

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 : Optique et Photonique Appliquée

Mémoire de Master

**Etude par Simulation numérique l'effet de l'épaisseur
de la couche absorbante et de la densité des défauts sur
les performances des cellules solaires à base de
matériaux PEROVSKITE hybride par SCAPS**

Étudié par : Lattali Rayenne

Dirigé Par : Dr .Madoui Karima

Devant le jury :

(Président) : Dr. GUESSOUM ASSIA

(Examineur) : Dr. GAHMOUSSE ABDELAZIZ

Soutenue le : 04/07/2023

Liste des tableaux

Tableau n° 1: Les différentes molécules correspondantes aux différentes familles de pérovskite[12].....	15
Tableau n° 2: Paramètres des matériaux de la cellule solaire simulée	29
Tableau n° 3: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de la variation de l'épaisseur de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	31
Tableau n° 4: Variation des paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de TiO_2	32
Tableau n° 5: Représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation de l'épaisseur de ZnO:Al	33
Tableau n° 7: représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation du coefficient d'absorption (α) de la couche absorbante	35
Tableau n° 8: représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation de la fonction de travail (contact arrière)	36
Tableau n° 9: représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation de la résistance shunt (R_{sh})	38
Tableau n° 10: représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation de la résistance série (R_s)	39
Tableau n° 11: représente les paramètres photovoltaïques simulés en fonction de la variation de la densité de défauts de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	40
Tableau n° 12: représente les paramètres photovoltaïques de la variation de distribution énergétique de la densité de défauts de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	42
Tableau n° 13: représente les paramètres photovoltaïques de la variation du type de la densité de défauts de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	42
Tableau n° 14: Paramètres photovoltaïques de la cellule de référence et optimisée	43

Liste des figures

Figure 1:Structure basique d'une cellule solaire. [4].....	4
Figure 2:Caractéristiques d'une jonction PN polarisée sous différents éclairagements (E) [5].....	5
Figure 3:Structure (gauche) et diagramme de bande (droite) d'une cellule photovoltaïque.....	6
Figure 4:Caractéristique courant tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque dans le noir et sous éclairement. [9].....	9
Figure 5:Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque. [9].....	10
Figure 6:Rendements de conversion certifiés des meilleures cellules solaires des laboratoires de recherche dans le monde depuis 1976 pour diverses technologies photovoltaïques .Rendements publiés par le Laboratoire National de l'Énergie Renouvelable (NREL). [1].....	12
Figure 7:La structure cristalline de la forme ABX ₃ [13].....	15
Figure 8:Schéma des cellules solaires pérovskites avec a) planaire, b) mésoporeuse, et c) architecture de dispositif inversé[15]	16
Figure 9:Mécanisme opérationnel d'une PSC typique[3]	17
Figure 10:Processus de transfert de charge / recombinaison dans les PSCs[3].....	18
Figure 11:Processus de transport de charge dans les PSCs (a) structure méso-poreuse (b) structure planaire[3].....	18
Figure 12:Méthode de dépôt par évaporation en une étape (coévaporation)[16].....	19
Figure 13:Méthode de dépôt par évaporation en deux étapes (solution-évaporation)[16]	20
Figure 14:Coefficients d'absorption de quelques pérovskites hybrides[17].....	22
Figure 15: Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS.....	25
Figure 16:Interface de définition des appareils.	26
Figure 17:architecture de la cellule solaire pérovskite étudié	28
Figure 18:Structure de la cellule solaire pérovskite HTM à base d'étain étudiée générée par SCAPS-1D	28
Figure 19:Représente la fenêtre de propriétés de la couche ajoutée.....	29
Figure 20:représente la vérification des résultats obtenus par l'article.....	30
Figure 21:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (eta)) en fonction de la variation de l'épaisseur de $CH_3NH_3SnI_3$	31
Figure 22:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (eta)) en fonction de l'épaisseur de TiO_2	32
Figure 23:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (eta)) en fonction de la variation de l'épaisseur $ZnO:Al$	33
Figure 24:Les paramètres optimaux de la cellule	34

Figure 25:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) en fonction de la variation du coefficient d'absorption. ($\alpha = \alpha$).....	35
Figure 26:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) en fonction de la variation de la fonction de travail(WF) (contact arrière) du métal Au.....	37
Figure 27:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) en fonction de la variation de la résistance shunt (R_{sh}).....	38
Figure 28:Variation des paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) en fonction de la variation de la résistance série (R_s)	39
Figure 29:représente les paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) simulés en fonction de la variation de la densité de défauts de $CH_3NH_3SnI_3$	41
Figure 30:représente les paramètres photovoltaïques (V_{oc} , J_{sc} , FF , η (η_a)) de la variation de distribution énergétique de la densité de défauts de $CH_3NH_3SnI_3$	42
Figure 31:La caractéristique courant- tension (J-V) optimisée de la cellule à base de $CH_3NH_3SnI_3$	43

Table des matières

Remerciement

Dédicace

Liste des tableaux	6
Liste des figures	7
Introduction	1
Chapitre I : Cellule photovoltaïque	4
I-1 Définition	4
I.2. L'effet photovoltaïque.....	5
I-3. Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....	6
I.3.1. Les matériaux semi-conducteurs.....	7
I.4. Les performances des cellules photovoltaïques.....	7
I.4.1. Caractéristique courant-tension.....	7
Chapitre II : Cellules solaires à pérovskites.....	14
II.1 : Historique.....	14
II.2 : Structure cristalline des Pérovskites	14
II.3 : Architecture et fabrication des cellules à pérovskite	15
II.4 : Principe de fonctionnement de pérovskite	16
II.5 : Les différentes techniques de dépôt de la pérovskite hybride.....	19
II.5.1 : Dépôt par évaporation	19
II.5.2 : Dépôt en solution	20
II.6 : Stabilité des cellules solaires Pérovskites	21
II.7 : Propriétés des matériaux pérovskites	21
II.7.1 : Propriétés optiques et électroniques des pérovskites	21
Chapitre III : Simulation de la cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	24
Introduction	24
III.1 Logiciel SCAPS	24
III.1.1 Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)	25
III.1.2 Avantages et inconvénients du SCAPS	26
III.2 Structure de la cellule solaire à simuler.....	27
III.2.1 Architecture de dispositif et simulation numérique	27

III.2.2 : Paramètres et propriétés de la cellule simulée.....	28
III.3. : Résultats et discussions	30
III.3.1 : Effet de l'épaisseur de la couche absorbante $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	30
III.3.1.2 : Effet de la variation de l'épaisseur de la couche TiO_2	32
III.3.1.3 : Effet de la variation de l'épaisseur de la couche ZnO:Al	33
III.3.2 : Effet de la variation du coefficient d'absorption (α) de la couche absorbante.....	34
III 3.3 Effet de la variation de la fonction de travail(WF) (contact arrière) du métal Au:	36
III.3.4 : Effet de la variation de la résistance série (R_s) et résistance shunt (R_{sh}):	37
III.3.5 : Effet de la variation de la densité de défauts N_t (cm^{-3}) de la couche absorbante :	40
III.3.6 : Effet de la variation de type et de distribution énergétique de la densité de défauts.....	41
III.4 : Les paramètres photovoltaïques de la cellule optimisée	43
III.4.1 : Caractéristique (J-V).....	43
Conclusion générale	45
Références	
Résumé	

Introduction

Introduction :

La production d'énergie solaire a connu une augmentation remarquable et devrait continuer à croître dans les années à venir. Convertir l'énergie solaire en électricité est une solution propre et durable aux problèmes de la crise énergétique et du réchauffement climatique [1].

Les cellules solaires à base de matériaux de type Pérovskite hybrides font partie des technologies photovoltaïques émergentes et prometteuses. En raison de leurs propriétés physiques et de leur importance technologique, les pérovskites sont devenues un matériau en vogue aujourd'hui [2].

Les progrès récents dans les cellules solaires à base de pérovskites ont conduit à l'avènement d'une nouvelle technologie photovoltaïque à faible coût et un rendement élevé qui pourrait être un concurrent viable des cellules solaires à base de silicium qui ont dominé le marché photovoltaïque auparavant [3].

Il est nécessaire de prédire les paramètres idéaux qui contribuent à la conception d'une cellule solaire photovoltaïque pour améliorer ses performances. Dans ce contexte, l'utilisation d'outils de simulation informatique est essentielle au développement et à l'optimisation des cellules solaires.

L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier l'impact des différents paramètres sur les performances photovoltaïques des cellules solaires pérovskites en $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$. L'outil de simulation SCAPS est utilisé pour y parvenir. On a étudié l'impact de la variation de l'épaisseur des couches pérovskite, le coefficient d'absorption, la fonction de travail du contact arrière, la résistance de série et le shunt pour améliorer les performances de la cellule solaire. On a étudié aussi comment la densité de défauts affecte les propriétés de la cellule solaire.

Ce mémoire est divisé en trois chapitres et clarifié l'objectif de ce travail :

Le chapitre 1 présente brièvement le contexte et l'état de la recherche photovoltaïque actuelle, Ensuite, les principes de base des performances des cellules photovoltaïques sont présentés.

Le chapitre 2 présente brièvement la structure, le principe de fonctionnement des cellules solaires pérovskite et les techniques de dépôt des couches minces utilisées pour la fabrication des cellules solaires pérovskite.

Introduction

Le chapitre 3 concerne tout d'abord un rappel sur le logiciel de simulation utilisé SCAPS-1D.

Ensuite on discute les résultats de la simulation numérique et de l'optimisation de la cellule solaire étudiée, par l'impact de différents paramètres sur les performances des cellules solaires en $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$.

Finalement, ce mémoire a été achevé par une conclusion générale.

Résumé

La simulation et l'optimisation d'une cellule solaire photovoltaïque à base de matériau hybride pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ à l'aide de l'outil de simulation unidimensionnel SCAPS sont incluses dans ce travail. L'objectif principal est d'améliorer les performances de cette cellule solaire en déterminant les paramètres de fonctionnement idéaux, comme les épaisseurs des couches, le coefficient d'absorption, la fonction de travail du contact arrière et la résistance série et shunt. Les résultats obtenus montrent que les épaisseurs des couches qui fournissent des meilleures performances électriques sont de $0.7 \mu\text{m}$, $0.04 \mu\text{m}$ et $0.04 \mu\text{m}$ pour les matériaux $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, TiO_2 et ZnO:Al respectivement. Les meilleurs résultats obtenus sont : $V_{oc} = 9.5520 \text{ V}$, $J_{sc} = 38.760941 \text{ mA/cm}^2$, $\text{FF}=8.34\%$ et $\eta=30.86\%$.

Mots clés : pérovskite, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, SCAPS, paramètres électriques

ملخص:

مادختساب نتيجتها $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ تياكسفوريلا ةدامى لىءةمناظلا ةينوضورهكلا تيسمشلا تيلخلا نيسحتو ةاكاحم نيمضت متي ديدحت ل لاخنم تيسمشلا تيلخلا هذء ءادأ نيسحتو هى سيئرلا فدهلا .ل معلا اذهى فى SCAPS داعيلأا تيداحأ ةاكاحملا ءادأ .ل يوحثلاو لسلسلا ةمواقمو يفلخلا لاصنلا ل مع ةقيظوو صاصتملا ل ماعمو تاقبطلا ةكامسد لثم ،ةيلاثملا ليغشتلا ريياعم 0.04 و رتم 0.04 و رتم نوا 0.7 ي هى نابرهك ءادأ ل ضفأ رفوت ي تلا تاقبطلا ةكامسد نأ اهيلء لوصحلا مدي تلا جئاتنلا رهظت $V_{oc} = 9.5520 \text{ V}$ ، ي هى اهيلء لوصحلا مدي تلا جئاتنلا ل ضفأ .ي لاوتلا لىءة $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ و TiO_2 و ZnO:Al رتم نوا V ، $J_{sc} = 38.760941 \text{ mA/cm}^2$ ، $\text{FF} = 8.34\%$ و $\eta = 30.86\%$.
تياكسفوريلا :تيسيرلا تاملكلا ، تاملعلا ةينابرهكلا ، SCAPS ، $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$

Abstract

The simulation and optimization of a photovoltaic solar cell based on perovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ hybrid material using the SCAPS unidimensional simulation tool are included in this work. The main objective is to improve the performance of this solar cell by determining ideal operating parameters, such as thicknesses . We then looked at the variation of the various parameters such as the absorption coefficient and the working function of the back contact and the serial and shunt resistance. The results obtained show that the thicknesses of the layers that provide the best electrical performance are $0.7 \mu\text{m}$, $0.04 \mu\text{m}$ and $0.04 \mu\text{m}$ for $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, TiO_2 and ZnO:Al respectively. The best results obtained are: $V_{oc} = 9.5520 \text{ V}$, $J_{sc} = 38.760941 \text{ mA/cm}^2$, $\text{FF}=8.34\%$ and $\eta=30.86\%$.

Keywords: perovskite, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, SCAPS, electrical parameters