) et (3) se réduit à l'équation de Poisson. Le seul inconnu est le niveau de vide  $\psi(x)$  (potentiel électrostatique). A l'état hors équilibre thermodynamique, le niveau de fermi se divise en quasi-niveau de fermi pour les électrons et les trous et on obtient un système de trois équations différentielles partielles non linéaire qui sont couplées. Afin de résoudre ces équations pour trouver les variables inconnues ( $\psi$ ,  $E_{Fn}$ ,  $E_{Fp}$ ), six conditions aux limites sont nécessaires: deux pour chaque variable. Les deux premières conditions aux limites sont:

$$\psi(0) = 0 - \chi(L) - \phi_{bL} + \phi_{b0} + \chi(0) - V \quad (\text{III.6a})$$

$$\psi(L) = 0 \quad (\text{III.6b})$$

Où  $L$  est la longueur du dispositif,  $\chi(0)$  et  $\chi(L)$  sont les affinités électroniques à  $x = 0$  et  $x = L$ .  $\phi_{b0}$  et  $\phi_{bL}$  les hauteurs de barrière au contact avant et arrière et  $V$  est la différence de potentiel appliquée (Figure III.1). La condition (6b) fait en sorte que l'on choisit 0 comme la position du potentiel électrostatique à  $x = L$ .

Les quatre autres conditions aux limites sont obtenues à partir des contraintes imposées sur les densités de courant à l'interface  $x = 0$  et  $x = L$  sont:

$$J_n(0) = q S_{n0} [n(0) - n_o(0)] \quad (\text{III.7a})$$

$$J_p(0) = q S_{p0} [p(0) - P_o(0)] \quad (\text{III.7b})$$

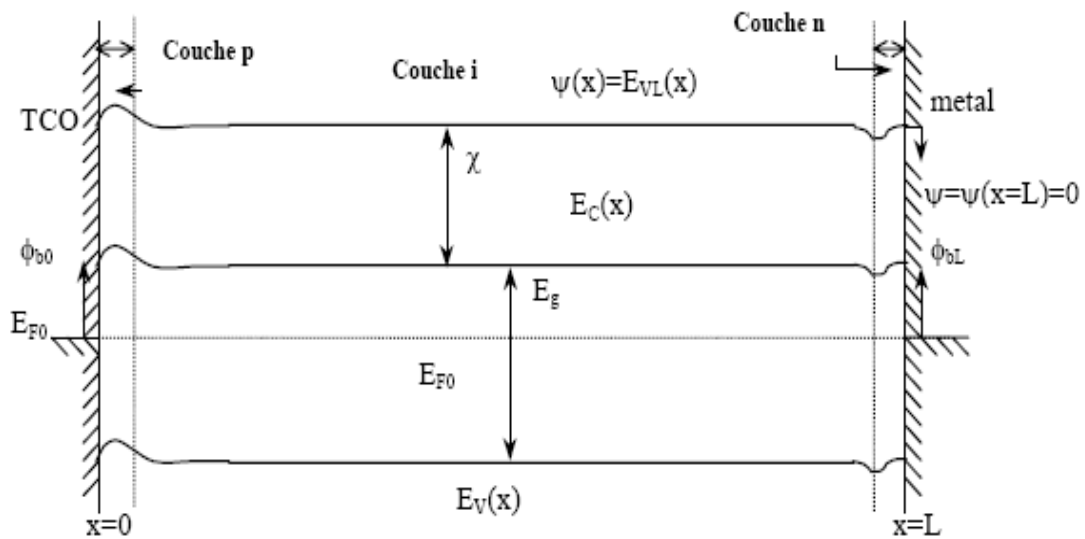
$$J_n(L) = q S_{nL} [n(L) - n_o(L)] \quad (\text{III.7c})$$

$$J_p(L) = q S_{pL} [p(L) - P_o(L)] \quad (\text{III.7d})$$

Avec  $S_{n0}$ ,  $S_{p0}$ ,  $S_{nL}$ ,  $S_{pL}$  sont les vitesses de recombinaison pour les électrons et les trous respectivement, à  $x = 0$  et à  $x = L$ . La valeur la plus grande de la vitesse de recombinaison qu'ils peuvent avoir est  $\sim 10^7$  cm/s.  $n(0)$  et  $p(0)$  sont les densités des électrons et des trous à  $x = 0$ .  $n(L)$  et  $p(L)$  sont les densités des électrons et des trous à  $x = L$ .  $n_o(0)$  ( $p_o(0)$ ),  $n_o(L)$

( $p_0(L)$ ) sont les densités des électrons et des trous à l'équilibre thermodynamique à  $x = 0$  et  $x = L$ . A l'aide des conditions aux limites indiquées précédemment, les trois équations (1), (2) et (3) peuvent être résolues simultanément pour trouver  $\psi = \psi(x)$ ,  $E_{Fn}(x) = E_{Fn}(x)$ , et  $E_{Fp} = E_{Fp}(x)$ . Les termes n et p de l'équation (4) sont développés assumant la structure de bande très générale représentée sur la Figure III.1.  $\psi = \psi(x)$  donne la valeur du niveau du vide à chaque point x. La densité des trous libres à l'équilibre thermodynamique est donnée par :

$$p_0(x) = N_V(x) \exp\left(\frac{-E_{F0}(x) - E_V(x)}{kT}\right) \quad (\text{III.8})$$



**Figure. III.1 :** Diagramme de bande d'une cellule solaire à jonction p-i-n à l'équilibre thermodynamique.

Puisque :

$$E_c(x) = \psi(x) - \chi(x) \quad (\text{III.9})$$

(III.9)

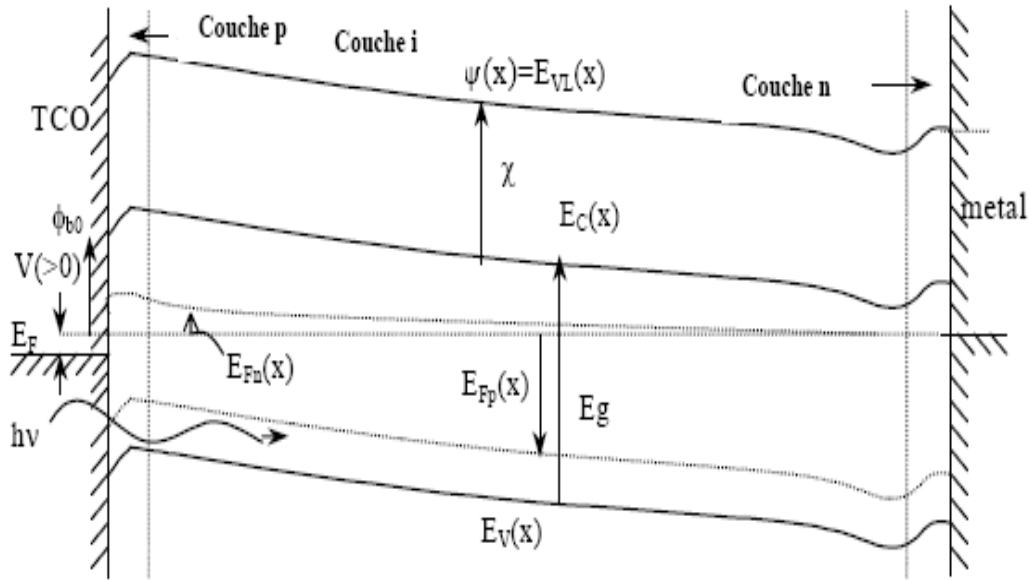
$$n_0 = N_C(x) \exp\left(\frac{-\psi(x) - \chi(x) - 0 + \chi(L) + \phi_{bL}}{kT}\right) \quad (\text{III.10})$$

Ainsi les équations (11) et (14) donnent les expressions des densités des porteurs libres à l'équilibre thermodynamique. A l'état hors équilibre thermodynamique le niveau de Fermi se divise en deux quasi-niveaux fermis  $E_{Fn}$  et  $E_{Fp}$ , (Voir Figure III.2). Par conséquent les expressions pour les trous et les électrons libres prennent les formes suivantes [5]:

$$p(x) = N_V(x) \exp\left(\frac{-E_{Fp}(x) - E_V(x)}{kT}\right) \quad (\text{III.11})$$

$$n(x) = N_C(x) \exp\left(\frac{-E_C(x) - E_{Fn}(x)}{kT}\right) \quad (\text{III.12})$$

Où  $p(x)$  et  $n(x)$  sont les densités de trou et d'électron à l'état hors équilibre thermodynamique.



**Figure. III.2 :** Diagramme de bande d'une cellule solaire à jonction p-i-n sous éclairage.

### III.3 Les caractéristiques de wxAMPS

À partir de la solution fournie par une simulation AMPS, une sortie telle que les caractéristiques de tension actuelle dans l'obscurité et, si désiré, sous éclairage peut être obtenue. Ceux-ci peuvent être calculés en fonction de la température. Pour les cellules solaires et les structures de détection, des rendements de collecte en fonction de la tension, de la polarisation lumineuse et de la température peuvent également être obtenus. De plus, des informations importantes telles que la distribution des champs électriques, les populations de porteurs libres et piégés, les profils de recombinaison et les densités de courant des porteurs individuels en fonction de la position peuvent être extraites du programme AMPS. Comme indiqué précédemment, la polyvalence d'AMPS peut être utilisée pour analyser le transport dans une grande structures de dispositifs pouvant contenir des combinaisons de couches cristallines, polycristallines ou amorphes. AMPS est formulé pour analyser, concevoir et optimiser les structures destinées aux applications microélectroniques, photovoltaïques ou optoélectroniques [5].

Une comparaison d'AMPS avec d'autres programmes connus montre que l'AMPS est le seul programme de modélisation informatique disponible qui intègre toutes les caractéristiques physiques suivantes:

- un traitement de contact qui permet à l'émission thermoïonique et à la recombinaison d'avoir lieu aux contacts de l'appareil.
- un modèle d'état d'écart très généralisé qui peut s'adapter à n'importe quelle densité d'états de distribution en vrac ou à une interface.
- à la fois de bande à bande et de Shockley-Read-Hall recombinaison.
- un modèle de recombinaison qui calcule le trafic de recombinaison Shockley-Read-Hall par le biais de toute distribution d'état de l'écart général entrée au lieu de l'approche de niveau de recombinaison unique souvent utilisée.
- Fermi-Dirac complet, et pas seulement Boltzmann, statistiques.
- Populations des États de l'écart calculées avec des statistiques de température réelle plutôt qu'avec l'approche  $T = 0K$  souvent utilisée.
- un modèle de charge piégée qui tient compte de la charge dans toute distribution d'état d'écart général entrée.
- un modèle d'état de l'écart qui permet aux sections efficaces de capture de varier avec l'énergie.
- distributions d'états d'écart dont les propriétés peuvent varier selon la position.
- affinités des électrons et des trous qui peuvent varier selon la position.
- lacunes de mobilité qui peuvent différer des lacunes optiques.
- la capacité de calculer les caractéristiques de l'appareil en fonction de la température en biais direct et inverse ainsi qu'avec ou sans éclairage.
- la capacité d'analyser les structures des dispositifs fabriqués à l'aide de monocristaux, polycristallines, ou des matériaux amorphes ou les trois [5].

Dans le tableau qui suit on trouve une comparaison entre quelques simulateurs couramment utilisés pour simuler les cellules solaires et AMPS.

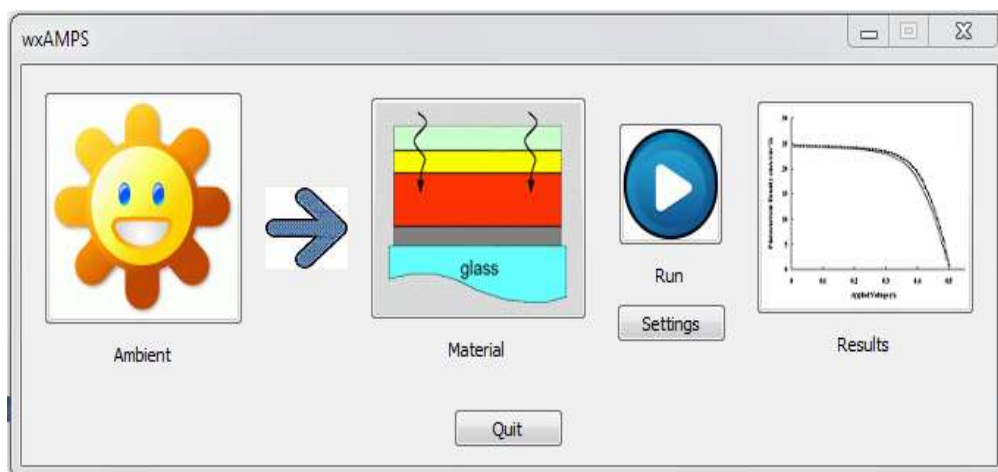
	AMPS	SCAPS	ASA	PCID
<i>Nombre maximum de couches</i>	30	7	Illimite	5
<i>Discontinuités de bande dans Ec et Ev</i>	Tout les programme utilisent le modèle d' Anderson			
<i>Gap graduel</i>	Non	Non	Oui	Non
<i>Etats profond</i>	50	3	4	Aucune charge
<i>Etats d'interface profond</i>	Non	Oui	Non	Non
<i>Changement dans les états profond</i>	Oui	Oui	Oui	Non
<i>Robustesse numérique (convergence)</i>	++	OK	++	OK
<i>Rapide</i>	-	+	++	++
<i>Facile a utiliser</i>	+	++	-	++

**Tableau III.1** : caractéristiques de quelques simulateurs solaire des couches minces.

### III.4 Description de wxAMPS

L'interface d'wxAMPS (Figure III.3) est constituée de trois boîtes de dialogue. Chacune donne les paramètres nécessaires avant le lancement de la simulation par l'wxAMPS. Les trois boîtes de dialogues donnent :

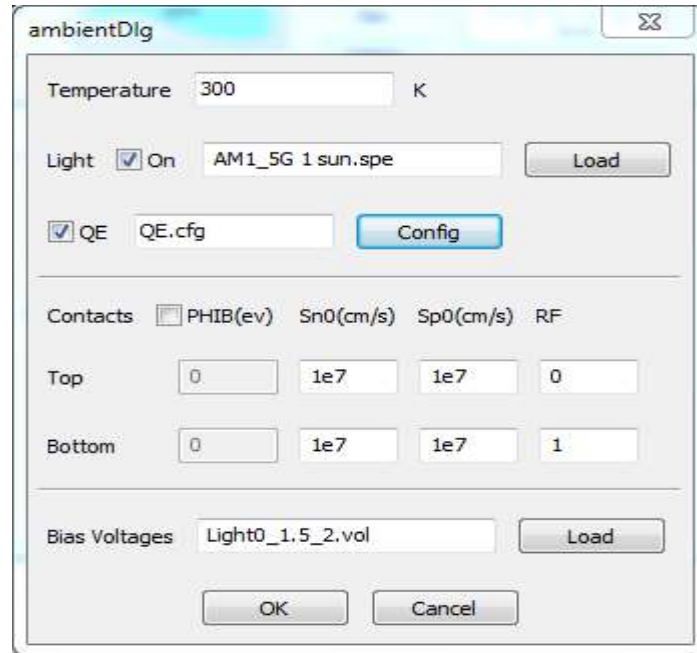
- Les conditions environnementales;
- Les propriétés du matériau de chaque couche;
- Les paramètres de modélisation.



**Figure III.3** : Page d'accueil de l'interface utilisateur.

### III.4.1 Conditions environnementales

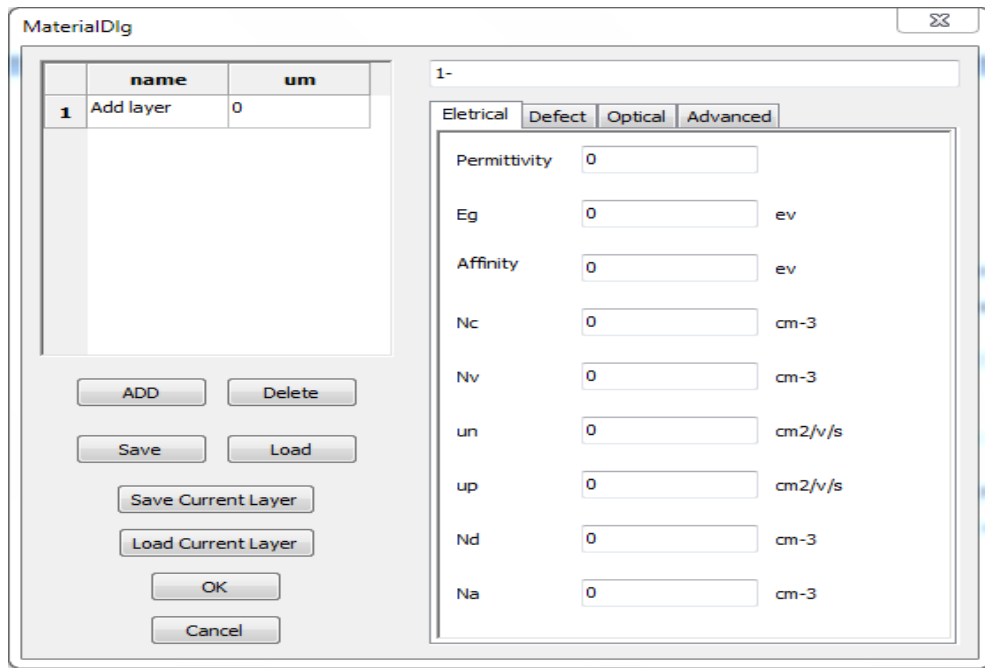
L'interface des conditions environnementales (AmbientDlg) dans le logiciel wxAMPS est représentée dans la figure (III.4), nous entrons les paramètres comme température, le fichier du spectre lumineux, le fichier rendement quantique QE et le fichier de «Bias voltages» dans la boîtes de dialogue [3].



**Figure III.4:** L'interface des conditions environnementales.

### III.4.2 Les propriétés du matériau de chaque couche

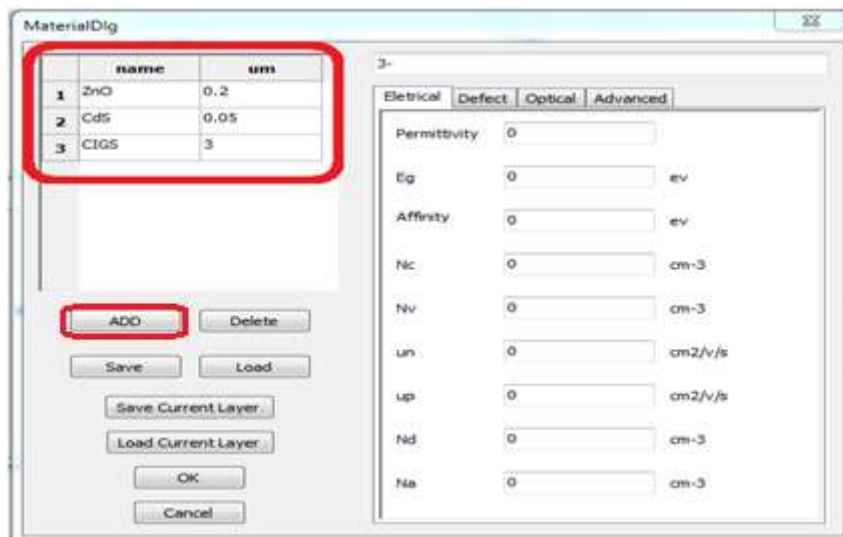
l'interface des propriétés du matériau de chaque couche (MaterialDlg) est représentée dans la figure (III.5):



**Figure III.5 :** L'interface des propriétés du matériau de chaque couche.

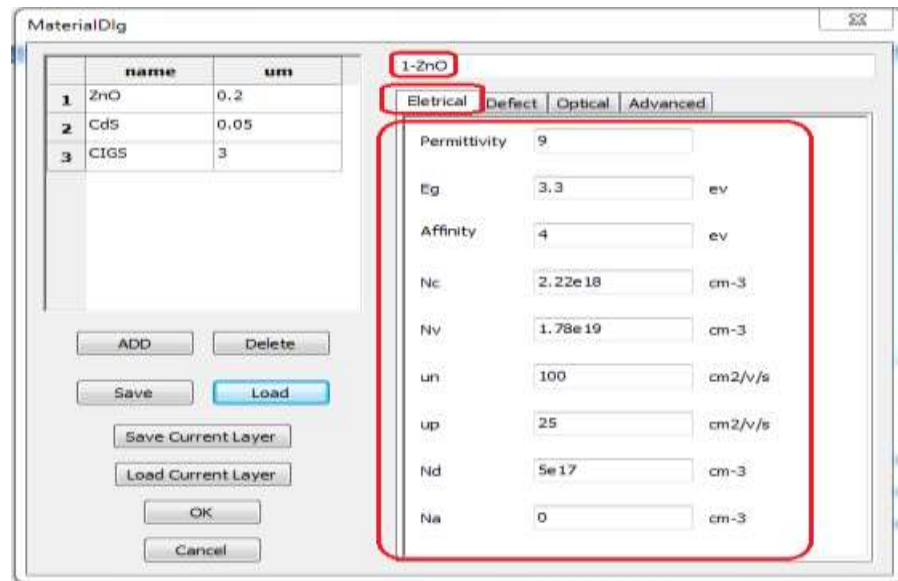
On entrons les paramètres suivants :

- Les couches et leurs épaisseurs: ils sont représentés dans la figure (III.6).



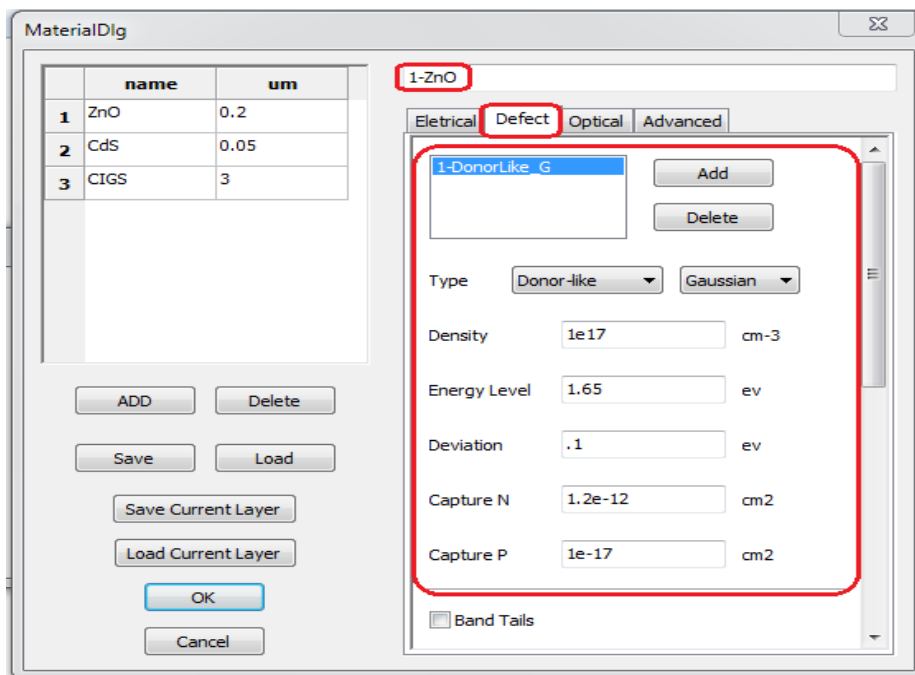
**Figure III.6 :** L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (l'épaisseur).

- les propriétés électriques de chaque couche comme la permittivité, l'énergie de gap ( $E_g$ ), l'affinité, la mobilité, Densité d'effective  $N_C$ , Densité d'effective  $N_V$  ... comme l'indique la figure (III.7).



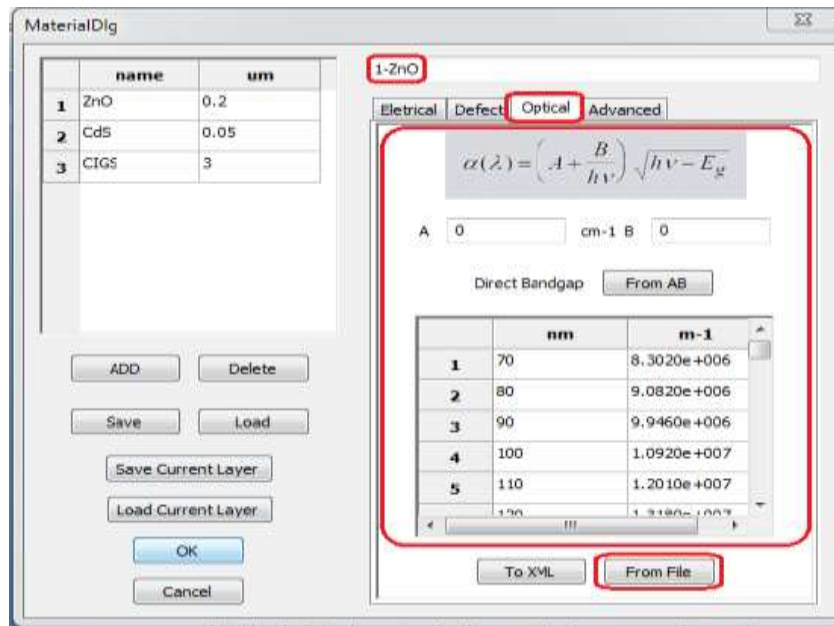
**Figure III.7:** L’interface des propriétés du matériau de chaque couche (électrical)

- les paramètres des défauts (sections efficaces de captures, densités, niveau d’énergie), ils sont représentés dans la figure (III.8).



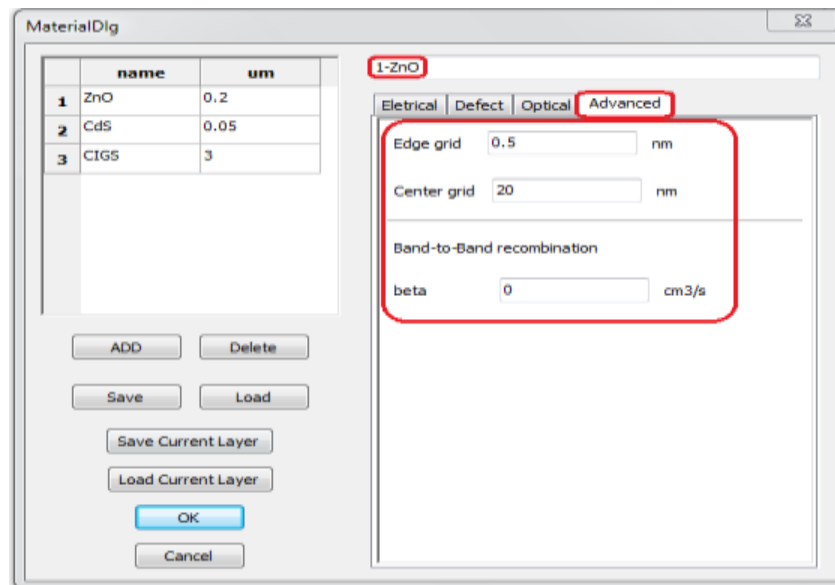
**Figure III.8:** L’interface des propriétés du matériau de chaque couche (Defect).

- les propriétés optiques (coefficient d’absorption) de chaque couche. ils sont représentés dans la figure (III.9).



**Figure III.9:** L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (Optical).

- paramètres avancés (paramètres de convergence numérique): ils sont représentés dans la figure (III.10).

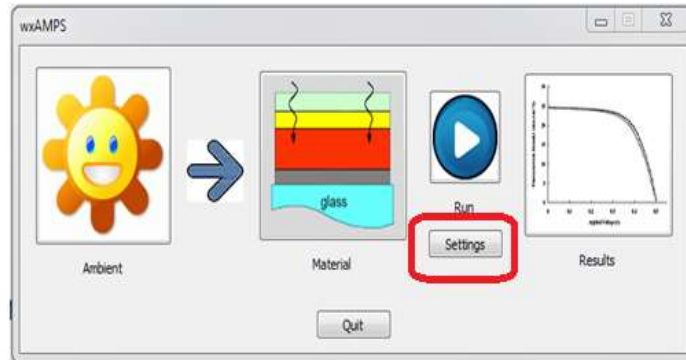


**Figure III.10:** L'interface des propriétés du matériau de chaque couche (Advanced).

Donc, après choisir le modèle de la cellule solaire qu'on veut la simuler, on peut étudier l'effet de l'épaisseur et le dopage de chaque couche sur les paramètres de la cellule solaire pour obtenir un rendement maximale.

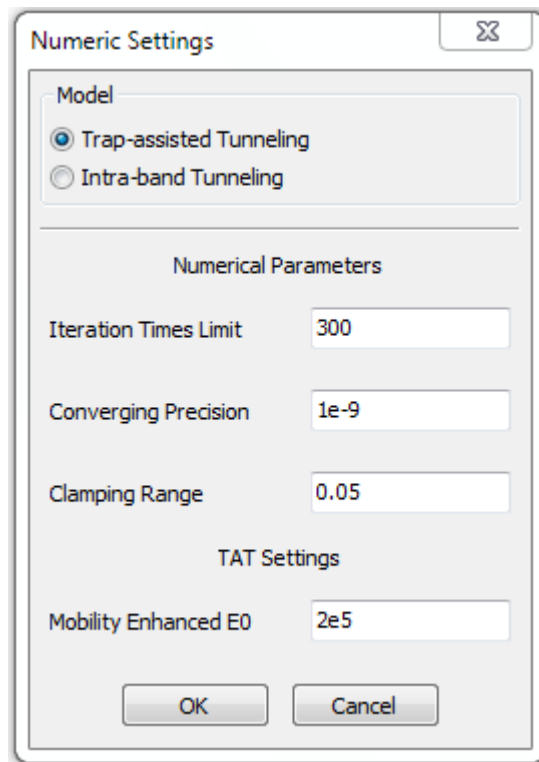
### III.4.3 Les paramètres de modélisation

Pour modifier les paramètres de modélisation, on pressons sur le mode «Settings» à l'interface de logiciel (voir figure III.11)



**Figure III.11:** L'interface de wxAMPS (Settings).

Une nouvelle fenêtre s'ouvre, on y apportons des modifications (voir figure III.12).

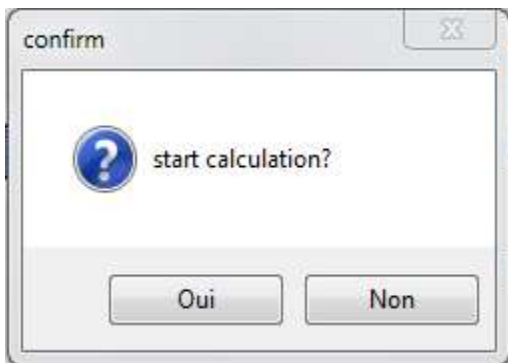


**Figure III.12:** L'interface des paramètres de modélisation.

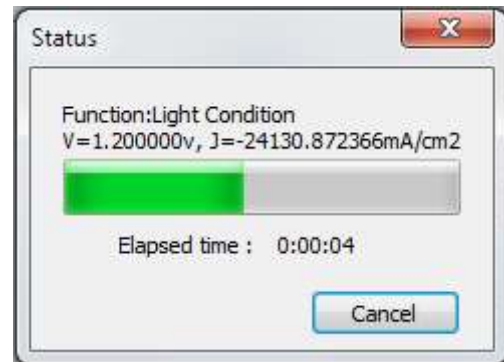
- le type du modèle:
  - Tunnellisation assistée par piège (Trap-assisted Tunneling).
  - Intra-band Tunneling.

- Paramètres numériques :
  - Limite de temps d'itération (Iteration Times Limit);
  - Précision convergente (Converging Precision);
  - Plage de serrage (Clamping Range).
- TAT Setting :
  - Mobilité améliorée (Mobility Enhanced E0).

Pour la simulation, nous cochons la case «oui» et ainsi le logiciel commence l'exécution (figure III.13). Pendant le processus de simulation, une boîte de dialogue de progression s'affiche, qui permet aux utilisateurs de savoir que le calcul s'effectue normalement (figure III.14).

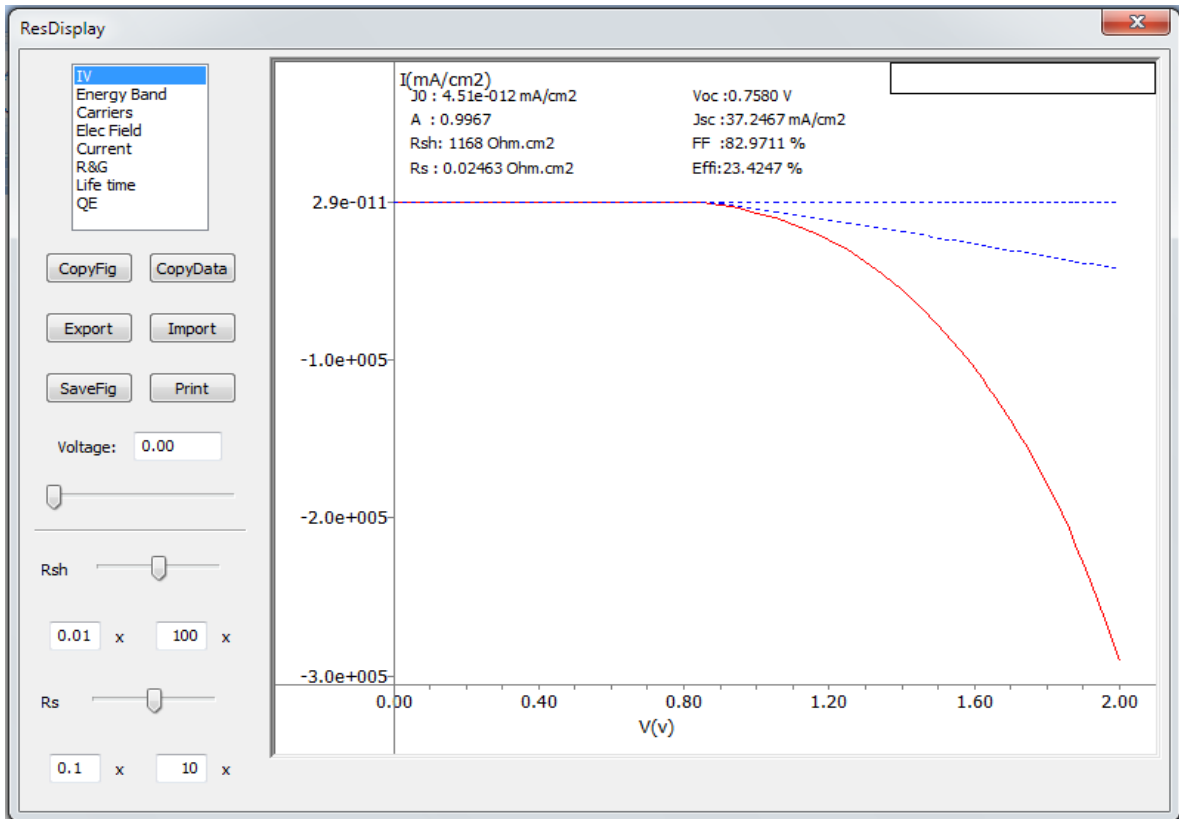


**Figure III.13** :Boite de dialogue pour L'interface de l'exécution.



**Figure III.14** : Boîte de dialogue pour progression s'affiche.

Quand le calcul est terminé, les résultats sont stockés et présentés par des courbes comme il est illustré sur la figure (III.15). Elles sont les caractéristiques (J-V) à l'obscurité et sous éclairage, les valeurs de la densité de courant de saturation ( $J_0$ ), du facteur d'idéalité ( $A$ ), de la résistance parallèle (shunt)  $R_{sh}$ , de la résistance série  $R_s$ , de la densité de courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), de la tension de circuit ouvert ( $V_{CO}$ ), du facteur de remplissage ( $FF$ ), du rendement de conversion photovoltaïque, du rendement quantique externe ( $QE$ ) ainsi que les grandeur internes comme le diagramme du gap d'énergie, les densités des porteurs libres ou piégés, le champ et potentiel électrique, le taux de recombinaison, les composantes du courant des électrons et des trous, les durées de vie...etc.



**Figure III.15:** Interface des résultats.

Le modèle de bande à bande nécessite actuellement beaucoup de temps pour parvenir à une solution (~ 30 minutes pour une courbe I-V d'un périphérique à 2000 grilles), et parfois il peut échouer lors de la convergence. Afin d'augmenter la propriété de convergence, les méthodes suivantes peuvent être essayées [7]:

- Réglez les grilles. Surtout pour la jonction tunnel, une grille bien affinée est fortement recommandée.
- Réglez le paramètre numérique, comme l'augmentation de la limite de temps d'itération (> 5000), le réglage de la précision de convergence ( $1e-8 \sim 1e-9$ ) et le jeu avec «Clamping Range».
- Réduisez les pas de la tension si la simulation échoue à haute tension.

### **III.5 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle de simulation détaillé qui simule à l'obscurité et sous éclairage la caractéristique de la densité du courant-tension (J-V) et le rendement quantique des cellules. Dans ce processus on peut analyser le champ électrique à l'interface et à la zone de charge d'espace, le transport des porteurs, les recombinaisons et les piègeages dans les états de la bande gap en fonction de la position dans la cellule, puis une description relativement détaillée sur le logiciel de simulation wxAMPS. Nous avons défini sa structure, ses outils et ses capacités permettant de calculer tous les paramètres internes et externes liés à la cellule solaire et générer ainsi ses caractéristiques électriques comme la caractéristique densité de courant-tension (J-V).

Dans le chapitre qui suit on va présenter la simulation de la structure des deux cellules solaires individuellement (la cellule inférieure est à base de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) et la cellule supérieure est à base de Pérovskite), puis on va passer à la simulation de la cellule Tandem Pérovskite/CIGS, afin d'améliorer les performances des cellules tandem par rapport aux deux cellules individuelles.

### REFERENCES

- [01] Y. Liu, Y. Sun et A. Rockett, "Un nouveau logiciel de simulation de cellules solaires - wxAMPS", Matériaux d'énergie solaire et cellules solaires, 2012.
- [02] Y. Liu, Y. Sun, and A. Rockett, "Batch simulation of solar cells by using Matlab and wxAMPS", 38th IEEE in Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2012.
- [03] Y. Liu, D. Heinzl, and A. Rockett, "A new solar cell simulator: wxAMPS", 37th IEEE in Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2011.
- [03] Parsathi Chatterjee, J. Appl. Phys. 79 (1996) 7339.
- [05] John Arch, Joe Cuiffi, Jingya Hou, William Howland, Peter McElheny, Anthony Moquin, Michael Rogosky, Thi Tran, Hong Zhu, and Francisco Rubinelli "AMPS Manual"
- [06] Y. Liu, D. Heinzl, and A. Rockett, "A Revised Version of the AMPS Simulation Code", in Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2010 35th IEEE, 2010, pp. 001943-001947
- [07] Dr. Yiming Liu , " Brief Introduction of wxAMPS", 37th IEEE in Photovoltaic Specialists Conference (PVSC), 2011.

# *Chapitre IV*

## *Résultats et Discussion*

## **IV.1 Introduction**

Ces dernières années ont vu une voie sans précédent de cellules solaires pérovskite avec des rendements passant de 3.7% à une valeur approuvée de 22.7% dans une configuration de liaison unique, en raison des propriétés photoélectriques extraordinaires des matériaux pérovskite, y compris une absorption élevée, longues longueurs d'utilisation des porteurs, et une petite énergie de liaison de l'exciton. pérovskite fournit également une opportunité appropriée pour modifier la structure en tandem ayant des opportunités significatives pour une ingénierie compositionnelle facile et un réglage de la bande interdite dans la région spectrale proche infrarouge visible [1,2].

Toutes les cellules solaires en structure tandem pérovskite/Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) en couches minces ont un potentiel énorme car elles peuvent être fabriquées sur des substrats minces, légers et flexibles de manière rentable, offrant ainsi de larges possibilités d'application, y compris le photovoltaïque intégré au bâtiment et les appareils mobiles [3,4].

Dans notre travail, on a entamé l'étude du fonctionnement d'une cellule solaire tandem Pérovskite/CIGS par un outil de simulation unidimensionnelle wxAMPS. La simulation par le logiciel wxAMPS permet de déterminer, à chaque variation des variables, les caractéristiques électriques de la cellule solaire, on note par exemple: la caractéristique densité de courant – tension (J-V) dans l'obscurité et sous éclairage, et par la suite les paramètres photovoltaïques liés à ces caractéristiques tels que la densité du courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ), la tension de circuit-ouvert ( $V_{CO}$ ), le Facteur de Forme ( $FF$ ) et le rendement de conversion photovoltaïque ( $\eta$ ).

## **IV.2 Description de la structure tandem proposée**

Une cellule photovoltaïque tandem est un empilement de deux cellules simples. En combinant deux cellules (une cellule individuelle à grand gap à base de Pérovskite et une autre cellule à base de petit gap à base de CIGS) absorbent dans des domaines spectraux différents, la première s'appelle cellule supérieure et la deuxième s'appelle cellule inférieure.

Dans ce travail, on a utilisé la structure suivante: ZnO/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>Pb-Cl/CuSCN comme une cellule supérieure et la structure ZnO/CdS/CIGS comme une cellule inférieure avec deux petites couches (Si-n et Si-p) comme des couches intermédiaires (Jonction Tunnel). Au début, on va commencer par une présentation de la simulation des deux cellules

individuellement, afin d'assurer le bon fonctionnement des deux structures avant de les mettre dans la structure tandem.

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

La structure de la cellule solaire individuelle à base du composé Pérovskite est constituée par: une couche de l'oxyde de zinc (ZnO) a été utilisé comme matériau de transport d'électrons (ETM), de la pérovskite halogénure mixte ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ ) qui a été utilisé comme matériau absorbant et du thiocyanate de cuivre ( $\text{CuSCN}$ ) comme un matériau de transport de trous (HTM). Ensuite la couche métallique à base de Mo (Molybdène) comme un contact arrière (Voir Figure IV.1).



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

##### **IV.2.1.1 Paramètres de la cellule Pérovskite individuelle**

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

	<i>ZnO</i>	<i>CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>Cl</i>	<i>CuSCN</i>
<i>Épaisseur (µm)</i>	<i>0.03</i>	<i>variable</i>	<i>0.05</i>
<i>Constante diélectrique</i>	<i>8.12</i>	<i>30</i>	<i>10</i>
<i>Bande de gap (eV)</i>	<i>3.4</i>	<i>1.57</i>	<i>3.4</i>
<i>Les affinités des électrons (eV)</i>	<i>4.29</i>	<i>3.93</i>	<i>1.9</i>
<i>Densité d'effective N<sub>C</sub> (cm<sup>-3</sup>)</i>	<i>3.7 × 10<sup>18</sup></i>	<i>2.5 × 10<sup>20</sup></i>	<i>1.7 × 10<sup>19</sup></i>
<i>Densité d'effective N<sub>V</sub> (cm<sup>-3</sup>)</i>	<i>3.7 × 10<sup>19</sup></i>	<i>2.5 × 10<sup>20</sup></i>	<i>2.5 × 10<sup>21</sup></i>
<i>Mobilité d'électrons (cm<sup>2</sup>/Vs)</i>	<i>30</i>	<i>14</i>	<i>0.0001</i>

<b>Mobilité de trous</b> ( $cm^2/Vs$ )	<b>2</b>	<b>14</b>	<b>0.1</b>
<b>Les densités</b> ( $cm^{-3}$ )	$N_D: 10^{19}$ $N_A: 9 \times 10^{16}$	$N_A: 6 \times 10^{14}$	$N_A: 5 \times 10^{18}$

**Tableau IV.1 :** Paramètres électriques des différentes couches de la cellule individuelle à base de Pérovskite [5,6].

	<b>ZnO</b>	<b>CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> Cl</b>	<b>CuSCN</b>
<b>Défauts de densités</b> ( $cm^{-3}$ )	$N_{DG}: 10^{17}$	$N_{AG}: 10^{14}$	$N_{DG}: 10^{14}$
<b>Niveau d'énergie</b> (eV)	<b>1.65</b>	<b>0.7</b>	<b>0.6</b>
<b>La deviation standard</b> (eV)	<b>0.1</b>	<b>0.1</b>	<b>0.1</b>
<b>Cross-section des électrons</b> ( $cm^2$ )	$10^{-12}$	$10^{-15}$	$5 \times 10^{-13}$
<b>Cross-section des trous</b> ( $cm^2$ )	$10^{-15}$	$10^{-15}$	$10^{-15}$

**Tableau IV.2 :** Paramètres des défauts Gaussiens des différentes couches de la cellule individuelle à base de Pérovskite [5,6].

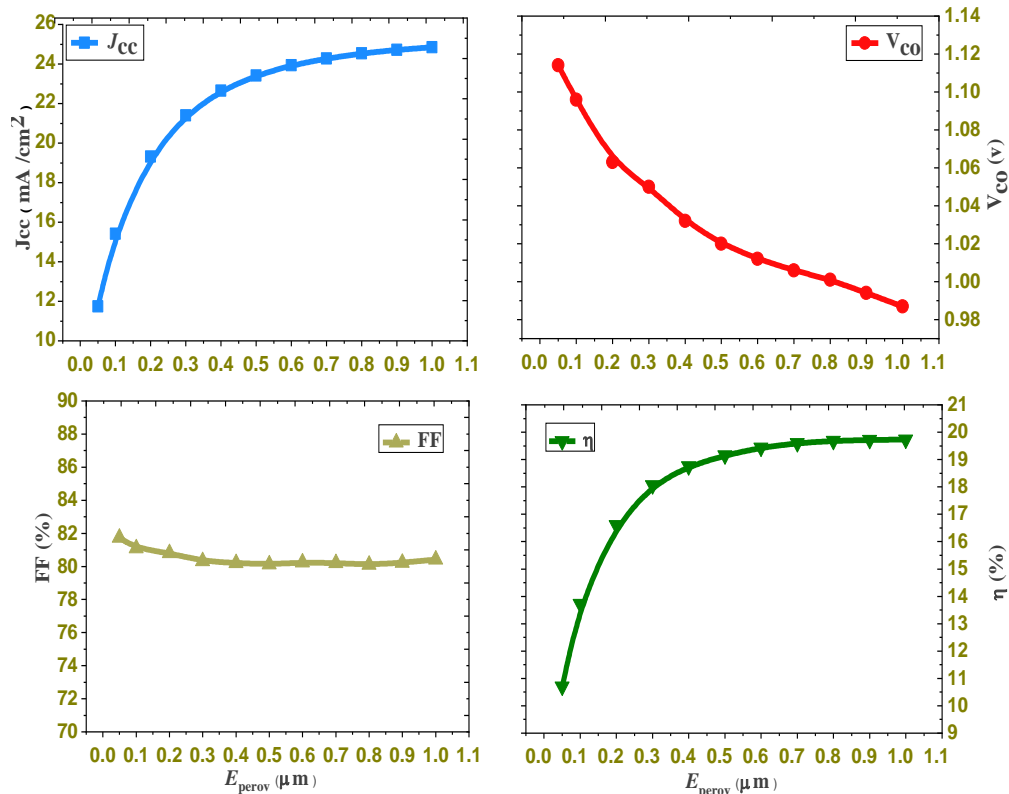
#### **IV.2.1.2 Résultats et discussion**

Pour étudier les performances de la cellule individuelle à base de pérovskite, deux paramètres essentiels doivent être variés et optimisés: L'épaisseur de la couche absorbante et la concentration des accepteurs de cette couche. L'épaisseur de la couche (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>Cl) est donc variée de 0.1  $\mu m$  à 1  $\mu m$ , bien que la concentration des accepteurs  $N_A$  du matériau (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>Cl) est variée de  $1 \times 10^{12} cm^{-3}$  à  $1 \times 10^{19} cm^{-3}$ . Enfin, nous choisissons l'épaisseur et la concentration  $N_A$  optimales de la cellule éclairée qui vont donner des performances meilleurs.

##### **a- Effet de l'épaisseur de la couche CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>Cl sur les performances de la cellule solaire individuelle**

La Figure IV.2 présente la variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{CO}$ ,  $J_{SC}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche pérovskite ( $E_{perov}$ ). Lorsque  $E_{perov}$  augmente entre 0.01 et 0.5  $\mu m$ , une variation rapide est observée: Le courant  $J_{CC}$  augmente rapidement entre 12 et 23 mA/cm<sup>2</sup>, cependant la tension  $V_{OC}$  diminue entre 1.11 et 1.02 Volt. En d'autre part, le Facteur de Forme  $FF$  diminue légèrement quand le  $E_{perov}$  augmente. Concernant le rendement de conversion  $\eta$ , il subit une augmentation rapide entre 11 et 19% quand  $E_{perov}$  varie entre 0.01 et 0.5  $\mu m$ . On a remarqué lorsque  $E_{perov}$  dépasse 0.5  $\mu m$  que le rendement de conversion  $\eta$  tend vers une valeur fixée de 19.7%, ce qui donne une optimale

de de l'épaisseur  $E_{\text{perov}}$  est de l'ordre de  $0.5 \mu\text{m}$ . Cette valeur sera utilisée, par la suite, dans le reste de nos calculs.

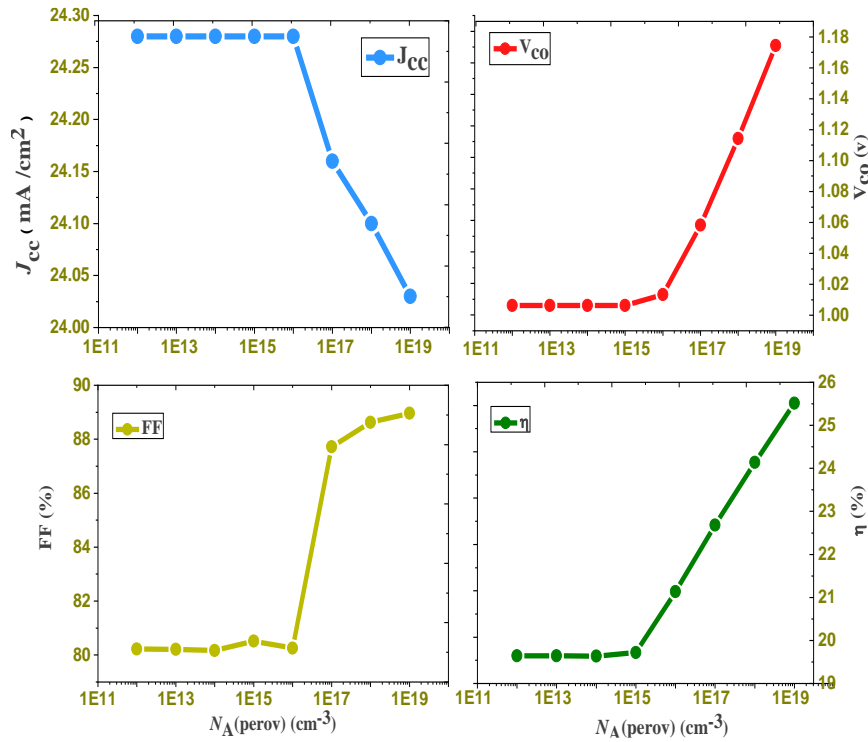


**Figure IV.2:** Variation du paramètre photovoltaïque ( $V_{\text{CO}}$ ,  $J_{\text{SC}}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ ,  $E_{\text{perov}}$ .

#### **b- Effet de la concentration (la densité) des accepteurs $N_{\text{A}}$ de la couche $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ sur les performances de la cellule solaire individuelle**

La Figure IV.3 présente la variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{\text{CO}}$ ,  $J_{\text{SC}}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de la concentration des accepteurs de la couche pirovskite,  $N_{\text{A}}(\text{perov})$ , entre  $1 \times 10^{11}$  et  $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ . Lorsque  $N_{\text{A}}(\text{perov})$  augmente entre  $1 \times 10^{11}$  et  $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , des valeurs fixées des performances ont été observées: Le courant  $J_{\text{CC}}$  est égale à  $24.28 \text{mA/cm}^2$ , cependant la tension  $V_{\text{OC}}$  est égale à 1.01 Volt. Le Facteur de Forme  $FF$  est égale à 80.3%. En d'autre part, le rendement de conversion  $\eta$  à une valeur fixée égale à 19.5%.

Lorsque la concentration  $N_{\text{A}}(\text{perov})$  augmente plus de  $10^{16} \text{cm}^{-3}$ , toutes les paramètres photovoltaïques subit une variation rapide, le rendement de conversion  $\eta$  prend une valeur de 25.5% pour une concentration de  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ . La concentration de  $10^{16} \text{cm}^{-3}$  sera utilisée dans le reste de nos calculs.



**Figure IV.3:** Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la concentration des accepteurs de la couche  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ .

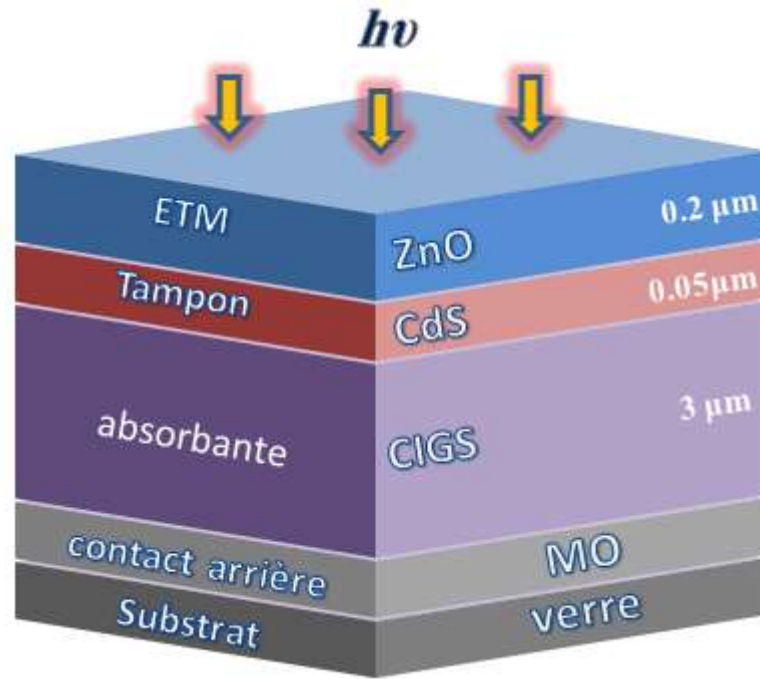
Les paramètres photovoltaïques de la cellule supérieure à base de Pérovskite sont résumés dans le Tableau IV.3.

$V_{co} \text{ (Volt)}$	$J_{cc} \text{ (mA/cm}^2\text{)}$	$FF \text{ (\%)}$	$\eta \text{ (\%)}$
1.03	22.65	80.20	18.75

**Tableau IV.3 :** Paramètres photovoltaïques obtenues de la cellule supérieure à base de Pérovskite.

#### IV.2.2 Présentation de la cellule individuelle à base de CIGS

La structure de la cellule solaire individuelle à base de CIGS contient respectivement les couches suivantes: La couche fenêtre à base de (ZnO) de conductivité de type  $n^+$ , la couche tampon de CdS de type n et la couche absorbante à base de notre matériaux CIGS de conductivité de type p. ensuite un couche Molebdene Mo qui a été utilisé comme un contact arrière métallique, comme le montre la Figure IV.4.



**Figure IV.4:** Structure de la cellule solaire individuelle à base de CIGS.

#### **IV.2.2.1 Paramètres de la cellule individuelle à base de CIGS**

Les paramètres de base des différentes couches constituant la structure CIGS sont résumés au Tableau IV.5.

	<i>ZnO</i>	<i>CdS</i>	<i>CIGS</i>
<i>Épaisseur (µm)</i>	<b>0.2</b>	<b>0.05</b>	<b>3</b>
<i>Constante diélectrique</i>	<b>9</b>	<b>10</b>	<b>13.6</b>
<i>Bande de gap (eV)</i>	<b>3.3</b>	<b>2.4</b>	<b>1.20</b>
<i>Les affinités des électrons (eV)</i>	<b>4</b>	<b>3.8</b>	<b>4.1</b>
<i>Densité d'effective NC (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>2.22 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>2.22 \times 10^{18}</math></b>	<b><math>2.22 \times 10^{18}</math></b>
<i>Densité d'effective NV (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>1.78 \times 10^{19}</math></b>	<b><math>1.78 \times 10^{19}</math></b>	<b><math>1.78 \times 10^{19}</math></b>
<i>Mobilité d'électrons (cm<sup>2</sup>/Vs)</i>	<b>100</b>	<b>100</b>	<b>100</b>
<i>Mobilité de trous (cm<sup>2</sup>/Vs)</i>	<b>25</b>	<b>25</b>	<b>25</b>
<i>Les densités (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>N_D : 1 \times 10^{17}</math></b>	<b><math>N_D : 5 \times 10^{17}</math></b>	<b><math>NA : 8 \times 10^{16}</math></b>

**Tableau IV.4 :** Paramètres électriques des différentes couches de la cellule individuelle à base de CIGS [7].

	ZnO	CdS	CIGS
Défauts de densités ( $cm^{-3}$ )	$N_{DG} : 10^{17}$	$N_{AG} : 10^{18}$	$N_{DG} : 10^{14}$
Niveau d'énergie (eV)	1.65	1.2	0.6
La deviation standard (eV)	0.1	0.1	0.1
Cross-section des électrons ( $cm^2$ )	$10^{-12}$	$10^{-17}$	$5 \times 10^{-13}$
Cross-section des trous ( $cm^2$ )	$10^{-15}$	$10^{-12}$	$10^{-15}$

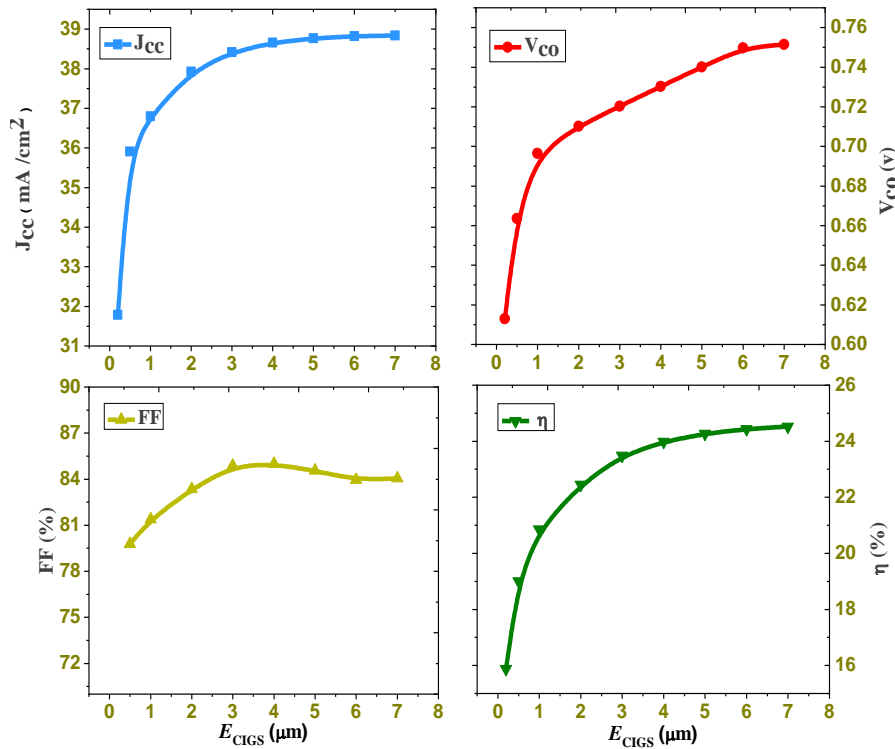
**Tableau IV.5 :** Paramètres des défauts Gaussiens des différentes couches de la cellule individuelle à base de CIGS [7].

#### **IV.2.2.2 Résultats et discussion**

Pour étudier les performances de la cellule individuelle à base de CIGS, deux paramètres essentiels doivent être variés et optimisés: L'épaisseur de la couche absorbante,  $E_{CIGS}$ , et la concentration des accepteurs de cette couche,  $N_A(CIGS)$ . L'épaisseur de la couche (CIGS) est donc variée de 0.2  $\mu m$  à 7  $\mu m$ , bien que la concentration des accepteurs  $N_A$  du matériau (CIGS) est variée de  $1 \times 10^{12} cm^{-3}$  à  $1 \times 10^{19} cm^{-3}$ . Enfin, nous choisissons les valeurs de l'épaisseur  $E_{CIGS}$  et de la concentration  $N_A(CIGS)$  optimales de la cellule éclairée (AM1.5G) qui donnent des performances meilleures.

##### **a- Effet de l'épaisseur de la couche CIGS sur les performances de la cellule solaire individuelle**

La Figure IV.5 présente la variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{CO}$ ,  $J_{SC}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche pirovskite ( $E_{CIGS}$ ). Lorsque  $E_{CIGS}$  augmente entre 0.2 et 3  $\mu m$ , une variation rapide est observée: Le courant  $J_{CC}$  augmente rapidement entre 31.8 et 38.4 mA/cm<sup>2</sup>, cependant la tension  $V_{OC}$  augmente entre 0.61 et 0.72 Volt. En d'autre part, le Facteur de Forme  $FF$  subit à une légère variation entre 80% à une valeur maximale de 85% quand  $E_{CIGS} \sim 3 \mu m$ . Concernant le rendement de conversion  $\eta$ , lui aussi il subit une augmentation rapide entre 16 et 23.8% quand  $E_{CIGS}$  varie entre 0.2 et 3  $\mu m$ . On a remarqué lorsque  $E_{CIGS}$  dépasse 3  $\mu m$  le rendement de conversion  $\eta$  tend vers une valeur presque fixée de 24%, ce qui donne une optimale de de l'épaisseur  $E_{CIGS}$  est de l'ordre de 3  $\mu m$ . Cette valeur sera utilisée, par la suite, dans le reste de nos calculs.

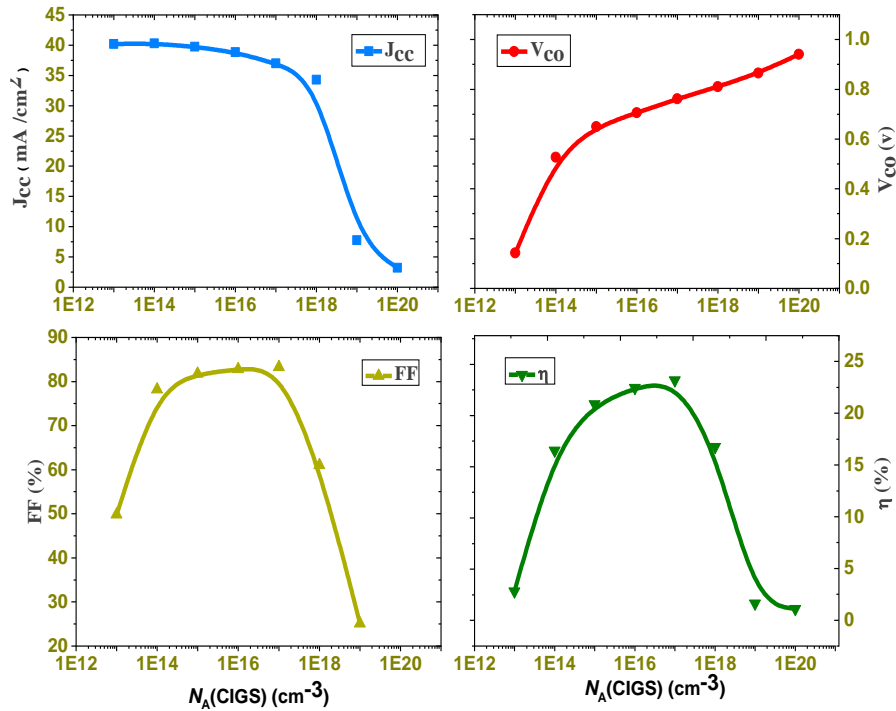


**Figure IV.5:** Variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{CO}$ ,  $J_{SC}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de l'épaisseur de la couche CIGS,  $E_{CIGS}$ .

### **b - Effet de la concentration (la densité) des accepteurs $N_A$ de la couche CIGS sur les performances de la cellule solaire individuelle**

La Figure IV.6 présente la variation des paramètres photovoltaïques ( $V_{CO}$ ,  $J_{SC}$ ,  $FF$  et  $\eta$ ) en fonction de la concentration des accepteurs de la couche CIGS,  $N_A(\text{CIGS})$ , entre  $1 \times 10^{12}$  et  $1 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ . Lorsque  $N_A(\text{CIGS})$  augmente entre  $1 \times 10^{15}$  et  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , un maximum des performances ont été observées: Le courant  $J_{CC}$  est égale à  $\sim 39 \text{ mA/cm}^2$ , cependant la tension  $V_{OC}$  est égale à  $\sim 0.7 \text{ Volt}$ . Le Facteur de Forme  $FF$  est prend un maximum de 84.5%. En d'autre part, le rendement de conversion  $\eta$  à une valeur maximale de 23% pour  $N_A(\text{CIGS}) \sim 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ .

La concentration optimale de  $N_A(\text{CIGS}) \sim 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  sera utilisée dans le reste de nos calculs.



**Figure IV.6:** Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la concentration des accepteurs de la couche CIGS.

Les paramètres photovoltaïques obtenues de la cellule CIGS individuelle ont été résumées dans le Tableau IV.6.

$V_{co}$ (Volt)	$J_{cc}$ ( $mA/cm^2$ )	$FF$ (%)	$\eta$ (%)
<i>0.72</i>	<i>38.42</i>	<i>84.88</i>	<i>23.49</i>

**Tableau IV.6 :** Paramètres photovoltaïques de la cellule inférieure à base de CIGS.

### **IV.3 Etude de la cellule Tandem Pérovskite/CIGS**

La cellule solaire tandem à base du composé Pérovskite/CIGS est constituée par une cellule supérieure à base du composé Pérovskite et de la cellule inférieure à base du composé CIGS. Deux fines couches (c-Si(n++) et c-Si(p++)) ont été utilisées comme une jonction tunnel (couche intermédiaire entre eux). La structure globale de la cellule Tandem est constituée de : Fenêtre de ZnO, une couche absorbante de  $CH_3NH_3PbI_3Cl$ , CuSCN, jonction tunnel à base de (c-Si(n++) et c-Si(p++)), Fenêtre de ZnO, couche buffer de CdS, une couche absorbante de CIGS (Voir Figure IV.7).



**Figure IV.7:** Structure de la cellule solaire tandem Pérovskite/CIGS.

Dans notre étude pour la cellule tandem Pérovskite/CIGS monolytique, les deux cellules sont connectées en série, la tension à circuit-ouvert de cellule complète est égale à la somme des tensions à circuit-ouvert des sous-cellules soit :

$$V_{co}^{Tandem} = \sum V_{co}^{sous-cellule} = V_{co}^{cellule\ supérieure} + V_{co}^{cellule\ inférieure} \quad (IV.1)$$

Pour le courant de court-circuit  $J_{cc}$  d'une structure tandem: Il est admis par la communauté scientifique que le courant généré par la cellule tandem correspond au courant le plus faible des deux sous-cellules, soit:

$$J_{cc}^{Tandem} = \min \left[ J_{cc}^{cellule\ supérieure} ; J_{cc}^{cellule\ inférieure} \right] \quad (IV.2)$$

#### **IV.3.1. Paramètres des couches intermédiaires (Jonction tunnel)**

	<i>c-Si (n++)</i>	<i>c-Si(p++)</i>
<i>Épaisseur (μm)</i>	<b>0.005</b>	<b>0.005</b>
<i>Constante diélectrique</i>	<b>11.9</b>	<b>11.9</b>
<i>Bande de gap (eV)</i>	<b>1.16</b>	<b>1.16</b>
<i>Les affinités des électrons (eV)</i>	<b>4.05</b>	<b>4.05</b>
<i>Densité d'effective NC (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>3.5 \times 10^{20}</math></b>	<b><math>3.5 \times 10^{20}</math></b>
<i>Densité d'effective NV (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>3.5 \times 10^{19}</math></b>	<b><math>3.5 \times 10^{20}</math></b>
<i>Mobilité d'électrons (cm<sup>2</sup>/Vs)</i>	<b>20</b>	<b>20</b>
<i>Mobilité de trous (cm<sup>2</sup>/Vs)</i>	<b>4</b>	<b>4</b>
<i>Les densités (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>N_D: 1 \times 10^{20}</math></b>	<b><math>N_A: 3 \times 10^{19}</math></b>

**Tableau IV.7 :** Paramètres électriques des couches intermédiaires c-Si(n++) et c-Si(p++)[8].

	<i>c-Si (n++)</i>	<i>c-Si(p++)</i>
<i>Défauts de densités (cm<sup>-3</sup>)</i>	<b><math>N_{DG}: 10^{15}</math></b>	<b><math>N_{AG}: 10^{15}</math></b>
<i>Niveau d'énergie (eV)</i>	<b>0.8</b>	<b>0.8</b>
<i>La deviation standard (eV)</i>	<b>0.2</b>	<b>0.2</b>
<i>Cross-section des electrons (cm<sup>2</sup>)</i>	<b><math>10^{-17}</math></b>	<b><math>10^{-17}</math></b>
<i>Cross-section des trous (cm<sup>2</sup>)</i>	<b><math>10^{-17}</math></b>	<b><math>10^{-17}</math></b>

**Tableau I.8 :** Paramètres des défaut Gaussiens des couches intermédiaires c-Si(n++) et c-Si(p++) [8].

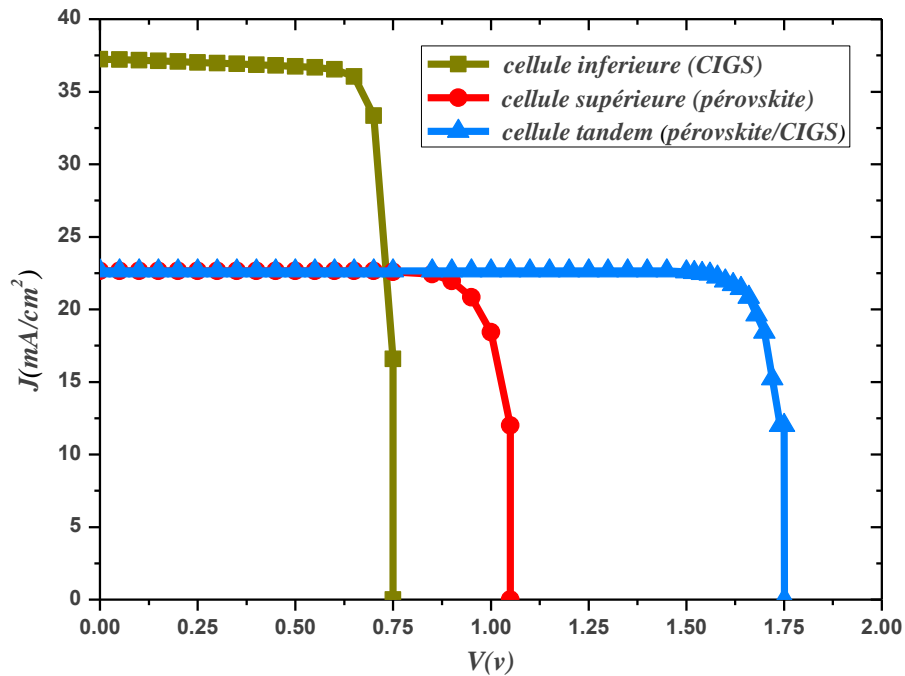
### **VI.3.2 Résultats de simulation de la cellule tandem Pérovskite/CIGS**

- Après le lancement de la simulation, les paramètres photovoltaïques de la cellule tandem Pérovskite/CIGS sont résumés dans le Tableau IV.9.

<i>V<sub>co</sub> (Volt)</i>	<i>J<sub>CC</sub> (mA/cm<sup>2</sup>)</i>	<i>FF (%)</i>	<i>η (%)</i>
<b>1.75</b>	<b>19.14</b>	<b>64.58</b>	<b>21.24</b>

**Tableau IV.9 :** Paramètres photovoltaïques de la cellule tandem Pérovskite/CIGS.

La figure IV.8 montre ces trois courbes J-V qui sont issues de l'analyse de sous-cellules à l'aide du wxAMPS.



**Figure IV.8 :** Caractéristiques (I-V) calculées des trois cellules solaires, cellule inférieure (CIGS), cellule supérieure (Pérovskite) et cellule tandem (Pérovskite /CIGS).

Le courant induit à la cellule tandem égale dans tous les cas au minimum des courants des deux cellules supérieure et inférieure, donc on voit clairement que le courant de court-circuit ( $J_{CC}$ ) dans le cas de la cellule tandem ( $22.65 \text{ mA}/\text{cm}^2$ ) est égale presque le courant court-circuit ( $J_{CC}$ ) de la cellule supérieur  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ .

La tension de circuit-ouvert de la cellule tandem est égale à la somme des deux tensions de circuit-ouvert des deux cellules empilées (1.75 Volt).

#### **IV.4 Conclusion**

Dans notre travail, nous avons étudié par simulation numérique la structure des cellules solaires individuelles à base de CIGS et Pérovskite pour optimiser quelque paramètres physiques de ces deux cellules, tels que: L'épaisseur et la concentration des accepteurs de l'absorbeur de la structure, utilisant un meilleur logiciel unidimensionnel wxAMPS.

Nous avons commencé par la simulation de la cellule CIGS et de la cellule pérovskite afin de déterminer l'effet de l'épaisseur des couches (CIGS) et ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ ) individuellement empilées. Les paramètres photovoltaïques:  $J_{cc}$ ,  $V_{co}$ ,  $FF$  et le rendement de conversion de la cellule solaire ont été déterminés afin d'obtenir les meilleures conditions de fonctionnement de la cellule tandem  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}/\text{CIGS}$ . Les résultats obtenus nous a permis d'extraire quelques points, tels que:

- Le courant induit dans la cellule tandem égale dans tous les cas au minimum des courants des deux cellules supérieure et inférieure;
- La tension de circuit-ouvert de la cellule tandem est égale à la somme des deux tensions de circuit-ouvert des deux cellules empilées (montées en série);
- Les paramètres à commander pour optimiser les performances de la cellule solaire tandem sont: l'épaisseur de la couche absorbante de cellule supérieure ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{Cl}$ ) et inférieure à base de (CIGS), ensuite la densité des accepteurs  $N_A$  des deux absorbeurs.

## REFERENCES

- [01] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai et T. Miyasaka, *J. Am. Chem. Soc.*, 131 (2009) 6050–6051.
- [02] S.D. Stranks, G.E. Eperon, G. Grancini, C. Menelaou, M.J. Alcocer, T. Leijtens, L. M. Herz, A. Petrozza et H.J. Snaith, *Science*, 342 (2013) 341-344.
- [03] J. Burschka, N. Pellet, S.-J. Moon, R. Humphry-Baker, P. Gao, M. K. Nazeeruddin et M. Gratzel, *Nature*, 499 (2013) 316-319.
- [04] W.S. Yang, B.-W. Park, E. H. Jung, N. J. Jeon, Y. C. Kim, D. U. Lee, S. S. Shin, J. Seo, E. K. Kim, J. H. Noh et S. I. Seok, *Science*, 356 (2017) 1376-1379.
- [05] Y. Wang, Z. Xia, Y. Liu, and H. Zhou, "Simulation of Perovskite Solar Cells with Inorganic Hole Transporting Materials", 12 (2015) 1-6.
- [06] B.M. Soucase, I. Guaita Pradas, and K. R. Adhikari, "Numerical Simulations on Pérovskite Photovoltaic Devices", in *Perovskite Materials - Synthesis, Characterisation, Properties, and Applications*, InTech, 2016.
- [07] F. Konstantinos, "Modeling and simulation of A dual-Junction CIGS Solar cell using silvaco atlas", Thèse PhD., Naval post-graduate school, Monterey California,

2012.

- [08] S.J. Hou, J., Xi, J., Kampas, F., Bae, S., Fonash, Non-local recombination in “tunnel junctions” of multijunction amorphous Si alloy solar cells, in: Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 336 (1994) 717–722.

# *Conclusion Générale*

Dans ce travail, on va utiliser la logiciel de simulation wxAMPS pour étudier les propriétés photovoltaïques des cellules solaires tandem Pérovskite/CIGS, tel que : le courant de court-circuit, la tension de circuit-ouvert, le facteur de forme et le rendement de conversion.

Dans un premier temps, on va étudier les deux cellules solaires individuellement (la cellule inférieure est à bas de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) [  $E_g = 1.2$  eV] et la cellule supérieure est à base de Pérovskite [  $E_g = 1.57$  eV]), puis on va passer à la simulation de la cellule Tandem Pérovskite/CIGS afin d'améliorer les performances des cellules tandem par rapport au cellules individuelles.

Nous avons étudié l'effet de l'épaisseur et la concentration des accepteurs  $N_A$  des deux couches absorbantes de la cellule tandem sur les propriétés photovoltaïques d'une cellule tandem Pérovskite/CIGS.

A partir des résultats de simulation, nous avons constaté que:

- Le courant induit dans la cellule tandem égale dans tous les cas au minimum des courants des deux cellules supérieure et inférieure et la tension de circuit-ouvert de la cellule tandem est égale à la somme des deux tensions de circuit-ouvert des deux cellules empilées (montées en sérié).
- Les paramètres à commander pour optimiser les performance de la cellule solaire tandem sont: l'épaisseur de la couche absorbante de cellule supérieure (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>Cl) et inférieure à base de (CIGS), ensuite la densité des accepteurs  $N_A$  des deux absorbeurs.
- Le rendement de conversion total de la cellule tandem Pérovskite/CIGS n'est pas forcément la somme des deux rendements, puisque il est fonction des trois paramètres:  $J_{cc}$ ,  $V_{co}$  et  $FF$ .

En conclusion, nous pouvons dire que l'empilement des deux cellules solaires dépend étroitement des paramètres physiques et géométriques de la couche absorbante des deux cellules: la cellule supérieure à grand gap et la cellule inférieure de petit gap de la structure tandem. Cela rend le champ ouvert aux cellules de pérovskite qui ont l'avantage d'être faciles à repenser la structure.

Cette étude suscite de nombreuses interrogations et ouvre la voie sur de riches perspectives de recherche avec des applications potentielles dans le domaine de la

conversion photovoltaïque. Nous suggérons d'effectuer une étude plus approfondie sur la possibilité de développer des cellules solaires à double jonction « Tandem » en utilisant des logiciels bidimensionnels ou tridimensionnels et pour d'autres matériaux absorbants, en prenant en considération les défauts existants dans les niveaux profonds et superficiels des absorbeurs de la structure tandem et aussi pour d'autres composés tels : CZTS, CdTe, GaAs, c-Si, etc...

## RÉSUMÉ

Dans ce travail, on va utiliser le logiciel de simulation unidimensionnel wxAMPS pour étudier les propriétés photovoltaïques des cellules solaires tandem Pérovskite/CIGS. (la cellule inférieure est à bas de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) [  $E_g = 1.2$  eV] et la cellule supérieure est à base de Pérovskite [  $E_g = 1.55$  eV] ). Dans un premier temps, on va étudier l'influence des épaisseurs et la concentration des accepteurs  $N_A$  des couches absorbantes des les deux cellules solaires individuelles. On va passer ensuite à la simulation de la cellule Tandem Pérovskite/CIGS, afin d'améliorer les performances photovoltaïques des cellules solaires Tandem par rapport au cellules individuelles.

**Mots clés :** Cellules solaires, CIGS, Pérovskite, Tandem, Simulation, WxAMPS.

## ABSTRACT

In this work, we will use the one-dimensional simulation software wxAMPS to study the photovoltaic properties of tandem Perovskite/CIGS thin films solar cells (The bottom cell is based on Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS) [  $E_g = 1.2$  eV] and the top cell is based on Perovskite [  $E_g = 1.55$  eV] ). In the first time, we will study the influence of the absorber thicknesses and the acceptor density  $N_A$  of the absorbers layers of the two individual solar cells. then we will move to the simulation of the Tandem Perovskite/CIGS solar cell, in order to improve the photovoltaic performances of tandem cells compared to individual cells.

**Keywords:** Solar cells, CIGS, Perovskite, Tandem, Simulation, WxAMPS.

## ملخص

في هذا العمل ، سوف نستخدم برنامج محاكاة في اتجاه واحد WxAMPS لدراسة الخصائص الكهروضوئية للخلايا الشمسية الترادفية Perovskite/CIGS (الخلية السفلية تتكون من طبقة الامتصاص CIGS [  $E_g = 1.2$  eV] بينما الخلية العلوية مكونة من مركب البيروفسكايت [  $E_g = 1.55$  eV]). في اول الامر، سوف ندرس تأثير سمك وكثافة الذرات القابلة  $N_A$  للطبقات الماصة في التركيبين المنفصلين كل على حدى. ثم ننتقل إلى محاكاة الخلية الترادفية Perovskite / CIGS ، من أجل تحسين الأداء الكهروضوئي للخلايا الترادفية مقارنة بالخلايا الفردية.

الكلمات المفتاحية: الخلايا الشمسية ، CIGS ، بيروفسكايت ، ترادف ، محاكاة ، WxAMPS.