

REPUBLICQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE  
SCIENTIFIQUE

*Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj*

*Faculté des Sciences et de la technologie*

*Département d'Electronique*

## **Mémoire**

*Présenté pour obtenir*

**LE DIPLOME DE MASTER**

**FILIERE : ELECTRONIQUE**

**Spécialité : Microélectronique**

Par

➤ **Bennia Imen**

➤ **Derradj Sarra**

*Intitulé*

### **Simulation numérique et optimisation des performances d'une cellule solaire à pérovskite.**

*Soutenu le : 22/06/2022*

*Devant le Jury composé de :*

<i>Nom &amp; Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>Dr Z.MESSAI</i>	<i>MCA</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>Dr F.KHALED</i>	<i>MCB</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M<sup>me</sup> F.KHERRAT</i>	<i>MAA</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>

*Année Universitaire 2021/2022*



# Remerciement

*Avant toutes choses, nous remercions « Allah » , le tout puissant, pour nous avoir donné la force et la patience. Nous exprimons d'abord nos profonds remerciements et notre vive connaissance à M<sup>me</sup> F.KHERRAT pour avoir proposé le thème de ce travail et avoir accepté de le diriger du début jusqu'à la fin. Nous le remercions sincèrement pour ses précieux conseils, ses encouragements, sa disponibilité, sa patience, le temps qu'elle nous a consacré, des corrections minutieuses et tous les efforts qu'elle a fournis pour le bon aboutissement de ce travail.*

*Nos remerciements aux membres du jury : Dr F.KHALED et Dr Z.MESSAI qui nous ont fait l'honneur d'accepter de lire et de juger ce travail.*

*Nous adressons également nos remerciements, à tous nos enseignants, qui nous ont donné les bases de la science, sans oublier d'exprimer nos remerciements encore au Chef de Département d'électronique.*

*Nous tenons à remercier enfin, tous ceux qui ont aidés de près ou de loin à la réalisation de ce projet de fin d'études.*





# Dédicaces

*Nous dédions ce modeste travail à :*

*Nos mères, sources de tendresse et d'amour pour leurs soutiens tout le long de notre vie scolaire.*

*Nos pères, qui nous ont toujours soutenus et qui ont fait tout leur possible pour nous aider.*

*Nos frères et nos sœurs, que nous aimons beaucoup.*

*Nos chers amis et enseignants.*



# Sommaire

---

Remerciement	
Dédicace	
Liste des figures	
Liste des tableaux	
Liste des abréviations	
Introduction générale .....	1

## Chapitre 1

### Généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires

1.1	Introduction.....	3
1.2	Le rayonnement solaire et notion d'air mass.....	3
1.3	Types des rayonnements solaires .....	5
1.4	Cellule solaire photovoltaïque .....	6
1.4.1	Définition .....	6
1.4.2	Effet photovoltaïque .....	6
1.4.3	Principe de fonctionnement d'une cellule solaire.....	7
1.5	Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire .....	8
1.5.1	Caractéristique courant - tension (I-V).....	8
1.5.2	Paramètres d'une cellule photovoltaïque .....	8
1.6	Schéma équivalent d'une cellule.....	10
1.7	Les différentes filières technologies des cellules photovoltaïques.....	11
1.8	Matériaux pérovskite.....	13
1.9	Propriétés des matériaux pérovskites .....	15
1.9.1	Propriétés optiques et électroniques des pérovskites.....	15
1.9.2	Propriétés optoélectroniques .....	15
1.10	Architecture et fabrication des cellules à pérovskite.....	16
1.11	Processus de transfert de charge dans les cellules solaires à pérovskite.....	17
1.12	Conclusion .....	19

# Sommaire

---

## Chapitre 2

### Simulation de la cellule solaire pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ par SCAPS-1D

2.1	Introduction.....	21
2.2	Logiciel SCAPS.....	21
2.2.1	Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem).....	22
2.2.2	Présentation de logiciel SCAPS.....	23
2.2.3	Avantages et inconvénients du SCAPS.....	24
2.3	Structure de la cellule solaire de référence à simuler.....	25
2.4	Paramètres et propriétés de la cellule de référence.....	27
2.5	Résultats et discussion.....	30
2.5.1	Caractéristique (J-V) et efficacité quantique QE.....	30
2.5.2	Les bandes énergétiques.....	31
2.5.3	Effet de l'épaisseur de la couche absorbante.....	32
2.5.4	Effet de l'épaisseur de la couche ETL ( $\text{TiO}_2$ ).....	34
2.5.5	Effet de l'épaisseur de la couche HTL ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ).....	35
2.5.6	Effet de la densité d'accepteur $N_a$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) de la couche absorbante.....	35
2.5.7	Effet de la densité de défauts $N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) de la couche absorbante.....	36
2.5.8	Effet du travail de sortie du métal de l'anode.....	38
2.5.9	Effet des interfaces ( $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) et ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{TiO}_2$ ).....	39
2.6	Les paramètres photovoltaïques de la cellule optimisée.....	40
2.7	Conclusion.....	42
	Conclusion générale.....	43
	Références bibliographiques	
	Résumé	

# Liste des figures

---

## Chapitre 1

### Généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires

<b>Figure 1. 1</b> : Caractéristiques spectrales du soleil. ....	4
<b>Figure 1. 2</b> : Schéma de principe de la conversion photoélectrique. ....	6
<b>Figure 1. 3</b> : Diagramme de bande et structure d'une cellule photovoltaïque. ....	7
<b>Figure 1. 4</b> : Caractéristique courant-tension et grandeurs physiques associées. ....	8
<b>Figure 1. 5</b> : Rendement quantique externe de la cellule. ....	10
<b>Figure 1. 6</b> : Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque. ....	11
<b>Figure 1.7</b> : Rendements de conversion pour diverses technologies photovoltaïques publiés par le Laboratoire (NREL). ....	13
<b>Figure 1. 8</b> : Schéma de la structure cristalline des matériaux pérovskites. ....	14
<b>Figure 1. 9</b> : Coefficients d'absorption de quelques pérovskites hybrides. ....	15
<b>Figure 1. 10</b> : Architecture des cellules solaires pérovskite. ....	17
<b>Figure 1. 11</b> : Diagramme schématique des niveaux de bande d'énergie et des processus de transport de charge des électrons et des trous dans les cellules solaires à pérovskite. ....	18

## Chapitre 2

### Simulation de la cellule solaire pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ par SCAPS-1D

<b>Figure 2. 1</b> : Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS. ....	21
<b>Figure 2. 2</b> : Interface de définition des appareils. ....	23
<b>Figure 2. 3</b> : Paramètres de la pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ introduits dans SCAPS. ....	24
<b>Figure 2. 4</b> : Structure de la cellule solaire n-p étudiée générée par SCAPS-1D. ....	26
<b>Figure 2. 5</b> : Diagramme des niveaux d'énergie. ....	26
<b>Figure 2. 6</b> : Coefficient d'absorption de la pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ . ....	29
<b>Figure 2. 7</b> : La caractéristique courant- tension (J-V). ....	30
<b>Figure 2. 8</b> : Rendement quantique QE en fonction de la longueur d'onde. ....	31
<b>Figure 2. 9</b> : Diagramme des bandes énergétiques de la structure étudiée généré par SCAPS. ....	32
<b>Figure 2. 10</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ . ....	33
<b>Figure 2. 11</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de $\text{TiO}_2$ . ....	34

## Liste des figures

---

<b>Figure 2. 12</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de $\text{Cu}_2\text{O}$ .....	35
<b>Figure 2. 13</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité d'accepteur Na ( $\text{cm}^{-3}$ ). .....	36
<b>Figure 2. 14</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité de défauts Nt ( $\text{cm}^{-3}$ ).....	37
<b>Figure 2. 15</b> : Caractéristique (J-V) pour différents métaux de contact de l'anode. ....	38
<b>Figure 2. 16</b> : Variation des paramètres photovoltaïques FF et PCE en fonction du travail de sortie. ....	39
<b>Figure 2. 17</b> : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité de défauts des interfaces. ....	40
<b>Figure 2. 18</b> : Caractéristique J-V optimisée de la cellule à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ . ....	41

## Liste des tableaux

---

<b>Tableau 2.1:</b> Propriétés électriques et optiques des différentes couches de la cellule.....	27
<b>Tableau 2. 2 :</b> Paramètres pour les défauts dans les matériaux et les interfaces. ....	28
<b>Tableau 2. 3 :</b> Paramètres photovoltaïques de la cellule de référence et optimisés. ....	41

## Liste des abréviations

---

<b>C</b>	La vitesse de la lumière	m/s
<b>E<sub>g</sub></b>	L'énergie de gap	Ev
<b>FF</b>	Le facteur de forme	(%)
<b>h</b>	Constante de Planck ( $6,626 \cdot 10^{-34}$ )	J.S
<b>I<sub>cc</sub></b>	Le courant de court-circuit	A
<b>I<sub>ph</sub></b>	Photo courant	A
<b>J<sub>sc</sub></b>	Densité du courant de court-circuit	mA/cm <sup>2</sup>
<b>N<sub>a</sub></b>	Concentration d'accepteur	cm <sup>-3</sup>
<b>N<sub>c</sub></b>	La densité effective d'état de la bande de conduction	cm <sup>-3</sup>
<b>N<sub>d</sub></b>	Concentration de donneur	cm <sup>-3</sup>
<b>N<sub>v</sub></b>	La densité effective d'état de la bande de valence	cm <sup>-3</sup>
<b>R<sub>s</sub></b>	La résistance série	Ω
<b>R<sub>sh</sub></b>	La résistance shunt	Ω
<b>T</b>	La température	K
<b>μ<sub>n</sub></b>	Mobilité des électrons	cm <sup>2</sup> v <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
<b>μ<sub>p</sub></b>	Mobilité des trous	cm <sup>2</sup> v <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
<b>V<sub>co</sub></b>	Tension de circuit ouvert	V
<b>n</b>	Rendement de conversion	%
<b>α</b>	Coefficient d'absorption	m <sup>-1</sup>

# Introduction général

---

## Introduction générale

Le marché des cellules PV est dominé par la technologie silicium. Elle représente plus de 90 % du marché mondial. La technologie du silicium a profité de plusieurs années de développement, et devenue actuellement une technologie mature.

Parmi les technologies photovoltaïques émergentes et prometteuses figurent les cellules solaires à base de matériaux Pérovskite. Ces cellules ont reçu une énorme attention en raison de leurs excellentes performances photovoltaïques et de leur procédure de fabrication simple. En 2009, la pérovskite hybride (organique-inorganique) à base d'iodure de méthylammonium-plomb ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ) a été introduite comme sensibilisant à la lumière visible par Kojima et ses collaborateurs, et a fait état d'une efficacité intéressante de plus de 3 %. Plus loin, de nombreuses stratégies et efforts ont été employés par divers chercheurs pour améliorer l'efficacité. Dans un court laps de temps, une efficacité maximale de plus de 25 % a été atteinte. Cela a montré que les matériaux pérovskites aux halogénures de plomb sont les matériaux les plus efficaces absorbant la lumière. Malheureusement, la présence de plomb (Pb) dans  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  et sa mauvaise stabilité dans l'air limitent sa production à grande échelle. Ainsi, la structure pérovskite d'halogénure d'étain ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) a été introduite comme absorbeur. Malgré les avancées et les progrès spectaculaires, le photovoltaïque organique-inorganique est toujours à la phase de recherche et développement en laboratoire. Cependant, le défi de la commercialisation de cette technologie dépendra essentiellement du développement de procédé à faible coût et aussi d'un meilleur rendement de conversion.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante :

- ✚ Le premier chapitre, présente des généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires, et nous avons également évoqué de la cellule solaire pérovskite
- ✚ Le deuxième chapitre, comporte d'abord, une présentation générale du logiciel de simulation SCAPS-1D, ensuite une simulation et optimisation des performances photovoltaïques de la cellule solaire de structure  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ . Finalement, une conclusion générale de l'ensemble des résultats obtenus dans ce document est présentée.

# **Chapitre 1**

## **Généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires**

## 1.1 Introduction

L'énergie solaire est une source d'énergie qui est dépendante du soleil. Par l'utilisation de cellule photovoltaïque qui, exposé aux photons de la lumière, produit de l'électricité, cette dernière est de loin le meilleur moyen de satisfaire nos besoins en énergie tout en protégeant notre environnement.

Dans ce chapitre, nous présentons des généralités sur la source d'énergie solaire et la cellule photovoltaïque, Nous décrirons ensuite son principe de fonctionnement, et ses paramètres photovoltaïques. Ensuite on donnera un aperçu sur le matériau pérovskite et l'architecture de la cellule pérovskite. Enfin on expliquera le transfert de charge dans ce genre de cellule solaire.

## 1.2 Le rayonnement solaire et notion d'air mass

Le Soleil est à l'origine de la plupart des énergies sur terre à l'exception de l'énergie nucléaire et de la géothermie profonde, Cette source d'énergie est propre, facilement accessible et virtuellement inépuisable. Le flux d'énergie solaire reçu annuellement sur la surface de la terre représente environ 15000 fois notre consommation globale d'énergie. Le Soleil émet un rayonnement électromagnétique d'un spectre allant de  $0,2\mu\text{m}$  (ultra-violet) à  $4\mu\text{m}$  (infrarouge). Le soleil hors atmosphère est usuellement considéré comme un corps noir à 5900 K. L'énergie associée à ce rayonnement solaire se décompose approximativement ainsi : 9% dans la bande des ultraviolets ( $<0,4\mu\text{m}$ ), 47% dans la bande visible ( $0,4$  à  $0,8\mu\text{m}$ ) et 44% dans la bande des infrarouges ( $>0,8\mu\text{m}$ ) [1].

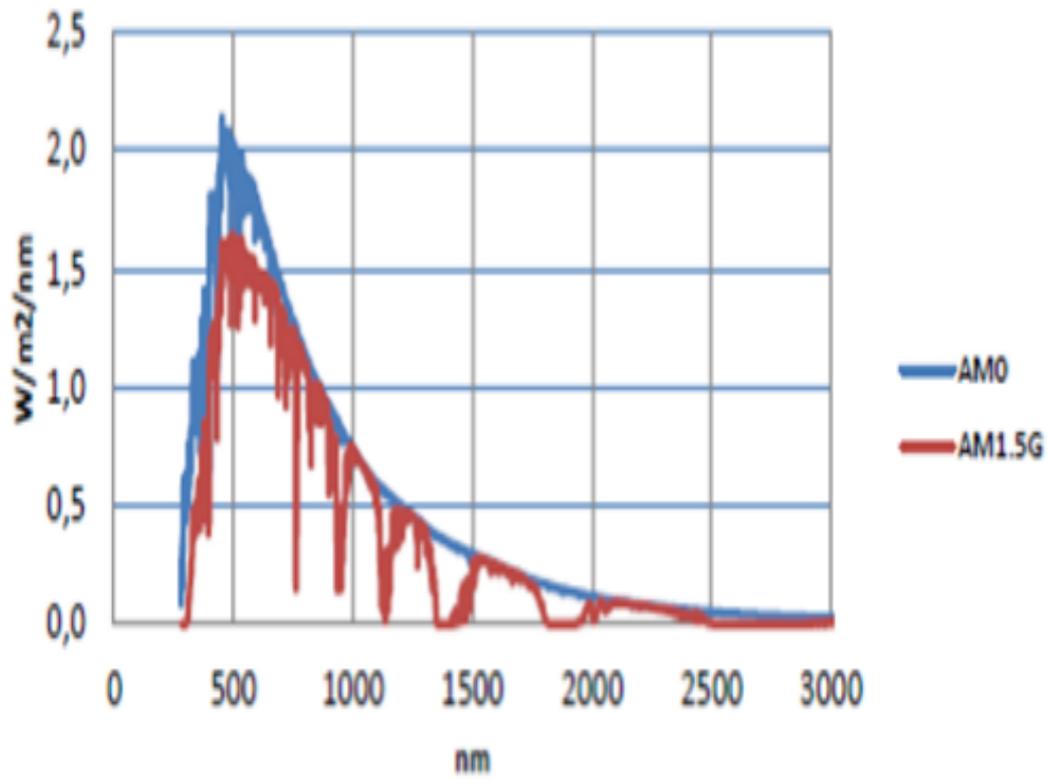


Figure 1. 1 : Caractéristiques spectrales du soleil [2].

Le rayonnement solaire est constitué de photons transportant une énergie qui est donnée par la relation suivante :

$$E = h\gamma = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.1)$$

E : Énergie en électronvolts [eV].

$\lambda$  : Longueur d'onde en  $\mu m$ .

$\gamma$  : Fréquence des photons en Hz.

C : vitesse de la lumière  $m \cdot s^{-1}$ .

La notion de AM pour « Air mass » (masse atmosphérique) qui est définie par :

$$AM = \frac{1}{\cos\theta} \quad (1.2)$$

Où  $\theta$  est l'angle que fait le soleil avec son Zénith [1].

Suivant les conditions de réception de la lumière, la masse d'air est définie comme suit :

✚ Le spectre solaire AM0 correspond au rayonnement à l'extérieur d'atmosphère, ce spectre est utilisé pour les applications spatiales (satellites et véhicules spatiaux). L'intensité totale de ce spectre est de  $1367\text{W/m}^2$ .

✚ Le spectre solaire AM1 correspond au trajet optique minimal, où le soleil est perpendiculaire à la surface de la terre (soleil au zénith).

✚ Le spectre solaire AM1.5G correspond aux applications terrestres, conventionnellement normalisé à  $1000\text{W/m}^2$ , comprend le spectre direct et le spectre diffus [3].

### 1.3 Types des rayonnements solaires

On distingue plusieurs types de rayonnement dont nous allons voir quelques-uns :

- **Rayonnement diffus** : Il intéresse tout le rayonnement dont la trajectoire entre le soleil et le point d'observation n'est pas géométriquement rectiligne et qui est dispersé ou réfléchi par l'atmosphère ou bien le sol.
- **Rayonnement direct** : Il représente des rayons ultraviolets. Il est émis du soleil et arrive à la Terre directement. Il a une trajectoire linéaire Il est employé dans les systèmes de concentration et se symbolise par la lettre "D" dans le spectre AM 1.5D.
- **Rayonnement réfléchi** : Il représente des rayons réfléchis par la Terre.
- **Rayonnement Global** : Il constitue un ensemble de rayons (direct, diffus et réfléchi) qui est employé pour faire fonctionner les panneaux solaires [4].

## 1.4 Cellule solaire photovoltaïque

### 1.4.1 Définition

Les cellules photovoltaïques (photon : grain de lumière et volt : unité de tension) sont des composants électroniques à semi-conducteurs (généralement faits de silicium sous ses différentes formes). Elles convertissent directement l'énergie lumineuse en électricité courant continu basse tension (effet photovoltaïque). Comme l'énergie lumineuse est le soleil, on parle alors de cellules solaires [5].

### 1.4.2 Effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque est un phénomène qui permet la conversion de l'énergie lumineuse en électricité, à travers un matériau semi-conducteur responsable du transport des charges électriques comme illustré à la figure 1.2 [6]:

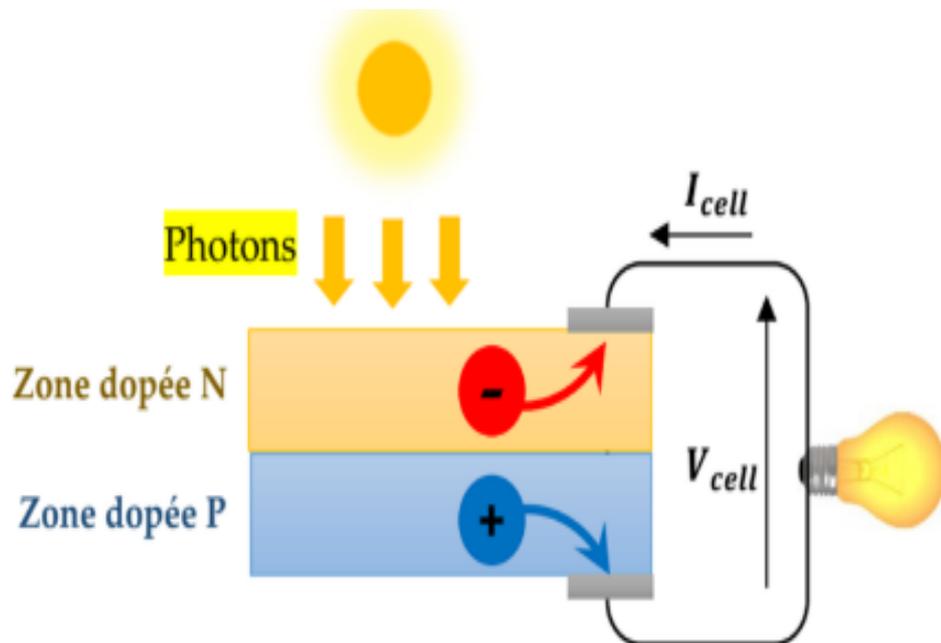


Figure 1. 2: Schéma de principe de la conversion photoélectrique [7].

### 1.4.3 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Le fonctionnement de toute cellule photovoltaïque repose sur l'existence d'un champ interne afin de séparer les paires électron-trou générées par absorption lumineuse.

Le principe de fonctionnement d'une cellule est décrit dans la figure 1.3. Les photons incidents créent des paires électron-trou et nous avons deux scénarios possibles suivant le lieu de création des paires électron-trou.

Si une paire électron-trou, est générée dans une zone électriquement neutre (p ou n), les porteurs minoritaires vont diffuser sous l'effet du champ électrique vers la région où ils deviennent majoritaires. Ces porteurs contribuent ainsi au courant par leur diffusion en créant un courant de diffusion. Si une paire est générée dans la zone de charge d'espace, l'électron et le trou sont séparés par le champ électrique et chacun est propulsé dans la région où il est porteur majoritaire (région n pour l'électron et région p pour le trou), ces porteurs donnent naissance à un courant de génération.

Ces deux contributions provoquent un photo-courant, qui contribue au courant inverse de la diode formée par la jonction [8].

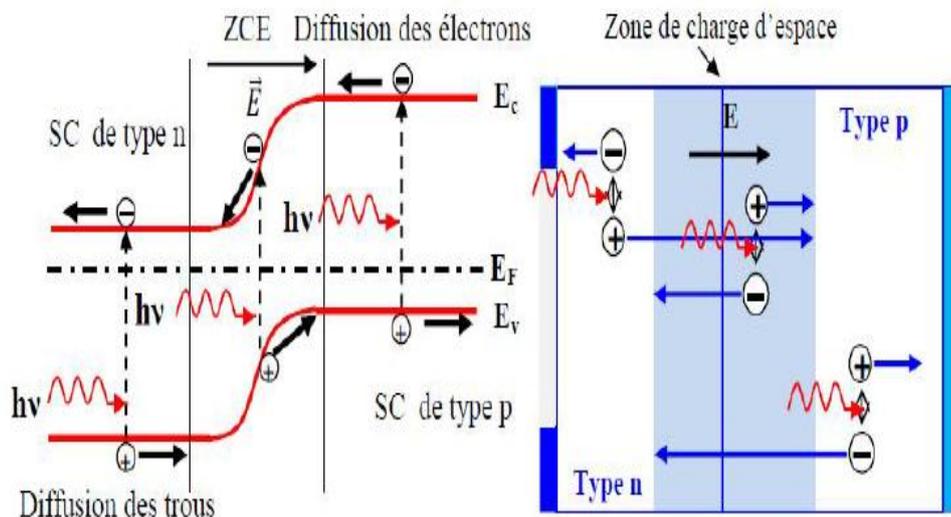


Figure 1. 3: Diagramme de bande et structure d'une cellule photovoltaïque [7].

## 1.5 Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire

### 1.5.1 Caractéristique courant - tension (I-V)

La capacité d'une cellule à produire de l'énergie est mesurée grâce à sa caractéristique courant-tension (Figure 1.4).

On peut facilement obtenir à partir de cette caractéristique certains paramètres qui vont nous renseigner sur les phénomènes physiques mis en jeu dans la cellule [9].

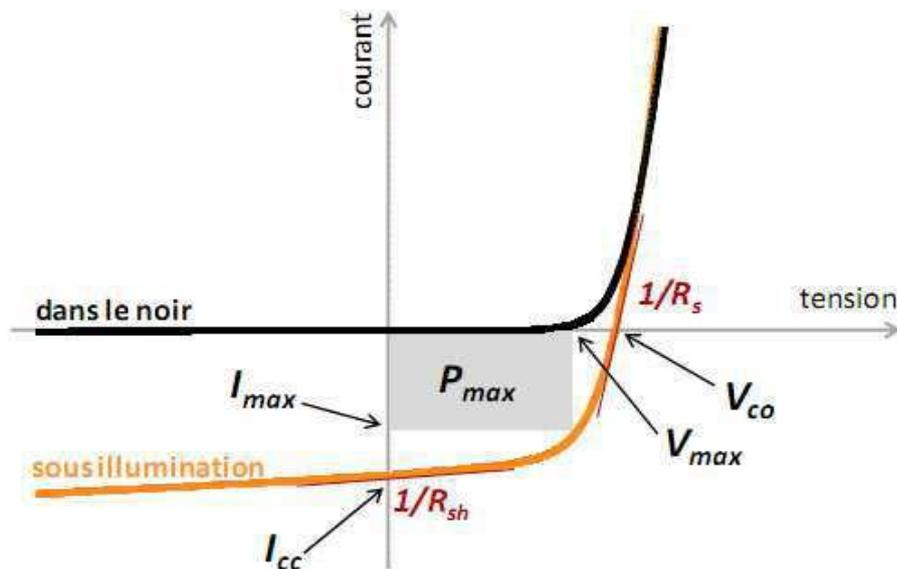


Figure 1. 4: Caractéristique courant-tension et grandeurs physiques associées.

### 1.5.2 Paramètres d'une cellule photovoltaïque

#### 1.5.2.1 Courant du court-circuit

Il est obtenu en court-circuitant les bornes de la cellule ( $V=0$ ). Il correspond au photocourant  $I_{ph}$  généré par le rayonnement. Pour une distribution spectrale donnée, ce photocourant croît linéairement avec l'intensité d'illumination de la cellule, de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs et de la température [10].

$I_{CC}$  le courant de court-circuit qui correspond au courant obtenu à  $V=0$ . L'expression approchée du courant de court-circuit est :

$$I_{cc} = \frac{I_{ph}}{1 + \frac{R_s}{R_{sh}}} \quad (1.3)$$

Dans le cas idéal ( $R_s$  nulle,  $R_{sh}$  infini) ce courant se confond avec le photo-courant  $I_{ph}$ .  $I_{cc}=I_{ph}$ . Si la cellule est laissée en circuit ouvert (courant nul), la tension mesurée aux bornes des électrodes est appelée tension de circuit ouvert  $V_{co}$ . C'est la tension qu'il faudrait appliquer à la diode dans le sens passant pour générer un courant égal au photo-courant  $I_{cc}$ . Elle est donnée par la relation :

$$V_{co} = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{I_{cc}}{I_0} + 1 \right) \quad (1.4)$$

### 1.5.2.2 Facteur de forme

Le facteur de forme ou FF (Fill Factor) représente l'efficacité de la cellule solaire. C'est le rapport entre la puissance maximale débitée  $V_m \cdot I_m$  (la surface du plus petit rectangle) et la puissance idéale  $V_{co} \cdot I_{cc}$  (la surface du plus grand rectangle). Où  $V_m$  et  $I_m$  sont les valeurs de tension et du courant correspondant au point de fonctionnement pour lequel la puissance, qui est égale à  $U \cdot I$ , est maximale. Le facteur de forme, est donné par la relation suivante :

$$FF = \frac{V_m I_m}{V_{co} I_{cc}} \quad (1.5)$$

### 1.5.2.3 Rendement en puissance PCE ( $\eta$ )

Il est défini par le rapport entre l'énergie maximale délivrée par la cellule  $P_{max}$  et l'énergie lumineuse incidente  $P_{in}$  par unité de surface :

$$\eta = \frac{V_m I_m}{P_{in}} = \frac{FF I_{cc} V_{co}}{P_{in}} \quad (1.6)$$

### 1.5.2.4 Rendement quantique de la cellule QE

Le rendement quantique décrit la probabilité, pour un photon incident d'une longueur d'onde donnée, de créer une paire électron-trou effectivement collectée par la cellule [10].

Il s'exprime selon l'équation suivante :

$$QE(\lambda) = \frac{\text{paire (electron-trous) collectées}}{\text{photon incident}} \quad (1.7)$$

Le rendement quantique dépend de plusieurs propriétés du matériau ; coefficient d'absorption, profondeur de jonction  $X_j$ , l'épaisseur de la zone de charge de déplétion, la durée de vie des porteurs et leur mobilité, la recombinaison en surface etc.. [3].

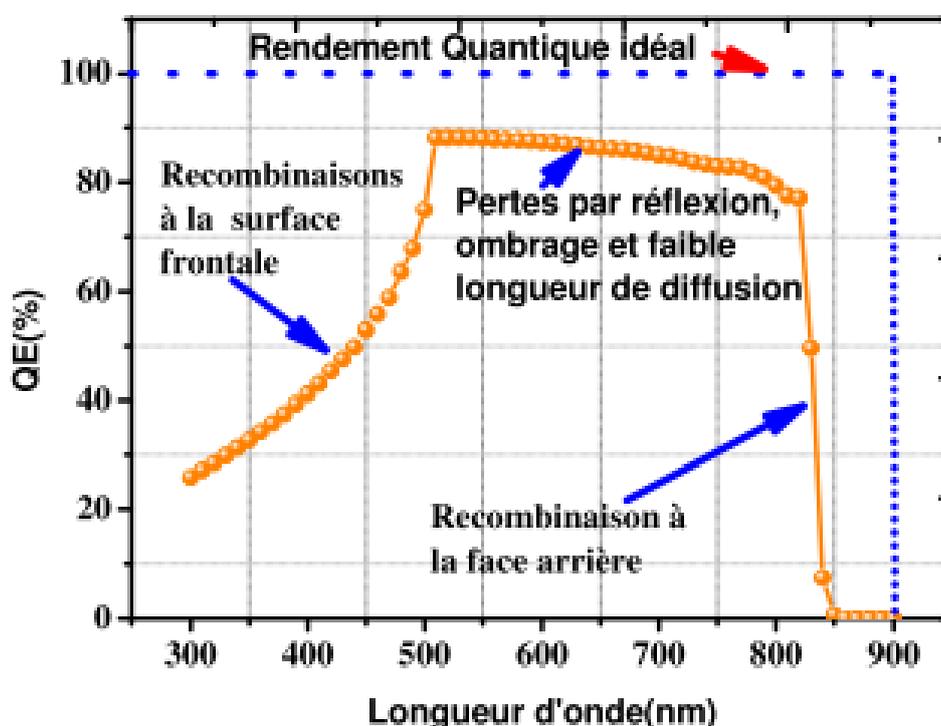


Figure 1. 5: Rendement quantique externe de la cellule.

## 1.6 Schéma équivalent d'une cellule

Si l'on considère le cas simple d'une cellule idéale à jonction donneur-accepteur soumise à un flux lumineux, celle-ci fonctionne comme un générateur de courant. Son schéma équivalent (Figure 1.6) est représenté par une diode idéale montée en parallèle avec une source de courant.  $R_s$  est une résistance série liée à la résistivité volumique et à l'impédance des électrodes et des matériaux.

$R_{sh}$  est une résistance parallèle liée aux effets de bord et aux recombinaisons volumiques. Pour minimiser les pertes, il faut diminuer  $R_s$  et augmenter  $R_{sh}$ . Le cas idéal est représenté par  $R_{sh}$  égale à l'infini et  $R_s$  égale à zéro [9].

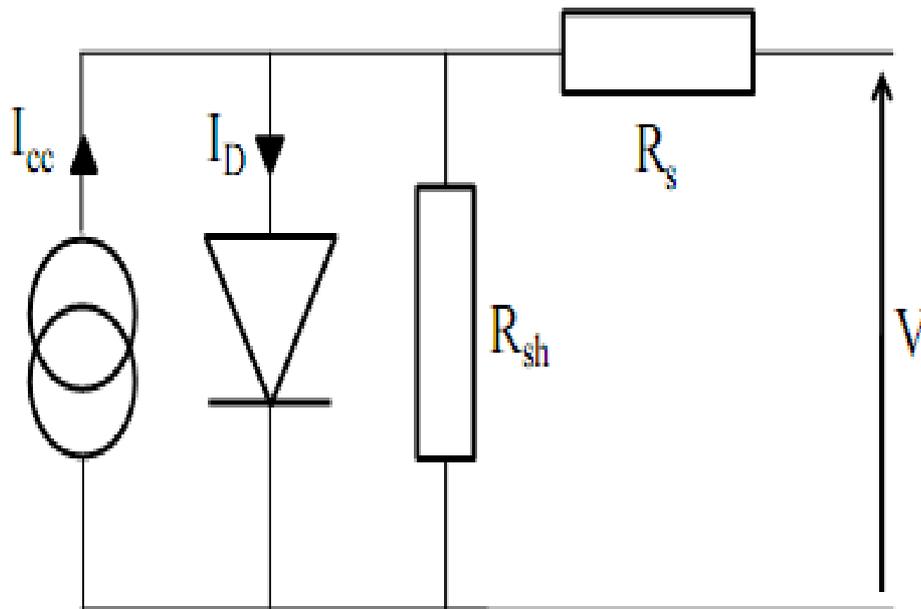


Figure 1. 6: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque.

### 1.7 Les différentes filières technologies des cellules photovoltaïques

Il existe aujourd'hui trois générations principales pour les technologies photovoltaïques. Les matériaux absorbants de ces cellules solaires peuvent être des semi-conducteurs inorganiques, organiques ou hybrides [11].

La première filière dite technologie du silicium cristallin Cette technologie présente 90% du marché avec une durée de vie de plus de 30 ans. Elle regroupe les filières du silicium monocristallin et celle du silicium polycristallin. Les principales caractéristiques sont :

- **Substrat** : Silicium mono ou polycristallin;
- **Fabrication** : jonction PN où le substrat est du silicium mono ou polycristallin, texturation de surface, dépôt d'une couche antireflet ( $TiO_2$  ou  $SiN$ ) en face avant, dépôt d'une couche d'aluminium sur la face arrière et sérigraphie des contacts avant et arrière ;

- **Épaisseur** : 150 à 200  $\mu\text{m}$ ;
- **Rendement** : 16 à 25% (mono) et 14 à 18% (poly);
- **Aspect** : uniforme bleu foncé à noir pour le monocristallin; effet de mosaïque bleuté pour le polycristallin[2].

La deuxième filière, dite deuxième génération, regroupe les systèmes photovoltaïques à couche mince. Dans cette filière, on retrouve les cellules au silicium amorphe hydrogéné, au tellure de cadmium (CdTe), au séléniure de cuivre indium gallium (CIGS) et au sulfure de cuivre et d'étain-zinc (CZTS).

Les technologies PV de troisième génération comprennent les cellules solaires à colorant, les photovoltaïques organiques et les Pérovskites. Ces nouvelles technologies doivent combiner plusieurs propriétés, notamment des rendements élevés, une bonne stabilité et un faible coût de fabrication afin de pouvoir rivaliser avec la technologie silicium. Pour ces raisons, les recherches se sont focalisées durant ces dernières années sur les cellules solaires à base de matériaux Pérovskites hybrides, grâce à l'augmentation spectaculaire des rendements mesurés [11].

Comme l'illustre la figure 1.7, les cellules à base de Pérovskite ont montré une très grande évolution de leur rendement qui est passé de 2,2% à 25,2% entre 2006 et 2019, montrant une perspective intéressante pour leur commercialisation.

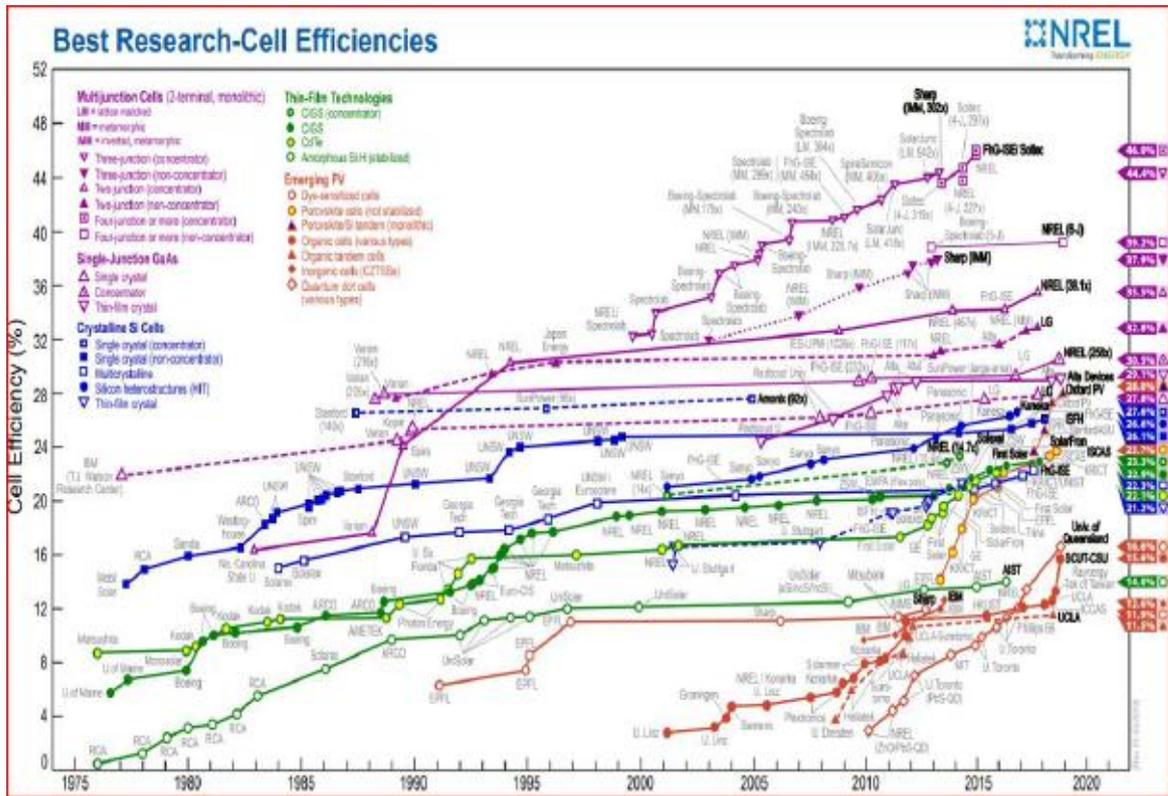


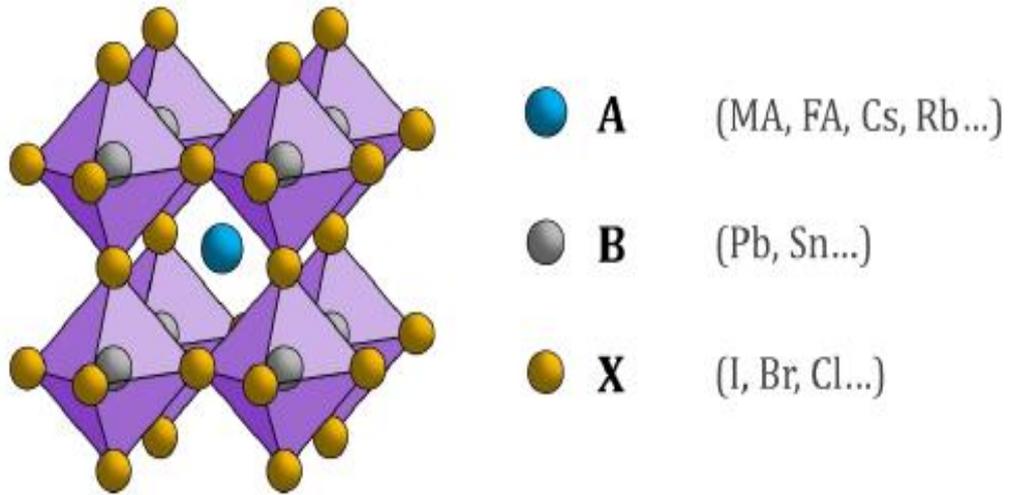
Figure 1.7 : Rendements de conversion pour diverses technologies photovoltaïques publiés par le Laboratoire (NREL).

### 1.8 Matériaux pérovskite

La pérovskite est un minéral composé d'oxyde de calcium et de titane de formule  $\text{CaTiO}_3$  et décrit pour la première fois en 1839. Elle tient son nom du minéralogiste russe L.A. Petrovski (1792-1856) [12].

Les pérovskites désignent aujourd'hui surtout un groupe de matériaux à structure cristalline de formule  $\text{ABX}_3$ . En 2012, les scientifiques se sont aperçus que certaines pérovskites présentaient des propriétés- bonne séparation et mobilité des charges électriques mais aussi bonne absorption de la lumière du soleil- qui pourraient permettre de doper les rendements des cellules photovoltaïques. Les chercheurs s'intéressent particulièrement aux pérovskites hybrides, comprenant à la fois composés organiques et des composés inorganiques comme par exemple le  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  [12].

Pérovskite : structure cristalline de type  $ABX_3$



**Figure 1. 8:** Schéma de la structure cristalline des matériaux pérovskites.

Avec les éléments A, B et X peuvent êtres :

A : cation ( $Cs^+$ ,  $Rb^+$ ,  $MA^+$ ,  $FA^+$ , ...),

B : cation ( $Pb^{2+}$ ,  $Sn^{2+}$ ,  $Ge^{2+}$ , ...),

X : anion (halogénures ( $I^-$ ,  $Br^-$ ,  $Cl^-$ , ...)) [6].

La formation appropriée des composants de site A, B et X doit respecter le facteur de tolérance de Goldschmidt (GTF ou simplement  $t$ ), pour définir la stabilité structurale de ces hybrides organiques-inorganiques matériaux pérovskite en utilisant la formule suivante :

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad (1.10)$$

Où,  $r_A$ ,  $r_B$  et  $r_X$  sont les rayons ioniques effectifs des sites A, B et X, respectivement [13].

## 1.9 Propriétés des matériaux pérovskites

### 1.9.1 Propriétés optiques et électroniques des pérovskites

Les halogénures de méthylammonium ont des propriétés électroniques et optiques intéressantes. Il s'agit de pigments semi-conducteurs à transition directe, ce qui permet une forte absorbance, qui sont généralement décrits comme étant de type p [16].

Pour montrer la capacité d'absorption de la lumière des cinq matériaux pérovskites  $\text{MAPbI}_3$ ,  $\text{MASnI}_3$ ,  $\text{MAGeI}_3$ ,  $\text{MAGeBr}_3$  et  $\text{MAGeCl}_3$  dans la zone visible, les coefficients d'absorption optique des cinq structures sont obtenus et représentés sur la Figure 1.9 [14].

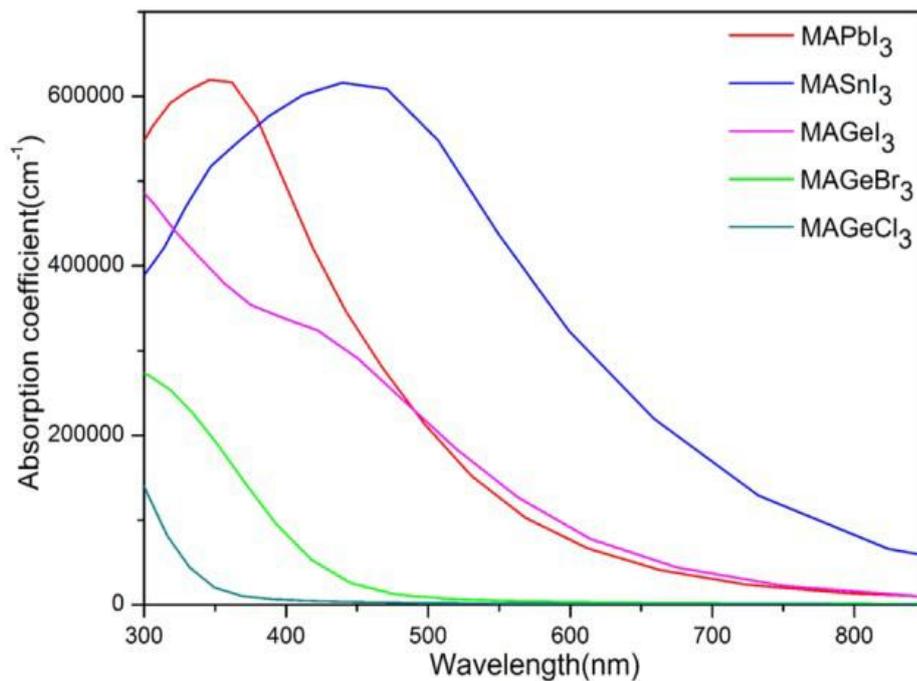


Figure 1.9 : Coefficients d'absorption de quelques pérovskites hybrides [14].

### 1.9.2 Propriétés optoélectroniques

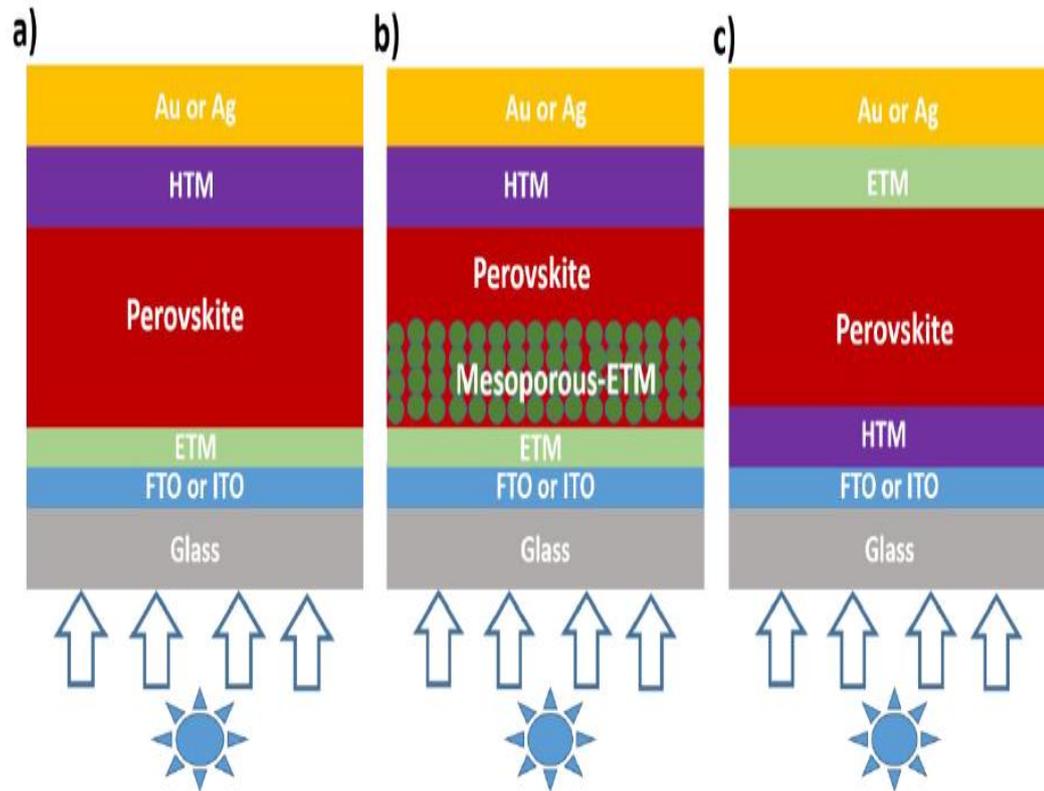
L'intérêt porté aux oxydes de structure pérovskite  $\text{ABX}_3$  depuis plus de quatre décennies, résulte dans la facilité de changer la nature des cations A et B présents dans la structure. De ce fait cette modification des éléments entraîne un changement des propriétés du matériau laissant ainsi

la porte ouverte à toutes sortes de propriétés physiques en fonction de la nature chimique et électronique des deux atomes A et B [15].

### 1.10 Architecture et fabrication des cellules à pérovskite

En général, les architectures de cellules solaires en pérovskite sont conçues de manière à ce que la couche active soit située entre deux couches sélectives de charge et prise en sandwich entre deux électrodes. Le haut est une électrode métallique et le bas est une électrode d'oxyde conducteur transparent (TCO), permettant aux photons d'atteindre et d'être absorbés par la couche de pérovskite. Les deux couches sélectives de charge sont un matériau de transport d'électrons (ETM) ou (ETL) et un matériau de transport de trous (HTM) ou (HTL). Selon la disposition des ETM et HTM, les cellules solaires à pérovskite peuvent être classées en trois architectures : planaire (Figure 1.10a), mésoporeux (Figure 1.10b) et inversé (Figure 1.10c).

La structure plane est constituée de TCO/ETM/pérovskite/HTM/Au ou Ag, avec principalement une couche compacte de  $\text{TiO}_2$  comme ETM et Spiro-OMeTAD comme HTM. La couche compacte de  $\text{TiO}_2$  est déposée sur le TCO, tel que des substrats en verre d'oxyde d'indium et d'étain (ITO) et d'oxyde d'étain dopé au fluor (FTO), comme le montre la figure 1.10a. La structure du dispositif mésoporeux est similaire à la configuration planaire. La seule différence est l'ETM mésoporeux supplémentaire (principalement  $\text{TiO}_2$  ou  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) au-dessus de la couche compacte de  $\text{TiO}_2$ . Enfin, dans l'architecture inversée, l'ETM et le HTM sont permutés par rapport à la structure planaire. Dans ce cas, une petite molécule telle que l'ester méthylique d'acide -phényl- $\text{C}_{61}$ -butyrique (PCBM) est utilisée comme ETM, et un polymère conducteur transparent tel que le polystyrène sulfonate (PEDOT-PSS) est utilisé comme HTM [16].



**Figure 1. 10:** Architecture des cellules solaires pérovskite.

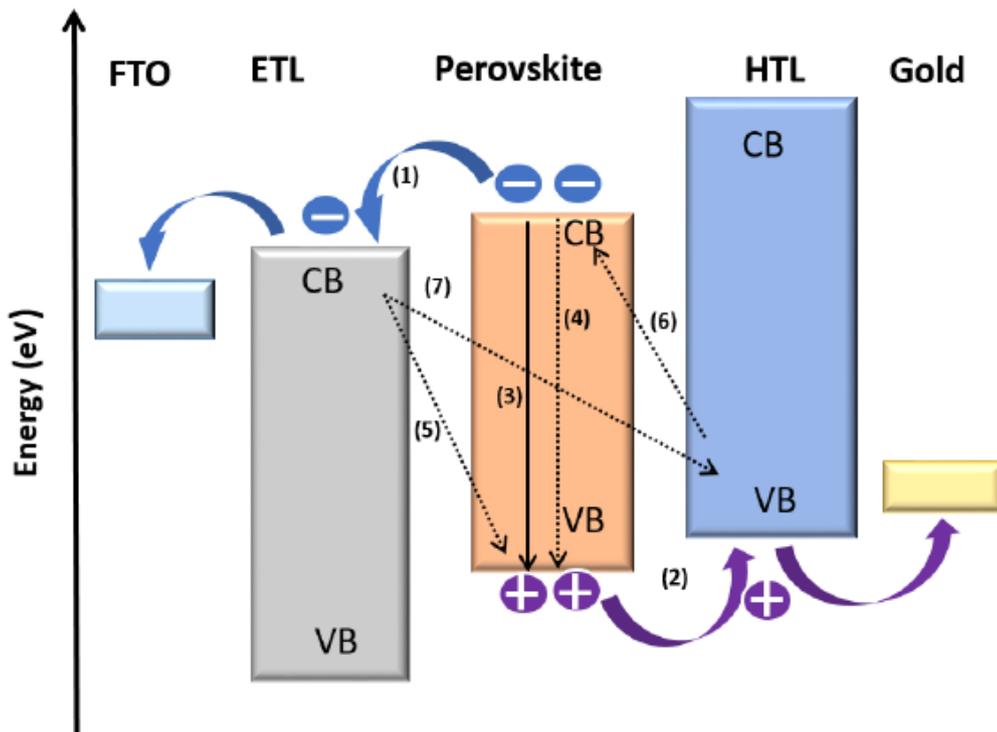
a) planaire, b) mésoporeuse et c) inversée.

HTL : matériau de transport de trous, ETL : matériau de transport d'électrons, FTO : oxyde d'étain dopé au fluor, ITO

### 1.11 Processus de transfert de charge dans les cellules solaires à pérovskite

Le mécanisme de fonctionnement général d'une cellule à pérovskite est illustré à la figure 1.11. La lumière est absorbée par le film mince de pérovskite pour produire des excitons (paires électron-trou). En raison de la constante diélectrique élevée du matériau pérovskite, les excitons se dissocient facilement en électrons libres et en trous et sont efficacement transportés et collectés sous forme de photo-courant. Les électrons sont ensuite sélectivement injectés dans la bande de conduction de la couche de transport d'électrons (ETL) (1) et collectés au niveau de l'électrode FTO. Le matériau de transport d'électrons est choisi de telle sorte que les trous soient bloqués en raison d'un alignement de bande

défavorable pour les trous. De même, les trous de la pérovskite sont injectés dans la couche transporteuse de trous (HTL) (2) tandis que les électrons sont bloqués. Ensuite, au niveau des deux contre-électrodes (FTO et or), les porteurs de charge sont efficacement collectés et extraits sous forme de photo-courant dans le circuit externe [16].



**Figure 1. 11:** Diagramme schématique des niveaux de bande d'énergie et des processus de transport de charge des électrons et des trous dans les cellules solaires à pérovskite.

D'autres processus indésirables affectent les performances de ces cellules comprenant l'annulation des excitons par photoluminescence (3), ou recombinaison non radiative (4), transfert inverse d'électrons et de trous, et recombinaison des charges aux interfaces d'ETL, HTL, et pérovskite (5,6), et entre l'ETL et HTL (7). La recombinaison de surface et aux interfaces (5-7) pourrait principalement se produire dans le film mince de pérovskite. Par conséquent, ces processus indésirables peuvent être supprimés en choisissant sélectivement les matériaux du contact et des électrodes [16].

## 1.12 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les notions fondamentales sur la photovoltaïque. Premièrement, nous avons parlé de rayonnement soleil et de ces types. Puis nous avons introduit une définition et l'effet des cellules photovoltaïques, principe de fonctionnement et les différents paramètres de cette dernière. On a aussi défini la cellule solaire pérovskite et les propriétés optiques, électroniques et optoélectroniques de cette cellule. Finalement, nous avons expliqué les processus de transfert de charge dans les cellules solaires à pérovskite.

## Chapitre 2

# Simulation de la cellule solaire pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ par SCAPS- 1D

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons faire une simulation numérique de la cellule solaire à pérovskite hybride à base d'étain ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) à l'aide du programme de simulation SCAPS-1D version 3.3.09, qui permet de trouver les paramètres les plus importants pour un meilleur fonctionnement de la cellule pérovskite.

La simulation permet d'optimiser certains paramètres physiques et géométriques comme, l'épaisseur, la concentration d'accepteurs, la densité de défauts, les défauts à l'interface, le travail de sortie de l'anode ... L'objectif de cette étude est de simuler et optimiser une cellule solaire à pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  pour obtenir un meilleur rendement de cette dernière.

## 2.2 Logiciel SCAPS

SCAPS-1D "Solar Cell Capacitance Simulator one Dimension" est un programme de simulation de cellule solaire unidimensionnel développé au département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS) de l'université de Gand, Belgique [17].

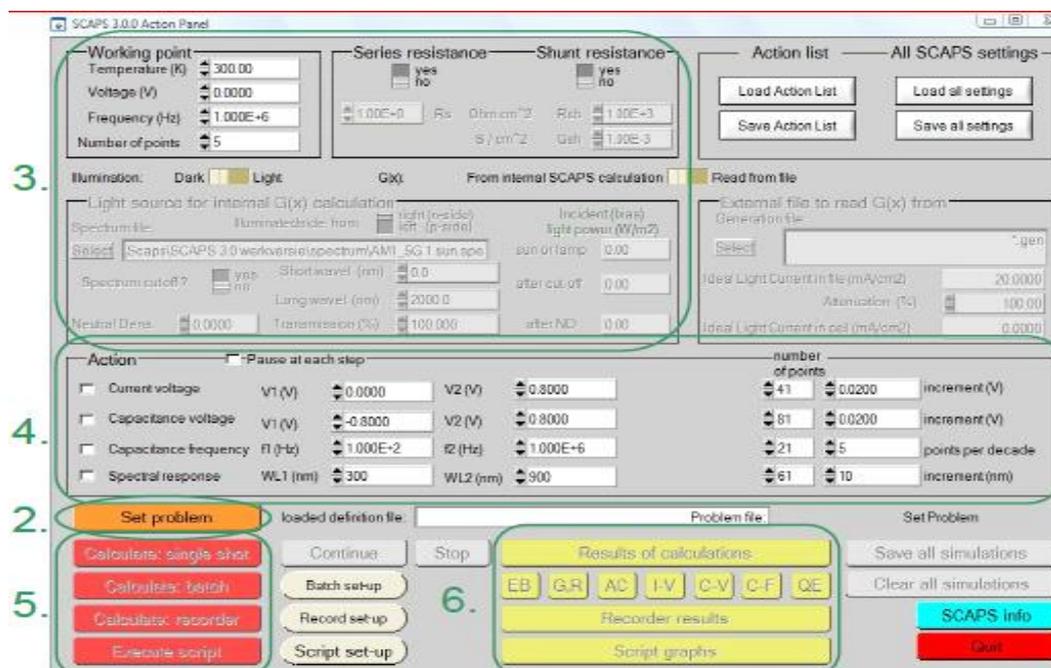


Figure 2. 1 : Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS.

La description des blocs numérotés de 1 à 6 est :

1. Lancer SCAPS.
2. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée.
3. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de fonctionnement).
4. Indiquer la mesure à simuler.
5. Commencer le(s) calcul(s).
6. Afficher les courbes de simulation [18].

### 2.2.1 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)

Pour définir le problème dont la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire, on doit cliquer sur le bouton « Définir le problème » sur le panneau d'action, une nouvelle fenêtre s'ouvre qui est le panneau de définition de la cellule solaire (Figure 2.2). Cette interface joue un rôle important dans la simulation de la cellule, dans ce panneau, nous pouvons créer différentes couches et définir leurs paramètres physiques et leurs propriétés, nous pouvons également avoir une visualisation de la structure de l'appareil.

Il y a trois parties de l'interface de définition de périphérique et des détails dans ce panneau :

- **Section (1)** dans cette partie, nous pouvons définir des structures comprenant jusqu'à 9 couches. La première couche est le contact arrière, le dernier est le contact frontal. L'utilisateur peut spécifier les propriétés de toutes les couches.
- **La section (2)** est un affichage de la structure définie du dispositif photovoltaïque avec contact avant et arrière. Il existe également des boutons supplémentaires pour la sélection de l'éclairage du dispositif soit du côté contact arrière soit du côté contact

avant, le sens de la tension appliquée à un appareil et enfin un bouton dédié à inverser l'ordre des couches de structure.

• **La section (3)** a des boutons pour enregistrer le fichier de définition dans la bibliothèque SCAPS ou une bibliothèque externe, en chargeant les fichiers de définition de structure précédemment enregistrés. Les boutons Annuler et OK permettent de quitter ou d'entrer dans l'interface de définition de l'appareil et de revenir à l'interface de démarrage [15].

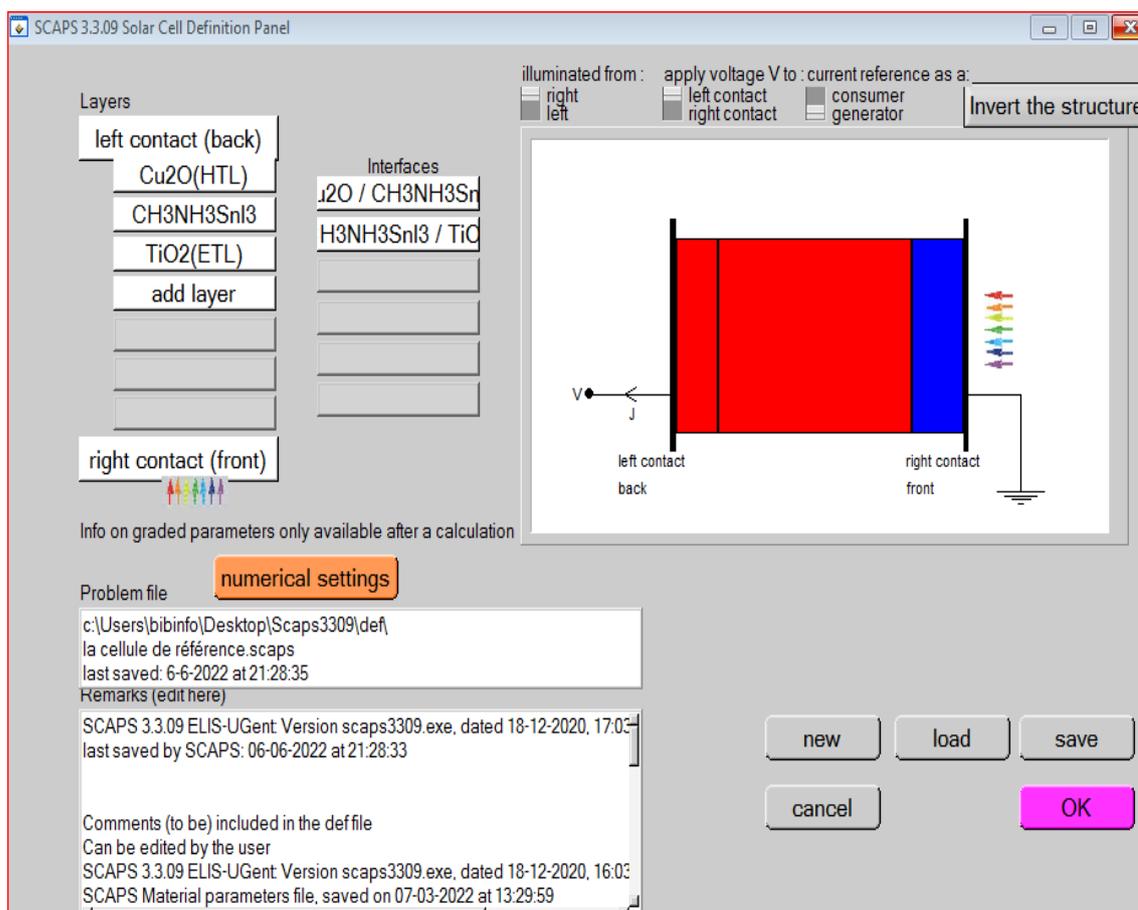


Figure 2. 2: Interface de définition des appareils.

## 2.2.2 Présentation de logiciel SCAPS

La simulation des cellules en couches minces est devenue de plus utilisée ces dernières années, ainsi, plusieurs logiciels de calcul et de simulation ont été développés par la communauté des chercheurs dans ce domaine. On peut citer les logiciels AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO ...[19].

Toutes les simulations ont été effectuées avec SCAPS, en introduisant les valeurs réelles des paramètres disponibles à partir de données industrielles pour le processus des cellules commerciales. Le programme est conçu pour simuler les propriétés électriques ainsi que la réponse spectrale des couches minces cellules solaires [20].

L'utilisation de SCAPS est très pratique, il permet de simuler n'importe quelle structure photovoltaïque, selon les matériaux disponibles en fichiers data, en jouant sur les paramètres variables (largeur, surface, dopage, etc...), la fenêtre de logiciel pour écrire ces paramètres est représenté sur la figure 2.3 [19] :

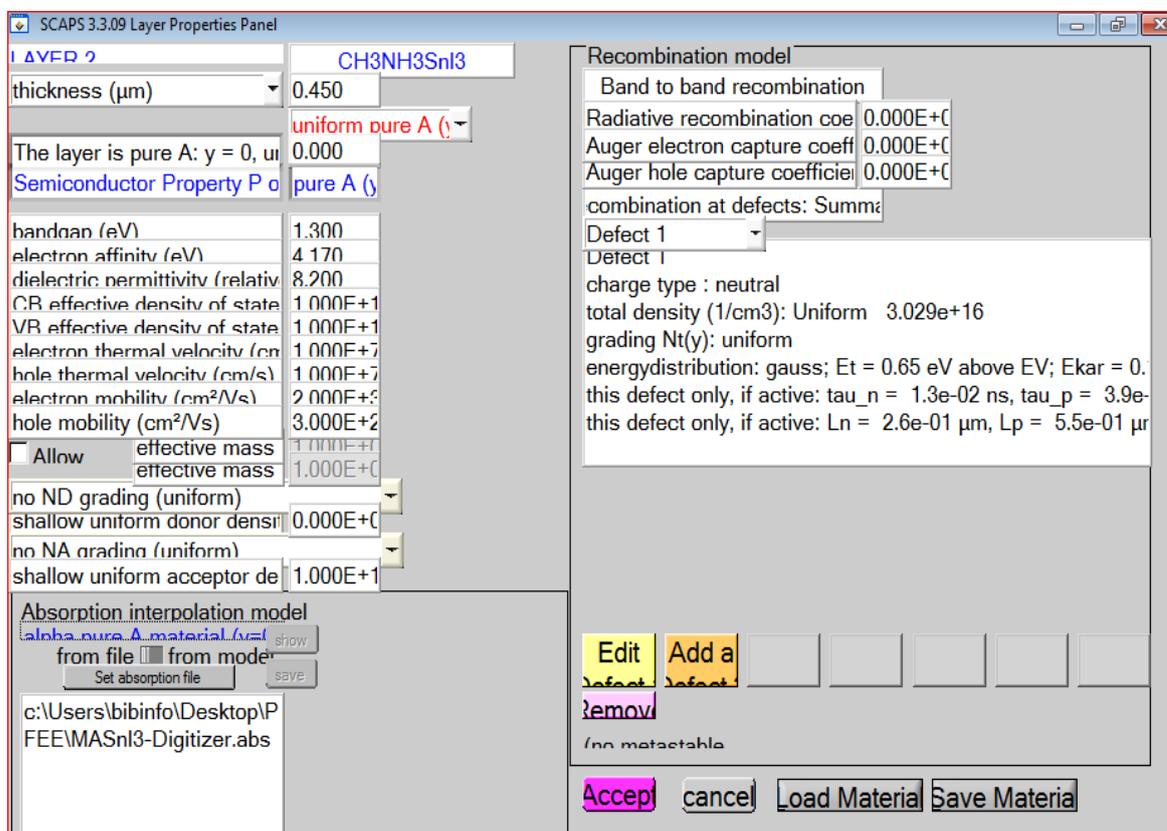


Figure 2. 3 : Paramètres de la pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  introduits dans SCAPS.

### 2.2.3 Avantages et inconvénients du SCAPS

Les avantages du SCAPS sont multiples à savoir : la grande vitesse d'exécution, les fichiers d'entrée sont accessibles à l'utilisateur en format texte tel que les données spectrales et les paramètres décrivant le dispositif, la possibilité d'introduire des interfaces et prise en

compte du phénomène de recombinaison en celle-ci, l'introduction de résistances en série, et l'obtention des caractéristiques capacité-tension et capacité-fréquence. Cependant, ses inconvénients concernent l'absence de la réflexion aux interfaces de différentes couches constituant la cellule qui n'est pas gérée par SCAPS et son programme de traçage inflexible. D'autant plus, qu'il peut être instable lorsque le dispositif est loin d'être idéal et comprend des barrières secondaires [10].

### 2.3 Structure de la cellule solaire de référence à simuler

La structure étudiée est une structure planaire dont la configuration est  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$  donnée sur la figure 2.4.

Elle est donc composée par une couche dioxyde de titane ( $\text{TiO}_2$ ) de type n, utilisée comme matériau de transport d'électrons (ETL) et en même temps comme contact avant (anode), de la pérovskite hybride halogénée ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) de type p qui a été utilisée comme matériau absorbant et d'oxyde cuivreux ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ) de type p, comme un matériau de transport de trous (HTL) vers l'électrode métallique qui est le cuivre.

La simulation a été effectuée dans les conditions standards c'est-à-dire sous l'éclairage de  $1000 \text{ w/m}^2$  à  $300 \text{ K}$  et une masse d'air AM 1.5G.

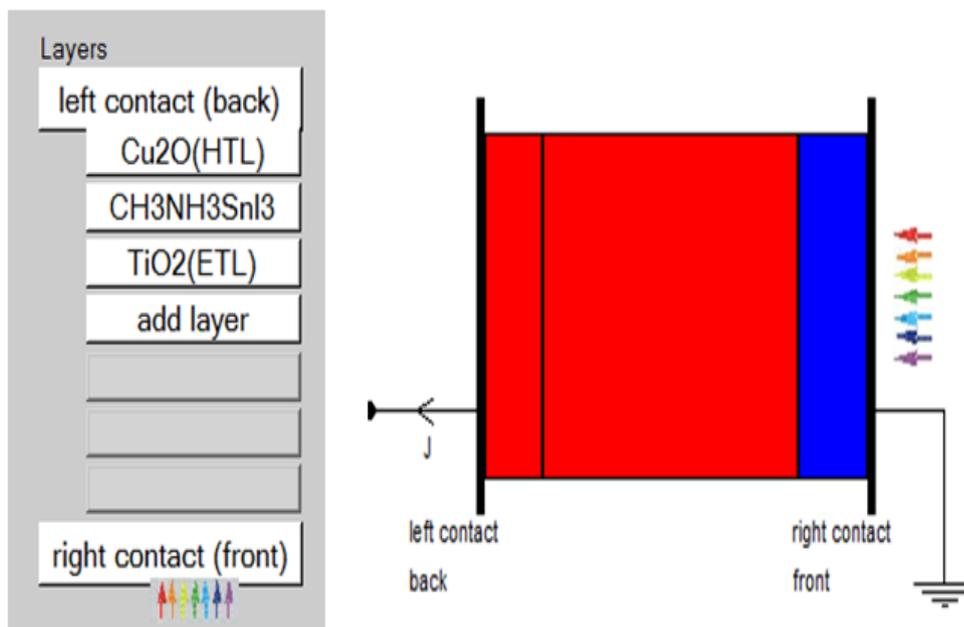


Figure 2. 4 : Structure de la cellule solaire n-p étudiée générée par SCAPS-1D.

Les niveaux d'énergies de la cellule solaire étudiée sont montrés dans la figure 2.5.

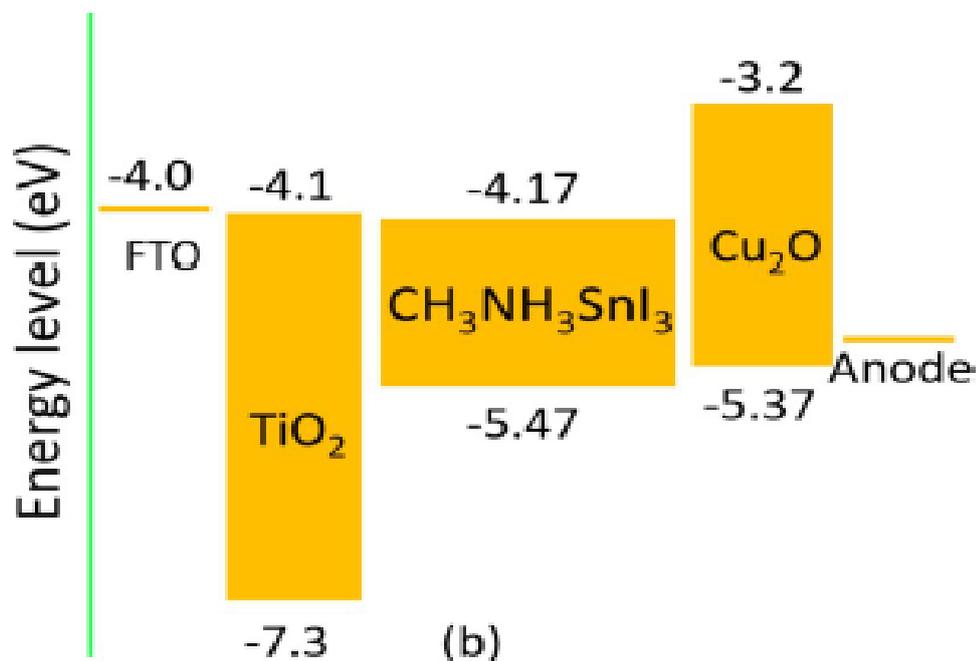


Figure 2. 5 : Diagramme des niveaux d'énergie [21].

## 2.4 Paramètres et propriétés de la cellule de référence

Le tableau 2.1 résume les propriétés des différentes couches de la cellule ( $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$ ) ces propriétés sont sélectionnée à partir de la littérature [21].

Les paramètres des interfaces sont exposés dans le tableau 2.2 [21].

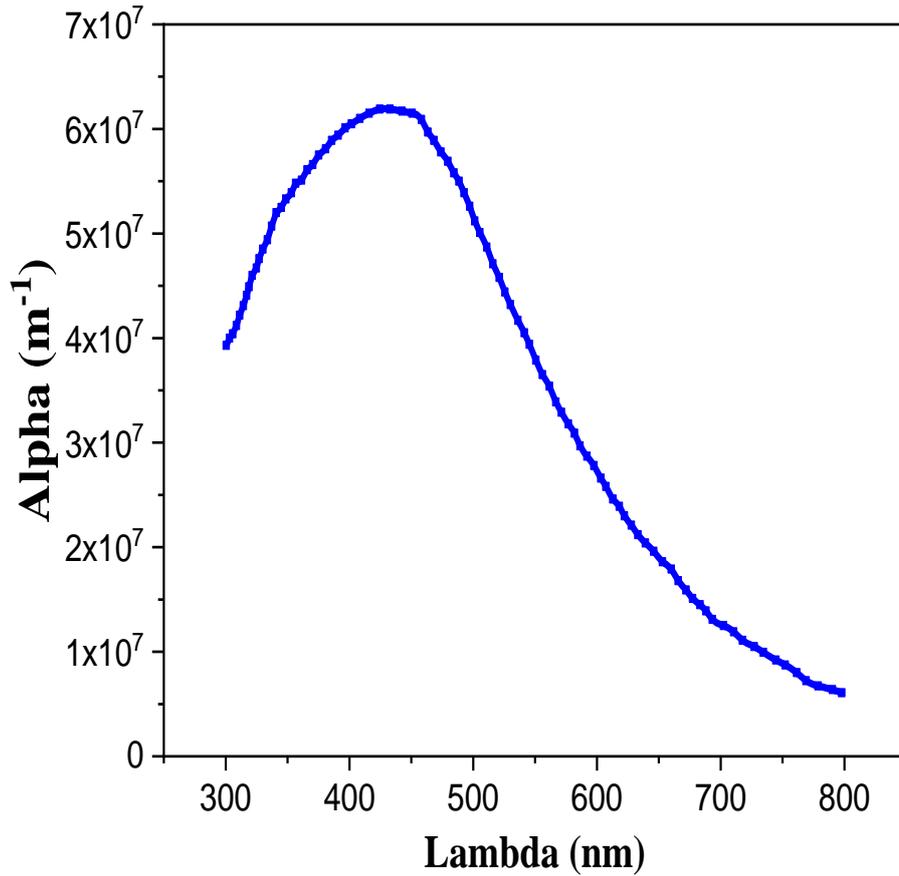
**Tableau 2. 1:** Propriétés électriques et optiques des différentes couches de la cellule.

Paramètres	$\text{TiO}_2$ (ETL)	$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	$\text{Cu}_2\text{O}$ (HTL)
Épaisseur (nm)	120	450	100
$E_g$ (eV)	3.2	1.3	2.17
$\chi$ (eV)	4.1	4.17	3.2
$\epsilon_r$	9.0	8.2	7.1
$N_c$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$2.2 * 10^{18}$	$1 * 10^{18}$	$2 * 10^{17}$
$N_v$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1.8 * 10^{19}$	$1 * 10^{18}$	$1.1 * 10^{19}$
$\mu_n$ ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	0.05	2000	200
$\mu_p$ ( $\text{cm}^2/\text{Vs}$ )	0.05	300	80
$N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 * 10^{18}$	0	0
$N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	0	$1 * 10^{14}$	$1 * 10^{18}$

Tableau 2. 2 : Paramètres pour les défauts dans les matériaux et les interfaces.

Paramètres	$\text{TiO}_2$	$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	$\text{Cu}_2\text{O}$	interface $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	Interface $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}$
Type	Neutre	Neutre	Neutre	Neutre	Neutre
$\sigma_n$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	$1 * 10^{-15}$	$2.5 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$
$\sigma_p$ ( $\text{cm}^{-2}$ )	$1 * 10^{-15}$	$8.5 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$	$1 * 10^{-15}$
Distribution d'énergie	Uniform	Gaussian	Uniform	Uniform	Uniform
Niveau d'énergie par rapport à $E_v$ (eV)	0.600	0.650	0.100	0.600	0.600
Caractéristique d'énergie (eV)	–	0.100	–	–	–
$N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$1 * 10^{14}$	$3.029 * 10^{16}$	$1 * 10^{14}$	$1 * 10^{10}$	$1 * 10^{10}$

Le coefficient d'absorption de la pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  présenté sur la figure ci-dessous est tiré de l'expérimentation à partir de la référence [14] et a été introduit sous forme de fichier dans le logiciel.



**Figure 2. 6 :** Coefficient d'absorption de la pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

Pour les coefficients d'absorptions  $\alpha(\lambda)$  des couches HTL et ETL  $\text{Cu}_2\text{O}$  et  $\text{TiO}_2$  respectivement on a utilisé le modèle de SCAPS, elles données par les relations ci-dessous :

$$\alpha(\lambda) = \left( A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_{gap}} \quad (2.1)$$

Où, A et B sont les constants d'absorption, h est la constant de Planck et  $\nu$  est la vitesse de la lumière [18].

## 2.5 Résultats et discussion

### 2.5.1 Caractéristique (J-V) et efficacité quantique QE

En introduisant, dans le simulateur SCAPS, les paramètres du tableau 2.1, on obtient la caractéristique densité de courant en fonction de la tension J-V de la figure 2.7, nous avons ainsi obtenu les paramètres photovoltaïques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et  $\eta$ ) de la cellule à étudier qui sont affichés sur la même courbe J-V.

La figure 2.8 correspond au rendement quantique extérieur de cette cellule en fonction de la longueur d'onde  $\lambda$ .

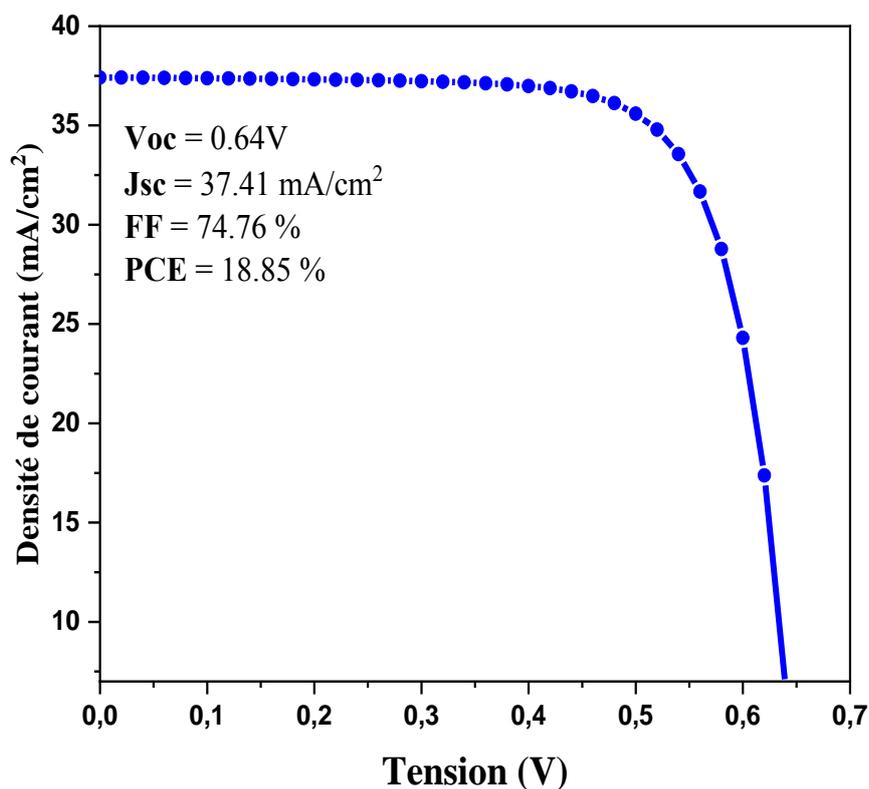
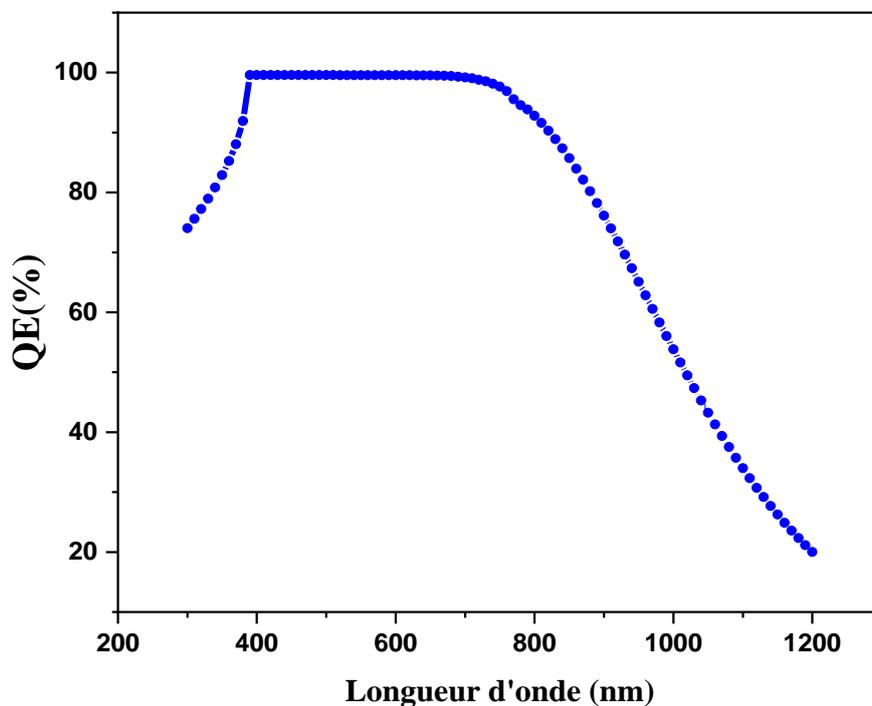


Figure 2. 7 : La caractéristique courant- tension (J-V).



**Figure 2. 8** : Rendement quantique QE en fonction de la longueur d'onde.

En raison de la bande interdite plus étroite, qui est de 1,3eV du  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  par rapport à 1,55 eV de la pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , le bord d'absorption optique de la pérovskite d'étain est décalé vers 1200 nm, dans la courbe d'efficacité quantique externe (QE) (Figure 2.8). Le QE couvre tout le spectre visible et atteint un maximum d'absorption de 400 nm à 800 nm, avec par un début d'absorption notable jusqu'à 1200 nm. Le décalage vers le rouge de la courbe QE est plus bénéfique pour l'absorption de la lumière aux longueurs d'onde infrarouges.

### 2.5.2 Les bandes énergétiques

La figure 2.9 affiche le diagramme de bande d'énergie de PSC. Le décalage de bande de conduction positive (CBO) d'environ 0,36 eV est observé à l'interface absorbeur/ETL. À cause de ce CBO positif, un pic se forme à l'interface absorbeur/ETL. Cette pointe agit comme une barrière pour le flux d'électrons photo-généré vers l'électrode [21].

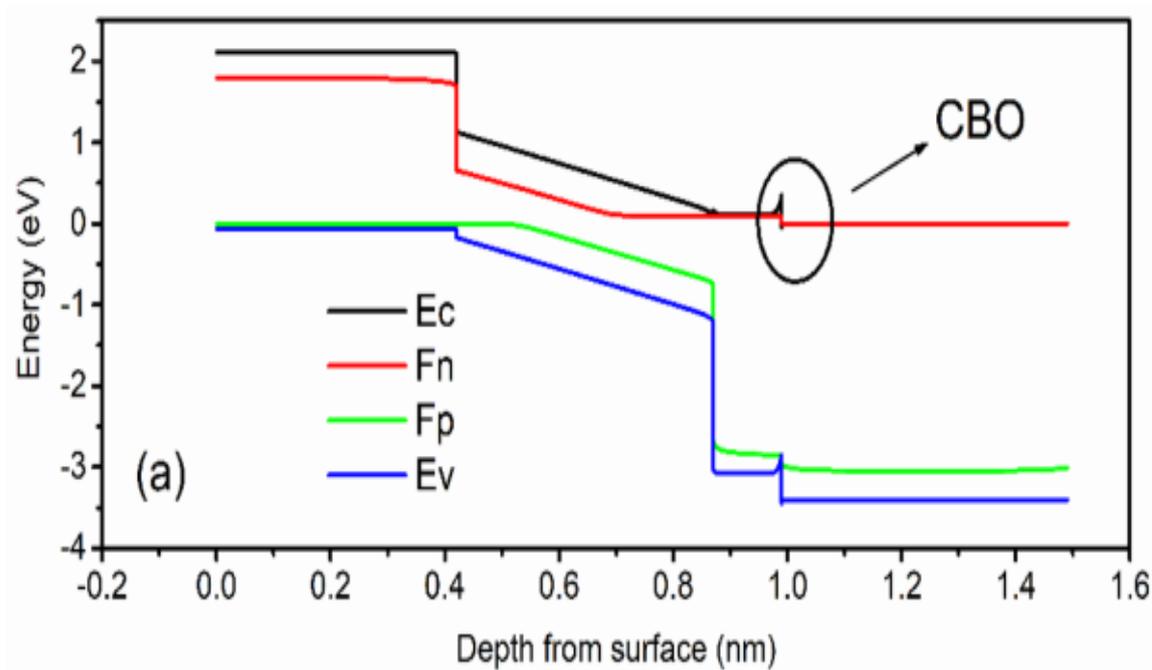


Figure 2. 9: Diagramme des bandes énergétiques de la structure étudiée généré par SCAPS.

### 2.5.3 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante

La couche absorbante joue un rôle très important dans les performances de la cellule, donc pour obtenir ce rôle nous allons varier l'épaisseur de la couche absorbante de 100 nm à 1000 nm. Les résultats de simulation sont illustrés sur la figure 2.10.

On constate que la variation de l'épaisseur de la pérovskite agit sur tous les paramètres de la cellule.

La densité de courant  $J_{sc}$  augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbant (pérovskite,) ceci est due au large coefficient d'absorption de ce dernier. Le PCE croit avec l'augmentation de l'épaisseur, jusqu'à atteindre un maximum de 19,03% à une épaisseur de 500 nm, au-delà de cette dernière, il commence à diminuer à cause de la longueur de diffusion des porteurs de charge, qui devient inférieure à l'épaisseur de la pérovskite, certains porteurs n'arrivent pas à atteindre les électrodes. Une légère diminution du  $V_{co}$  avec l'épaisseur est due aussi à l'augmentation de recombinaison [22]. La diminution du facteur de forme avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbant, peut être attribuée à l'augmentation de la résistance série de ce dernier.

Cette étude de simulation confirme donc que le film doit avoir une épaisseur optimale de 500 nm. Ce qui prouve que la pérovskite est un matériau même avec des épaisseurs de quelques centaines de nanomètres est capable d'avoir une meilleure absorption de la lumière et une meilleure efficacité.

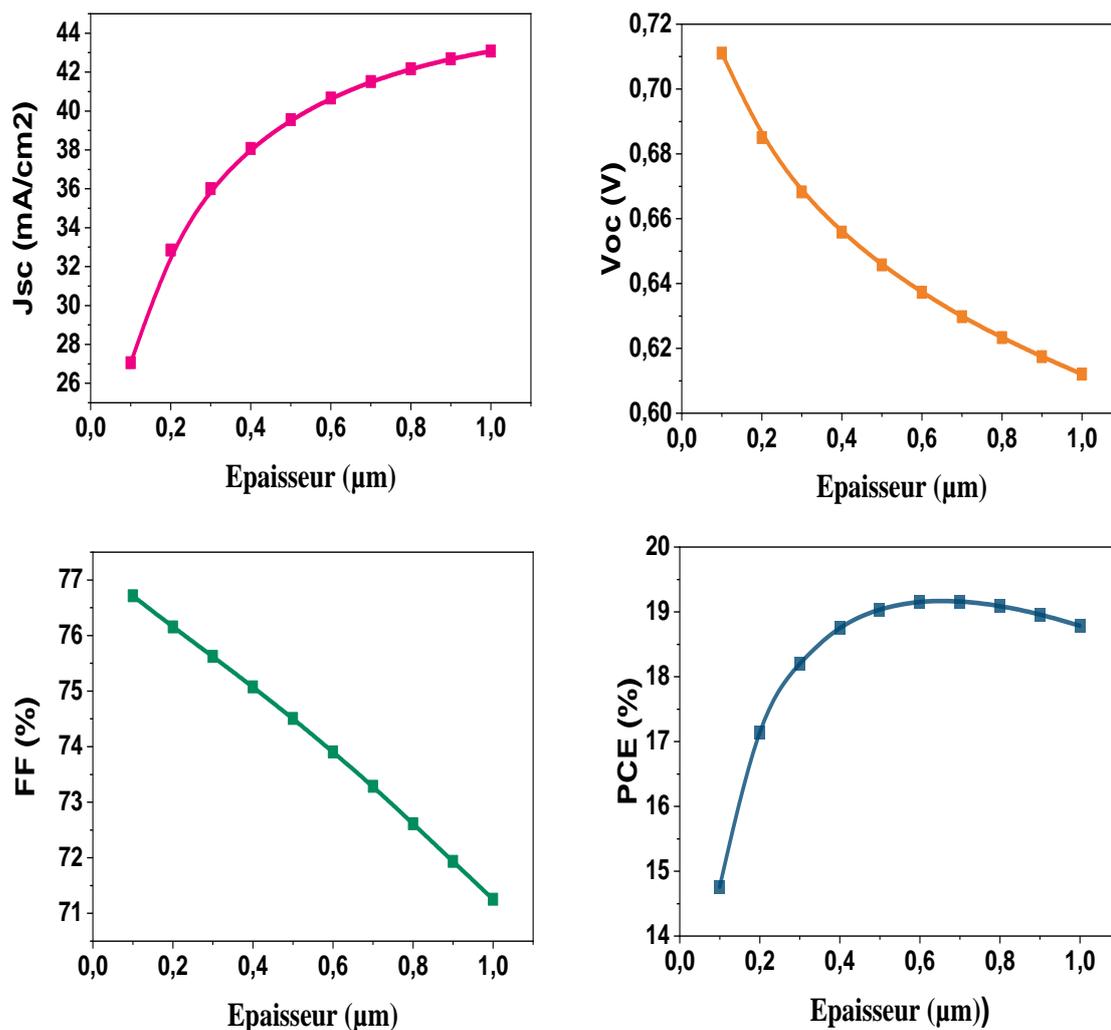


Figure 2. 10 : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

2.5.4 Effet de l'épaisseur de la couche ETL ( $\text{TiO}_2$ )

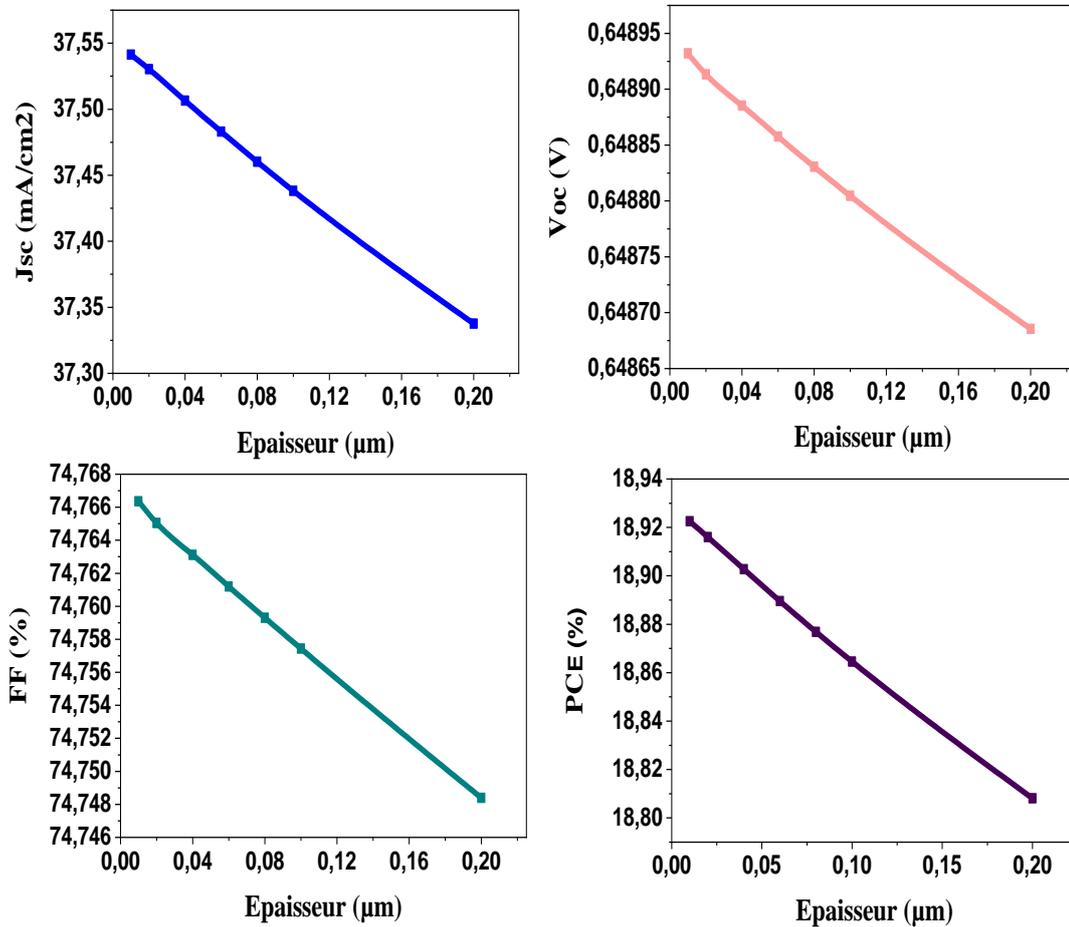


Figure 2. 11: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de  $\text{TiO}_2$ .

Ici, on remarque que l'épaisseur de la couche  $\text{TiO}_2$  n'a pas d'effet sur tous les performance de la cellule, donc on a choisi une épaisseur de 100 nm, par comparaison avec des valeurs déjà publiés dans la littérature.

### 2.5.5 Effet de l'épaisseur de la couche HTL ( $\text{Cu}_2\text{O}$ )

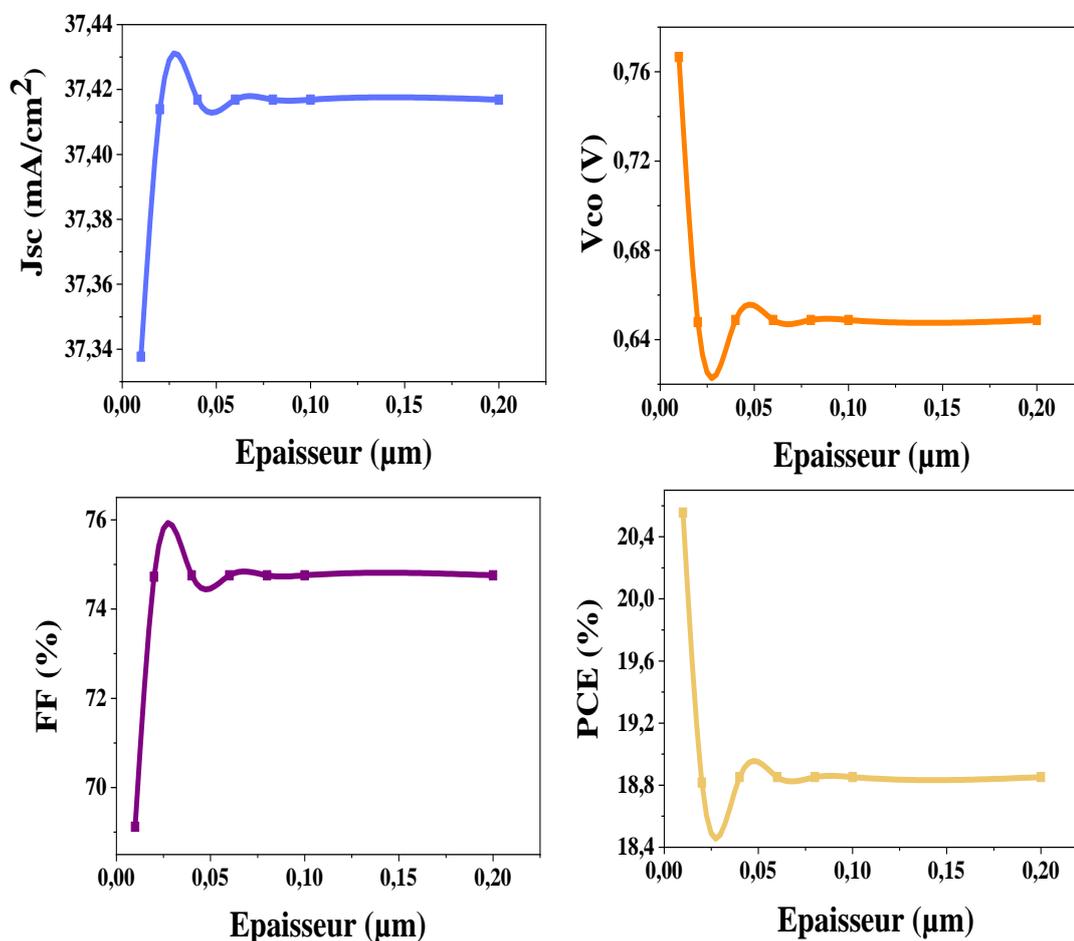


Figure 2. 12 : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de  $\text{Cu}_2\text{O}$ .

D'après la figure 2.12, l'épaisseur de la couche HTL de  $\text{Cu}_2\text{O}$  n'a presque pas d'effet sur le courant photo généré, mais agit sur les autres paramètres, seulement pour de très faible valeurs (inférieurs à 50nm), ainsi sa valeur a été fixé à 100nm, conformément à d'autres références.

### 2.5.6 Effet de la densité d'accepteur Na ( $\text{cm}^{-3}$ ) de la couche absorbante

D'après la figure 2.13 on constate que les performances de la cellule ne sont affectées par la densité d'accepteurs de trous qu' à partir d'une valeur de  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ , on remarque un léger changement des paramètres PV, avec l'augmentation de la concentration de dopage

accepteur jusqu' à  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . Voc augmente car l'énergie de Fermi des trous diminue. Initialement, le courant  $J_{sc}$  diminue légèrement, puis il diminue drastiquement. C'est possible en raison de l'augmentation du taux de recombinaison des porteurs de charge à l'intérieur de la couche absorbante de pérovskite [23]. Cependant, le PCE chute rapidement lorsque Na dépasse  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

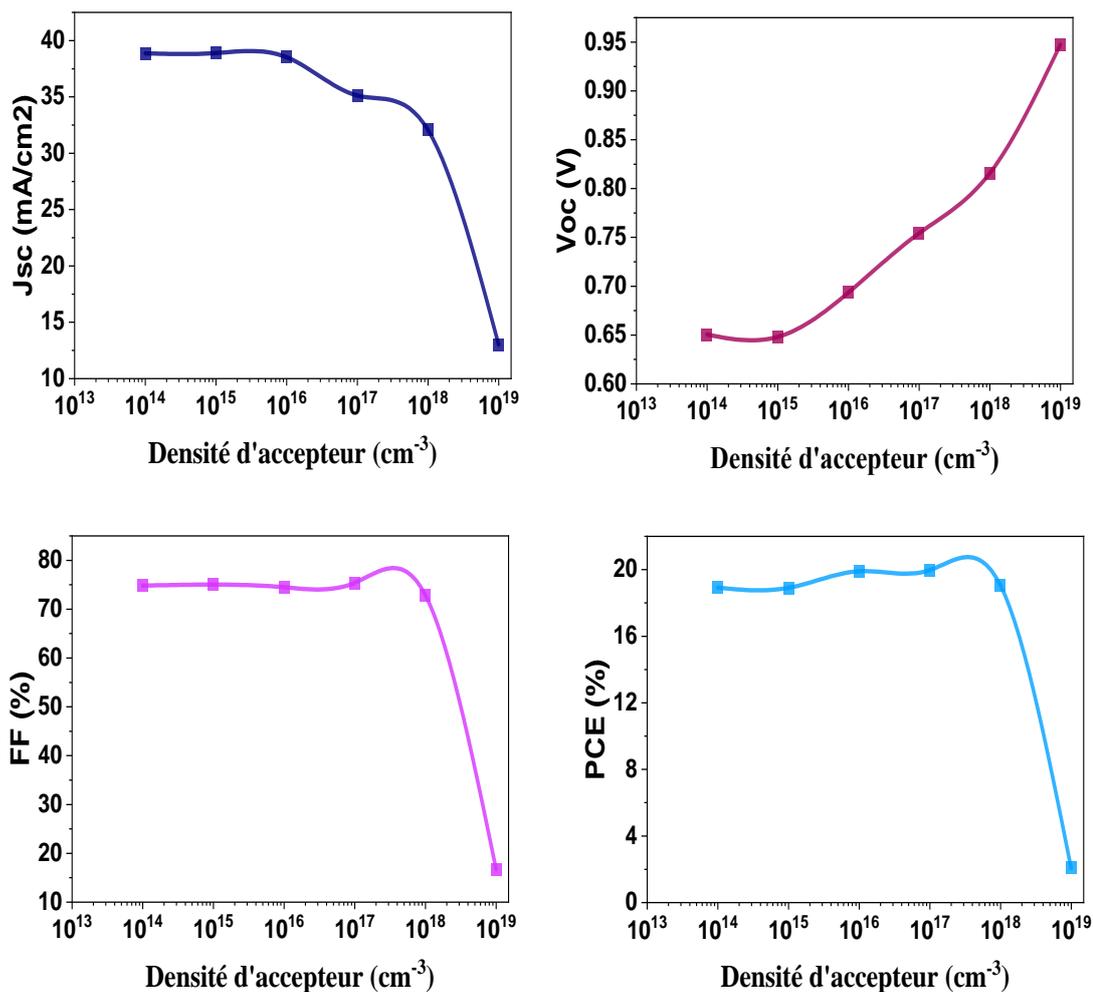


Figure 2. 13 : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité d'accepteur Na ( $\text{cm}^{-3}$ ).

### 2.5.7 Effet de la densité de défauts $N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ ) de la couche absorbante

Les défauts sont inévitables dans la couche absorbante, ils existent dans le volume et en surface, des défauts ponctuels tels que les lacunes, les défauts interstitiels, Schottky et Frenkel, en plus des dislocations et des joints de grains qui peuvent être aussi présents. Ces

défauts introduisent des niveaux profonds ou peu profonds dans la bande interdite d'énergie. En raison de ces défauts, les porteurs de charge peuvent piéger et faciliter la recombinaison électron-trou non radiative [24].

Comme le montre la figure 2.14, on observe que les performances du dispositif se sont améliorées avec la réduction de la densité de défauts. La densité initiale (dans la cellule de référence) de défauts de la couche absorbante a été fixée à  $3,029 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  (tableau 2.2), parce que pour cette valeur de densité de défauts est presque similaire aux valeurs observées expérimentalement [20]. Lorsque la densité de défauts est de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , les performances de la cellule sont significativement améliorées et prennent les valeurs maximales.

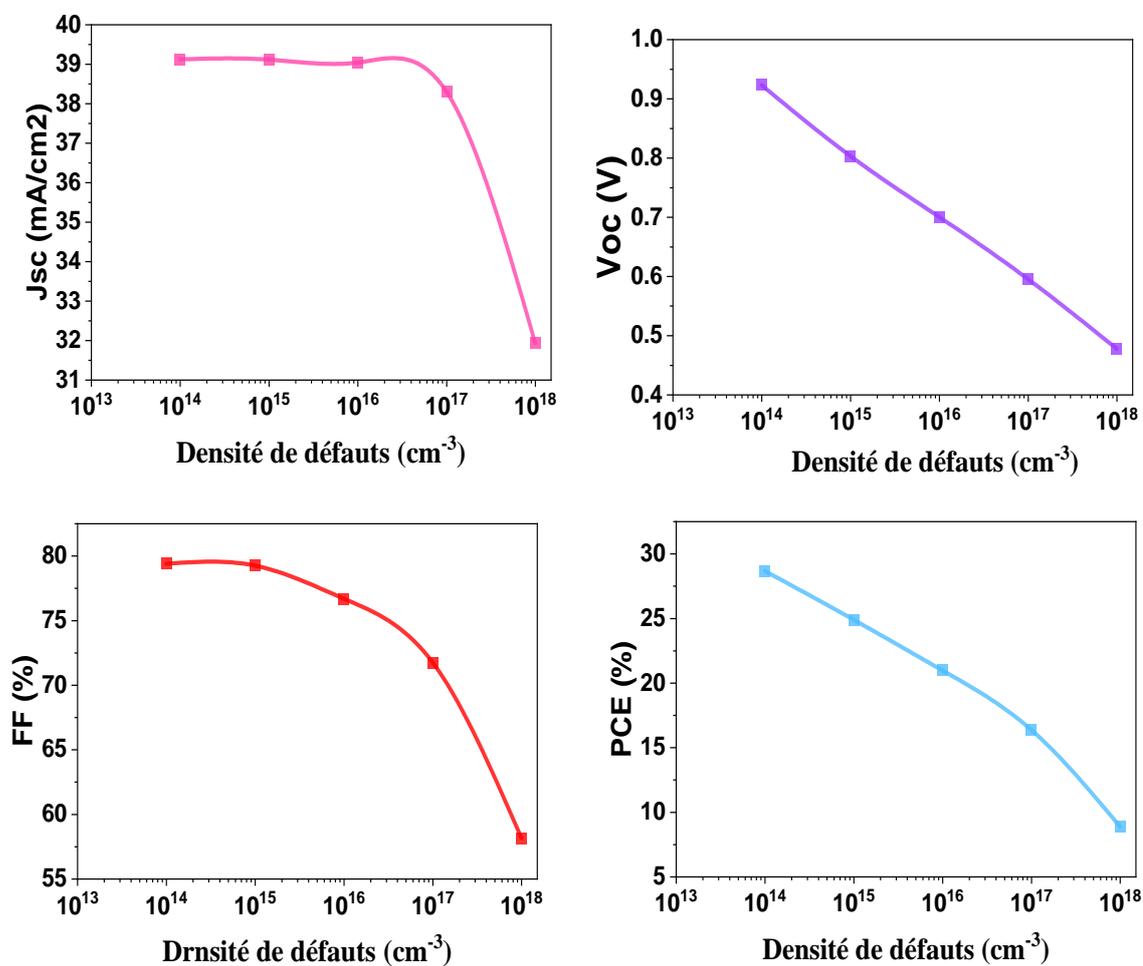


Figure 2. 14 : Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité de défauts  $N_t$  ( $\text{cm}^{-3}$ ).

### 2.5.8 Effet du travail de sortie du métal de l'anode

Le travail de sortie du métal de contact est un paramètre très important pour obtenir les meilleures performances de la cellule dans la figure 2.15, une étude de l'influence du travail de sortie a été réalisée, en faisant varier différents matériaux de l'anode. La simulation a été faite en utilisant Ag, Cu, Au et Pt comme contact pour l'anode. Le travail de sortie de Ag, Cu, Au et Pt est de 4,74 eV, 5,0 eV, 5,1 eV et 5,7 eV, respectivement. La meilleure courbe J-V, avec les meilleures performances, a été obtenue lorsque nous avons utilisé le platine (Pt) comme anode de contact.

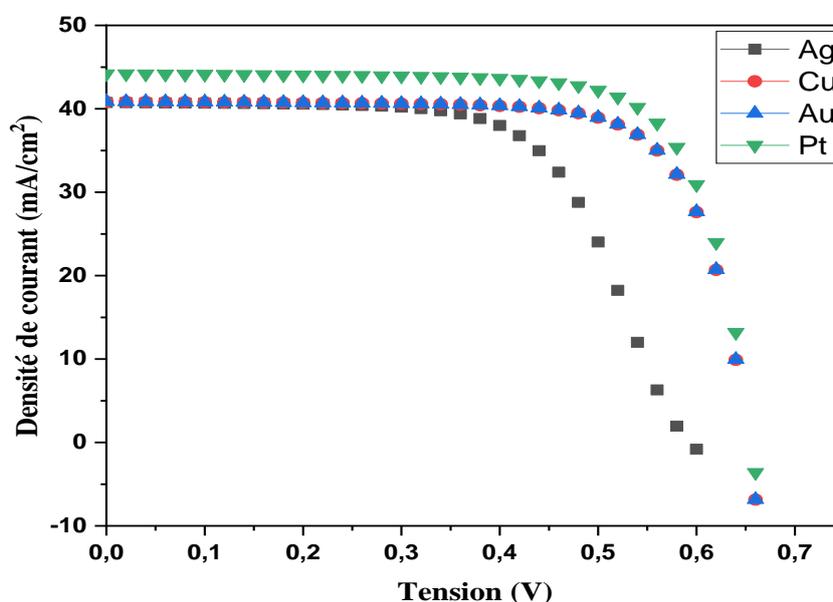


Figure 2. 15 : Caractéristique (J-V) pour différents métaux de contact de l'anode.

Dans la figure 2.16 on remarque que le facteur de forme FF et le rendement en puissance PCE de la cellule prennent une valeur plus élevée, lorsque nous avons utilisé une valeur maximale du travail de sortie pour l'anode qui correspond dans ce cas au platine.

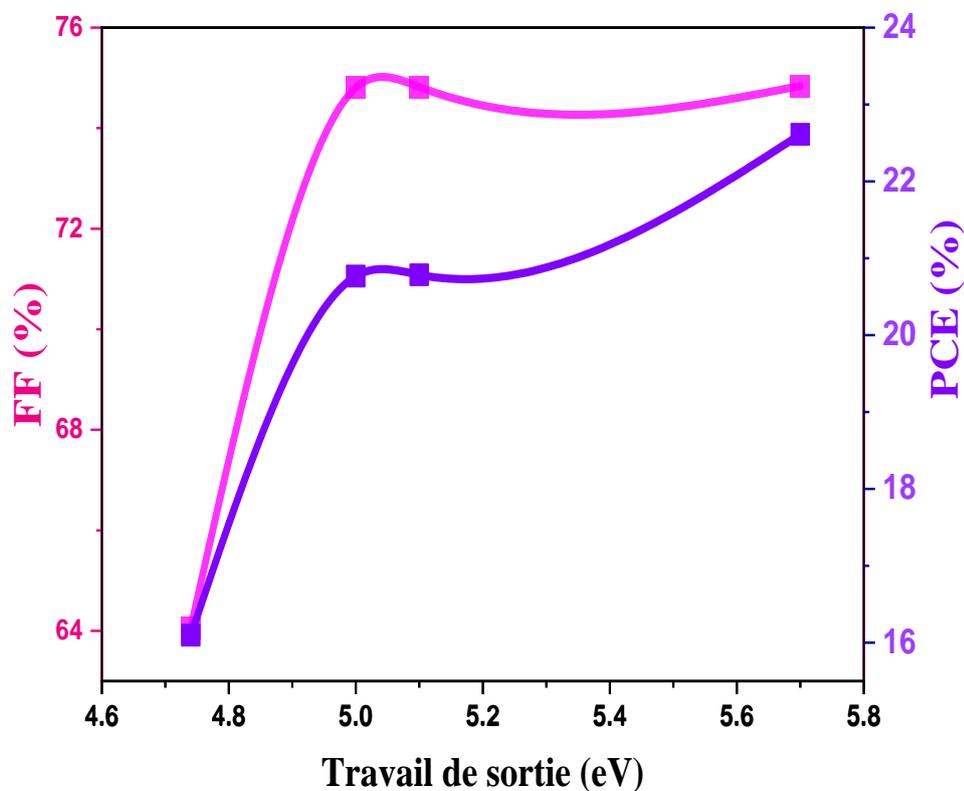


Figure 2. 16 : Variation des paramètres photovoltaïques FF et PCE en fonction du travail de sortie.

### 2.5.9 Effet des interfaces ( $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) et ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{TiO}_2$ )

L'effet de la densité de défauts de l'interface  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  et  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{TiO}_2$  sur les performances PV ont été étudiées et présentées dans la figure 2.17. Il est clair que les performances de la cellule solaire ne sont pas influencées par la densité de défauts de l'interface de ces interfaces jusqu'à  $10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , ce qui est évidemment un bon signe de la formation de meilleures hétéro-interfaces.

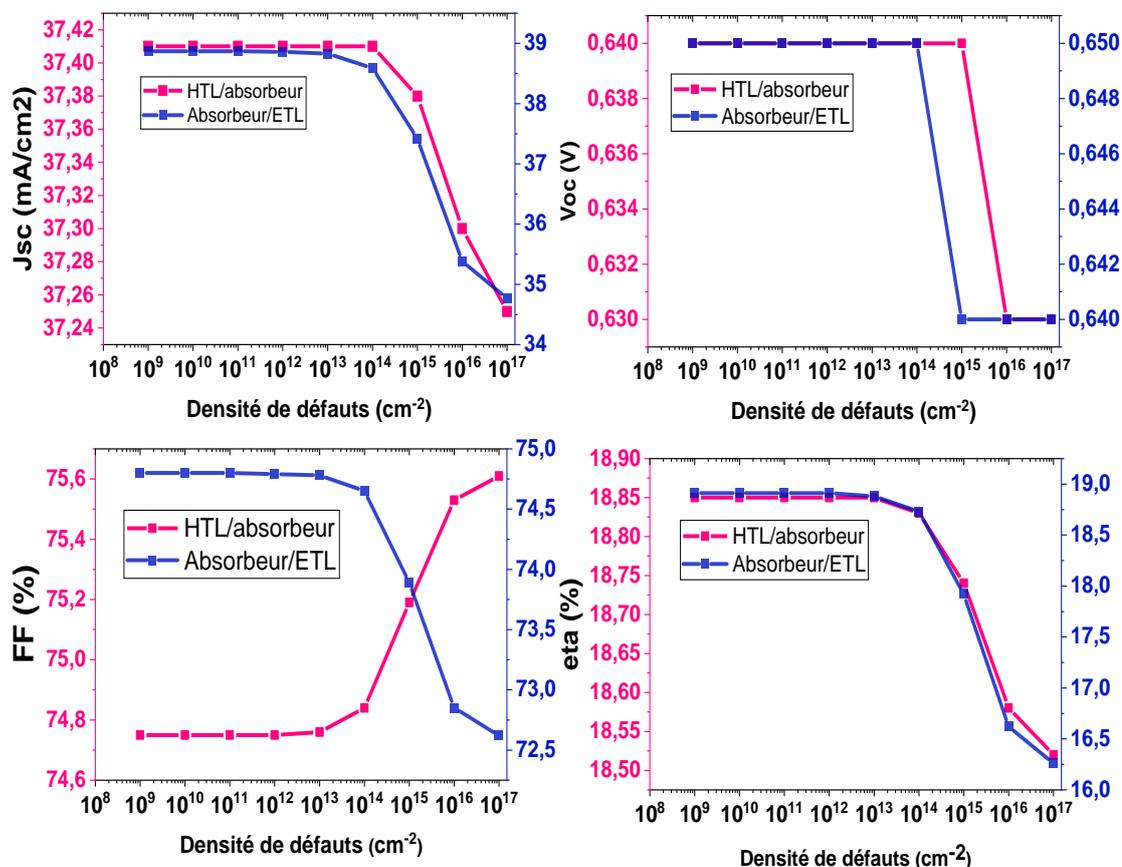


Figure 2.17: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la densité de défauts des interfaces.

## 2.6 Les paramètres photovoltaïques de la cellule optimisée

La courbe des caractéristiques J-V représentée sur la figure 2.18 en considérant tous les paramètres optimisés de la cellule solaire pérovskite à base de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

La forme finale contient une épaisseur de la couche absorbante de 500nm, la concentration des défauts  $N_t$  égale  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$ , et on a utilisé le platine (Pt) comme anode avec un travail de sortie de 5.7eV.

Les valeurs des paramètres photovoltaïques de la cellule de référence et de la cellule optimisés à base de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  sont rapportées dans le tableau 2.3.

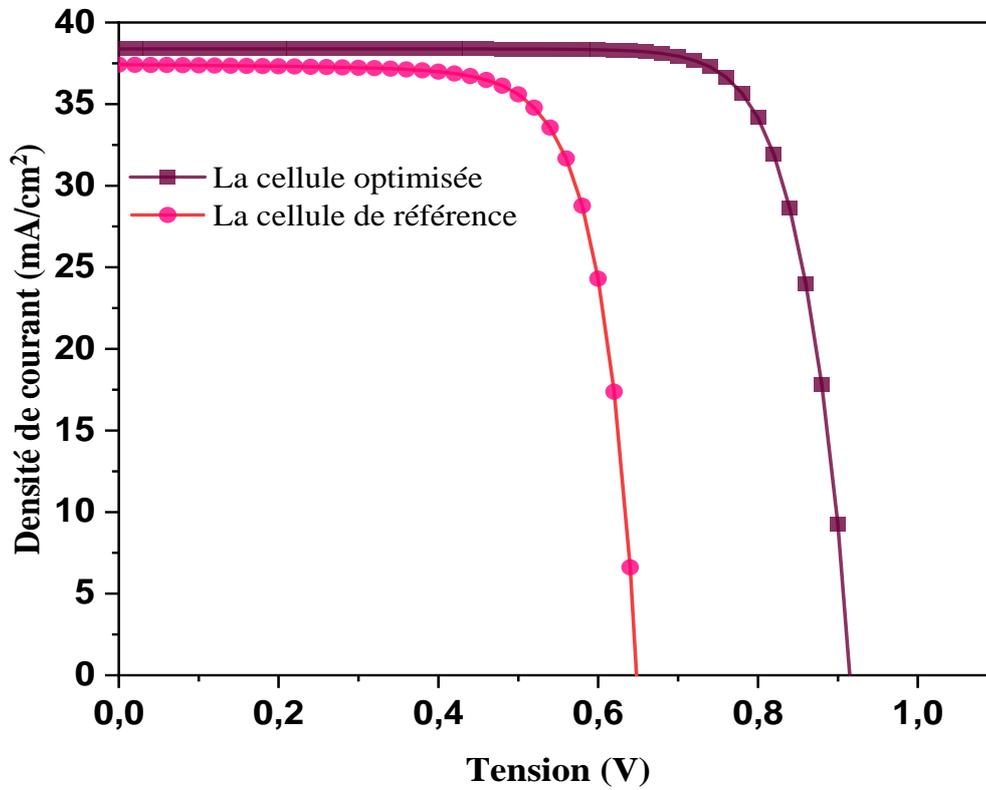


Figure 2. 18 : Caractéristique J-V optimisée de la cellule à base de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

Tableau 2. 3 : Paramètres photovoltaïques de la cellule de référence et optimisée.

	Voc (V)	Jsc ( $\text{mA}/\text{cm}^2$ )	FF (%)	PCE (%)
Cellule de référence	0.64	37.41	74.76	18.85
Cellule optimisée	0.91	38.38	79.37	28.98

## **2.7 Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons étudié et simulé la cellule solaire à base du matériau pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  pour extraire les différents paramètres :  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE en utilisant l'outil de simulation unidimensionnel SCAPS-1D.

L'objectif principal est d'améliorer les performances de la cellule solaire en déterminant les paramètres optimaux. Les résultats de simulation ont montré que l'épaisseur, la concentration de dopage, le travail de sortie, la densité des défauts de la couche absorbante et les défauts aux interfaces jouent un rôle important dans les performances de la cellule solaire.

Les résultats obtenus après l'optimisation des paramètres photovoltaïques de la couche absorbante ( $J_{sc}=38.38\text{mA}/\text{cm}^2$ ,  $V_{oc}=0.91\text{V}$ ,  $\text{FF}=79.37\%$ ,  $\text{PCE}=28.98\%$ ) montrent que la cellule a de meilleures performances électriques.

## Conclusion générale

---

### Conclusion générale

Les cellules solaires à pérovskite (PSC) basées sur des pérovskites aux halogénures métalliques organiques et inorganiques, constituent une avancée révolutionnaire récente pour atteindre des rendements de conversion de puissance supérieurs à 21 %. Cependant, la toxicité du plomb dans ces PSC pourrait avoir un effet néfaste sur le développement à grande échelle en raison des préoccupations environnementales.

La pérovskite de triiodure d'étain et de méthylammonium ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) a été utilisée avec succès dans les PSC sans plomb comme alternative à la pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . Nous avons étudié et optimisé les paramètres des PSC sans plomb à base de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  dont la structure est :  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}/\text{anode}$  avec  $\text{Cu}_2\text{O}$  comme matériau de transport de trous (HTM), et  $\text{TiO}_2$  comme matériau de transport d'électrons (ETM). Le dispositif simulé montre une efficacité de conversion de puissance supérieure à 18 % sous un éclairage AM 1,5 G.

Les performances photovoltaïques ont été optimisés en fonction de plusieurs paramètres tels que l'épaisseur de la couche absorbante, la densité des accepteurs, la densité des défauts, la densité des défauts aux interfaces et le travail de sorties des matériaux de l'anode. L'épaisseur de pérovskite optimisée à 500 nm, la densité de défauts et la concentration de dopage de  $10^{14} \text{ cm}^{-3}$  améliorent les performances de la cellule ; cependant une concentration excessive conduit à un taux de recombinaison plus élevé des porteurs de charge et à de mauvaises performances cellulaires. La simulation de la cellule avec quelques matériaux de contact de l'anode montre qu'un métal à fonction de travail élevée, est nécessaire pour un contact bon ohmique comme le Pt. Ainsi les meilleures performances PV sont :  $J_{sc}=38.38\text{mA/cm}^2$ ,  $V_{oc}=0.91\text{V}$ ,  $\text{FF}=79.37\%$ ,  $\text{PCE}=28.98\%$ .

Les cellules solaires pérovskites à base de  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  rapportés offrent une voie viable vers la réalisation de PSC sans danger pour l'environnement, à faible coût et à haute efficacité.

# **Références bibliographiques**

## Références

---

### Références bibliographiques

- [1] S. Karima, "Contribution de la microscopie EBIC et des calculs numériques pour l'étude de cellules photovoltaïques," 2016.
- [2] F.khaled, "Dispositifs photovoltaïques," *polycopiémaster1, microélectronique, Université BBA.*
- [3] M. Abderrezek, "Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces," 2015.
- [4] Y. MAROUF, "Etude et simulation des cellules solaires photovoltaïques à base de silicium," 2020.
- [5] J.XUEYANG, "Étude comparative de structures de convertisseurs pour les systèmes photovoltaïques connectés à un réseau électrique moyenne tension," 2019.
- [6] M. A. Slimani, "Cellules solaires pérovskites imprimées et optimisation des couches pérovskites pour les cellules tandems," 2019.
- [7] M.Abdellatif, "Contribution to the control of a Power Converter with Improved Topologies Associated with a Photovoltaic Generator Based on Advanced Techniques Supported," 2020. doi: 10.1080/03085694.2016.1242865.
- [8] KHELIFI Seyf Allah, "Optimisation des paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire réalisée à partir de matériaux ternaires ou quaternaires basés sur les semiconducteurs II-VI," 2017.
- [9] L. Bailly, "Cellules photovoltaïques organiques souples à grande surface," 2010.
- [10] T. Naïma, "Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de  $\text{CuIn}_{1-x}\text{GaxSe}_2$ ," 2015.
- [11] P. Dally, "Cellules Solaires à base de Matériaux Pérovskites : De la caractérisation des matériaux à l'amélioration des rendements et de la stabilité," 2019.
- [12] A.Mammar and A.SLIMANI, "Simulation Et Optimisation D'une Cellule Solaire A Base Du Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  En Architecture NIP," 2020.
- [13] S. Karthick, "Céldas solares de perovskita híbridadas basadas en formamidinio- cesio (FA-Cs): una simulación completa y un análisis experimental," 2021.
- [14] P.Sun, Q.Li, and L.Yang, "Theoretical insights into a potential lead-free hybrid perovskite: substituting  $\text{Pb}^{2+}$  with  $\text{Ge}^{2+}$ ," *Nanoscale*, p. 10, 2015, doi: 10.1039/C5NR05337D.
- [15] A. Baudrant, G. Burgot, and J. Frigerio, "Innovations en énergie et environnement," *Tech. l'Ingénieur*.

## Références

---

- [16] I. M. ASUO, “Ambient-Processed Halide Perovskites for Photovoltaic and Optoelectronic Devices,” 2021.
- [17] R. T. Zair, C. Oudjehani, and K. Tighilt, “SCAPS Simulation for Perovskite Solar Cell,” vol. 8, p. 26, 2021, doi: 10.31875/2410-2199.2021.08.3.
- [18] M. Burgelman, “SCAPS manual,” 2020.
- [19] C. Asma, “Optimisation et simulation numérique du profil de la couche absorbante et des différentes couches.”
- [20] C. Meriem, “Optimization by simulation of the nature of the buffer, the gap profile of the absorber and the thickness of the various layers in CZTSSe solar cells,” pp. 0–30, 2017.
- [21] P. K. Patel, “Device simulation of highly efficient eco-friendly  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  perovskite solar cell,” *Sci. Rep.*, vol. 11, pp. 1–11, 2021, doi: 10.1038/s41598-021-82817-w.
- [22] M. Lazemi, S. Asgharizadeh, and S. Bellucci, “rsc.li/pccp,” pp. 1–12, 2018, doi: 10.1039/C8CP03660H.
- [23] L. Yang, A. T. Barrows, and D. G. Lidzey, “Device simulation of lead-free  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  perovskite solar cells with high efficiency,” vol. 25, p. 10, 2016, doi: 10.1088/1674-1056/25/10/108802.
- [24] Y. M. Lee, I. Maeng, J. Park, M. Song, and J. Yun, “Comprehensive Understanding and Controlling the Defect Structures: An Effective Approach for Organic-Inorganic Hybrid Application,” vol. 6, no. November, pp. 1–9, 2018, doi: 10.3389/fenrg.2018.00128.

## Résumé

**Résumé :** Dans ce travail, nous avons étudié l'effet de divers paramètres, sur les performances de la cellule solaire pérovskite hybride sans plomb, dont la structure est  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}/\text{anode}$ . Ceci a été fait grâce à une analyse théorique et à une optimisation de certains paramètres par le simulateur SCAPS 1-D. On a constaté que les performances des cellules solaires peuvent être améliorées dans une certaine mesure en ajustant, l'épaisseur de la couche absorbante ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ), la concentration de dopage (Na), et la densité de défauts (Nt) et avec le choix d'un matériau adéquat pour l'anode, tandis que la densité de défauts aux interfaces n'a pas une grande influence. On obtient enfin des résultats encourageants du  $J_{sc}=38.38 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc}=0.91 \text{ V}$ ,  $FF=79.37\%$ , et du  $PCE=28.98\%$ . Ces résultats montrent que le  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  sans plomb, est un bon absorbeur solaire écologique, et à haut rendement.

**Mots clés :** Cellules solaires, Pérovskite,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ , SCAPS-1D.

**Abstract :** In this work, we studied the influence of various parameters on the performance of the lead-free hybrid perovskite solar cell, which structure is  $\text{TiO}_2/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{Cu}_2\text{O}/\text{anode}$ . This was done with a theoretical analysis and an optimization of certain parameters by the SCAPS 1-D simulator. It has been found that the performance of solar cells can be improved by adjusting, the thickness of the absorber layer ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ), the doping concentration (Na), and the defects density (Nt) and with the choice of a suitable material for the anode, while the defect density at the interfaces does not have a great influence. Finally, encouraging results are obtained from  $J_{sc}=38.38 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc}=0.91 \text{ V}$ ,  $FF=79.37\%$ , and from  $PCE=28.98\%$ . These results show that the lead-free  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  is a good ecological solar absorber with high efficiency.

**Keywords :** Solar cell, Perovskite,  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ , SCAPS-1D.

**المخلص :** في هذا العمل ، درسنا تأثير العوامل المختلفة على أداء خلية بيروفسكايت الشمسية الهجينة الخالية من الرصاص ، والتي يتكون هيكلها من الأنود /  $\text{TiO}_2 / \text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3 / \text{Cu}_2\text{O}$  . تم ذلك بفضل التحليل النظري وتحسين بعض المعلمات بواسطة محاكي SCAPS 1-D . لقد وجد أن أداء الخلايا الشمسية يمكن أن يتحسن إلى حد ما عن طريق ضبط سمك الطبقة الماصة ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ ) وتركيز المنشطات (Na) وكثافة الخلل (Nt) واختيار نوع مناسب. مادة الأنود، بينما كثافة الخلل في الواجهات ليس لها تأثير كبير. أخيراً ، يتم الحصول على نتائج مشجعة من  $J_{sc} = 38.38 \text{ mA/cm}^2$  ،  $V_{oc} = 0.91 \text{ V}$  ،  $FF = 79.37\%$  ، و  $PCE = 28.98\%$  .

## Résumé

---

أمبير / سم 2 ،  $V_{oc} = 0.91$  فولت ،  $FF = 79.37\%$  ، ومن  $PCE = 28.98\%$  . تظهر هذه النتائج أن  $CH_3NH_3SnI_3$  الخالي من الرصاص هو ممتص شمسي بيئي جيد بكفاءة عالية.

الكلمات الرئيسية : الخلايا الشمسية،  $CH_3NH_3SnI_3$  ، Proskite ، SCAPS-1D .