

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE 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

- HAOUECHE Aicha
- MECHRI Bochra

Intitulé

*Etude et simulation d'une cellule solaire à pérovskite hybride a
base de germanium par le simulateur SCAPS1-D.*

Évalué le :

Par la commission d'évaluation composée de* :

<i>Nom & Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
<i>M. A.DJEMOUAI</i>	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M^{me} F.KHERRAT.</i>	<i>MAA</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M. Z.MESSAI</i>	<i>MCA</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>

Année Universitaire 2020/2021

Dédicaces

Nous dédions ce modeste travail :

A nos chère pères, à nos chères mères, pour leur tendresse, leurs conseils, leurs sacrifices, leur présence à nos côtés et leur soutien, auxquels nous devons ce que nous sommes et à qui nous souhaitons une longue vie pleine de bonheur et de santé. Qu'ils trouvent ici l'expression de notre éternelle reconnaissance et de notre profonde affection.

A nos frères

A nos sœurs

A toutes nos familles

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions ALLAH de nous avoir donné la volonté et la patience qui nous ont permis de continuer le parcours universitaire de master malgré toutes les difficultés.

Nous voudrions bien remercier le jury pour évaluer et participer à la conclusion de ce modeste travail.

Nous tenons à témoigner notre profonde gratitude et nos remerciements les plus vifs à M^{me} **F. Kharrat**, enseignante au département d'Electronique de l'université Mohammed EL Bachir Ibrahimi de BBA de nous avoir encadrée, orientée, aidée et conseillée.

Enfin, merci à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail

Table des matières

Introduction générale	1
-----------------------------	---

Chapitre I

Généralités sur les cellules photovoltaïques

I.1 Introduction	2
I.2 L'énergie solaire	2
I.2.1 Spectre solaire :	2
I.3 Cellule photovoltaïques	4
I.3.1 Principe de fonctionnement.....	5
I.4 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque	6
I.5 Paramètres d'une cellule photovoltaïque :.....	6
I.5.1 Courant de court-circuit (I_{cc}) :.....	6
I.5.2 Tension de circuit-ouvert (V_{co}) :.....	7
I.5.3 Facteur de forme :	7
I.5.4 Rendement énergétique de conversion :	8
I.6 Circuit équivalent d'une cellule solaire :.....	8
I.6.1 Le modèle idéal :.....	8
I.6.2 Le modèle réel :.....	8

I.7 Les différentes filières photovoltaïques :	9
1.7.1 La filière silicium	10
1.7.2 La filière couches minces	10
1.7.3 La filière de troisième génération	10
I-8 Cellule photovoltaïques a pérovskites :	10
I.8.1 Perovskite	10
I.8.2 Historique cellules solaires à pérovskites	11
I.9 Conclusion	12

Chapitre II

Simulation de la cellule solaire à pérovskite

II-1 Introduction :	13
II-2 Présentation du logiciel SCAPS-1D :	13
II.2.1 Edition de la structure d'une cellule solaire :	14
II.2.2 Panneau des résultats de simulation	15
II-3 Structure de la cellule à simuler	16
II-4 Paramètres et propriétés de la cellule à étudier	18
II.4.1 Alignement des bandes énergétiques	19
II-5 Résultats et discussion	20
II.5.1. Cellule de référence	20

II.5.2. Effet des différentes couches HTM	22
I.7.4 Effet de l'épaisseur de l'absorbeur pour différentes couches HTMs sur les paramètres photovoltaïques.	24
II-6 Conclusion	27
II-7 Références bibliographiques.....	29
II.8 Résumé	30

Liste des figures

Chapitre I

Figure I-1 : Spectre solaire. AM0 : spectre solaire hors atmosphère, AM 1.5 : spectre solaire traversé de l'atmosphère, le soleil faisant un angle de 48° environ par rapport à sa position au zénith.....	1
Figure I-2 : Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire	2
Figure I-3 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	3
Figure I-4 : Schéma équivalent de la cellule photovoltaïque PV	5
Figure I-5 : schéma électrique équivalent d'une cellule solaire idéal.....	6
Figure I-6 : schéma électrique équivalent d'une cellule solaire réelle.....	7
Figure I-7 : Évolution des records de rendements de chaque filière de cellules photovoltaïques.....	8
Figure I-8 : structure hybride de la pérovskite.....	10

Chapitre 02

Figure II-1 : Fenêtre d'exécution « action panel » du logiciel SCAPS.....	11
Figure II-2 : Définition des couches dans SCAPS.....	12
Figure II-3 : panneau des résultats de simulation de la courbe I-V de la cellule illuminée.....	13
Figure II-4 : architecture de cellules solaires à pérovskite p-i-n généré par SCAPS	14
Figure II-5 : l'alignement des bandes d'énergie des divers matériaux.....	15
Figure II-6 : La caractéristique courant-tension(J-V).....	16
Figure II-7 : les caractéristiques J-V de divers structures introduisant trois HTM différents, PEDOT : PSS, CuSbS2, CuSCN et NiO.....	17

Figure II-8 :variation des paramètres électriques en fonction de l'épaisseur de pérovskite CH₃NH₃GeI₃ avec différents HTMs.....18

Figure II-9 : caractéristiques J-V optimisées de la cellule à base de CH₃NH₃GeI₃ avec différents HTMs.....19

Liste des tableaux

Tableau II-1 : propriétés des matériaux des différentes couches de la cellule.....20

Tableau II-2 : paramètres de la cellule de référence à simuler de type PEDOT : PSS : MAgel₃.....22

Tableau II-3 : Les paramètres photovoltaïques de différentes couches HTMs..... 25

Tableau II-4: paramètres photovoltaïques optimisé pour les différents HTMs28

Liste des symboles

λ	Longueur d'onde de la lumière	μm
R_s	Résistance série	Ω
R_{sh}	Résistance shunt	Ω
I_{cc}	Courant de court-circuit	A
V_{co}	Tension de circuit ouvert	V
V_t	Tension thermique de la jonction	V
I_0	Courant de saturation	A
K	Constante de Boltzmann ($1,38 \cdot 10^{23}$)	J /K
T	température de la cellule PV	K
E	Charge électrique	C
FF	Facteur de forme	%
P_{max}	puissance maximale	W
η	Rendement énergétique	%
P_{inc}	Puissance incidente	W
N	Facteur d'idéalité de la diode	
E_g	Energie de gap	Ev
K	Affinité électrique	Ev

N_c	Densité d'état de la bande de conduction	cm^{-3}
N_v	Densité d'état de la bande de valence	cm^{-3}
N_D	Concentration de donneur	cm^{-3}
N_A	Concentration d'accepteur	cm^{-3}
ϵ_r	Permittivité relatives	
μ_n	Mobilité d'électrons	$\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$
μ_h	Mobilité des trous	$\text{cm}^2\text{v}^{-1}\text{s}^{-1}$
C	Célérité de la lumière dans le vide ($3 \cdot 10^8$)	m/s
H	Constante de Planck ($6,626 \cdot 10^{-34}$)	J.S
ν	La fréquence	Hz
I_{ph}	Photo Courant	A

Introduction générale

Les cellules solaires pérovskites ont marqué le monde du photovoltaïque, car elles ont atteint très rapidement de hauts rendements et en utilisant des méthodes de dépôt peu coûteuses. Cette progression impressionnante sur une courte durée est un phénomène sans précédent, qui est en train de révolutionner la recherche sur les cellules solaires.

Depuis 2012, les pérovskites halogénées hybrides, et particulièrement le composé de formule chimique $\text{CHNH}_3\text{PbI}_3$, s'est imposé comme de très prometteurs absorbeur pour les cellules solaires, démontrant en peu de temps des performances remarquables.

Malgré l'énorme progrès des cellules solaires à pérovskite, la toxicité et l'instabilité de la Pb-pérovskite limite la commercialisation de ces PSC (Perovskite solar cells). Le moyen efficace de surmonter ces problèmes est de remplacer le Pb-perovskite par un matériau de pérovskite écologique, candidat alternatif tels que Ge-perovskite ($\text{CHNH}_3\text{GeI}_3$). Dans la conception typique des cellules solaires à pérovskite, un matériau absorbant pérovskite est pris en sandwich entre un transport d'électrons matériau (ETM) et un matériau de transport de trous (HTM). Afin d'améliorer la reproductibilité et la stabilité des cellules solaires à pérovskite, il est important de sélectionner les ETM et HTM appropriés de ces cellules.

Dans ce présent travail, la modélisation numérique de la cellule solaire à base du méthyl ammonium germanium sans plomb tri-iodure (MAGeI_3), utilisant SCAPS-1D est étudié, en utilisant des matériaux inorganiques comme CuSbS_2 , CuSCN et NiO comme HTM, les paramètres photovoltaïques sont comparés à ceux utilisant de la matière organique, tels que PEDOT:PSS.

Ce mémoire comporte un chapitre portant des généralités sur les cellules photovoltaïques, en particulier les cellules à perovskite hybride halogénées. Le deuxième chapitre est consacré à la simulation et l'optimisation d'une cellule solaire HTM/ $\text{CHNH}_3\text{GeI}_3$ /ETM. Ce manuscrit est ensuite clôturé par une conclusion générale.

Chapitre I

Généralités sur les cellules photovoltaïques

I.1 Introduction

La production des énergies reste toujours un des soucis de l'homme, l'énergie photovoltaïque est l'une des énergies renouvelables très prometteuse pour avoir un monde propre et non pollué Elle présente l'intérêt de convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique et exploiter tous les spectres lumineux. Plusieurs matériaux à caractère semi-conducteur sont utilisés dans cette conversion.

Ce chapitre est consacré entièrement à une étude bibliographique des cellules solaires à base d'un matériau émergent qui est la pérovskite.

I.2 L'énergie solaire

L'énergie solaire photovoltaïque provient de la transformation directe d'une partie de la lumière en électricité. Cette conversion s'effectue par le biais d'une cellule dite photovoltaïque (PV) basé sur un phénomène physique appelé effet photovoltaïque qui consiste à produire une force électromotrice lorsque la cellule est exposée à la lumière. La tension générée peut varier en fonction du matériau utilisé pour la fabrication de la cellule [1].

I.2.1 Spectre solaire :

Le spectre solaire est en effet composé de toutes sortes de rayonnements d'énergies et de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique, sont considérés comme des porteurs d'énergie qui est reliée à leur longueur d'onde par la relation suivante :

$$E = h \nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{I-1})$$

Avec : h est la constante de Planck, ν la fréquence, C la vitesse de la lumière et λ la longueur d'onde.

La répartition du rayonnement solaire extraterrestre peut être compilée selon les données recueillies par les satellites, est désignée sous le nom d'AM0 Sa distribution en longueur d'onde. La figure (I-1) montre que l'atténuation observée après le passage à travers l'épaisseur de l'atmosphère correspondant à une masse d'air de 1,5, soit l'équivalent d'une hauteur du soleil de $(41,8)^\circ$ au niveau de la mer. Ce spectre de ciel clair, noté AM 1,5 devient la référence pour les différentes mesures concernant les cellules photovoltaïques. [2]

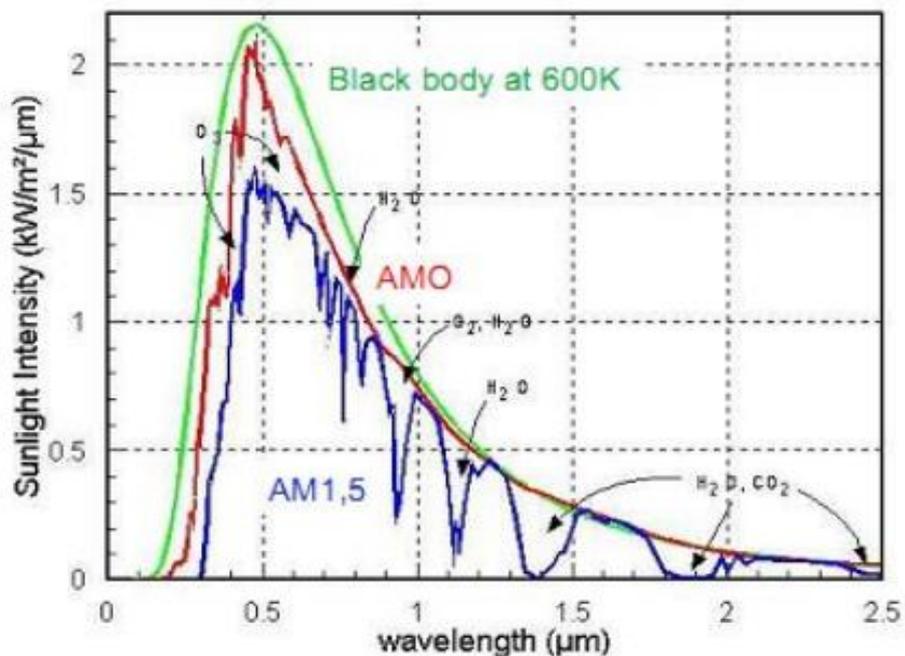


Figure I-1 : Spectre solaire. AM0 : spectre solaire hors atmosphère, AM 1.5 : spectre solaire traversé de l'atmosphère, le soleil faisant un angle de 48° environ par rapport à sa position au zénith.

:

I.3 Cellule photovoltaïques

La cellule solaire est un dispositif optoélectronique capable de capter et convertir directement l'énergie des rayons lumineux en électricité. Cette conversion est appelée la conversion photovoltaïque. Sa structure est illustrée dans la figure (I.5) ci-dessous. Elle montre un schéma simplifié d'une cellule solaire typique car l'architecture des dispositifs photovoltaïques modernes se révèle particulièrement complexe.

La cellule photovoltaïque sera donc une plaquette du matériau semi-conducteur; où la jonction P-N représente le cœur de la cellule photovoltaïque; elle représente le vrai générateur dans le dispositif

Les contacts métalliques en face avant et en face arrière, constituent la structure de cheminement permettant de récupérer les porteurs photo générés, pour ça; deux électrodes sont élaborées sur la plaquette du semi-conducteur, l'une qui recouvre la totalité de la face arrière pour assurer le contact avec la zone p, et l'autre en forme de grille sur la face avant, la géométrie de cette grille étant un compromis entre une faible occultation du rayonnement et un bon contact électrique avec la zone n[3]

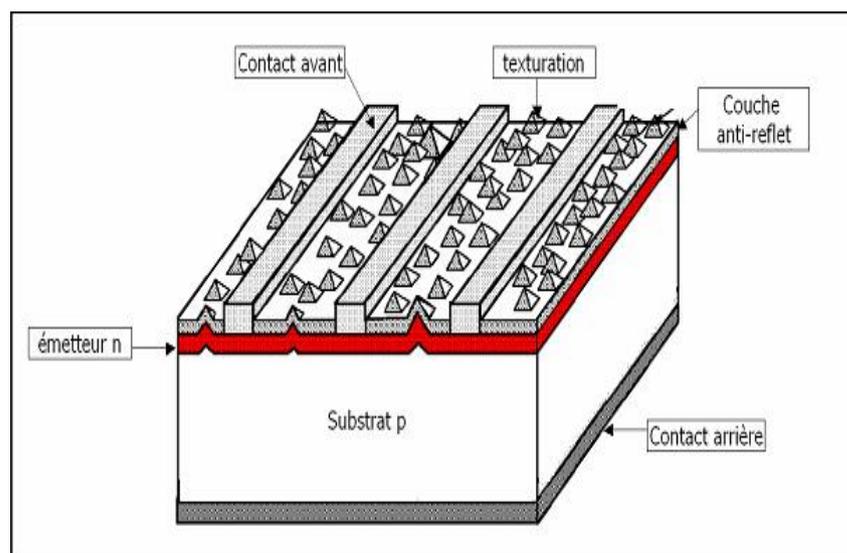


Figure I-2 : Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire

I.3.1 Principe de fonctionnement

Dans un semi-conducteur exposé à la lumière, un photon d'énergie suffisante arrache un électron à la matrice et crée ainsi un « trou ». En l'absence de dispositif supplémentaire, l'électron trouve rapidement un trou pour se recombiner et l'énergie apportée par le photon est ainsi dissipée. Le principe d'une cellule photovoltaïque est de forcer les électrons et les trous à se diriger chacun vers une face opposée du matériau au lieu de se recombiner en son sein : il apparaîtra une différence de potentiel et donc une tension entre les deux faces, comme dans une pile. L'une des solutions pour atteindre cet objectif, couramment utilisée, est de générer un champ électrique au moyen d'une jonction P-N, c'est à dire entre deux couches dopées respectivement P et N.

D'un point de vue électrique, une cellule photovoltaïque est l'équivalent d'un générateur de courant auquel on a adjoint une diode. Il faut ajouter des contacts électriques (qui laissent passer la lumière en face éclairée : en pratique, on utilise souvent un contact par une grille), une couche antireflet pour assurer une bonne transmission des photons vers l'absorbeur. [4]

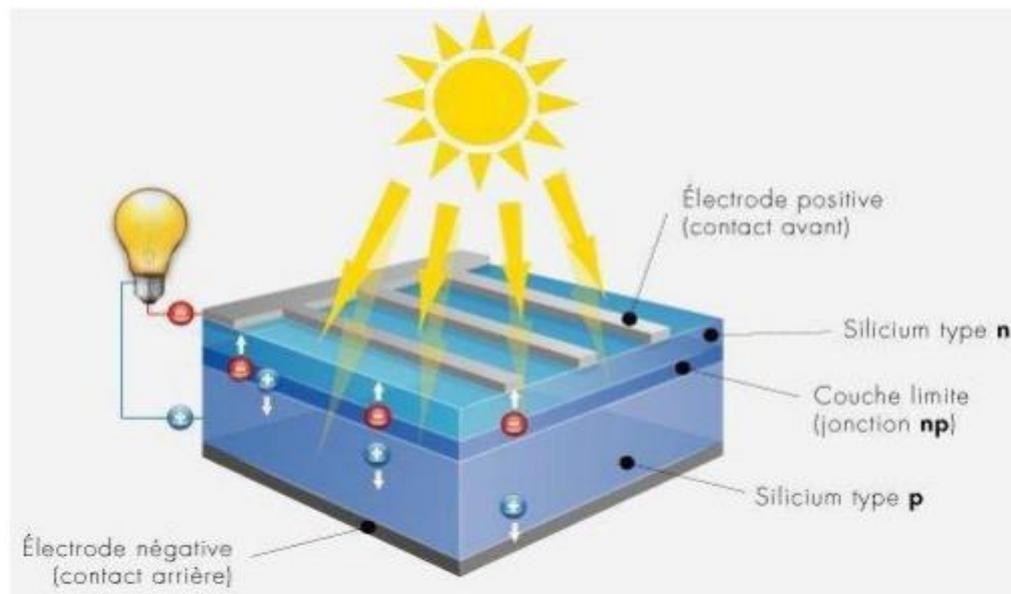


Figure I-3: Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

I.4 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

La figure (I.5) présente le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque sous éclairement, elle est constituée d'un générateur de courant I_{ph} monté en parallèle avec une diode. Deux résistances parasites sont introduites dans ce modèle.

Ces résistances influence sur la caractéristique $I = f(V)$ de la cellule :

La résistance série (R_s) est la résistance interne de la cellule ; elle dépend principalement de la résistance du semi-conducteur utilisé, de la résistance de contact des grilles collectrices et de la résistivité de ces grilles;

La résistance shunt (R_{sh}) est due à un courant de fuite au niveau de la jonction; elle dépend de la façon dont celle-ci a été réalisée [5]

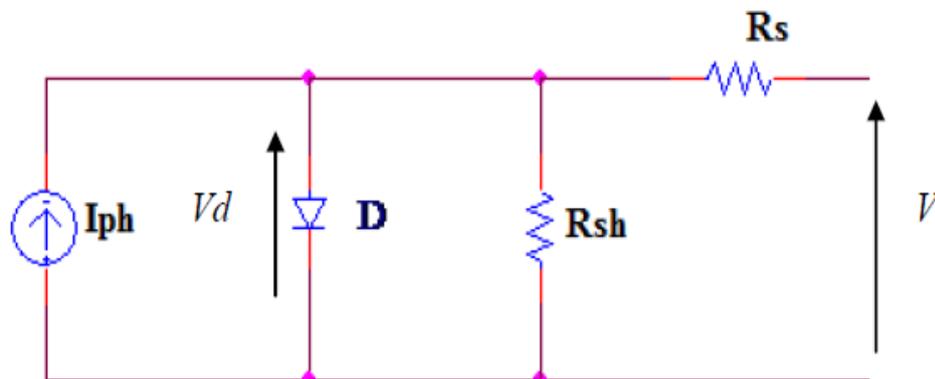


Figure I-5: Schéma équivalent de la cellule photovoltaïque PV.

I.5 Paramètres d'une cellule photovoltaïque :

Ces paramètres peuvent être déterminés à partir des courbes courant-tension, ou de l'équation caractéristique. Les plus usuels sont les suivantes :

I.5.1 Courant de court-circuit (I_{cc}) :

Le courant de court-circuit exprimé en mA, est le courant qui circule dans la cellule sous éclairement et en court-circuitant les bornes de la cellule. Il croît linéairement avec l'intensité

d'illumination de la cellule et il dépend de la surface éclairée, de la longueur d'onde du rayonnement, de la mobilité des porteurs de charges et de la température [6]. Dans le cas idéal (R_s nulle et R_{sh} infinie), ce courant se confond avec la photo courant I_{ph} dans le cas contraire, en annulant la tension V dans l'équation (I.2) [5].

$$I_{cc} = I_{ph} / [1 + \frac{R_s}{R_{sh}}] \quad (I-2)$$

I.5.2 Tension de circuit-ouvert (V_{co}) :

C'est la tension maximale V_{co} que peut fournir la cellule pour un courant nul [5], la tension de circuit ouvert exprimée en millivolts, est mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans la cellule. Elle dépend de la différence des travaux de sortie des électrodes et de la résistance shunt, elle décroît avec la température et varie avec l'intensité lumineuse. [7]

Elle est donnée par l'expression :

$$V_{co} = V_t * \ln(\frac{I_{ph}}{I_0} + 1) \quad (I.3)$$

Avec : $V_t = \frac{K.T}{e}$ qui représente la tension thermique .

I.5.3 Facteur de forme :

Le facteur de forme FF est un paramètre important pour définir la qualité d'une cellule. C'est le rapport entre la puissance maximum fournie par la cellule P_{max} et le produit du courant de court-circuit I_{sc} par la tension de circuit-ouvert V_{co} (c'est-à-dire la puissance maximale d'une cellule idéale). Le facteur de forme indique la qualité de la cellule plus il s'approche de l'unité plus la cellule est performante, Il est de l'ordre de 0.7 pour les cellules performantes ; il diminue avec la température. Il traduit l'influence des pertes par les deux résistances parasites R_s et R_{sh} [5]

Il est exprimé comme suit :

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

I.5.4 Rendement énergétique de conversion :

C'est le rapport entre la puissance électrique maximale fournie par la cellule P_{max} (I_{opt}, V_{opt}) et la puissance solaire incidente. Il est donné par :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{inc}} = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{inc}} \quad (I.5)$$

Avec : P_{inc} est égale au produit de l'éclairement et de la surface totale des photopiles. Ce paramètre reflète la qualité de conversion de l'énergie solaire en énergie électrique.[5]

I.6 Circuit équivalent d'une cellule solaire :

I.6.1 Le modèle idéal :

C'est le modèle le plus simple pour représenter la cellule solaire. Il ne tient compte que du phénomène de diffusion. Le circuit équivalent de ce modèle est représenté sur la figure(I-7)

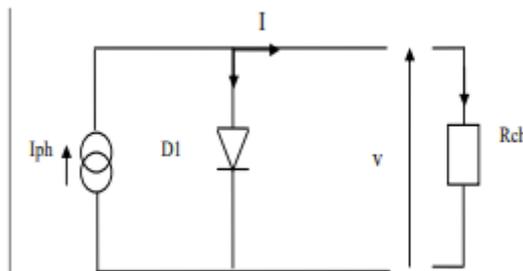


Figure I-6 : schéma électrique équivalent d'une cellule solaire idéal

I.6.2 Le modèle réel :

Ce modèle est celui d'une cellule solaire réelle représenté sur la figure (I-8). L'expression de la caractéristique courant – tension sous éclairement s'écrit :

$$I = I_{ph} - I_{01} \left\{ \exp \left[\frac{q(V + R_s I)}{N K T} \right] - 1 \right\} - I_{02} \left\{ \exp \left[\frac{q(V + R_s I)}{K T} \right] - 1 \right\} - \frac{V + R_s I}{R_{sh}} \quad (I.6)$$

I_{ph} étant la photo courant du aux photons incidents, les deux termes exponentiels représentent séparément le courant de saturation de diffusion (I_{01}) et le courant de saturation

génération recombinaison (I_{02}), respectivement. Le dernier terme de l'équation reflète les pertes par résistance shunt, appelé courant de fuite. [6]

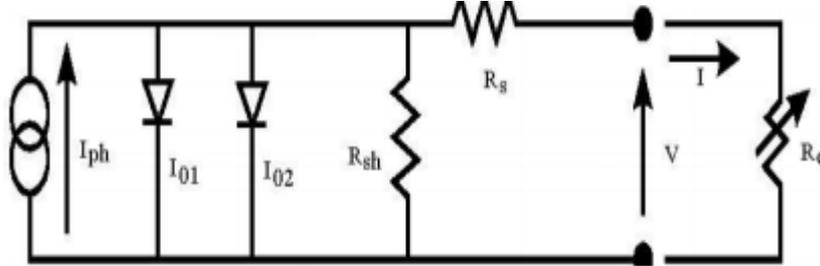


Figure I-7 : schéma électrique équivalent d'une cellule solaire réelle

I.7 Les différentes filières photovoltaïques :

Il existe plusieurs technologies de cellules qui ont toutes des propriétés différentes. Classifiées en fonction de la nature des matériaux absorbants, les cellules photovoltaïques PV sont réalisées à partir de nombreux matériaux semi-conducteurs qui peuvent être inorganiques, organiques ou hybrides. Il existe à ce jour trois principales filières qui se partagent le marché de manière inégale [8]

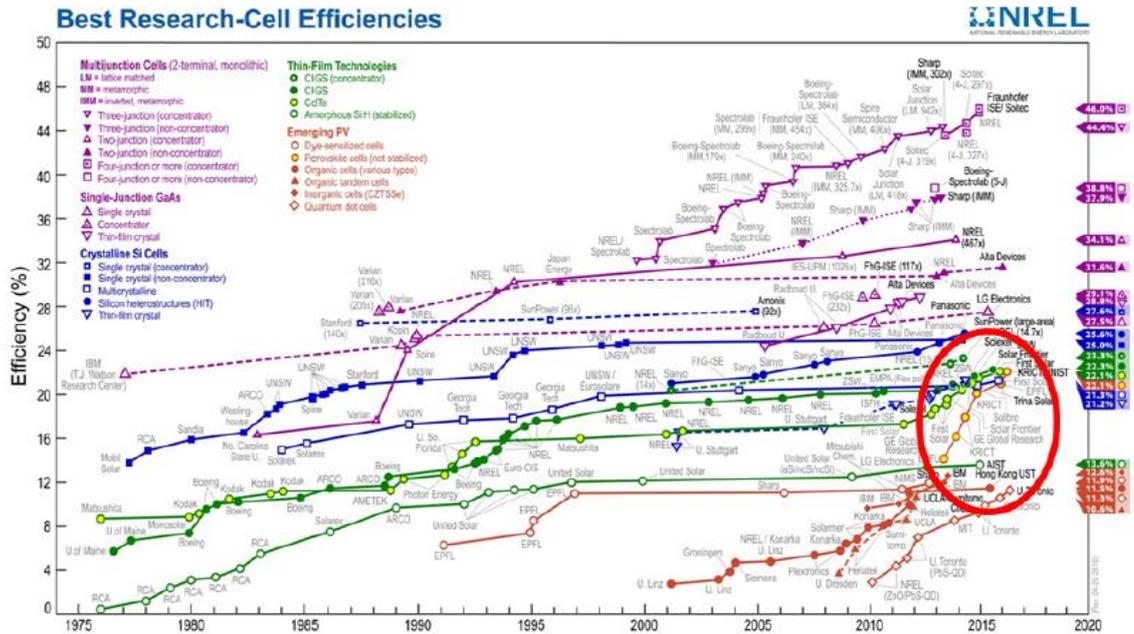


Figure I-8 : Évolution des records de rendements de chaque filière de cellules photovoltaïques [NREL : Laboratoire nationale de l'énergie renouvelable]

1.7.1 La filière silicium

La première génération de cellules solaires qui comprend la technologie silicium, domine le marché du PV en raison de leurs rendements élevés

Il existe deux types de technologies au silicium : le silicium monocristallin et le silicium polycristallin.

1.7.2 La filière couches minces

La technologie couches minces correspond à la deuxième génération de cellules solaires dont les trois principales filières sont :

- Le silicium amorphe
- Le tellurure de cadmium (CdTe)
- Le diséléniure de cuivre indium gallium (CIGS)

1.7.3 La filière de troisième génération

Les technologies PV de troisième génération sont développées dans le but de poursuivre les hautes performances de conversion, voire dépasser la limite de Schokley-Queisser, ou le développement d'architectures innovantes à des prix bas. Elles incluent les cellules sous concentration, les multijonctions, les cellules photovoltaïques organiques (OPV), les cellules solaires à colorants (DSSCs) et les cellules solaires pérovskite (PSCs).[8]

I-8 Cellule photovoltaïques a pérovskites :

I.8.1 Perovskite

La pérovskite est un composé minéral, constitué de calcium et de titane. Sa formule chimique est CaTiO_3 , elle a été découverte par le minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Perovski (1792–1856). La structure la plus simple de la pérovskite et la structure cubique simple de formule ABX_3 (Figure I-10) avec l'ion A dans les coins, l'ion B au centre et l'ion négatifs occupe la position centrée de la face. La pérovskite possède des propriétés physiques impressionnantes, elle a une très grande absorption de la lumière et une grande longueur de

diffusion des charges. En effet, la pérovskite hybride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (MAPbI_3) a un grand coefficient d'absorption $1.5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ à 550 nm, elle se caractérise par une grande longueur de diffusion des électrons et des trous (plus de 1 μm et potentiellement 100 μm) et finalement d'une grande mobilité des porteurs de charges [9].

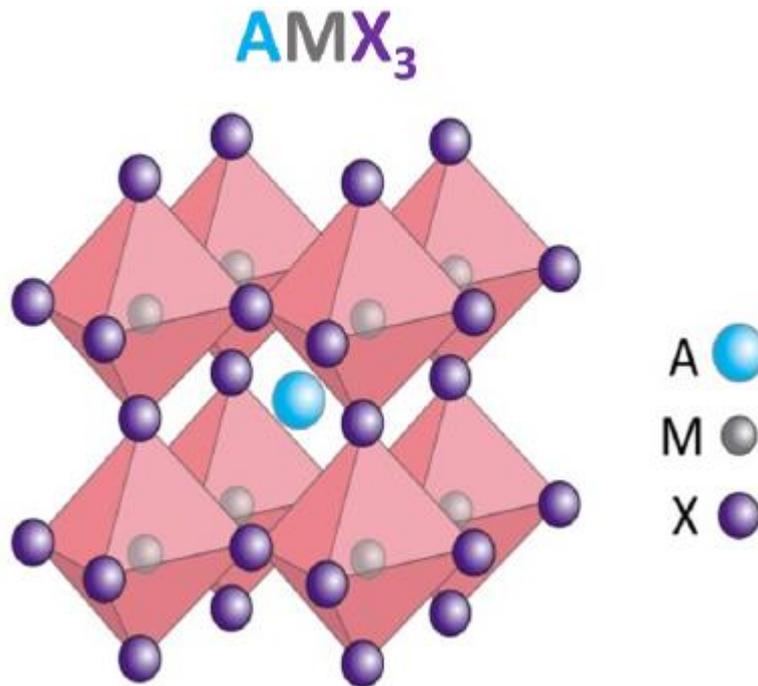


Figure I-10 : structure hybride de la perovskite

I.8.2 Historique cellules solaires à pérovskites

La dernière décennie a été témoin du développement rapide d'une nouvelle classe de cellules solaires à base des matériaux pérovskites organique-inorganique halogénures (pérovskites hybrides) (figure I. B. 1). En 2009, date de première introduction d'une pérovskite hybride dans un cellule photovoltaïque, Gratzel et al. ont publié les premières études sur des pérovskites trihalogénures organométalliques utilisés en tant que sensibilisateurs au colorant à base d'électrolyte liquide (dyesensitized solar cells (DSSCs)). Ces cellules solaires (DSSC) ont atteint un photo-voltage élevé proche de 1 V et une efficacité de conversion de puissance (PCE) $\approx 3\%$ [10].

I.9 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mené une étude bibliographique abrégé sur le spectre solaire, le principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque en général, on a aussi identifié les différentes filières photovoltaïques et on a achevé ce chapitre par une revue générale sur les cellules solaires à perovskite.

Chapitre II

Simulation de la cellule solaire à pérovskite

II-1 Introduction :

Récemment, différents logiciels de simulation particulièrement employés dans le domaine du photovoltaïque sont maintenant disponibles tels que : AMPS-1D (Analysis of Microélectronique and Photonic Structures One Dimension) , SCAPS-1D (Solars cell capacitance Simulateur One Dimension), PC-1D (Personal Computer One Dimension) , ADEPT-F, ASA, ASPIN ou AFORS-HET . De ces outils, le plus utilisé pour la modélisation des cellules solaires à base de couches minces est le simulateur SCAPS. Ce logiciel a été appliqué en premier lieu en vue de modéliser des cellules solaires à base de CdTe CIGS et des cellules solaires à base d'autres matériaux.

Dans ce travail nous avons utilisé le logiciel SCAPS-1D version 3.3.07 pour simuler et optimiser une cellule solaire à pérovskite $\text{NH}_3\text{CH}_3\text{GeI}_3$ avec différentes couches de transport de trous (HTMs). nous allons étudier les effets majeurs qui influent sur les performances de la cellule solaire tels que la variation de l'épaisseur de la couche d'absorbeur et le matériau constituant la couche HTM.

II-2 Présentation du logiciel SCAPS-1D :

SCAPS est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles, développé par le département des systèmes électronique et informatique (ELIS) de l'université de Gent, Belgique.

En double-cliquant sur l'icône SCAPS3.3.07.EXE, SCAPS s'ouvre avec le panneau d'action ci-dessous :

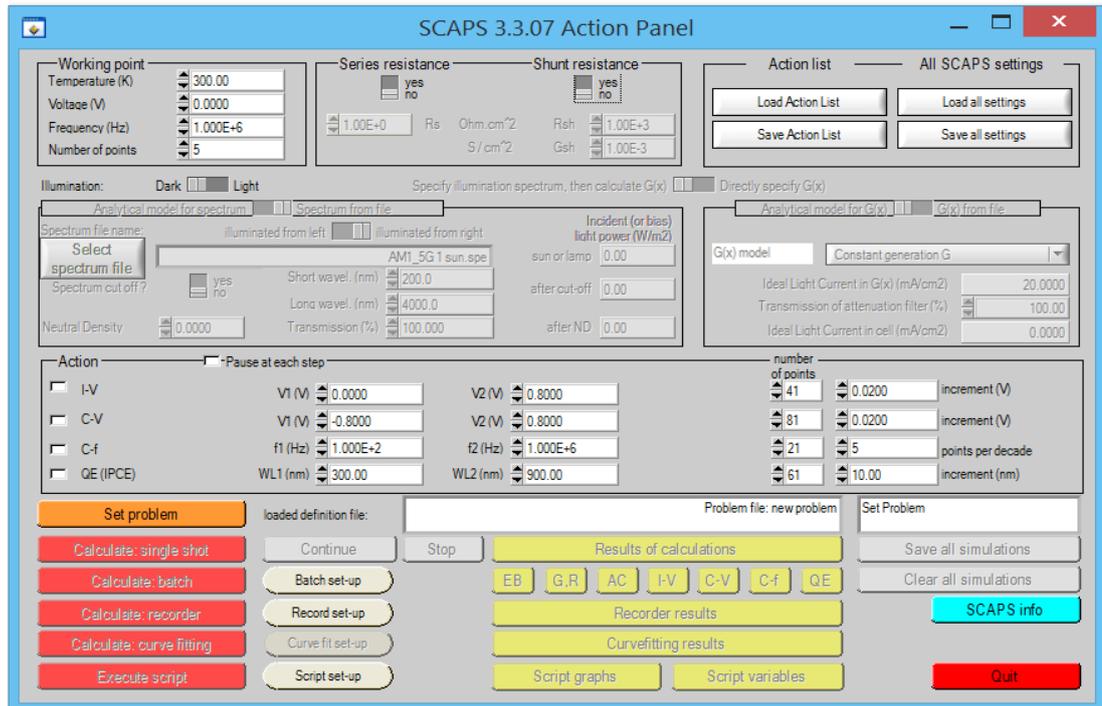


Figure II-1 : Fenêtre d'exécution « action panel » du logiciel SCAPS

II.2.1 Edition de la structure d'une cellule solaire :

Quand on clique sur le bouton « SET PROBLEM » sur le panneau d'action, le panneau « SOLAR CELL DEFINITION » s'affichera. Ce dernier permettra de créer ou de modifier les structures des cellules solaires et de les enregistrer. Les propriétés des couches, des contacts et d'interfaces peuvent être modifiées en cliquant sur le bouton approprié comme le montre la figure II-2, de la même manière, des couches peuvent être rajoutées en cliquant « ADD LAYER »

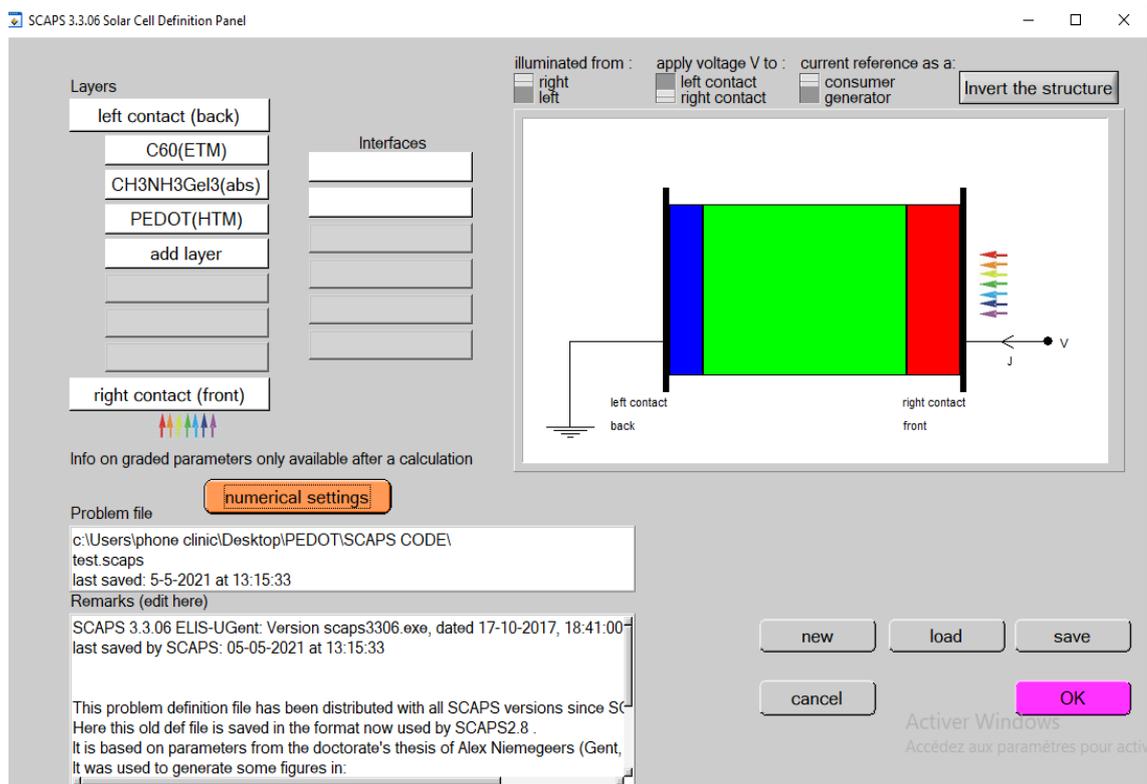


Figure II-2 : Définition des couches dans SCAPS

II.2.2 Panneau des résultats de simulation

Cette fenêtre affiche les résultats de la simulation sous forme de graphe avec la possibilité de les sauvegarder ou exporter leurs valeurs. SCAPS est capable de calculer les bandes d'énergie, les concentrations et les courants à un point de fonctionnement donné (Figure II-3), les caractéristiques (J-V), les caractéristiques (C-V) et (C-f), le rendement quantique (QE), et les bandes d'énergies en régime alternatif (ac-bands).

Les résultats de simulation de la caractéristique J-V illuminée sont représentés dans le panneau ce dessous :

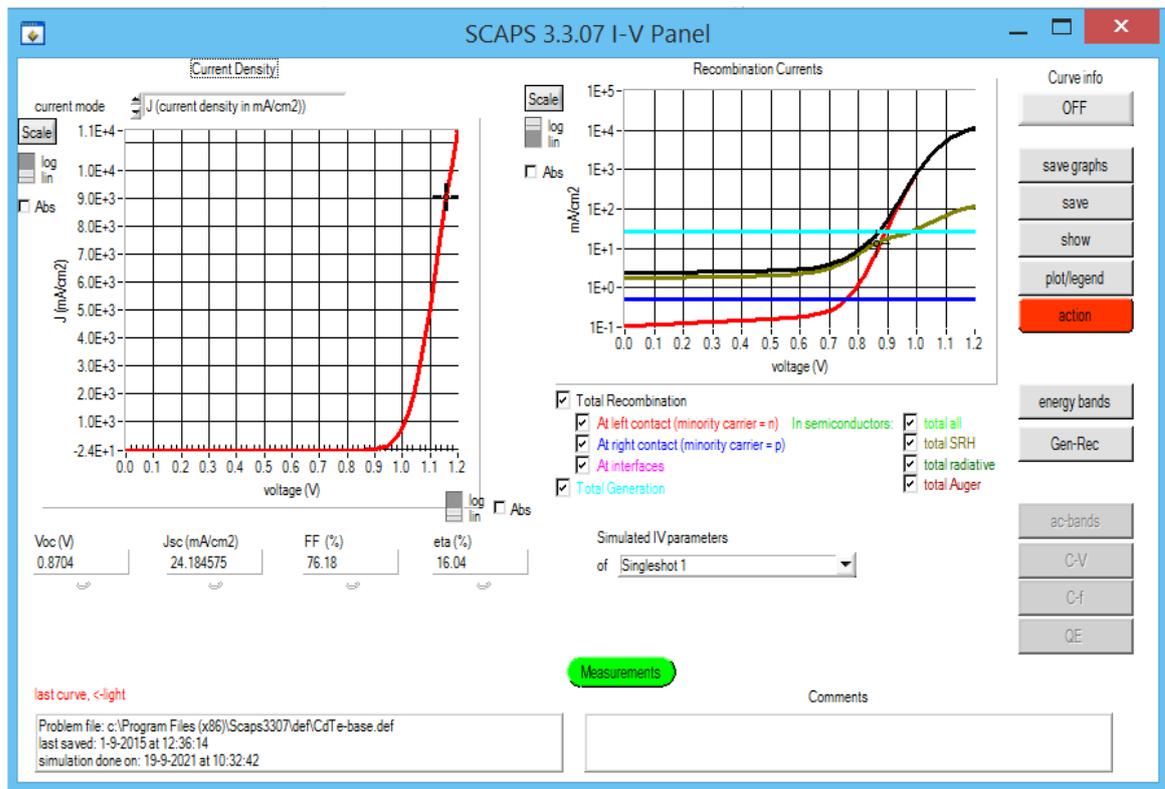


Figure II-3 : panneau des résultats de simulation de la courbe J-V de la cellule illuminée

Le graphique de gauche affiche toutes les simulations J-V. Le graphique de droite fournit des informations détaillées sur les courants de recombinaison dans la dernière simulation. Cela permet de voir le mécanisme de recombinaison principal dans la structure pour des tensions variables. Si la simulation est effectuée sous illumination, les paramètres de la cellule solaire sont calculés et affichés.[11]

II-3 Structure de la cellule à simuler

La structure p-i-n de la cellule solaire pérovskite proposée et générée par SCAPS est donnée sur la figure II-4, où une couche absorbante de pérovskite (PAL) est prise en sandwich entre un matériau de transport d'électrons supérieur (ETM) et un matériau de transport de trou inférieur (HTM).

La conception de la cellule considérée est basée sur le tri-iodure de méthylamine et de germanium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$) comme couche absorbante et C60 comme matériau de transport d'électrons. Ce dernier est sélectionné comme ETM approprié sur la base des résultats trouvés

dans la littérature [12] qui donne une efficacité de conversion de puissance élevée pour les cellules à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$.

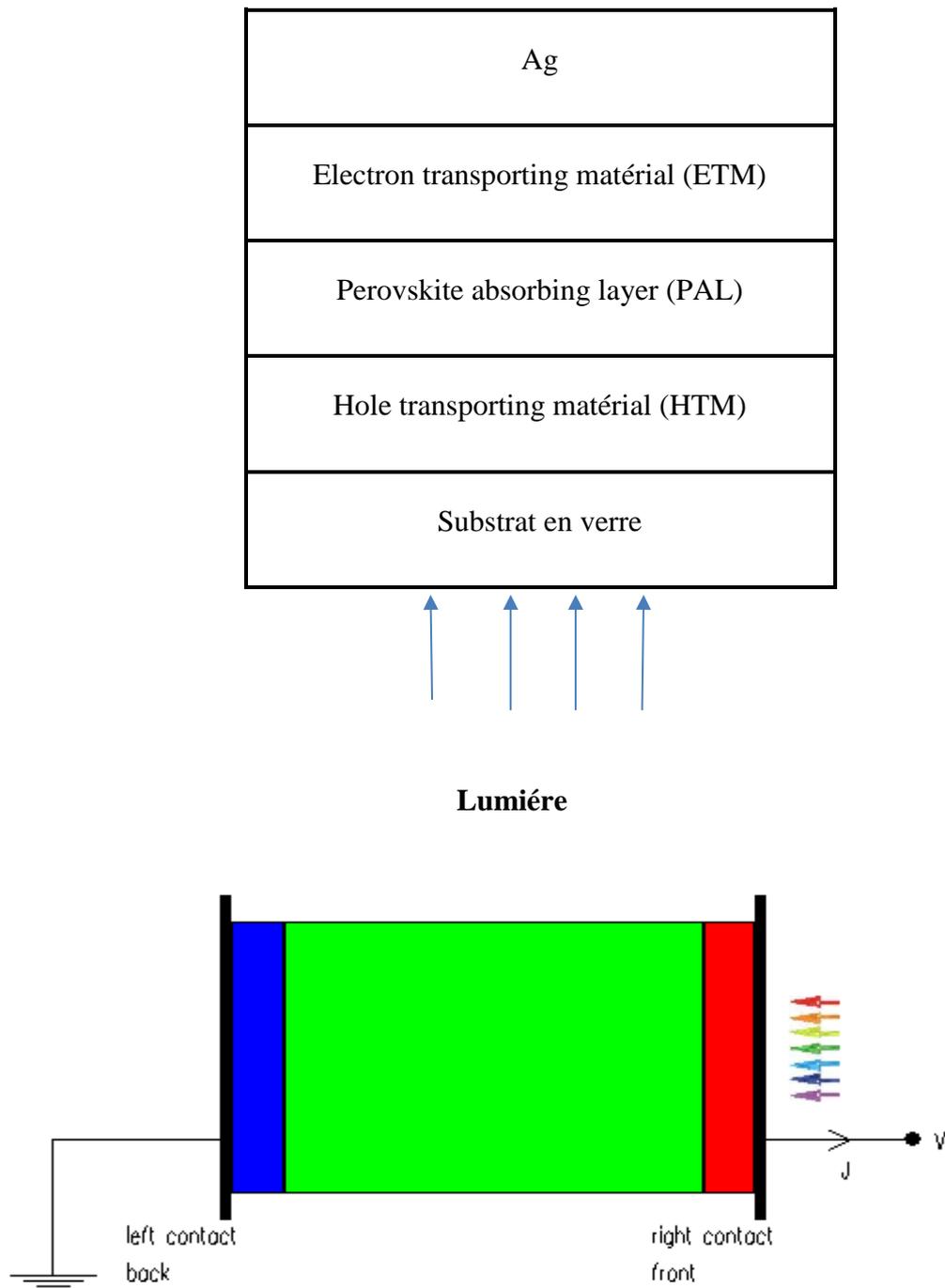


Figure II-4 : architecture de cellules solaires à pérovskite p-i-n generé par SCAPS

Différents matériaux de transport de trous, y compris des matériaux inorganiques, tels que CuSbS₂, CuSCN et NiO sont employés. À titre de comparaison, PEDOT:PSS est également appliqué en tant que matériau organique à la structure, afin de trouver un HTM approprié pour une efficacité et une stabilité élevées.

II-4 Paramètres et propriétés de la cellule à étudier

Les paramètres électriques des différents matériaux utilisés dans la simulation sont sélectionnés à partir de la littérature [13-14-15], et sont exposés dans le tableau II-1.

Tableau II-1 : propriétés des matériaux des différentes couches de la cellule.

Propriétés des différents matériaux	PEDOT :PSS	CuSCN	CuSbS ₂	NiO	MAGeI ₃	C60
E_g(eV)	1.6	3.4	1.58	3.8	1.9	1.7
α(eV)	3.4	1.9	4.2	1.46	3.98	3.9
N_c(cm⁻³)	10 ²²	22 10 ¹⁸	2 10 ¹⁸	2.8 10 ¹⁹	10 ¹⁶	8 10 ¹⁹
N_v(cm⁻³)	10 ²²	1.9 10 ¹⁹	1.9 10 ¹⁹	10 ¹⁹	10 ¹⁵	8 10 ¹⁹
ND(cm⁻³)	0	0	0	0	10 ⁹	2.6 10 ¹⁸
NA(cm⁻³)	10 ²²	10 ¹⁸	1.38 10 ¹⁸	10 ¹⁸	10 ⁹	0
ε_r	3	9	8.2	10.7	10	4.2

$\mu_n(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1})$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-4}$	49	12	16.2	$8 \cdot 10^{-2}$
$\mu_h(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1})$	$9.9 \cdot 10^{-5}$	$1 \cdot 10^{-2}$	49	2.8	10.1	$3.5 \cdot 10^{-3}$
Defect density	$2.5 \cdot 10^{15}$	10^{15}	10^{14}	10^{14}	10^{14}	$1 \cdot 10^{14}$

Le coefficient d'absorption de la pérovskite est tirée de l'expérimentation [16] alors que les coefficients d'absorption ETM et HTM sont générées par le logiciel SCAPS avec le préfacteur $A^\alpha = 10^5$. les coefficients d'absorption (α) sont calculées par l'équation suivante :

$$\alpha = A^\alpha(h\nu - E_g)$$

Où α est le coefficient d'absorption, E_g la bande interdite et $h\nu$ l'énergie des photons incidents. Notons que nos simulations sont réalisées sous le spectre solaire AM 1.5 à une intensité lumineuse de 100 mW/cm².

II.4.1 Alignement des bandes enegitiques

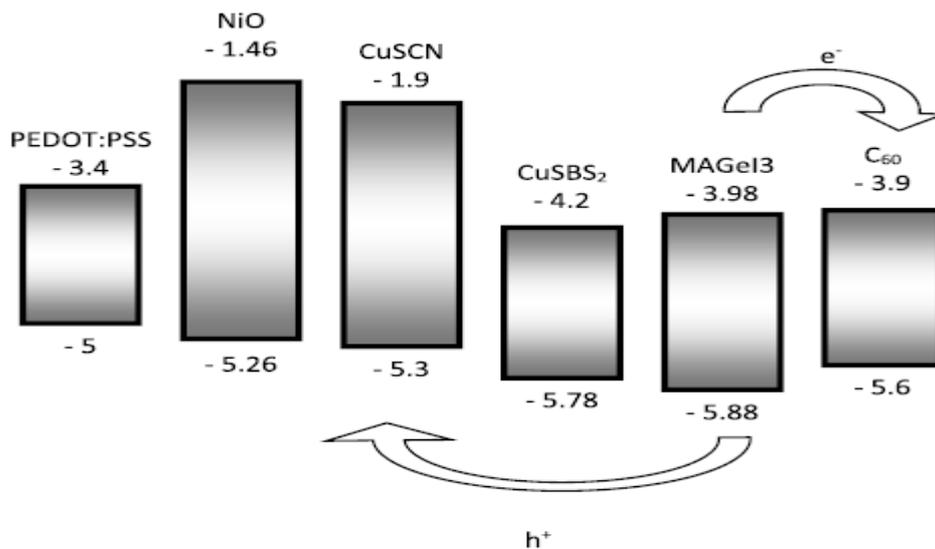


Figure II-5 : l'alignement des bandes d'énergie des divers matériaux

II-5 Résultats et discussion

II.5.1. Cellule de référence

On éclaire la cellule d'une seule face (face avant du côté HTL), et on calcule à chaque fois la caractéristique densité du courant-tension (J-V). A partir des caractéristiques J-V fournies par SCAPS-1D, on peut déterminer les valeurs des paramètres photovoltaïques 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 η (eta).

Le tableau ci-dessous regroupe les paramètres de la cellule de référence à simuler de type PEDOT:PSS/CH₃NH₃GeI₃/I₃.

Tableau II-2 :parametres de la cellule de réfférence a simuler de type PEDOT :PSS :MAGeI3

Couches HTMs	PEDOT :PSS	CH ₃ NH ₃ GeI ₃	C60
Eg(eV)	1 .6	1 .9	1 .7
κ(eV)	3 .4	3 .98	3 .9
Nc(cm⁻³)	10 ²²	10 ¹⁶	8 10 ¹⁹
Nv(cm⁻³)	10 ²²	10 ¹⁵	8 10 ¹⁹
ND(cm⁻³)	0	10 ⁹	2 .6 10 ¹⁸
NA(cm⁻³)	10 ²²	10 ⁹	0
ϵ_r	3	10	4 .2

$\mu_n(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1})$	$4.5 \cdot 10^{-4}$	16.2	$8 \cdot 10^{-2}$
$\mu_h(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{S}^{-1})$	$9.9 \cdot 10^{-5}$	10.1	$3.5 \cdot 10^{-3}$
Defect density	$2.5 \cdot 10^{15}$	10^{14}	$1 \cdot 10^{14}$

La caractéristique courant- tension (J-V) de cette cellule sous un éclairage par le spectre solaire AM 1.5 et une densité de puissance de $1000\text{W}/\text{m}^2$ est représentée dans la figure (II-6).

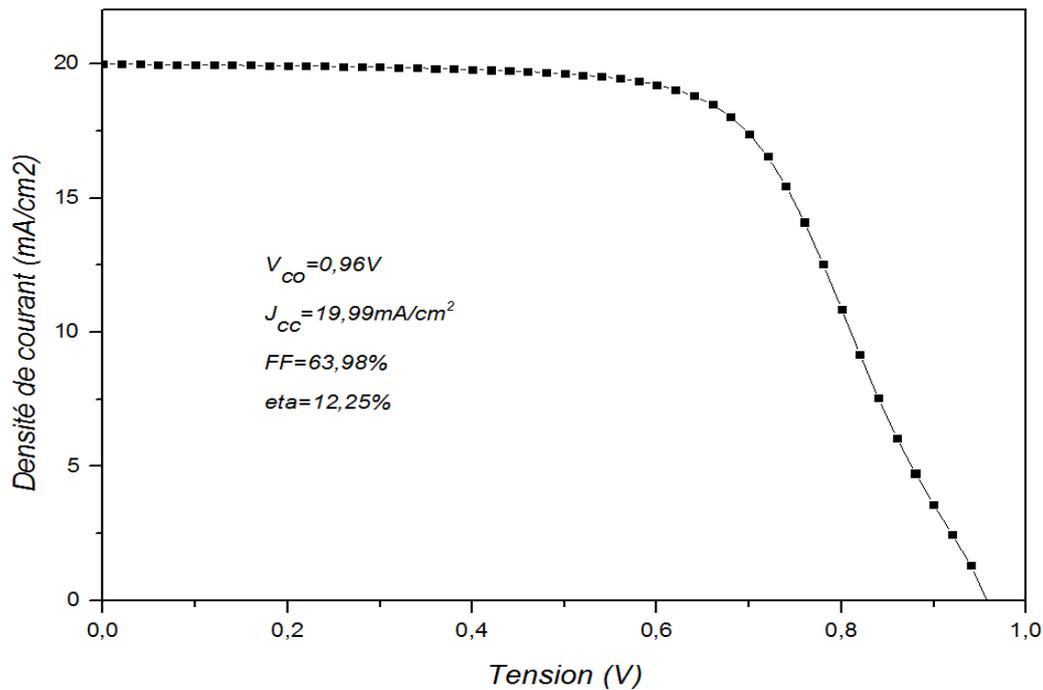


Figure II-6 : La caractéristique courant- tension (J-V)

Les paramètres de la cellule solaire de référence (J_{cc} , V_{co} , FF et η) que nous avons obtenus par simulation sont représentés sur la même figure. Ces paramètres sont en très bon accord avec ceux trouvés dans la référence .

A cet effet, nous allons essayer d'améliorer le rendement obtenu (12.25%) en optimisant deux paramètres technologiques qui sont l'épaisseur de l'absorbeur MAGeI_3 et le matériau de la couche de transport des trous HTM.

II.5.2. Effet des différentes couches HTM

Différentes structures p-i-n sont modélisées et examinées (Figure II-7) pour montrer l'impact des divers couches HTMs sur les performances des cellules solaires. La conception p-i-n, PEDOT:PSS/ MAGeI_3 / C_6O , avec des épaisseurs de couche de 50 nm, 400 nm et 50 nm pour HTM, PAL et ETM, respectivement, est étudié. Puis, le matériau PEDOT : PSS est remplacé par des matériaux inorganiques, CuSbS_2 , CuSCN et NiO comme HTM.

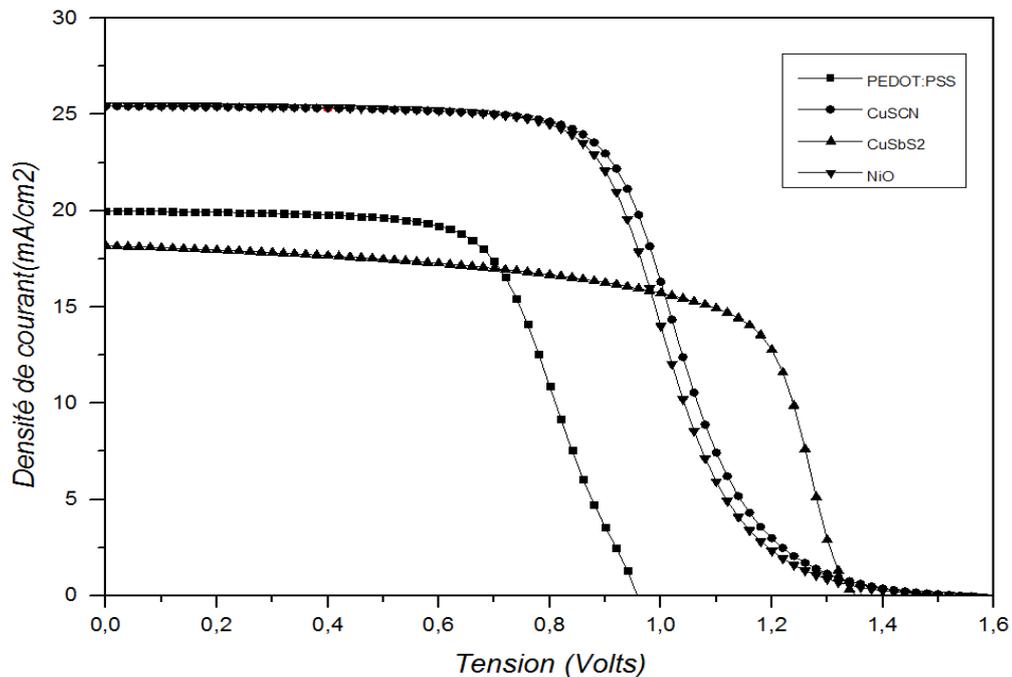


Figure II-7 : les caractéristiques J-V de divers structures introduisant trois HTM différents, PEDOT:PSS, CuSbS_2 , CuSCN et NiO .

Le tableau ci dessous montre les valeurs des paramètres photovoltaïques extraites pour chaque couche HTM à partir de ces caractéristiques.

Tableau II-2 :Les parametres photovoltaïques des diffirents couches HTMs

Différentes couches HTMs	Jsc (mA/cm²)	Vco (V)	FF (%)	PCE (%)
PEDOT : PSS	19.99	0.96	63.98	12.25
CuSCN	25.43	1.54	52.73	20.72
CuSbS2	18.18	1.35	67.06	16.47
NiO	25.48	1.54	51.33	20.23

Les paramètres photovoltaïques de quatre structures PSC différentes sont présentés dans le tableau 2. Comme on peut le voir, l'efficacité de conversion de puissance du CuSCN, CuSbS2, et du PSC à base de NiO est respectivement de 20.72 %, 16.47 % et 20,23 %, ce qui est supérieur à celui du PSC à base de PEDOT:PSS qui est de 12.25. Il est évident que les performances des PSC sont améliorées par l'insertion de matériaux inorganiques comme HTM en raison de leur grande mobilité et de l'alignement adéquat des bandes d'énergie entre les HTM et le matériau pérovskite.

A cet effet, nous allons essayer d'améliorer le rendement obtenu (12.25%) en optimisant deux paramètres technologiques qui sont l'épaisseur de l'absorbeur MAGEI3 et le matériau de la couche de transport des trous HTM.

I.7.4 Effet de l'épaisseur de l'absorbeur pour différentes couches HTMs sur les paramètres photovoltaïques.

Pour améliorer les performances des cellules solaires Ge-pérovskite avec plus de reproductibilité et une stabilité élevée, un processus d'optimisation est appliqué à quatre conceptions différentes de ces cellules.

Dans les résultats affichés sur la figure II-8, les paramètres photovoltaïques (J_{cc} , V_{co} , FF et PCE (eta)) sont tracés en fonction de l'épaisseur de la couche d'absorbeur afin de trouver les épaisseurs d'absorbeur optimales des quatre conceptions de cellules à pérovskite.

Il est à noter que les épaisseurs optimisées des ETM et HTM sont identiques et égales à 50 nm d'après la référence ;

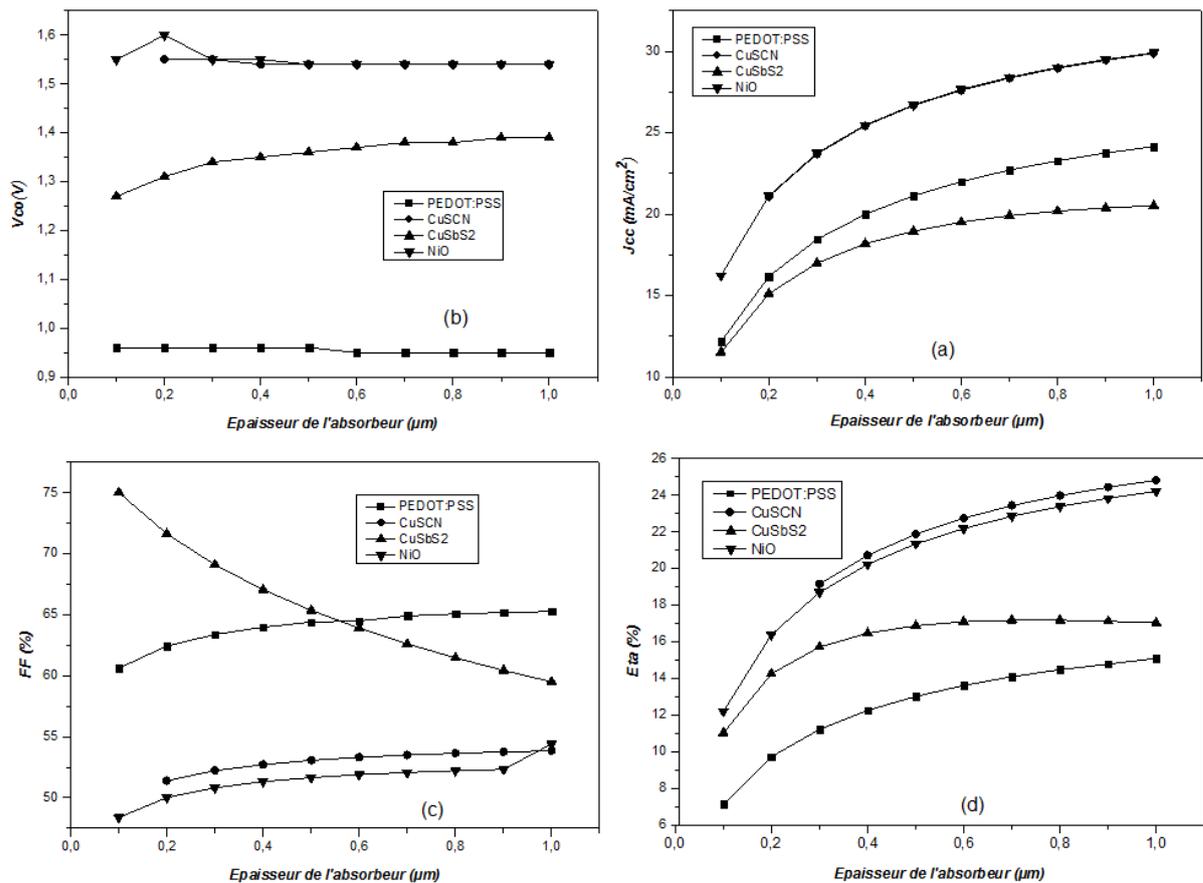


Figure II-8 : variation des paramètres électriques en fonction de l' épaisseur de peroveskite CH3NH3GeI3 avec déffirents HTMs

Il est remarquable que le J_{cc} augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur dans les quatre cas, c.à.d pour les quatre HTMs en raison que, plus l'énergie absorbée dans cette couche, plus de paires électron-trou sont créés comme illustré sur la figure II-8 (a).

Dans la figure II-8 (b), le V_{oc} est approximativement constant pour les quatre cas de structures.

Les PSC (perovskite solar cell) à base de CuSCN, les PSC à base de CuSbS₂ et les PSC à base de NiO présentent un meilleur comportement en termes de J_{sc} par rapport aux PSC à base de PEDOT:PSS. De plus, le facteur de forme se dégrade légèrement à mesure que l'épaisseur de l'absorbeur augmente pour le cas de la couche de transport de trou NiO en raison de la résistance série élevée, alors que pour les trois autres cas, FF demeure presque constant figure II-8 (c). De plus, le rendement en puissance η (PCE) augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur dans différents cas de PSC à base de HTM, comme le montre la figure II-8 d.

Ces figures mettent en évidence que les cellules à pérovskite à base de CuSCN, à base de CuSbS₂ et à base de NiO présentent des efficacités PCE maximales par rapport à la PSC à base de PEDOT:PSS. Cela est dû à un alignement adéquat des bandes d'énergie entre les bandes de valence du CuSCN, CuSbS₂ et NiO avec le matériau pérovskite

Tableau II-3 :parametres photovoltaïques optimisés pour les diferents HTMs

Parametres de la cellule optimisée	Different HTMs			
	PEDOT :PSS	CuSCN	CuSbS ₂	NiO
Epaisseur de l' ETM (nm)	50	50	50	50
Epaisseur de l' HTM (nm)	50	50	50	50

Epaisseur de PAL (nm)	700	900	900	500
J_{cc} (mA/cm²)	22 .71	29 .47	20 .39	26 .72
V_{co} (V)	0 .95	1 .54	1 .39	1 .54
FF (%)	64 .9	53 .77	60 .44	51 .66
PEC (%)	14 .09	24 .44	17 .12	21 .34

Les paramètres photovoltaïques optimisés de diverses conceptions de la cellule sont présentés dans le tableau II-3. Comme on peut le voir dans le tableau, la cellule solaire à pérovskite formée par CuSbS₂ présente le PCE le plus élevé atteignant 23,58 %. Alors qu'en insérant CuSCN, NiO et PEDOT:PSS comme HTM, leurs valeurs PCE sont respectivement de 21,93 %, 21,04 % et 13,5 %. Par conséquent, CuSbS₂ semble un matériau plus approprié pour les cellules solaires à pérovskite qui facilite l'extraction et le transport des trous de la pérovskite au contact arrière.

Les caractéristiques J-V de la cellule solaire Ge-pérovskite basées sur quatre HTMs différents sont données à la Figure II-9. Il est clair que la meilleure performance est illustrée dans le cas d'une cellule solaire à pérovskite formée de CuSCN, NiO et CuSbS₂ en tant que HTM par rapport à celle de PEDOT : PSS. Cela peut s'expliquer par l'introduction du matériau HTL approprié qui pourrait potentiellement améliorer la stabilité du PSC et faciliter le transfert des trous à partir du matériau pérovskite.

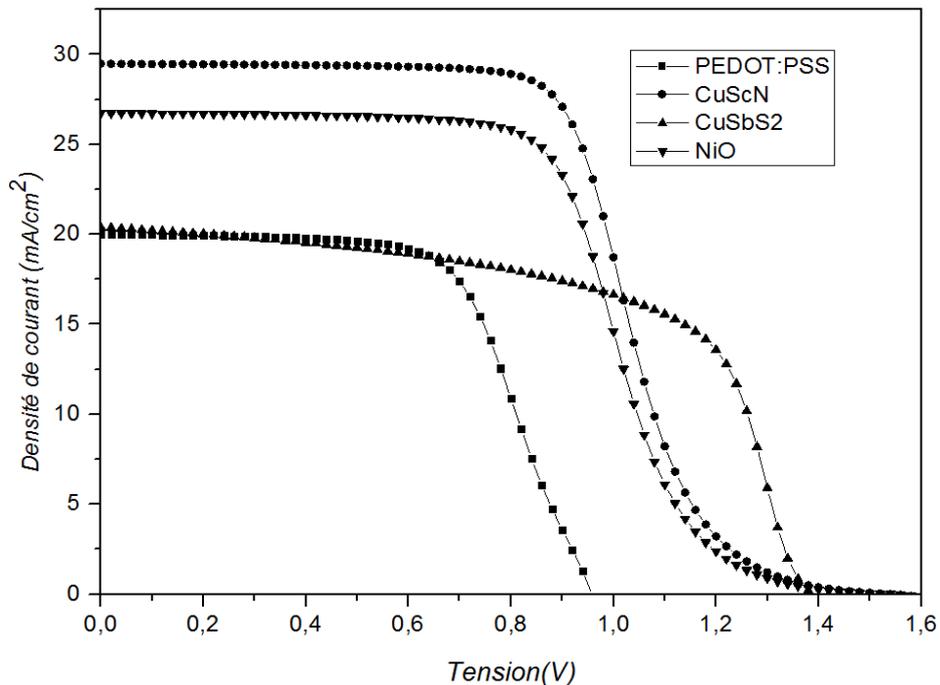


Figure II-9- : Caractéristiques J-V optimisées de la cellule à base de CH₃NH₃GeI₃-PSC avec différents HTMs

II-6 Conclusion

Dans ce chapitre, un modèle de la cellule avec la structure de Verre/HTM/CH₃NH₃GeI₃/ETM /Ag a été créé et simulé à l'aide du logiciel SCAPS-1D. divers matériaux de transport de trous tels que PEDOT : PSS, CuSCN, NiO et CuSbS₂ ont été insérés dans la cellule solaire à base de la pérovskite CH₃NH₃GeI₃. Les résultats de la simulation montrent que les performances de la cellule étaient significativement améliorés en appliquant les matériaux inorganiques CuSCN, NiO et CuSbS₂ comme HTM par rapport à celade PEDOT:PSS. Par conséquent, un processus d'optimisation a été appliqué, et l'efficacité de conversion de puissance atteint sa valeur maximale de 24,44 % utilisant PSC formé par CuSCN.

Conclusion générale

Parmi toutes les technologies photovoltaïques solaires de troisième génération qui ont fait l'objet de recherches au cours des deux dernières décennies, la seule technologie qui a marqué de manière significative l'efficacité de conversion d'énergie est constituée par les cellules solaires basées sur des matériaux structurés à base de pérovskite, par exemple les matériaux hybrides organiques-inorganiques tel que $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$.

Pour cela, Nous avons d'abord mené une étude théorique sur le principe de fonctionnement des cellule solaires, leurs caractéristiques électriques, ensuite les paramètres d'une cellule photovoltaïque et les différentes filières et enfin la cellule PV à base du matériau émergent : la pérovskite.

Dans la deuxième partie nous avons fait une optimisation par simulation, d'une cellule solaire à base de pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, à l'aide du logiciel SCAPS. Le modèle de la cellule avec la structure $\text{HTM}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3/\text{ETM}/\text{Ag}$ a été créé et simulé ensuite nous avons optimisé l'épaisseur de l'absorbeur pour divers matériaux de transport de trous tels que PEDOT : PSS, CuSCN, NiO et CuSbS₂. Les résultats de la simulation montrent que les performances de la cellule étaient significativement améliorées en appliquant les matériaux inorganiques CuSCN, NiO et CuSbS₂ comme HTM par rapport à celles de PEDOT:PSS. Nous avons conclu que l'efficacité de conversion de puissance atteint sa valeur maximale de 24,44 % utilisant les cellules à pérovskite formés par la couche de transport de trous CuSCN.

References bibliographiques

- [1] B. MHENNA et G. FERHAT, « Alimentation d'un moteur à courant continu par une source photovoltaïque », mémoire de master académique. Université Mouloud Mammeri de TIZI OUZOU, 2018.
- [2] B.HICHAM, « Etude des différents montages et différents branchements des panneaux solaires », Mémoire de Master en physique Université L'ARBI BEN MHIDI (OUM EL BOUAGHI) ,2014.
- [3] B.SALAHEDDINE, « Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires », mémoire magister .Université FERHAT ABBAS – SETIF, 2011.
- [4] M. ABDELKADER et CH. AYMENE, « Etude et simulation d'un système de production d'énergie photovoltaïque en site isolé », mémoire de master. Université BADJI MOKHTAR ANNABA, 2018.
- [5] K. TAKI EDDINE, « Modélisation et commande d'un système photovoltaïque connecté au réseau électrique », mémoire de master. Université MOHAMED BOUDIAF M'SILA, 2016.
- [6] CH. HOUDA, « Etude d'une cellule solaire à base de structure PIN », mémoire magister Université HADJ LAKHDAR BATNA, 2015.
- [7] B. OUIZA, « Etude et Simulation des paramètres électriques d'une cellule solaire photovoltaïque à base de Silicium » Mémoire master. Université MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU ,2017.
- [8] **H.Warda**, « Etude de l'utilisation du ZnO comme contact de type n dans des dispositifs photovoltaïques à base de pérovskite hybride », These de doctorat. Université PARIS-SACLAY,2017 .
- [11] SCAPS Manuel ,18 MAI 2020
- [12] A. Hima, N. Lakhdar, A. Saadoune ,« Effect of electron transporting layer on power conversion efficiency of perovskite-based solar cell » comparative study, J. Nano Electron. Phys, 11 (2019)
- [13] Ahmed-Ali Kanoun, Mohammed Benali Kanoun, Abdelkrim E. Merad, Souraya Goumri-Said, Toward development of high-performance perovskite solar cells based on CH₃NH₃GeI₃ using computational approach, Sol., 2019
- [14] K. Tan, et al. Controllable design of solid-state perovskite solar cells by SCAPS device simulation, Solid State Electron,2016
- [15] Z. Zhu, Y. Bai, X. Liu, C.C. Chueh, S. Yang, A.K.Y. Jen, Enhanced efficiency and stability of inverted perovskite solar cells using highly crystalline SnO₂ nanocrystals as the robust electron-transporting layer, Adv. Mater.,2016
- [16] P.-P. Sun, Q.-S. Li, L.-N. Yang, Z.-S. Li, Theoretical insights into a potential lead-free hybrid perovskite: substituting Pb²⁺ with Ge²⁺,2016.

II.8 Résumé

Dans ce présent travail, nous rapportons une modélisation numérique de la pérovskite à base de tri-iodure de méthylammonium germanium cellules solaires à l'aide du programme de simulation 1D-SCAPS. Pour améliorer les performances de l'appareil, l'amélioration de la structure du dispositif et les matériaux de transport d'électrons et de transport de trous sont le moyen efficace. En conséquence, ce L'étude est principalement axée sur l'exploration de matériaux de transport de trous (HTM) potentiellement très stables. Divers HTM ont été suggérés, y compris des matériaux organiques et inorganiques, et étudiés pour améliorer la reproductibilité et stabilité des cellules solaires à pérovskite à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$. Parmi les matériaux proposés, le sulfure de cuivre et d'antimoine (CuSbS_2) est le HTM le plus approprié. Par conséquent, en utilisant CuSbS_2 comme HTM dans une cellule solaire à pérovskite, la conversion de puissance 'efficacité est considérablement améliorée et sa valeur atteint 23,58 %. Par conséquent, les résultats obtenus font CuSbS_2 un excellent candidat pour améliorer les performances des cellules solaires Ge-pérovskite.

Abstract

In this present work, we report a numerical modeling of perovskite-based methylammonium germanium tri-iodide solar cells using the 1D-SCAPS simulation program. To improve the performance of the apparatus, improving the structure of the device and the electron transport and hole transport materials is the effective way. As a result, this study is primarily focused on the exploration of potentially very stable hole transport materials (HTMs). Various HTMs have been suggested, including organic and inorganic materials, and studied to improve the reproducibility and stability of perovskite solar cells based on $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$. Among the proposed materials, copper antimony sulphide (CuSbS_2) is the most suitable HTM. Therefore, by using CuSbS_2 as HTM in perovskite solar cell, the power conversion efficiency is greatly improved and its value reaches 23.58%. Therefore, the results obtained make CuSbS_2 an excellent candidate for improving the performance of Ge-perovskite solar cells.

ملخص

في هذا العمل الحالي ، أبلغنا عن نمذجة عددية للخلايا الشمسية ثلاثية يوديد الميثيل الأمونيوم الجرمانيوم القائمة على لتحسين أداء الجهاز ، فإن تحسين بنية الجهاز ونقل الإلكترون ومواد D-SCAPS البيروفسكايت باستخدام برنامج محاكاة 1 نقل الفتحات هي الطريقة الفعالة. نتيجة لذلك ، تركّز هذه الدراسة بشكل أساسي على استكشاف مواد نقل الحفرة التي يحتمل ، بما في ذلك المواد العضوية وغير العضوية ، ودراستها HTMs تم اقتراح العديد من (HTMs) أن تكون مستقرة للغاية من بين المواد المقترحة ، يعتبر $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$ لتحسين استنساخ واستقرار خلايا بيروفسكايت الشمسية على أساس في خلية HTM كـ CuSbS_2 لذلك ، باستخدام HTM هو الأكثر ملاءمة (CuSbS_2) كبريتيد الأنتيمون النحاسي بيروفسكايت الشمسية ، تم تحسين كفاءة تحويل الطاقة بشكل كبير ووصلت قيمتها إلى 23.58%. لذلك ، فإن النتائج التي تم الشمسية Ge-perovskite مرشحاً ممتازاً لتحسين أداء خلايا CuSbS_2 الحصول عليها تجعل