

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Ferhat Abbas- Sétif 1

Institut : Optique et Mécanique de Précision

Département : Optique et mécanique de précision

Domaine : Sciences et Technologies

Filière : Optique et Mécanique de Précision

Spécialité : optiques et photoniques appliqués

Mémoire de Master

Cellules solaires à base pérovskite :

**Une simulation numérique et une analyse
avec SCAPS-1D**

Etudié par : OUBBICHE Khadidja.

TAFROUNT Nada.

Dirigé Par : GUECHI Abla.

Devant le jury :

Dr.LOUAHDI (Président)

Dr.MADOUI Karima (Examineur)

..... (Examineur)

Soutenue le : 04/07/2023

Sommaire

Résumé.....	iii
Introduction générale	1
Chapitre I : Généralités sur le photovoltaïque et les cellules solaires	4
I.1. Introduction :	5
I.2. L'énergie solaire :	5
I.3. Cellules solaire photovoltaïques :	5
I.3.1. Définition :	5
I.3.2. Effet photovoltaïque :	5
I.3.3. Principe de la conversion photovoltaïque :	6
I.3.4. Paramètres électriques et énergétiques d'une cellule solaire :	8
I.3.5. Les technologies photovoltaïques :	12
I.6. Matériaux pérovskite :	14
I.6.1. Propriétés structurales des pérovskites :	14
I.6.2. Propriétés optoélectroniques :	15
I.7. Conclusion :	17
Chapitre II : Présentation du Logiciel SCAPS-1D	18
II.1. Introduction :	19
II.2. Définition du logiciel SCAPS-1D :	19
II.3. Utilisation du logiciel SCAPS :	20
II.3.1. Lancer SCAPS :	21
II.3.2. Définir le problème :	21
II.3.3. Définir le point de fonctionnement :	23
II.3.4. Sélection des mesures à simuler :	24
II.3.5. Lancer le calcul :	25

II.3.6. Afficher les courbes simulées :	25
II.3.7. Courbes I-V :	26
II.4. Edition de la structure d'une cellule solaire :	27
II.4.1. Les propriétés des couches :	28
II.4.2. Contacts de la cellule solaire :	31
II.5. Théorie de fonctionnement :	31
II.6. Equations de base :	32
II.7. Conclusion :	33
Chapitre III : Résultats et interprétations	35
III.1. Introduction :	36
III.2. Présentation de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$:	36
III.2.1. Architecture de dispositif et simulation numérique :	36
III.2.2. Paramètres et propriétés pour toutes les couches utilisées dans le modèle de dispositif proposé :	37
III.2.3. Vérification des résultats :	38
III.3. Résultats et discussions :	38
III.3.1. Étude des performances de la cellule solaire à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$: ..	38
III.4. Influence de la forme d'un gradient de gap (E_g) et la densité de dopage d'accepteur NA de la couche absorbante sur les performances de la cellule solaire :	55
III.4.1. La forme de trois couches absorbantes de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$:	55
III.4.2. La forme de cinq couches absorbantes de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$:	58
Conclusion générale.....	66

Liste des figures

Chapitre I

Figure I.1. Schéma de principe de la conversion photoélectrique [2].....	6
Figure I.2. Formation des bandes d'énergie et mécanisme d'absorption d'un photon [4]	6
Figure I.3. La jonction PN de la cellule photovoltaïque [5].....	7
Figure I.4. Diagramme de bande et structure d'une cellule photovoltaïque [6]	8
Figure I.5. Schéma électrique d'une cellule photovoltaïque [7].	8
Figure I.6. Caractéristique courant-tension et grandeurs physiques associées [8].....	10
Figure I.7. Réponse spectrale d'une cellule PV [11]	12
Figure I.8. Réponse spectrale d'une cellule PV [11]	14
Figure I.9. Structure cristalline du $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ montrant la conformation tétragone de la maille de la pérovskite [13].....	15
Figure I.10. Courbe d'absorption des matériaux [17].....	16

Chapitre II

Figure II.1. Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS.....	19
Figure II.1: Raccourci de logiciel SCAPS-1D.....	20
Figure II.2: Le bouton SET PROBLEM.....	21
Figure II.3: le dossier ($\times 86$) / scaps3309/def.....	22
Figure II.4. Le point de fonctionnement.....	22
Figure II.5: Choix de l'illumination.....	23
Figure II.7: la partie « Action ».....	23
Figure II.8: le bouton « Calculate : single shot ».....	24
Figure II.9: Panneau des bandes d'énergie.....	25
Figure II.1: Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.....	26
Figure II.11: Interface de définition des appareils.....	27
Figure II.12: Panneaux de définition des propriétés des couches.....	28
Figure II.13 : les types des défauts.....	29
Figure II.14: Définition des types de recombinaison présents.....	29
Figure II.15: Panneau des propriétés des contacts.....	30
Figure II.16: Stratégie de fonctionnement de SCAPS.....	31

Chapitre III

Figure III.1: La structure typique des cellules solaires étudiée.....	36
Figure III.2: Structure de cellule solaire étudiée générée par SCAPS-1D.....	37

Figures III.3. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la variation d'énergie de gap pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al	39
Figures III.4. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la variation de la concentration d'accepteur N_A pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al ...	42
Figures III.5. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la concentration donneur N_D pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al	44
Figures III.6. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la concentration d'accepteur N_A pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al	46
Figure III.7. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la concentration donneur N_D pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al	49
Figures III.8. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de l'énergie de gap pour les couches : a) $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, b) TiO_2 et c) ZnO: Al	51
Figure III.9 Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la variation de la température.....	53
Figure III.10. Les courbes des paramètres de la cellule solaire en fonction de la variation de la température.....	54
Figure III.11. Structure de la cellule solaire de trois couches absorbantes générée par SCAPS-1	57
Figure III.12. Structure de la cellule solaire de cinq couches absorbantes générées par SCAPS-1D.....	59
Figure III.13. Effet de variation d'un gradient de densité de dopage N_A de cinq couches d'épaisseur de $0.7\mu\text{m}$ sur le courant de circuit ouvert, la densité de tension de court-circuit, le rendement $\eta\%$, le facteur de forme $\text{FF}\%$	60
Figure III.14. Effet de variation d'un gradient inversé de la densité de dopage N_A de cinq couches d'épaisseur de $0.7\mu\text{m}$ sur le courant de circuit ouvert, la densité de tension de court-circuit, le rendement $\eta\%$, le facteur de forme $\text{FF}\%$	62
Figure III.15. Effet de variation d'un gradient normal de la densité de dopage N_A de cinq couches d'épaisseur de $0.14\mu\text{m}$ sur le courant de circuit ouvert, la densité de tension de court-circuit, le rendement $\eta\%$, le facteur de forme $\text{FF}\%$	63

Liste des Tableaux

Tableau III.1. Résume tous les paramètres d'entrée et les propriétés des différentes couches (ZnO:Al, ETL, absorbeur CH ₃ NH ₃ SnI ₃).....	36
Tableau III.2. Les résultats obtenus après la simulation par SCAPS-1D.....	37
Tableau III.3. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de l'énergie de gap.....	38
Tableau III.4. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de la concentration d'accepteur N _A de chaque couche.....	40
Tableau III.5. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de la concentration de donneur ND.....	43
Tableau III.6. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de la concentration d'accepteur NA.....	45
Tableau III.7. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de la concentration de donneur ND0.....	47
Tableau III.8. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η on fonction de la variation de l'énergie du gap.....	50
Tableau III.9. Les paramètres photovoltaïques simulés, FF et η en fonction de la variation de la température.....	54
Tableau III.10. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de gap normal.....	55
Tableau III.11. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de gap inverse.....	55
Tableau III.12. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de NA normal.....	56
Tableau III.13. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de NA inversé.....	56
Tableau III.14. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de gap normal d'une épaisseur 0.7 μ m.....	57
Tableau III.15. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de gap inversé d'une épaisseur 0.7 μ m.....	58
Tableau III.16. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire CH ₃ NH ₃ SnI ₃ avec une forme d'un gradient de NA normal de cinq couches d'une épaisseur 0.7 μ m.....	58

Tableau III.17. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ avec une forme d'un gradient de NA inversé de cinq couches d'une épaisseur $0.7\mu\text{m}$	59
Tableau III.18. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ avec une forme d'un gradient de gap normal d'une épaisseur $0.14\mu\text{m}$	60
Tableau III.19. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ avec une forme d'un gradient de gap inversé d'une épaisseur $0.14\mu\text{m}$	61
Tableau III.20. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ avec une forme d'un gradient de NA normal d'une épaisseur $0.14\mu\text{m}$	61
Tableau III.21. Paramètres fonctionnels de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ avec une forme d'un gradient de NA normal d'une épaisseur $0.14\mu\text{m}$	62

Résumé

Les cellules solaires à base pérovskite gardent un très grand intérêt dans le monde de l'énergie solaire, avec une efficacité en constante augmentation chaque année. Dans cette étude, nous avons conçu une cellule solaire pérovskite HTM à base d'étain (Hole Transport Material) avec la nouvelle architecture Au/CH₃NH₃SnI₃/TiO₂/ZnO : Al. Une simulation a été réalisée à l'aide de logiciel SCAPS-1D pour étudier le comportement des cellules solaires. Nous avons étudié l'effet de band gap, la densité de concentration et la température de fonctionnement du modèle.

Mots clés : Cellules Solaires, Pérovskite, SCAPS, CH₃NH₃SnI₃.

Abstract

Perovskite-based solar cells continue to be of great interest in the world of solar energy, with efficiency increasing steadily every year. In this study, we designed a perovskite solar cell HTM based on tin (Hole Transport Material) with the new Au/CH₃NH₃SnI₃/TiO₂/ZnO:Al architecture. A simulation was carried out using SCAPS-1D software. To study the behavior of solar cells. We studied the band gap effect, the concentration density and the operating temperature of the model.

Keywords: Solar cells, perovskite, SCAPS, CH₃NH₃SnI₃.

Introduction générale

Introduction générale

La majeure partie de l'énergie actuellement consommée provient de l'utilisation de combustibles fossiles tels que le pétrole, le charbon, le gaz naturel et l'énergie nucléaire. Ces ressources se raréfient alors que les besoins énergétiques mondiaux ne cessent d'augmenter. Si la consommation n'est pas fondamentalement modifiée, on estime que les réserves mondiales seront épuisées vers 2030. Si des efforts sont faits sur la production et la consommation, ce sera vers 2100 au plus, alors les scientifiques cherchent des alternatives et trouvent le soleil.

L'énergie peut être exploitée à des fins industrielles et biophysiques, par des moyens physiques ou chimiques. De plus, une source d'énergie peut être classée comme "renouvelable" si ses réserves ne sont pas épuisées de manière significative pendant sa période d'utilisation, ou "durable" lorsqu'elle est considérée dans le contexte de l'impact écologique.

Le soleil est une source d'énergie quasi illimitée et à l'origine d'une multitude d'effets biologiques intervenants directement ou indirectement dans la vie végétale et animale : il apporte de la chaleur, facilite la photosynthèse, voit, régule les rythmes biologiques, etc.

L'énergie solaire est une source d'énergie renouvelable qui provient du rayonnement du soleil. Elle est considérée comme propre et durable car elle ne produit pas de gaz à effet de serre ni de polluants nocifs lors de sa production. L'utilisation de l'énergie solaire contribue à réduire la dépendance aux combustibles fossiles, tout en offrant de nombreux avantages environnementaux. Il existe plusieurs types de systèmes pour capturer et utiliser l'énergie solaire, les deux principaux types sont les systèmes photovoltaïques et les systèmes thermiques.

Parmi les différentes cellules photovoltaïques nous avons choisi la pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$), car il a la capacité d'absorber un large spectre de lumière, y compris des photons à haute énergie. Cela signifie qu'ils peuvent fonctionner efficacement même dans des conditions de faible luminosité ou de lumière dispersée

La conception et la simulation de ce type de cellule solaire « $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ » faits actuellement l'objet d'une attention croissante, en effet, l'utilisation d'outils de simulation joue un rôle important dans l'évaluation et l'optimisation des équipements électroniques et techniques. Grâce à ces méthodes, nous pouvons réduire le temps et les coûts.

Le but principal de ce mémoire est d'explorer les différentes propriétés de la cellule pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, pour améliorer les performances de cette cellule
La rédaction de notre mémoire se compose introduction et trois chapitres :

Introduction générale

- ✓ Dans le premier chapitre, nous allons parler en général de l'énergie solaire, des cellules photovoltaïques et leur principe de fonctionnement et nous allons également évoquer de composer Pérovskite, et nous décrirons les propriétés optiques et électriques de ces matériaux.
- ✓ Dans le deuxième chapitre, nous présenterons le logiciel de simulation SCAPS-1D et nous allons expliquer étape par étape comment nous pouvons travailler avec ce logiciel.
- ✓ Le troisième chapitre c'est la partie de notre résultats de simulation des performances photovoltaïques de la cellule solaire de structure $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3/\text{TiO}_2/\text{ZnO} : \text{Al}$.
- ✓ Enfin, nous clôturerons le travail par une conclusion générale résumant l'ensemble des résultats obtenus.