

**République Algérienne Démocratique & Populaire**  
**Ministère De L'enseignement Supérieur Et De La Recherche Scientifique**  
**Université Echahid Hamma Lakhdar D'El-Oued**  
**Faculté De Technologie**  
**Département De Génie Electrique**



Mémoire de fin d'études  
En vue de l'obtention du diplôme de

# **MASTER ACADEMIQUE**

Domaine : Sciences et Techniques  
Filière : Télécommunications  
Spécialité : Systèmes de Télécommunications

## **Thème**

**Simulation Et Optimisation D'une Cellule Solaire**  
**A Base Du Pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>**  
**En Architecture NIP**

**Devant le jury composé de :**

LAIB Ismail  
NACEREDDINE Lakhdar  
HIMA Abdelkader

Président  
Examineur  
Encadreur

**Réalisé par :**

ZOUARI AHMED Mammar  
SLIMANI Abdelhamid

**Année universitaire : 2019/2020**

# Dédicace

*Nous dédions ce travail à :*

*Nos chers parents*

*Nos épouses*

*Nos enfants*

*Nos familles*

**ZOUARI AHMED MAMMAR  
SLIMANI ABDELHAMID**

# Remerciements

En premier lieu, nous tenons à remercier Dieu, notre créateur pour nous avoir donné la force pour accomplir ce travail.

Nous tenons à remercier Mr. HIMA Abdelkader notre encadreur pour son grand soutien et ses conseils considérables.

Nous voudrions également remercier les membres du jury Mr. LAIB Ismail et Mr. NACEREDDINE Lakhdar.

Que toute personne ait participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail accepte nos grands et sincères remerciements.

**ZOUARI AHMED MAMMAR**  
**SLIMANI ABDELHAMID**

## Sommaire

Dédicace	
Remerciements	
Sommaire	
Liste Des Figures	
Liste Des Tableaux	
Nomenclatures Et Abréviations	
Introduction Générale.....	01
<b>Chapitre I : Généralités Sur Les Cellules Solaires</b>	
I. 1. Introduction .....	03
I. 2. Historique.....	03
I. 3. Définition d'une cellule solaire PV ou l'effet photovoltaïque.....	04
I. 4. Rayonnement solaire .....	05
I. 5. Matériaux semi-conducteurs .....	06
I. 5.1. Semi-conducteurs intrinsèques.....	06
I. 5.2. Semi-conducteurs extrinsèques .....	07
I. 6. Dopage et silicium .....	07
I. 6.1. Dopage de type N .....	08
I. 6.2. Dopage de type P .....	08
I. 7. Jonction PN .....	09
I. 8. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire PV .....	10
I.9. Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire .....	11
I.9.1. Courant de court-circuit $I_{sc}$ .....	11
I.9.2. Tension de circuit ouvert $V_{oc}$ .....	12
I.9.3. Facteur de forme FF .....	13
I.9.4. Rendement $\eta$ .....	13
I. 10. Générations des cellules solaires PVs.....	13
I. 10.1. Première génération: Silicium cristallin (mono et poly) .....	14
I. 10.2. Deuxième génération: CdTe, CIS/ CIGS, silicium amorphe microcristallin... ..	15
I. 10.3. Troisième génération Technologies photo-électro-chimiques (Dye Sensitised Cell et Organic PV) .....	17
I. 11. Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque .....	19
I. 11.1. Avantages .....	19
I. 11.2. Inconvénients .....	19
<b>Chapitre II : Cellules Solaires A Base De Matériaux Pérovskites</b>	
II.1. Introduction .....	20
II.2. Définition de la Pérovskite .....	20
II.3. Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskites .....	20
II.4. Schéma équivalent d'une cellule solaire à pérovskites .....	22
II.5. Comparaison des performances de quelques cellules solaires à pérovskites.....	22
II.6.Conclusion.....	25
<b>Chapitre III : Présentation Du Logiciel SCAPS-1D</b>	
III.1. Logiciel SCAPS .....	26
III.1.1. Lancer SCAPS .....	27
III.1.2. Définir le problème .....	27
III.1.3. Définir le point de fonctionnement.....	27
III.1.4. Sélection des mesures à simuler.....	28
III.1.5. Lancer le calcul .....	28

III.1.6. Afficher les courbes simulées .....	29
III.1.7. Courbes I-V .....	29
III.2. Edition de la structure d'une cellule solaire .....	30
III.2.1. Contacts de la cellule solaire .....	31
III.2.2. Définition des couches de la cellule solaire .....	32
<b>Chapitre IV : Résultats Et Discussions</b>	
IV.1. Introduction .....	35
IV.2. Structure et propriétés des couches de cellule étudiée .....	35
IV.3. Résultats et discussions.....	37
IV.3.1 Influence de l'épaisseur de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	38
IV.3.2 Influence de la concentration de défauts $N_t$ ( $1/\text{cm}^3$ ) de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	39
IV.3.3 Influence de la température $T$ (K) sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	40
IV.3.4 Courbe des caractéristiques I-V optimisée.....	41
IV.4. Conclusion .....	42
Conclusion Générale.....	43
Bibliographie	

## Liste Des Figures


### Chapitre I : Généralités Sur Les Cellules Solaires

Figure I.1: Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....	04
Figure I.2: Rayonnement solaire.....	05
Figure I.3 : Différentes positions de soleil.....	06
Figure I.4: Forme quatre liaisons covalentes avec un atome voisin.....	06
Figure I.5: Diagramme de bande.....	07
Figure I.6: Dopage P-N.....	08
Figure I.7: Forme quatre liaisons covalentes avec un atome donneur.....	08
Figure I.8: Forme quatre liaisons covalentes avec un atome accepteur.....	09
Figure I.9: Diffusion des trous et des électrons.....	09
Figure I.10: Zone de transition.....	09
Figure I.11: Structure (à gauche) et diagramme de bande (à droite) d'une cellule photovoltaïque.....	10
Figure I.12: Caractéristique courant-tension et paramètres physiques d'une cellule photovoltaïque.....	11
Figure I.13: Différentes technologies des cellules photovoltaïques.....	14
Figure I.14: Etapes de fabrication des cellules : (1) minéral de Silicium (2) raffinage (Pour augmenter la pureté) (3) Silicium en fusion donnant des lingots (4) après solidification (5) wafer obtenu par sciage du lingot (6) traitement de surface par procédés physico chimiques et (7) cellule finie avec électrodes.....	14
Figure I.15: Cellule mono cristalline et poly cristalline.....	15
Figure I.16: modules verre-verre au Telluride de Cadmium, efficacité de 9 à 11%.....	16
Figure I.17: Façade en CIGS au Pays de Galles, efficacité de 8,5%.....	16
Figure I.18: Module photovoltaïque souple au silicium amorphe $\alpha$ Si triple jonction pour une efficacité de 6,5% (photo Unisolar).....	16
Figure I.19: Module combinant technologie microcristalline et amorphe pour une efficacité de 8,5% (photo Phoenix Solar).....	17
Figure I.20: Sac à dos incorporant un module de technologie organique DSC.....	17
Figure I.21: Cellule DSC(DyeSensitizedCell ) coupe explicative.....	18
<b>Chapitre II : Cellules Solaires A Base De Matériaux Pérovskites</b>	
Figure II.1: Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskites (A) structure et (B) Image MEB montrant l'architecture d'une cellule solaire à hétérojonction planaire à base de matériaux pérovskites [4].....	21
Figure II.2: Différentes structures d'une cellule à pérovskites (A) mésoscopique, (B) planaire et (C) inversée.....	21
Figure II.3: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque à base de matériaux pérovskites.....	22
Figure II.4: (A) Structure de l'électrode avec la couche protectrice de graphène dopé avec AuCl <sub>3</sub> et (B) travail de sortie et mobilité du graphène pur et du graphène dopé avec AuCl <sub>3</sub> pour diverse concentration ND [10].....	24
<b>Chapitre III : Présentation Du Logiciel SCAPS-1D</b>	
Figure III.1 : Fenêtre d'exécution « action panel » du logiciel SCAPS.....	26
Figure III.2 : Panneau des bandes d'énergie.....	29
Figure III.3 : Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.....	30
Figure III.4 : Définition de la structure d'une cellule solaire.....	31
Figure III.5 : Panneau des propriétés des contacts.....	31
Figure III.6 : Propriétés de la couche ajoutée.....	33
Figure III.7 : Modèle de l'absorption.....	33

---

Figure III.8 : Définition des types de recombinaison présents .....	34
<b>Chapitre IV : Résultats Et Discussions</b>	
Figure IV.1 : Structure de la cellule solaire étudiée .....	36
Figure IV.2 : Caractéristiques J-V de la cellule solaire à base pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> .....	37
Figure IV.3 : Variation des paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de l'épaisseur de la couche Pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> .....	38
Figure IV.4 : Variation des paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de défaut $N_t$ de la couche Pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> .....	39
Figure IV.5 : Variation des paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de la température T(K) de (ITO/PCBM/ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> /PEDOT:PSS/Ag).....	40
Figure IV.6 : Variation des caractéristiques J-V de la cellule solaire à base pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> optimisée.....	41

---



---

## Liste Des Tableaux

### Chapitre II : Cellules Solaires A Base De Matériaux Pérovskites

Tableau II.1: Comparaison des performances des cellules à base de matériaux pérovskites .....	22
---	----

### Chapitre IV : Résultats Et Discussions

Tableau IV.1: Propriétés électriques et optiques des couches de la cellule (ITO/PCBM/ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> /PEDOT:PSS/Ag).....	36
Tableau IV.2: Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à base pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> avec PCBM comme ETM et PEDOT:PSS comme HTM.....	37
Tableau IV.3: Effet de l'épaisseur de la couche Pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	38
Tableau IV.4: Effet de défauts $N_t$ de la couche Pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	40
Tableau IV.5: Effet de la température T(K) (ITO/PCBM/ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> /PEDOT:PSS/Ag) sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE.....	41
Tableau IV.6: Paramètres photovoltaïques optimisés de la cellule solaire à base pérovskite CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> avec PCBM comme ETM et PEDOT:PSS comme HTM.....	42

---

## Nomenclatures et Abréviations

### Nomenclatures

<b>V<sub>oc</sub></b>	Open circuit voltage
<b>J<sub>sc</sub></b>	Short circuit density of current
<b>E<sub>g</sub></b>	Band gap energy
<b>χ</b>	Electron affinity
<b>N<sub>c</sub></b>	Conduction band effective density of states
<b>N<sub>v</sub></b>	Valence band effective density of states
<b>ε<sub>r</sub></b>	Relative permittivity
<b>μ<sub>n</sub></b>	Electron mobility
<b>μ<sub>h</sub></b>	Hole mobility
<b>N<sub>A</sub></b>	Shallow uniform acceptor density
<b>N<sub>D</sub></b>	Shallow uniform donor density
<b>N<sub>t</sub></b>	Defect density of states
<b>α</b>	Absorption coefficient
<b>h</b>	Plank constant
<b>ν</b>	Frequency of light
<b>A and B</b>	Material dependent constants

### Abréviations

<b>FF</b>	Fill factor
<b>PCE</b>	Power conversion efficiency
<b>PVK</b>	Perovskite
<b>ETL</b>	Electron transport layer
<b>HTL</b>	Hole transport layer
<b>MASnI<sub>3</sub></b>	Methylammonium tin tri-iodide
<b>PCBM</b>	phenyl-C61-butyric acid methyl ester
<b>PEDOT:PSS</b>	poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate



# **Introduction Générale**

## Introduction Générale

À mesure que la technologie progresse, il y a un besoin international croissant de sources d'énergie renouvelables, en particulier avec les préoccupations mondiales concernant l'épuisement des ressources fossiles. Les énergies renouvelables permettent de fournir des ressources permanentes, et les chercheurs n'ont qu'à élargir le cercle de la recherche pour tirer parti de ces ressources naturelles. L'une des énergies renouvelables les plus prometteuses est l'énergie solaire. En conséquence, des efforts importants sont nécessaires pour développer une nouvelle technologie de cellules solaires avec une efficacité de conversion de puissance (PCE) accrue et des coûts de traitement réduits. Récemment, les cellules solaires à pérovskite aux halogénures organiques / inorganiques ont des avantages inhérents tels qu'un coefficient d'absorption élevé, une longue longueur de diffusion du support, une mobilité élevée du support, une fabrication facile dans divers domaines et des propriétés satisfaisantes. Cela les rend très attractifs pour les futures technologies de cellules solaires. Cependant, la première cellule solaire en pérovskite a été développée par Kojima et al. Du groupe basé à Tokyo de Tsutomu Miyasaka avec un PCE de 2,2% en 2006 et après quelques années ils l'ont augmenté à 3,8%. Par conséquent, en moins d'une décennie, la cellule solaire à base de pérovskite est passée à un PCE de 25,2% en 2019. Pour améliorer les performances des cellules solaires à base de pérovskite, l'amélioration de la structure de la cellule et du matériau de pérovskite est la solution clé. Plusieurs études se concentrent sur l'utilisation de cellules solaires à pérovskite avec un matériau à base de pérovskite à base de tri-iodure de plomb et de méthylammonium (MAPbI<sub>3</sub>). Ce dernier est composé de la structure ABX<sub>3</sub>, où A représente le méthylammonium (MA, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>), B est le plomb (Pb) et X représente un anion matériau halogénure, l'iodure (I). Malgré les hautes performances fournies par le matériau pérovskite aux halogénures de plomb, le facteur d'instabilité et de toxicité peut entraver sa production commerciale. La meilleure façon d'améliorer ces facteurs, un matériau alternatif de pérovskite écologique candidat est introduit et remplace la pérovskite Pb. Le matériau Sn-pérovskite peut potentiellement fournir des performances photovoltaïques analogues similaires aux dispositifs Pb-pérovskite. Dans ce contexte, nos travaux présentent des simulations numériques de cellule solaire à base de pérovskite à base de Tri-iodure d'étain méthylammonium CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> utilisant le simulateur de capacité de cellule solaire 1D (1D-SCAPS) développé au Département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS), Université de Gent, Belgique qui est un simulateur de cellules solaires unidimensionnel basé sur le modèle physique de diffusion de dérive. Pour améliorer les performances du dispositif, l'amélioration de la structure du dispositif et des matériaux de

transport d'électrons et de transport de trous est le moyen efficace. Par conséquent, cette étude est principalement axée sur le choix de matériaux de transport de trous (HTM) et des matériaux de transport d'électrons (ETM) potentiellement très stables pour améliorer la reproductibilité et la stabilité des cellules solaires à base de pérovskites  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

Dans ce mémoire, on a partagé les travaux en chapitres :

Le premier chapitre, des généralités sur les cellules solaires ;

Le deuxième chapitre, les cellules solaires à base de matériaux pérovskites ;

Dans le troisième chapitre, on a présenté le logiciel de simulation utilisé SCAPS-1D ;

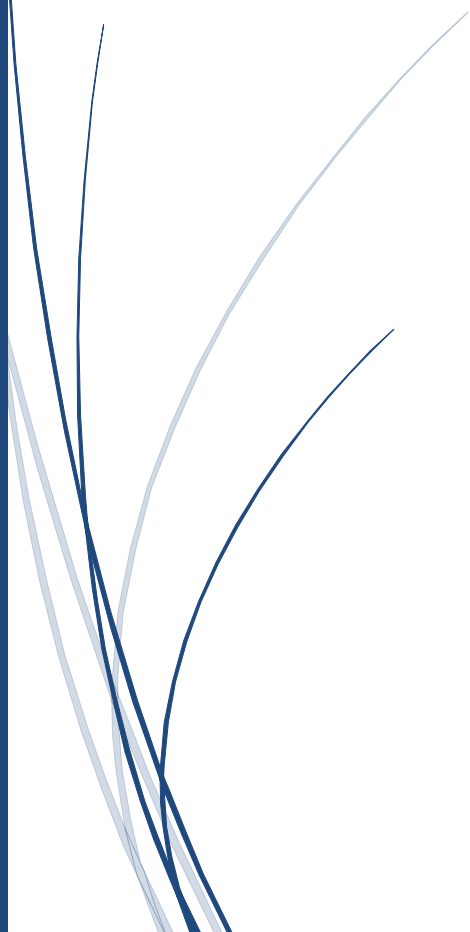
Le quatrième chapitre est réservé aux résultats et discussions de simulation et optimisation de la cellule solaire étudiée ;

En fin, on a terminé ce mémoire par une conclusion générale.



# Chapitre I

Généralités Sur Les Cellules Solaires



### I.1 Introduction :

Dans ce chapitre on fait appel à quelques bases indispensables dans le domaine photovoltaïque. Nous aborderons ainsi en premier lieu quelques notions sur la source d'énergie photovoltaïque. Nous décrirons ensuite les semi-conducteurs, la jonction P-N et les cellules solaires avec leurs caractéristiques photovoltaïques et une brève description des différentes filières technologiques existantes et on termine par les avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque.

### I.2 Historique :

Quelques dates importantes dans l'histoire du photovoltaïque :

En 1839 : Le physicien français Edmond Becquerel découvre le processus de l'utilisation de l'ensoleillement pour produire du courant électrique dans un matériau solide. C'est l'effet photovoltaïque.

En 1905 : Einstein découvre que l'énergie de cette quantité de lumière est proportionnelle à la fréquence de l'onde électromagnétique. L'utilisation des cellules solaires débute dans les années quarante. Le domaine spatial a besoin d'une énergie sans combustible embarqué. La recherche s'intensifie sur le photovoltaïque.

En 1875 : Werner Von Siemens expose devant l'Académie des Sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. Mais jusqu'à la Seconde Guerre Mondiale, le phénomène reste encore une curiosité de laboratoire.

En 1954 : Trois chercheurs américains, Chapin, Pearson et Prince mettent au point une cellule photovoltaïque à haut rendement au moment où l'industrie spatiale naissante cherche des solutions nouvelles pour alimenter ses satellites.

En 1958 : Une cellule avec un rendement de 09 % est mise au point. Les premiers satellites alimentés par des cellules solaires sont envoyés dans l'espace.

En 1973 : La première maison alimentée par des cellules photovoltaïques est construite à l'Université de Delaware.

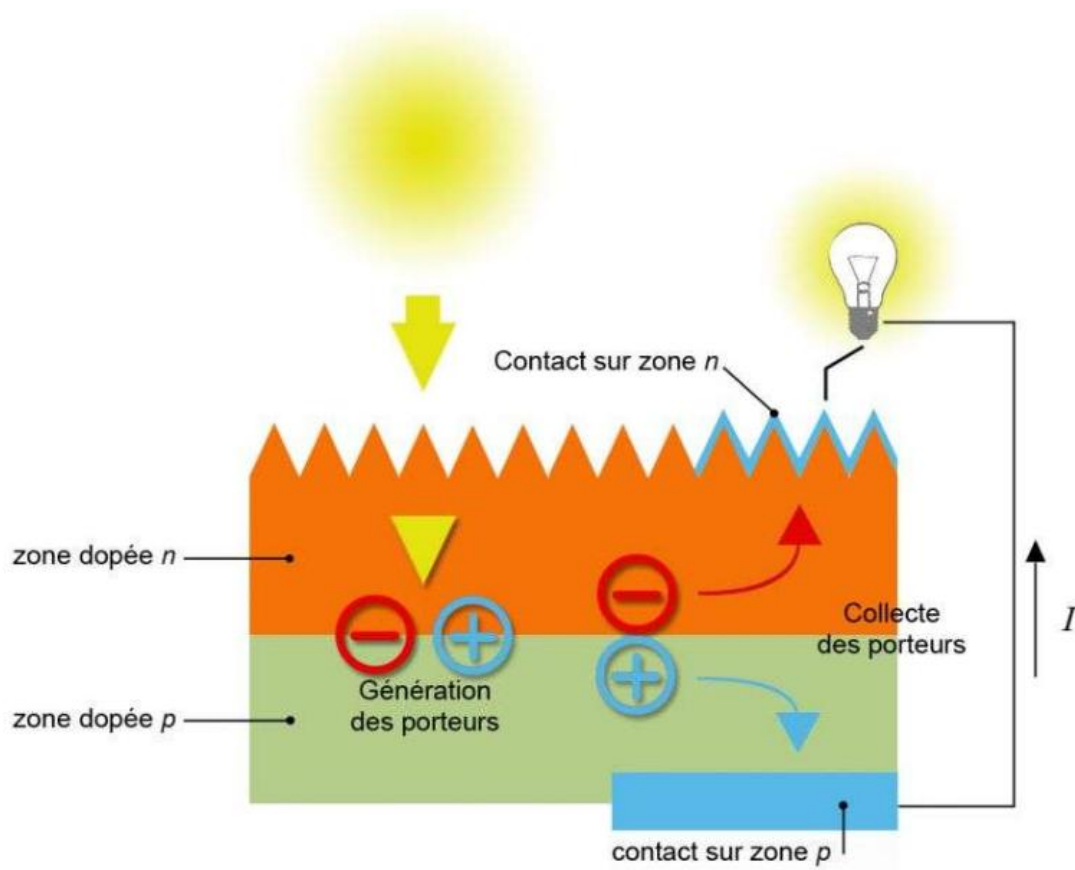
En 1983 : La première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt une distance de 4000 km en Australie.

En 1995: Des programmes de toits photovoltaïques raccordés au réseau ont été lancés au Japon et en Allemagne et se généralisent depuis 2001.

La première cellule photovoltaïque (ou photopile) a été développée aux États-Unis en 1954 par les chercheurs des laboratoires Bell qui ont découvert que la photosensibilité du silicium pouvait être augmentée en ajoutant des "impuretés".

### I.3 Définition d'une cellule solaire PV ou l'effet photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport dans un matériau semi-conducteur de charges électriques positives et négatives sous l'effet de la lumière, la figure I.1 illustre le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque. [1]



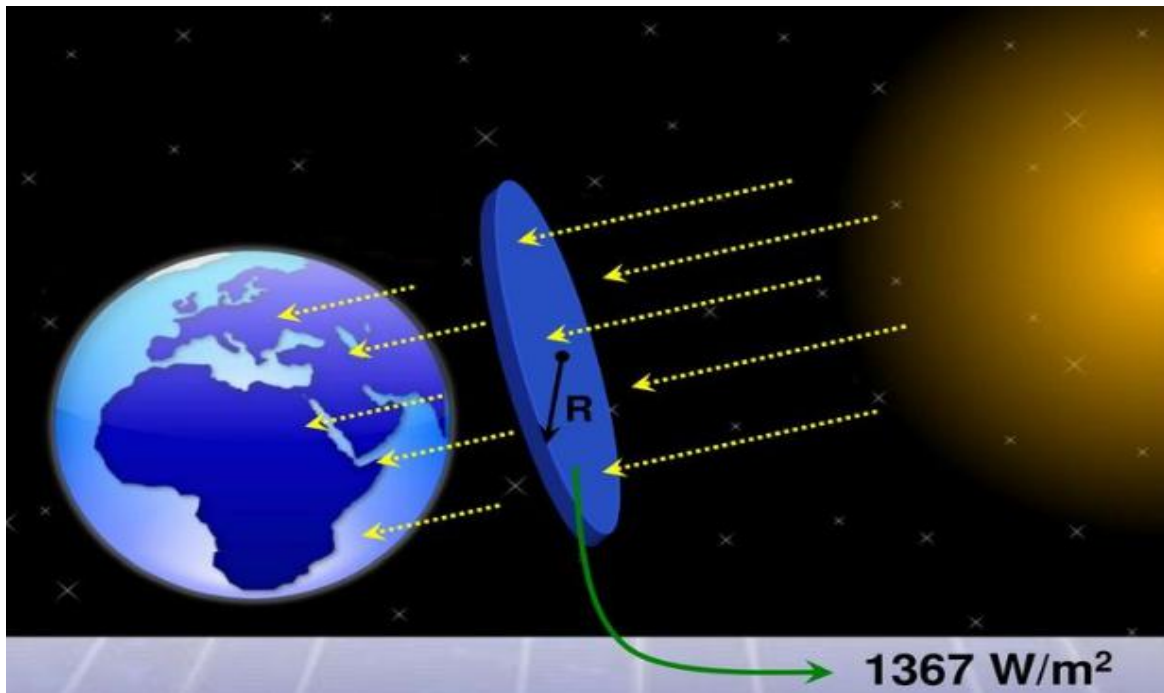
**Figure I.1:** Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque. [2]

Le principe de l'effet photovoltaïque est le suivant :

- ✚ Les grains de lumière (les photons) heurtent la surface du matériau photovoltaïque disposé en cellules ou en couche mince ;
- ✚ Ils transfèrent leur énergie aux électrons présents dans la matière qui se mettent alors en mouvement dans une direction particulière ;
- ✚ Le courant électrique continu qui se crée est alors recueilli par des fils métalliques très fins connectés les uns aux autres et acheminé à la cellule suivante.

#### I.4 Rayonnement solaire :

Le soleil décharge continuellement une énorme quantité d'énergie radiante dans le système solaire, la terre intercepte une toute petite partie de l'énergie solaire rayonnée dans l'espace. Une moyenne de 1367 Watts atteint chaque mètre carré du bord externe de l'atmosphère terrestre (pour une distance moyenne Terre-Soleil de 150 Millions de km), c'est ce que l'on appelle la constante solaire égale à  $1367 \text{ W/m}^2$ . [3]

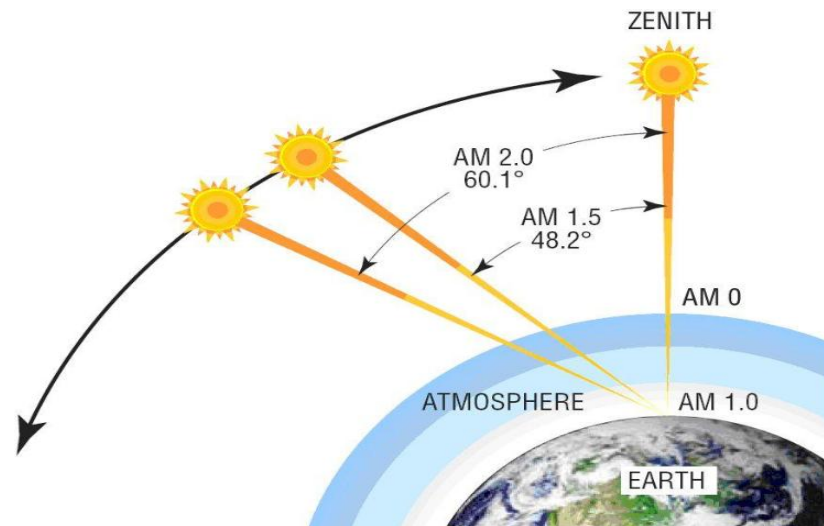


**Figure I.2 :** Rayonnement solaire. [4]

La part d'énergie reçue sur la surface de la terre dépend de l'épaisseur de l'atmosphère à traverser. Celle-ci est caractérisée nombre de masse d'air AM.

Le rayonnement qui atteint le niveau de la mer à midi dans un ciel clair est de  $1000 \text{ W/m}^2$ , il est décrit en tant que rayonnement de la masse d'air "1" (ou AM1). Lorsque le soleil se déplace plus bas dans le ciel, la lumière traverse une plus grande épaisseur d'air perdant plus d'énergie. Puisque le soleil n'est au zénith que durant peu de temps, la masse d'air est donc plus grande en permanence et l'énergie disponible est donc inférieure à  $1000 \text{ W/m}^2$ . [3]

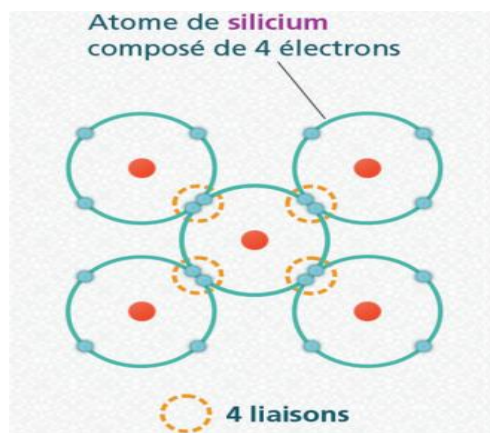
Les scientifiques ont donné un nom au spectre standard de la lumière du soleil sur la surface de la terre : AM1.5G ou AM1.5D. Le nombre "1.5" indique que le parcours de la lumière dans l'atmosphère est 1.5 fois supérieur au parcours le plus court du soleil, c'est-à-dire lorsqu'il est au zénith (correspondant à une inclinaison du soleil de  $45^\circ$  par rapport au zénith). Le « G » représente le rayonnement "global" incluant rayonnement direct et rayonnement diffus et la lettre « D » tient compte seulement du rayonnement direct. [3]



**Figure I.3 :** Différentes positions de soleil. [5]

### I.5 Matériaux semi-conducteurs :

Les matériaux semi-conducteurs sont des corps dont la résistivité est intermédiaire entre celle des conducteurs et celle des isolants. Les quatre électrons de valence du silicium permettent de former quatre liaisons covalentes avec un atome voisin. Dans ce cas, tous les électrons sont utilisés et aucun n'est disponible pour créer un courant électrique.



**Figure I.4:** Forme quatre liaisons covalentes avec un atome voisin. [6]

#### I.5.1 Semi-conducteurs intrinsèques :

Les électrons situés sur la couche la plus éloignée du noyau, qui participent aux liaisons covalentes peuvent sous l'effet de l'agitation thermique devenir porteur de charge.

Le diagramme énergétique est constitué de deux bandes (conduction et valence) séparé par une bande interdite. Pour franchir cette bande l'électron doit acquérir de l'énergie (thermique, photon, ...) mais le nombre d'électrons libres dans un semi-conducteur intrinsèque reste très faible. Ici le nombre de trou et d'électron est égal.

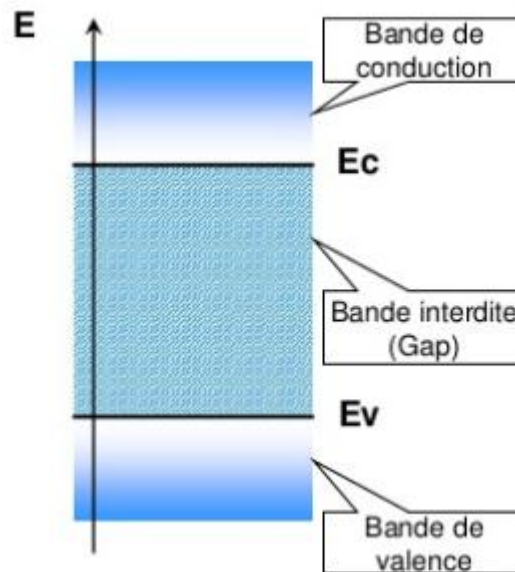


Figure I.5: Diagramme de bande.

### I.5.2 Semi-conducteurs extrinsèques :

Pour augmenter la conductivité des semi-conducteurs on y introduit des impuretés, ce procédé est appelé dopage.

### I.6 Dopage et silicium:

Dans un semi-conducteur pur le nombre de porteurs étant faible à température ordinaire, la conductivité est médiocre.

Pourquoi le silicium ?

Le silicium a été choisi pour réaliser les cellules solaires photovoltaïques pour ses propriétés électroniques, il est caractérisé par la présence de quatre électrons sur sa couche périphérique. Dans le silicium solide, chaque atome est lié à quatre voisins et tous les électrons de la couche périphérique participent aux liaisons. Si un atome de silicium est remplacé par un atome ayant 5 électrons périphériques (phosphore par exemple), un électron ne participe pas aux liaisons, il peut donc se déplacer dans le réseau. Il y a conduction par un électron et le semi-conducteur est appelé dopé N (négatif).

Si au contraire un atome de silicium est remplacé par un atome ayant 3 électrons périphériques (bore par exemple), il manque un électron pour réaliser toutes les liaisons et un électron peut venir combler ce manque. On dit alors qu'il y a conduction par un trou et le semi-conducteur est appelé dopé P (positif).

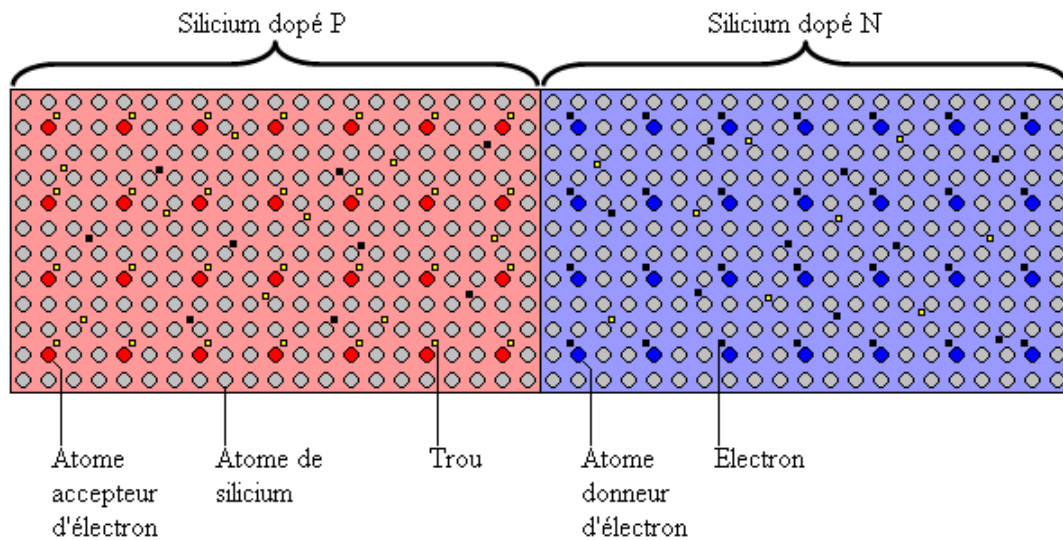


Figure I.6: Dopage P-N. [7]

### I.6.1 Dopage de type N :

On remplace un atome de silicium par un atome pentavalent. Quatre d'entre eux assurent les liaisons avec les atomes voisins de silicium et le cinquième resté disponible va être excité vers la bande de conduction très facilement par l'agitation thermique. D'où le nombre d'électron libre qui va fortement augmenter : dans ce cas le nombre des trous est très inférieur au nombre des électrons libres. On obtient ainsi un cristal dopé N (négatif).

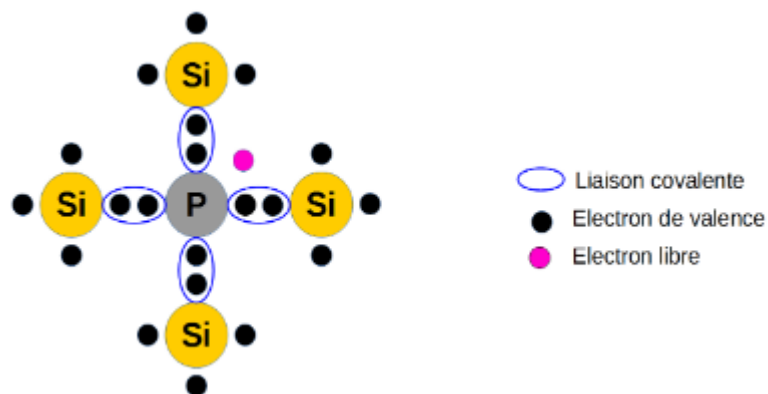
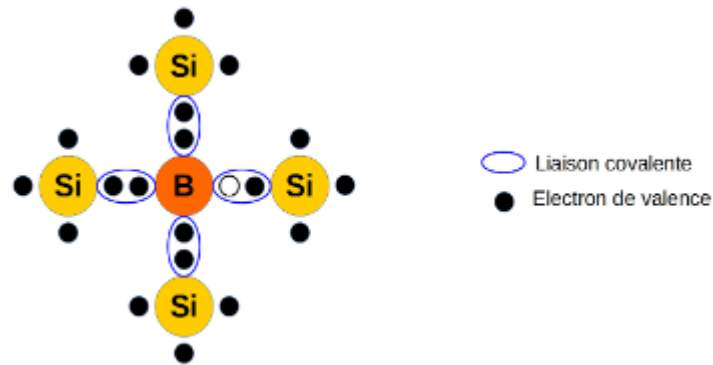


Figure I.7 : Forme quatre liaisons covalentes avec un atome donneur. [6]

### I.6.2 Dopage de type P :

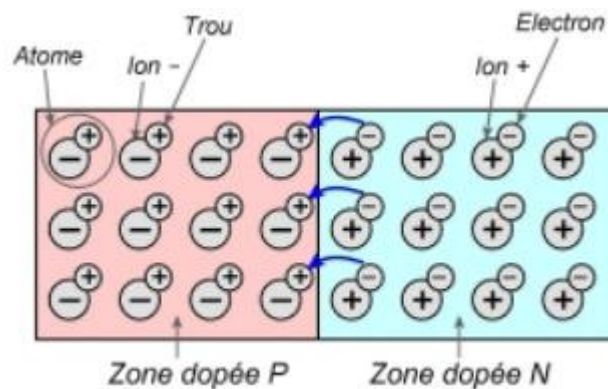
De la même façon on introduit des atomes trivalents, ses trois électrons vont assurer les liaisons covalentes avec trois atomes voisins mais laisser un trou au quatrième. Ce trou se déplace de proche en proche dans le cristal pour créer un courant. Ici le nombre des trous est très supérieur au nombre des électrons libres du cristal intrinsèque, on obtient donc un cristal dopé P (positif), les impuretés utilisées sont souvent du Bore.



**Figure I.8 :** Forme quatre liaisons covalentes avec un atome accepteur. [6]

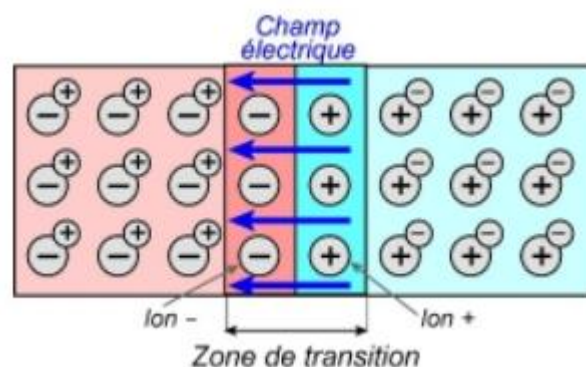
### I.7 Jonction PN :

Une jonction PN est l'accolement d'une région dopée P et d'une région dopée N. Lors de cet assemblage les porteurs de charges libres s'attirent et se recombinent dans la zone de jonction où les porteurs libres disparaissent : c'est la zone de transition.



**Figure I.9 :** Diffusion des trous et des électrons. [7]

Il ne reste donc plus que les ions dans cette zone qui vont créer un champ électrique interne au niveau de la jonction et qui empêche les charges libres restantes dans chaque zone de traverser la jonction pour se recombiner.



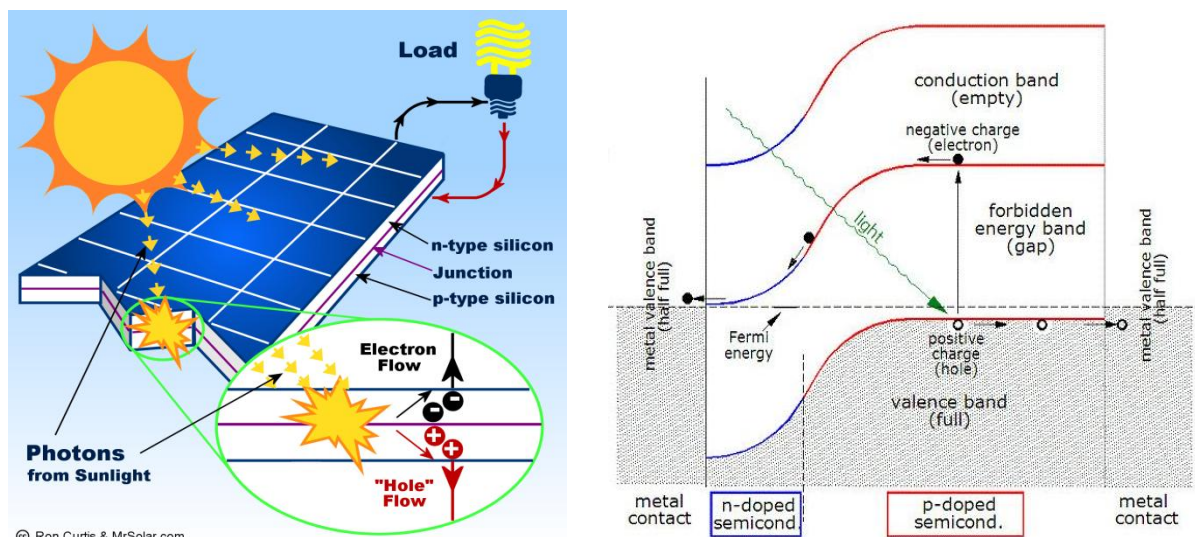
**Figure I.10:** Zone de transition. [7]

### I.8 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire PV :

La cellule solaire est une photodiode à jonction PN de grande surface qui génère un signal électrique sans l'aide d'une source d'énergie auxiliaire. Lorsque les photons issus du soleil frappent la cellule, certains sont réfléchis et d'autres sont transmis ou absorbés dans la cellule solaire, seuls les photons absorbés participent à l'effet photoélectrique. La conversion photovoltaïque met en jeu trois phénomènes physiques intimement liés et simultanés :

- ✚ L'absorption de la lumière dans le matériau ;
- ✚ Le transfert de l'énergie des photons aux charges électriques ;
- ✚ La collecte des charges.

Il est donc clair que les matériaux constituant une cellule solaire doivent avoir des propriétés optiques et électriques spécifiques pour permettre la conversion photovoltaïque. Dans le but de collecter les paires électron-trou générées, un champ électrique permettant de dissocier les paires électrons-trou créés est nécessaire. Pour cela on utilise le plus souvent une jonction PN.



**Figure I.11** : Structure (à gauche) et diagramme de bande (à droite) d'une cellule Photovoltaïque. [8]

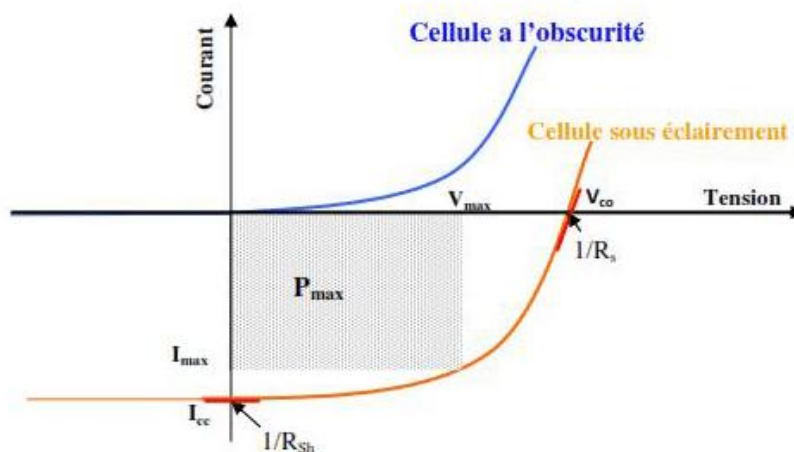
Les photons incidents génèrent des paires électron-trou dans les régions de type N et P et dans la zone de charge d'espace. Les paires électron-trou générés se comportent différemment suivant la région :

Dans la zone N et P, les porteurs minoritaires diffusent. Ce qui atteint la zone de charge d'espace sont propulsés par le champ électrique vers la zone P (pour les trous) et vers la zone N (pour les électrons) où ils seront majoritaires. Ce transport de porteurs de charges engendre un photo-courant de diffusion.

Dans la zone de charge d'espace, les paires électron-trou photo générés vont être entraînés par le champ électrique vers la région N (électrons) et la région P (trous). Ce déplacement des photos porteuses donne naissance à un photo-courant de génération. Ces deux contributions ensemble ont pour résultat de donner un photo-courant total  $I_{ph}$ . C'est un courant de porteurs minoritaires. Il est proportionnel à l'intensité lumineuse. [9]

### I.9 Paramètres photovoltaïques d'une cellule solaire:

Il existe de nombreux paramètres qui permettent de caractériser une cellule solaire. Ces paramètres sont appelés paramètres photovoltaïques et sont déduits de la caractéristique  $I(V)$ . La figure I.13 représente une caractéristique courant-tension  $I(V)$  dans le noir et sous illumination typique d'une cellule photovoltaïque à jonction PN. Le tracé de cette courbe permet d'accéder à bon nombre de paramètres physiques caractéristiques du composant. Les premiers paramètres qui apparaissent sur la caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque sont le courant de court-circuit  $I_{sc}$ , la tension à circuit ouvert  $V_{oc}$  et le facteur de forme  $FF$  du composant et le rendement  $\eta$ .



**Figure I.12 :** Caractéristique courant-tension et paramètres physiques d'une cellule photovoltaïque. [10]

#### I.9.1 Courant de court-circuit $I_{sc}$ :

Il s'agit du courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule est nul. C'est le plus grand courant que la cellule peut fournir. Celui-ci est en fonction de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule et de la mobilité des porteurs. Ce courant est linéairement dépendant de l'intensité lumineuse reçue. [11]

### I.9.2 Tension de circuit ouvert $V_{oc}$ :

Comme son nom l'indique, c'est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge ou lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie. Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction PN, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts de la couche active-électrode. Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule.

$$V_{oc} = \frac{kT_c}{q} \log\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right)$$

Avec :

$\frac{kT_c}{q}$  : La potentielle thermodynamique.

$T_c$  : La température absolue.

$q$  : La constante de charge d'électron =  $1.602 \cdot 10^{-19} C$ .

$k$  : La constante de Boltzmann =  $1.38 \cdot 10^{-23} J/K$ .

$I_{ph}$  : Le courant photonique.

$I_s$  : Le courant de saturation.

Deux régimes peuvent être observés suivant le degré d'éclairement :

✚ Régime des faibles flux lumineux : dans ce cas,  $I_{ph} \ll I_s$ , ce qui permet d'écrire :

$$\log\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) = \frac{I_{ph}}{I_s}$$

D'où :

$$V_{oc} \approx \frac{kT_c}{q} \left(\frac{I_{ph}}{I_s}\right)$$

C'est la zone de comportement linéaire de la cellule. La formule précédente peut s'écrire aussi

$$V_{oc} \approx R_0 I_{ph}$$

En posant :

$$R_0 = \frac{kT_c}{q I_s}$$

$R_0$ : C'est la résistance interne de la diode en polarisation externe nulle (circuit-ouvert) et sous faible flux lumineux.

✚ Régime des flux lumineux suffisamment intenses pour que  $I_{ph} \gg I_s$ , soit :

$$\frac{I_{ph}}{I_s} \gg 1$$

D'où :

$$V_{oc} = \frac{kT_c}{q} \left(\frac{I_{ph}}{I_s}\right)$$

### I.9.3 Facteur de forme FF :

Un paramètre important est souvent utilisé à partir de la caractéristique  $I(V)$  pour qualifier la qualité d'une cellule ou d'un générateur PV, c'est le facteur de remplissage ou fill factor ( $FF$ ). Ce coefficient représente le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer la cellule notée  $P_{max}$  et la puissance formée par le rectangle  $I_{sc}V_{oc}$ , plus la valeur de ce facteur sera grande, plus la puissance exploitable le sera également. Les meilleures cellules auront donc fait l'objet de compromis technologiques pour atteindre le plus possible les caractéristiques idéales. Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{sc}V_{oc}}$$

### I.9.4 Le rendement $\eta$ :

Le rendement  $\eta$  des cellules PV désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente  $P_{in}$ .

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}}$$
$$\eta = \frac{FF I_{sc}V_{oc}}{P_{in}}$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit-ouvert. Le rendement de conversion est un paramètre essentiel. En effet la seule connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule.

### I.10 Générations des cellules solaires PVs:

Il existe un grand nombre de technologies mettant en œuvre l'effet photovoltaïque, beaucoup sont encore en phase de recherche et développement [12], les principales technologies industrialisées en quantité à ce jour sont : le silicium mono ou poly-cristallin (plus de 80% de la production mondiale) et le silicium en couche mince à base de silicium amorphe ou CIS (Cuivre Indium Sélénium).

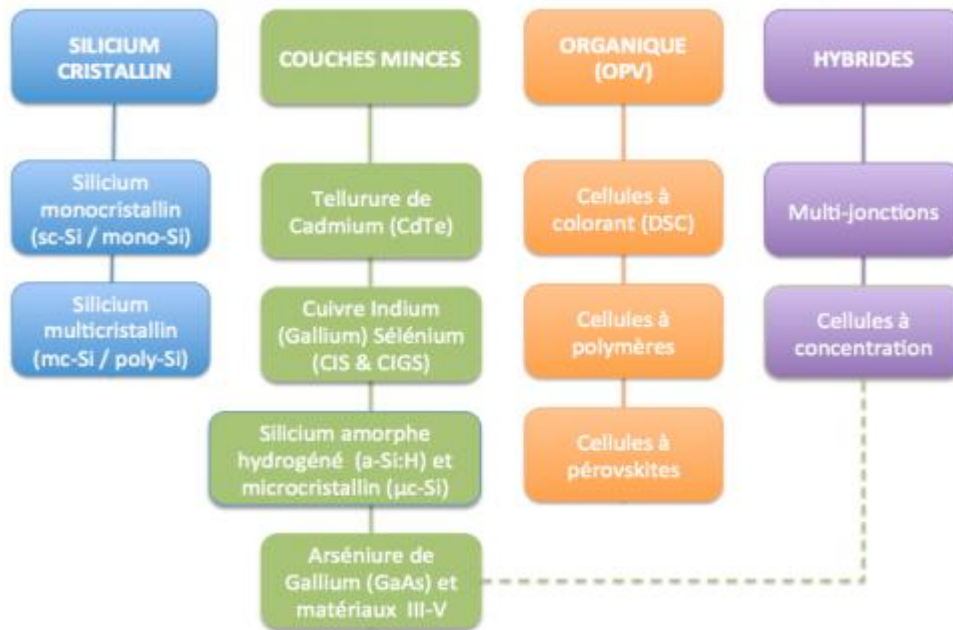


Figure I.13 : Technologies des cellules photovoltaïques. [13]

**I.10.1 Première génération: Silicium cristallin (mono et poly) :**

Cette génération de cellule repose sur les wafers (fine tranches) de silicium cristallin. Ces wafers sont sciés dans des lingots de silicium. Ces lingots sont le résultat d'un processus de purification de manière à obtenir un matériau contenant 99.99999% de Silicium.

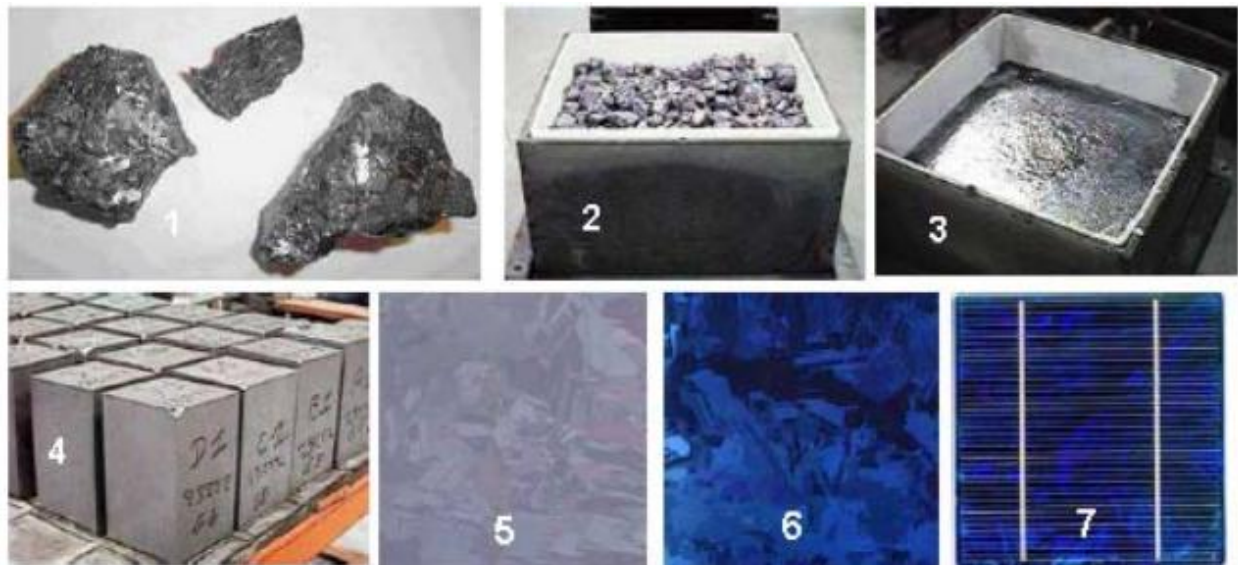
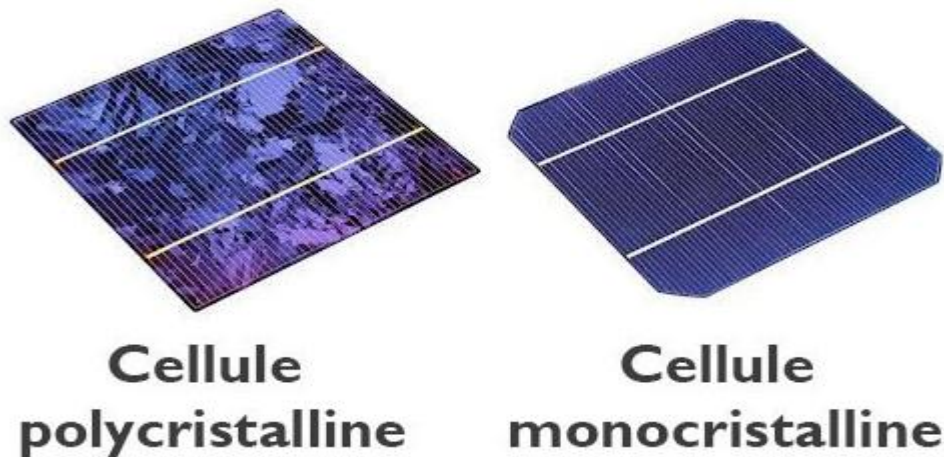


Figure I.14 : Etapes de fabrication des cellules : (1) minéral de Silicium (2) raffinage (Pour augmenter la pureté) (3) Silicium en fusion donnant des lingots (4) après solidification (5) wafer obtenu par sciage du lingot (6) traitement de surface par procédés physico chimiques et (7) cellule finie avec électrodes. [14]

Les cellules cristallines se subdivisent en 2 catégories : mono et poly cristalline selon le type de structure. Ces deux types de cellules proviennent de procédé de purification et de solidification différentes (processus Czochralski (Cz) et processus Siemens). Les procédés de purification Cz et Siemens ont des structures d’approvisionnement différentes et sont généralement réalisées par des industries différentes.



**Figure I.15:** Cellule monocristalline et polycristalline. [15]

Les cellules monocristallines se distinguent à leurs coins cassés et à leur aspect uniforme, les cellules poly-cristallines ont quant à elles un aspect plus irisé provenant de l’orientation des différents réseaux cristallins par rapport au plan de coupe.

### **I.10.2 Deuxième génération: CdTe, CIS/ CIGS, Silicium amorphe microcristallin:**

Cette génération de cellule repose sur la déposition de matériaux semi-conducteurs en couches minces (*thin film*). Ces matériaux sont déposés par des procédés tels que PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapour Deposition) sur un substrat. L’épaisseur de la couche varie entre quelques nanomètres à des dizaines de micromètres. Ces technologies qui étaient initialement chères étaient réservées aux applications spatiales (en raison de leur poids par Watt crête plus faible) et aux technologies de concentration. Avec l’augmentation des volumes de production, le prix de revient de ces technologies abaissé pour devenir compétitif avec les technologies cristallines de la première génération.

Parmi les technologies en couches minces qui sont exploitées industriellement (production de masse), on distingue : CdTe : Cadmium Telluride (Telluride de cadmium), CIS / CIGS : Copper Indium Gallium Selenide, Silicium en couche mince : silicium amorphe  $\alpha$ Si et microcristallin. A noter que le tellurure de cadmium est un alliage de métal lourd, très toxique et peut tout comme le plomb ou le mercure se concentrer dans la chaîne alimentaire. L’UE en a interdit l’usage pour les appareils électriques... exception faite pour les cellules PV...



**Figure I.16:** Modules verre-verre au Telluride de Cadmium, efficacité de 9 à 11%. [14]



**Figure I.17:** Façade en CIGS au Pays de Galles, efficacité de 8,5%. [14]



**Figure I.18:** Module photovoltaïque souple au silicium amorphe  $\alpha$ Si triple jonction pour une efficacité de 6,5% (photo Unisolar). [14]



**Figure I.19 :** Module combinant technologie microcristalline et amorphe pour une efficacité de 8,5% (photo Phoenix Solar). [14]

### **I.10.3 Troisième génération technologies photo-électro-chimiques (Dye Sensitised Cell et Organic PV) :**

Les cellules photovoltaïques organiques sont des cellules photovoltaïques dont au moins la couche active est constituée de molécules organiques. Il en existe principalement deux types:

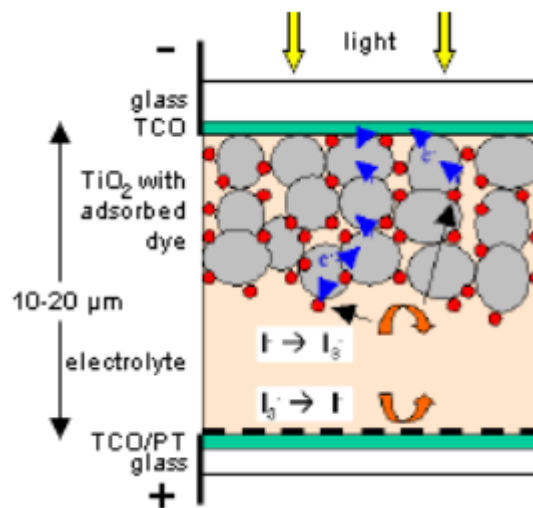
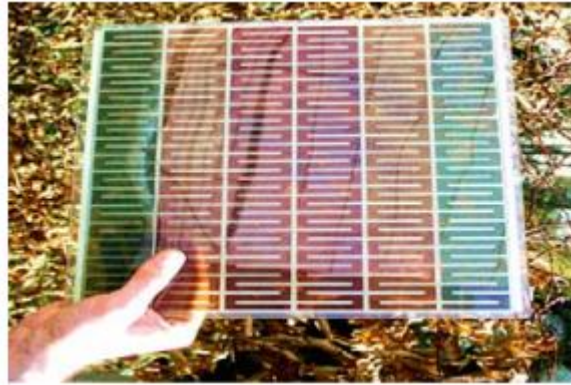
- ✚ Les cellules photovoltaïques organiques moléculaires ;
- ✚ Les cellules photovoltaïques organiques en polymères.

Apparues dans les années 1990, ces technologies ont pour but de réduire le coût de production de l'électricité. Les cellules photovoltaïques organiques bénéficient du faible coût des semi-conducteurs organiques et des simplifications potentielles dans le processus de fabrication. Elles offrent la perspective d'une production en continu (roll-to-roll) qui pourrait réduire drastiquement le prix de revient des panneaux solaires.



**Figure I.20 :** Sac à dos incorporant un module de technologie organique DSC. [14]

Pratiquement ces technologies ne sont utilisées commercialement aujourd'hui que dans le secteur de l'électronique de consommation (chargeur de GSM/ baladeur MP3) où la durée de vie de la cellule et du produit associé sont approximativement égales (2 ans). En améliorant la durée de vie ou en réduisant les coûts de production, d'autres applications devront voir le jour dans les années à venir.



**Figure I.21** : Cellule DSC (Dye Sensitized Cell ) coupe explicative. [14]

Encore au stade de recherche expérimentale, le record de rendement est compris entre 4 et 5% en laboratoire. Avant une possible commercialisation, des avancées concernant l'efficacité et l'encapsulât ion doivent encore être réalisés.

## I.11 Avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque :

### I.11.1 Avantages :

- ✚ Une haute fiabilité, les modules sont garantis pendant 25 ans par la plupart des constructeurs ;
- ✚ Elle ne comporte pas de pièces mobiles qui la rendent particulièrement appropriée aux régions isolées. C'est la raison de son utilisation sur les engins spatiaux ;
- ✚ Le caractère modulaire des panneaux photovoltaïques permet un montage simple et adaptable à des besoins énergétiques divers. Les systèmes peuvent être dimensionnés pour des applications de puissances allant du milliwatt au Mégawatt ;
- ✚ Leurs coûts de fonctionnement sont très faibles vu les entretiens réduits et ils ne nécessitent ni combustible, ni transport et ni personnel hautement spécialisé ;
- ✚ La technologie photovoltaïque présente des qualités sur le plan écologique car le produit final est non polluant, silencieux et peu de déchet.

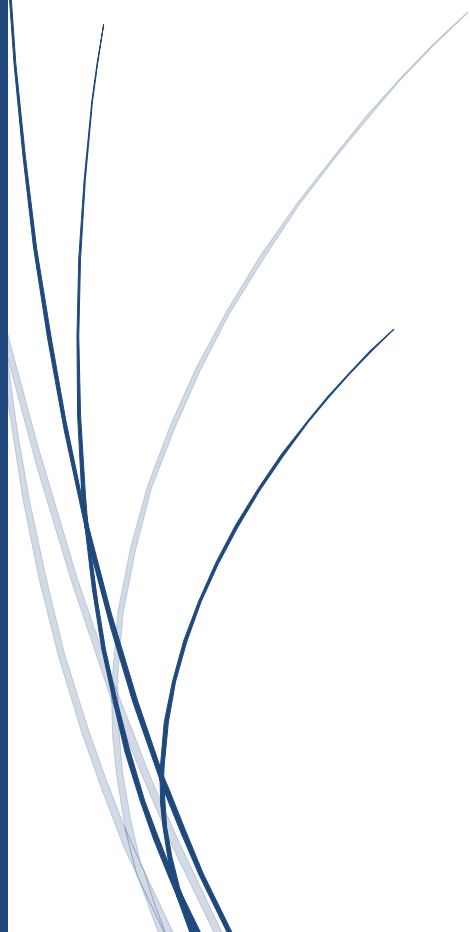
### I.11.2 Inconvénients :

- ✚ La fabrication du module photovoltaïque relève de la haute technologie et requiert des investissements d'un coût élevé ;
- ✚ L'occupation de l'espace pour les installations de grandes dimensions ;
- ✚ Le rendement réel de conversion d'un module est faible (la limite théorique pour une cellule au silicium cristallin est de 28 %) ;
- ✚ Les générateurs photovoltaïques ne sont compétitifs par rapport aux générateurs diesel que pour des faibles demandes d'énergie en régions isolées ;
- ✚ Enfin, lorsque le stockage de l'énergie électrique sous forme chimique (batterie) est nécessaire, le coût du générateur photovoltaïque est accru. La fiabilité et les performances du système restent cependant équivalentes pour autant que la batterie et les composants de régulations associés soient judicieusement choisis.



# Chapitre II

Cellules Solaires A Base De Matériaux Pérovskites



## II.1 Introduction :

Dans ce chapitre, on définit la pérovskite, on présente les récents progrès réalisés et l'avancement dans le domaine des cellules solaires à base de pérovskites. L'importance du choix du matériau pour le transport de trous et pour le transport des électrons, matériau des électrodes, ainsi que des approches visant à améliorer la stabilité du dispositif sont présentés. Nous discutons les paramètres influant sur les performances des cellules à pérovskites, tels que le type de la couche active, le type des couches de transport d'électrons et de trous et l'effet du dopage des différentes couches sur le rendement de conversion des cellules. Un autre point présenté est l'intérêt d'utiliser le graphène dans la technologie des cellules à pérovskites et l'effet du dopage du graphène sur le rendement des cellules.

## II.2 Définition de la 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.Perovski (1792-1856), qui l'a découverte dans les montagnes de l'Oural. C'est un minéral noire ou brun-rouge, d'aspect métallique, assez rare et que l'on retrouve associé à du métamorphisme de contact [16]. Ce nom d'abord désigne le titane de calcium de formule  $\text{CaTiO}_3$ , avant d'être étendu à l'ensemble des oxydes de formule générale  $\text{ABO}_3$  présentant la même structure. Les pérovskites présentant un grand intérêt en raison de la très grande variété de propriétés que présentent ces matériaux selon le choix des éléments A et B : ferroélasticité  $\text{SrTiO}_3$ , ferroélectricité  $\text{BaTiO}_3$ , antiferroélectricité  $\text{PBZrO}_3$ , ferromagnétisme  $\text{YTiO}_3$ , antiferromagnétisme  $\text{LaTiO}_3$ , etc. [17]

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  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . La pérovskite pourrait améliorer les rendements des cellules photovoltaïques. [17]

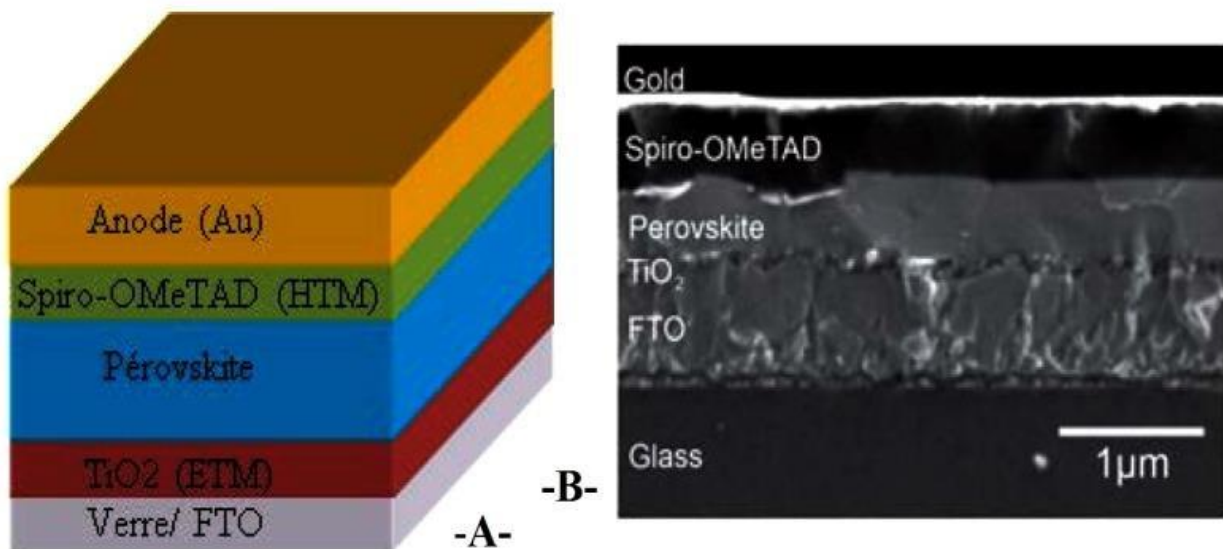
## II.3 Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskites :

Une cellule solaire à pérovskite est constituée d'un substrat verre/FTO sur lequel est déposé l'oxyde d'étain dopé au fluor FTO et sur FTO est déposé le dioxyde de titane  $\text{TiO}_2$ . Le

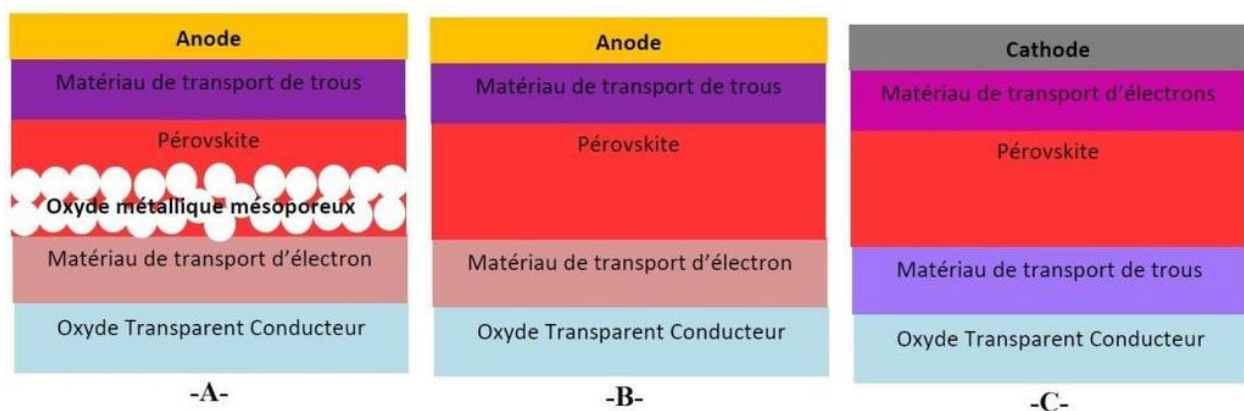
TiO<sub>2</sub> sert à améliorer le transport d'électrons. La couche active est constituée d'un matériau pérovskite. [18]

Pour améliorer le transport de trous, une couche de spiro-OMeTAD est déposée entre l'électrode en Or et la couche active.

La structure obtenue est représentée sur la figure II.1.A. La topographie réalisée avec le microscope électronique à balayage MEB d'une cellule à pérovskite de type verre/FTO/TiO<sub>2</sub>/Pérovskite/Spiro-OMeTAD/Au est représentée sur la figure II.1.B [11]. Différentes architectures et structures de cellules à pérovskites peuvent être réalisées comme le montre la figure II.2. On trouve des structure mésoscopiques figure II.2.A, planaires figure II.2.B ou inversées figure II.2.C.



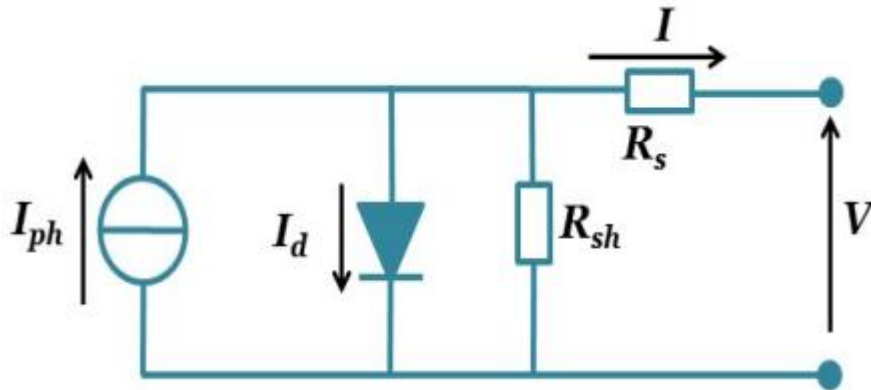
**Figure II.1 :** Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskites (A) structure et (B) Image MEB montrant l'architecture d'une cellule solaire à hétérojonction planaire à base de matériaux pérovskites. [19]



**Figure II.2 :** Différentes structures d'une cellule à pérovskites (A) mésoscopique, (B) planaire et (C) inversée.

#### II.4 Schéma équivalent d'une cellule solaire à pérovskites :

Une cellule solaire à pérovskites peut être modélisée par un schéma équivalent comme le montre la figure II.3. Elle est constituée d'un générateur de courant  $I_{ph}$  en parallèle avec une diode D. La résistance série  $R_s$  représente les interfaces entre électrodes et couche de pérovskite. La résistance parallèle  $R_{sh}$  représente les phénomènes de recombinaison des matériaux pérovskites.



**Figure II.3:** Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque à base de pérovskites. [20]

#### II.5 Comparaison des performances de quelques cellules solaires à pérovskites :

Les performances des cellules photovoltaïques à base des matériaux pérovskites dépendent de plusieurs paramètres tels que l'architecture de la cellule, les matériaux utilisés pour la couche active, les couches inter-faciales pour le transport des électrons ETM et pour le transport des trous HTM et le type d'électrodes ainsi que les techniques et les conditions de fabrication.

Le tableau II.1 donne les performances de quelques cellules de la nouvelle génération à base de matériaux pérovskites.

**Tableau II.1 :** Comparaison des performances des cellules solaires à base de matériaux pérovskites.

Structure de la cellule	$I_{sc}$ mA/cm <sup>2</sup>	$V_{oc}$ V	FF %	$\eta$ %	Réf
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> -xxClx/spiroOMeTAD/Au	15.3	0.8	55	6.7	[19]
FTO/SnO <sub>2</sub> /TiO <sub>2</sub> /MAPbI <sub>3</sub> -x(Ac)x/Au	23.68	1.06	68	17.07	[21]
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /Po-SpiroOmeTAD/Au	22.3	0.98	68.2	15.4	[22]
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> : ITIC/Po-Spiro-OmeTAD/Au	23.74	1	72.8	17.59	[22]
FTO/TBD-TiO <sub>2</sub> /MAPbI <sub>3</sub> /Spiro-OMeTAD/Au	20.5	1.05	63.1	13.9	[23]
FTO/TT-TiO <sub>2</sub> /MAPbI <sub>3</sub> /Spiro-OMeTAD/Au	23.2	1.1	68	17.4	[23]

ITO/SnO <sub>2</sub> /MAPbI <sub>3</sub> /spiro-OMeTAD/Au	22.01	1.05	69	15.98	[24]
ITO/SnO <sub>2</sub> /MAPbI <sub>3</sub> -(Gua1-xMAx)PbI <sub>3</sub> /spiro-OMeTAD	22.46	1.1	75	18.54	[24]
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /rGO/FTO (rGOpur)	15.86	0.71	45	5.10	[25]
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /B-rGO/FTO (10% de bore)	15.91	0.71	56	7.09	[25]
FTO/TiO <sub>2</sub> /CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> /B-rGO/FTO (20% de Bore)	16.74	0.88	60	8.96	[25]
ITO/PEDOT:PSS/CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> (MAPbI <sub>3</sub> )/PCBM/BCP/Al.	18.94	1.01	74.01	14.6	[26]
ITO/AuCl <sub>3</sub> -GR/PEDOT:PSS/CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub> (MAPbI <sub>3</sub> )/PCBM/BCP/Al.	20.13	1.01	77.53	15.77	[26]

La réalisation de cellule à hétérojonction volumique BHJ-pérovskite par ajout de 0.2% de ITIC (3,9-bis(2-méthylène-(3-(1,1-dicyanométhylène)-indanone))-5,5,11,11-tétrakis (4 hexylphényl)-dithiène[2,3-d':3'-d']-s-indacène[1,2-b:5,6-b'] dithiophène) dans la pérovskite présente un rendement de conversion de 17.6 %, ceci est dû à l'amélioration du courant de court-circuit 23.7 mA/cm<sup>2</sup> comparé à la cellule de référence sans ITIC. L'ajout de ITIC joue un rôle important dans l'amélioration de la qualité du film pérovskite comme l'amélioration de l'absorption et la réduction de la rugosité 12.3 nm des films pérovskites et la mobilité des électrons  $\mu_e = 1.43 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \cdot \text{s}$ .

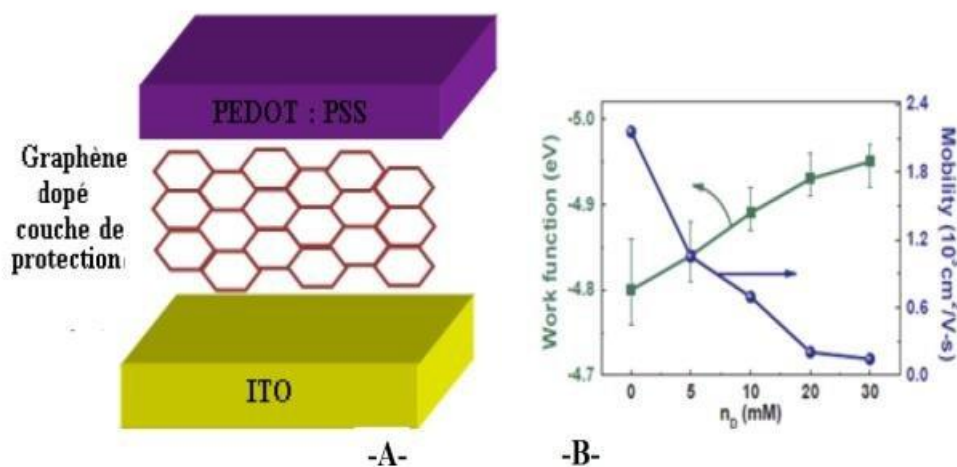
L'ajout d'ITIC améliore la stabilité thermique des cellules solaires à base de matériaux pérovskites [8]. Le précurseur utilisé pour la préparation des couches de transport d'électrons TiO<sub>2</sub> affecte la qualité de l'ETM et le rendement des cellules. Des couches de transport d'électrons TiO<sub>2</sub> (ETM) sont préparées par différents précurseurs de titanate de tétra butyle (TT) et diisopropoxyde bis (acétylacétonate) de titane (TDB). Le TT est plus approprié pour préparer du TiO<sub>2</sub> de haute qualité. Les cellules solaires à base de pérovskite dont l'ETM à base de TT-TiO<sub>2</sub> présentent un meilleur rendement PCE = 17.4 % [7]. TT-TiO<sub>2</sub> ETM possède une qualité d'interface supérieure, ceci est due la recombinaison des porteurs réduite entraînant une augmentation des performances photovoltaïques [23].

La présence de molécule de guanidinium (Gua) à l'interface entre le film pérovskite MAPbI<sub>3</sub> et la couche de transport de trous spiro-OMeTAD améliore les propriétés photovoltaïques en particulière la tension de circuit-ouvert  $V_{oc}$ , ainsi que la stabilité des dispositifs photovoltaïques. Un rendement de conversion de 18.54 % et un  $V_{oc}$  de 1.1 V sont obtenus. Les molécules de Gua permettent d'éliminer les pertes de porteurs de charge non radiative dans les cellules hybrides pérovskites [24].

L'ajout de bromures de cuivre CuBr ou CuBr<sub>2</sub> aux matériaux pérovskites CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3-x</sub>Cl<sub>x</sub> améliore le rendement des cellules. Un rendement de conversion de 7.33 % est obtenu pour une cellule de référence avec CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3-x</sub>Cl<sub>x</sub>. Le rendement des cellules avec CuBr est de 9.01 % et le rendement des cellules avec CuBr<sub>2</sub> est de 11.2 % [27].

Des études ont montré la possibilité d'utiliser l'oxyde de graphène GO et l'oxyde de graphène réduit rGO pur ou dopé avec du bore B-rGO en tant que matériaux pour le transport de trous, des cellules de type FTO/TiO<sub>2</sub>/CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>/B-rGO/FTO avec une surface active de 01 cm<sup>2</sup> ont été réalisées. Les résultats montrent que des films minces de rGO pur, dopés au bore à 10 % et 20 % peuvent être utilisés comme HTM, les rendements obtenus pour ces films sont 5.1 %, 7.09 % et 8.96 % respectivement [25].

Une nouvelle architecture d'électrodes peut être utilisée comme la montre la figure II.4.A. Cette architecture consiste à insérer une couche protectrice de graphène dopé entre l'anode et la couche de transport des trous. Une couche protectrice à base de AuCl<sub>3</sub>-Gr est utilisée entre l'ITO et le PEDOT : PSS pour améliorer le transport des trous. Un rendement de 15.77 % est obtenu en dopant le graphène par 10mM de AuCl<sub>3</sub>. Cette couche protectrice permet d'améliorer aussi la stabilité des cellules [26].



**Figure II.4 :** (A) Structure de l'électrode avec la couche protectrice de graphène dopé avec AuCl<sub>3</sub> et (B) travail de sortie et mobilité du graphène pur et du graphène dopé avec AuCl<sub>3</sub> pour diverse concentration N<sub>D</sub>. [26]

D'autres architectures d'électrode multicouche de type oxyde transparent conducteur/Métal/oxyde transparent conducteur (O/M/O) peuvent être réalisées pour améliorer le rendement des cellules à pérovskite. Du fait que l'utilisation des électrodes multicouches a montré des rendements améliorés dans le cas des cellules organiques.

## II.6 Conclusion :

L'amélioration des performances des dispositifs photovoltaïques à base de matériaux pérovskites nécessite le développement de nouveaux matériaux, l'optimisation de la structure des cellules et les technologies de fabrication associées. Des recherches plus profondes dans ce domaine peuvent ouvrir de nouvelles voies pour accroître le rendement de conversion et permettent une compréhension plus complète du principe de fonctionnement de ces dispositifs.

L'utilisation de l'oxyde de graphène, rGO permet la possibilité de réaliser des cellules à pérovskites à grande surface avec rendement élevé. L'insertion d'une couche protectrice entre l'anode d'ITO et la couche de transport de trous PEDOT:PSS améliore les performances des cellules à pérovskites.

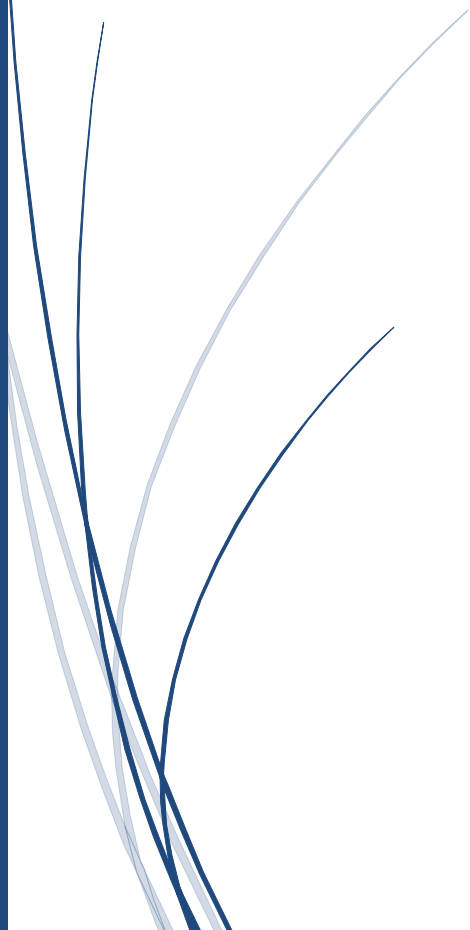
Une des solutions pour augmenter la durée de vie des cellules à pérovskites et améliorer leur stabilité est l'encapsulation des dispositifs, ceci dans le but d'arrêter la diffusion de l'oxygène, de l'eau et les impuretés dans la cellule.

Il existe deux types d'encapsulation: encapsulation classique qui utilise les matériaux plastiques simples tels que le polystyrène et le PMMA et l'encapsulation fonctionnelle à base de matériaux fluorescents mélangés dans une matrice polymère. L'encapsulation fonctionnelle a deux avantages: bloquer la diffusion de l'oxygène et de l'eau dans la couche active et augmenter le rendement par effet down conversion. Donc le problème de la dégradation et de stabilité des cellules doit être résolu pour assurer une bonne reproductibilité et une longue durée de vie avec des rendements de conversion élevés.



# Chapitre III

Présentation Du Logiciel SCAPS-1D



### III.1 Logiciel SCAPS :

La simulation des cellules en couches minces est devenue de plus en 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 le logiciel AMPS-1D, PC-1D, ASA, SCAPS-1D, SILVACO etc.

SCAPS-1D acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator One Dimension » est un programme développé à l'université de Gent en Belgique avec Windows/CVI National Instruments par Marc Burgelman et AL. Ce programme est conçu spécialement pour la simulation des dispositifs photoniques tels que les cellules au CdTe et CIGS.

Parmi les principaux avantages de SCAPS-1D :

- ✚ Les fichiers d'entrée sont accessibles à l'utilisateur en format texte tel que les données spectrales et les paramètres décrivant le dispositif.
- ✚ Possibilité d'introduire des interfaces et prise en compte du phénomène de recombinaison en celle-ci.
- ✚ Introduction de résistances en série et obtention des caractéristiques capacité-tension et capacité –fréquence.
- ✚ C'est un logiciel qui présente une grande vitesse d'exécution.

C'est la fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS.

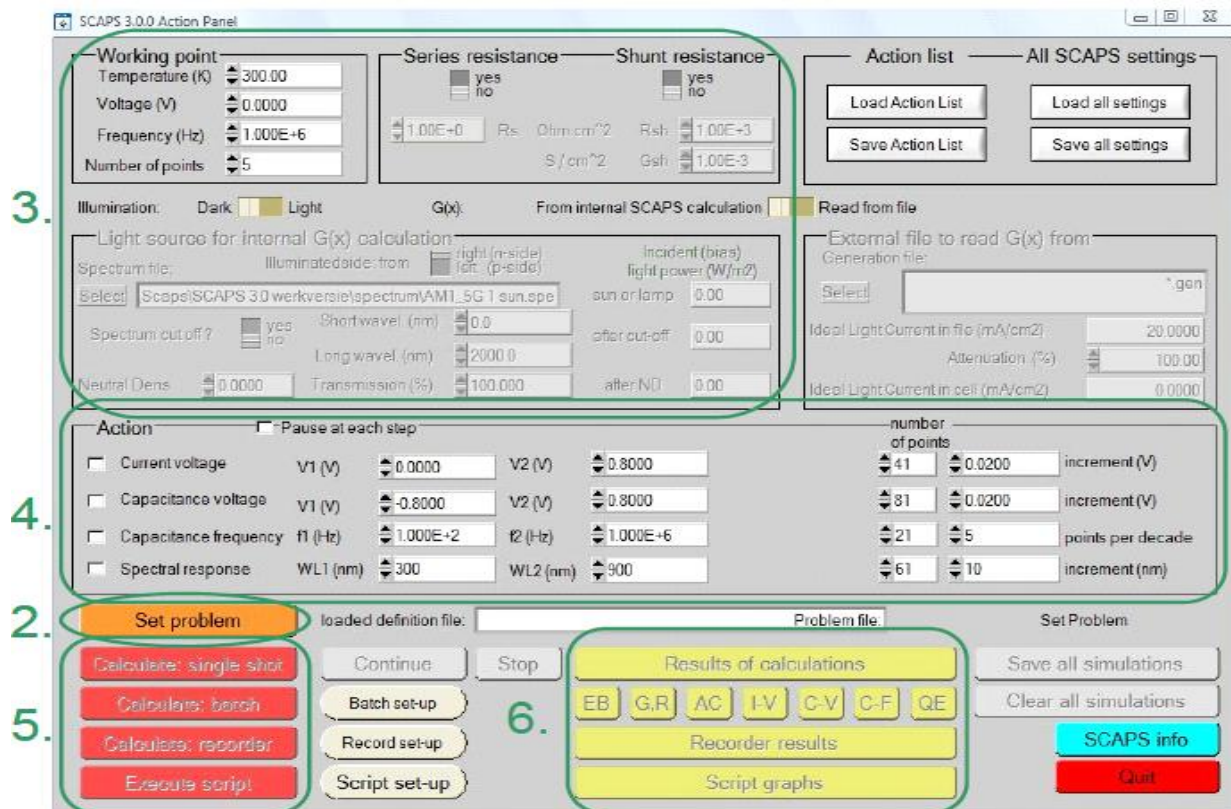


Figure III.1 : Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS.

La description des blocs numérotés de 1 à 6 est :

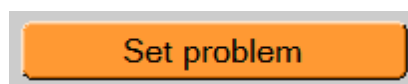
1. Lancer SCAPS.
2. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée.
3. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de fonctionnement).
4. Indiquer la mesure à simuler.
5. Commencer le(s)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

### III.1.1 Lancer SCAPS :

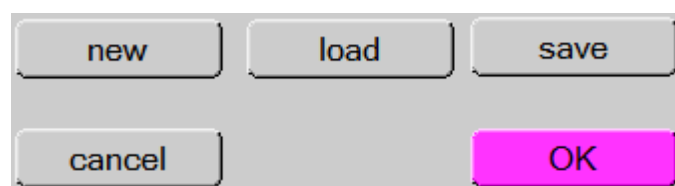


On clique sur l'icône ci-dessus sur le bureau ou bien double-clique sur le fichier SCAPS3308.EXE dans le gestionnaire des fichiers, SCAPS s'ouvre avec le panneau d'action.

### III.1.2 Définir le problème :

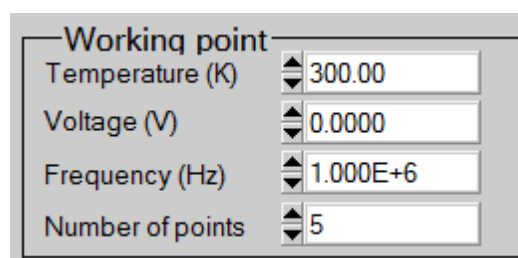


On clique sur le bouton SET PROBLEM dans le panneau d'action, ensuite on choisit NEW ou bien LOAD dans le coin droit en bas du panneau qui s'ouvre par la suite. NEW pour créer une nouvelle cellule et LOAD pour ouvrir ou modifier les propriétés d'une cellule déjà créée (par exemple NUMOS CIGS Baseline.def c'est un fichier exemple d'une cellule solaire à base de CIGS).



### III.1.3 Définir le point de fonctionnement :

Le point de fonctionnement spécifie les paramètres qui ne sont pas variables dans les mesures de la simulation et qui sont relatifs à l'opération de mesure.



Ces paramètres sont :

- ✚ La température  $T$  : Importante pour toutes les mesures.  
Note : dans SCAPS :  $N_c(T), N_v(T)$ , les vitesses thermiques, le voltage thermique  $kT$  et tous leurs dérivés sont les seuls variables qui ont une dépendance thermique explicite ; on doit saisir manuellement pour chaque valeur  $T$  les paramètres du matériau correspondant.
- ✚ Le voltage  $V$  : Il ne concerne pas les simulations I-V et C-V. C'est le voltage de la polarisation DC dans une simulation C-f et  $QE(\lambda)$ . SCAPS commence toujours à 0 V et s'exécute au voltage du point de fonctionnement par un nombre d'étapes qu'on doit aussi spécifier.
- ✚ La fréquence  $f$  : Elle ne concerne pas les simulations I-V,  $QE(\lambda)$  et C-f. C'est la fréquence dans laquelle la caractéristique C-V est simulée.
- ✚ L'illumination : Elle est utilisée dans toutes les mesures. Pour  $QE(\lambda)$ , elle détermine les conditions de polarisation de la lumière. Les paramètres de base sont : l'obscurité ou la lumière, le choix du côté illuminé, le choix du spectre. Le spectre d'illumination on Sun (= 1000 W/m<sup>2</sup>) avec la masse d'air 1.5 global est le spectre par défaut, mais il existe aussi une large gamme de lumières monochromatiques et de spectres pour plus de simulations personnalisées. S'il y a un simulateur optique, on peut immédiatement charger un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre.
- ✚ Nombre des points : Le nombre des points utilisé pour tracer les courbes.

### III.1.4 Sélection des mesures à simuler :

Dans la partie « Action » du panneau d'action, on peut choisir un ou plusieurs mesures à simuler: IV, C-V, C-f et  $QE(\lambda)$ . On peut ajuster également les valeurs initiales et finales de l'argument ainsi que le nombre des étapes.

Action	<input type="checkbox"/> Pause at each step			<input type="checkbox"/> Stop after Voc	number of points		
<input checked="" type="checkbox"/> I-V		V1 (V) <input type="text" value="0.0000"/>	V2 (V) <input type="text" value="0.8000"/>		<input type="text" value="41"/>	<input type="text" value="0.0200"/>	increment (V)
<input checked="" type="checkbox"/> C-V		V1 (V) <input type="text" value="-0.8000"/>	V2 (V) <input type="text" value="0.8000"/>		<input type="text" value="81"/>	<input type="text" value="0.0200"/>	increment (V)
<input checked="" type="checkbox"/> C-f		f1 (Hz) <input type="text" value="1.000E+2"/>	f2 (Hz) <input type="text" value="1.000E+6"/>		<input type="text" value="21"/>	<input type="text" value="5"/>	points per decade
<input checked="" type="checkbox"/> QE (IPCE)		WL1 (nm) <input type="text" value="300.00"/>	WL2 (nm) <input type="text" value="900.00"/>		<input type="text" value="61"/>	<input type="text" value="10.00"/>	increment (nm)

### III.1.5 Lancer le calcul :

**Calculate: single shot**

On clique sur le bouton « Calculate : single shot » pour lancer la simulation.

### III.1.6 Afficher les courbes simulées :

Après les calculs, SCAPS passe au panneau de bande d'énergie présenté dans la figure III.2, dans ce panneau on peut voir les diagrammes de bandes, les densités des porteurs libres, la densité du courant ; au dernier point de polarisation. Si on veut afficher les résultats pour des tensions intermédiaires, on utilise le bouton « pause » dans le panneau d'action. On peut faire apparaître les résultats par les commandes PRINT, SAVE GRAPHS et SHOW et les valeurs s'affichent par la suite à l'écran. Il est possible de faire du Couper et Coller vers, par ex., Excel, ou Sauvegarder les valeurs dans un fichier de données. On peut basculer vers un de panneaux personnalisés (si on a toutefois simulé au moins une seule opération de mesure).

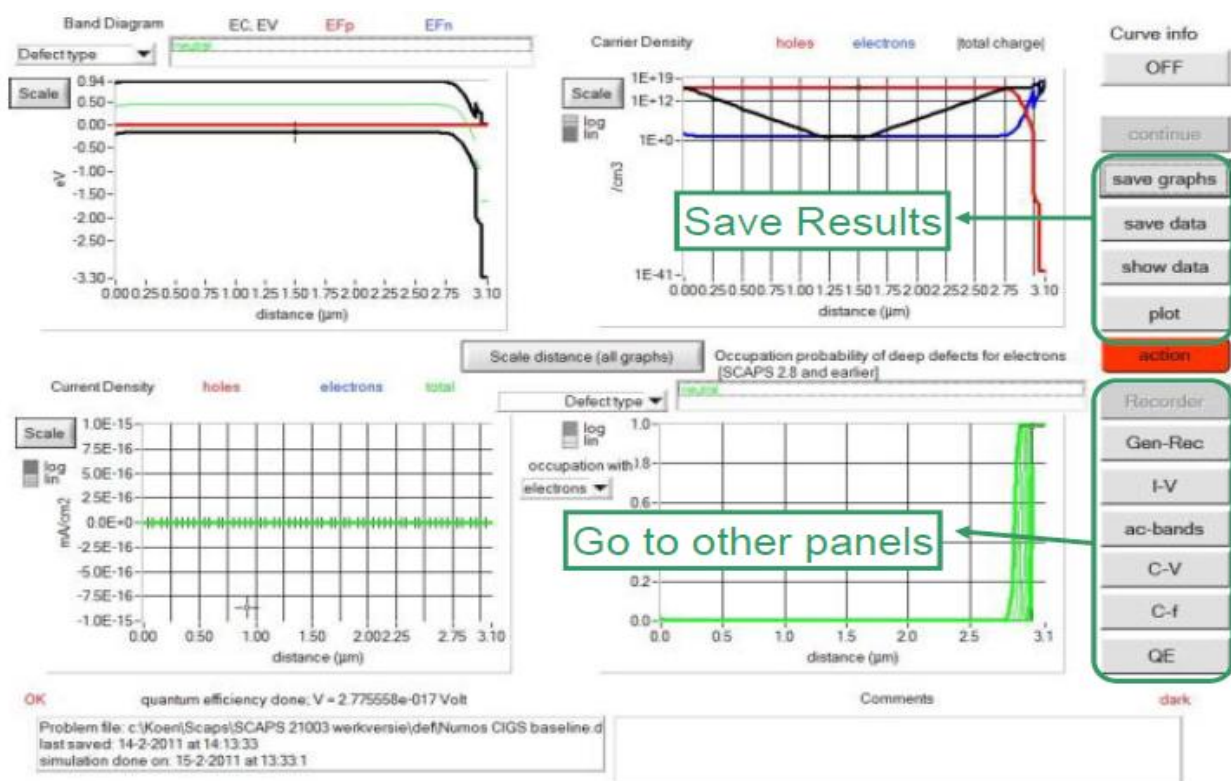


Figure III.2 : Panneau des bandes d'énergie.

### III.1.7 Courbes I-V :

La figure III.3 montre le panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et sous éclairage. La couleur de la dernière courbe calculée est indiquée (lorsque le graphe est trop encombré, on clique CLEAR ALL GRAPHS dans le panneau d'action). Les courbes des taux de recombinaison sont affichées seulement pour la dernière simulation. La couleur de la légende correspond à la couleur de la courbe. Si CURVE INFO est sur ON et si on clique sur une courbe du graphe un panneau pop-up apparaîtra avec des informations concernant le graphe, la courbe ainsi que le point cliqué.

Le bouton SCALE aide à changer la gamme et l'échelle des axes. Si on appuie sur le bouton CTRL et on sélectionne une aire rectangulaire dans un graphe, celui-ci fera un zoom intérieur (agrandissant) dans la zone sélectionnée. L'appui sur le bouton CTRL accompagné d'un clic droit donnera un zoom extérieur (Zoom out).

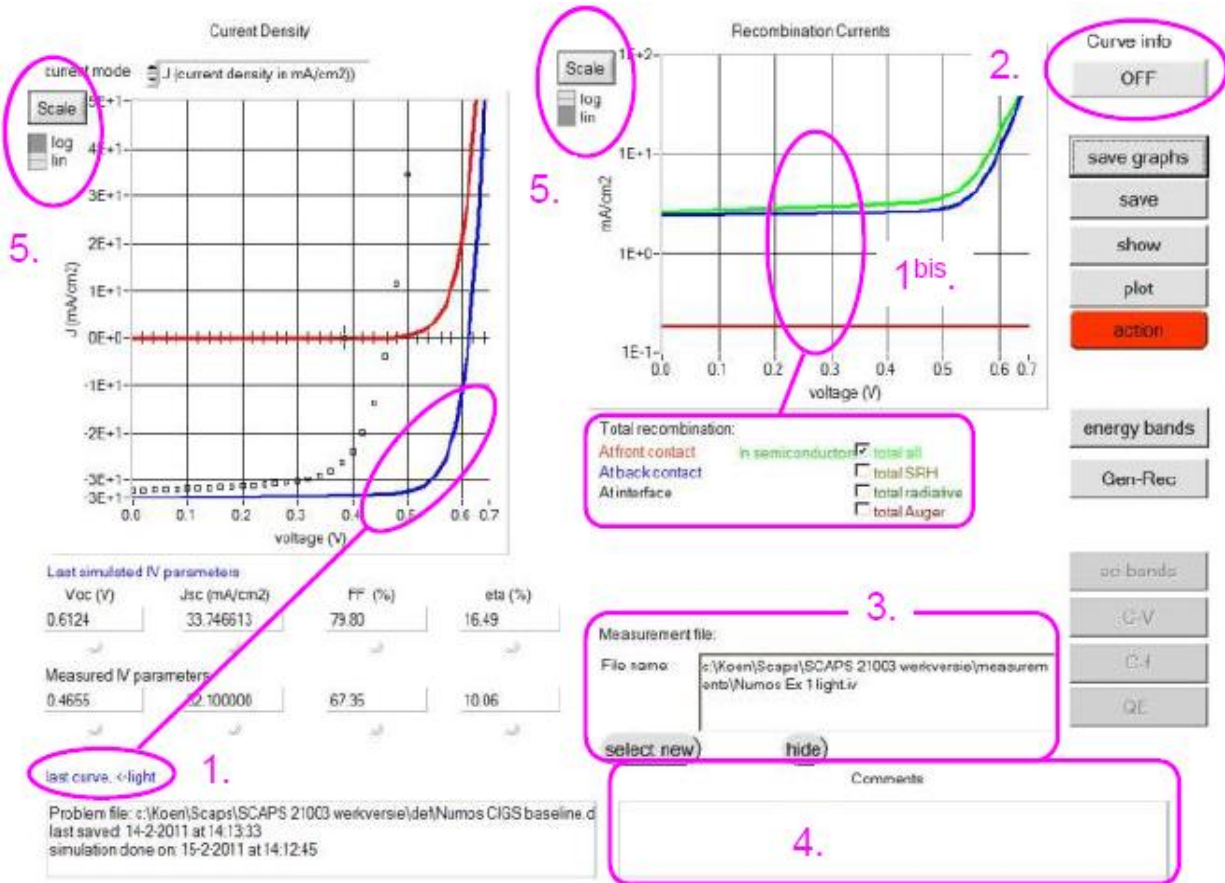


Figure III.3 : Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.

### III.2 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 ou bien de les charger à partir d'autres fichiers. Ces fichiers de définition sont des fichiers standards ASCII (American Standard Code for Information Inter change) d'extension « .def » qui peuvent s'ouvrir avec Notepad.exe ou Wordbad.exe. Il est déconseillé de les modifier au risque de les rendre inutilisables par la suite.

Les propriétés des couches, des contacts et d'interfaces peuvent être modifiées en cliquant sur le bouton approprié comme le montre la figure III.4. De la même manière, des couches peuvent être rajoutées en cliquant 'ADD LAYER'.

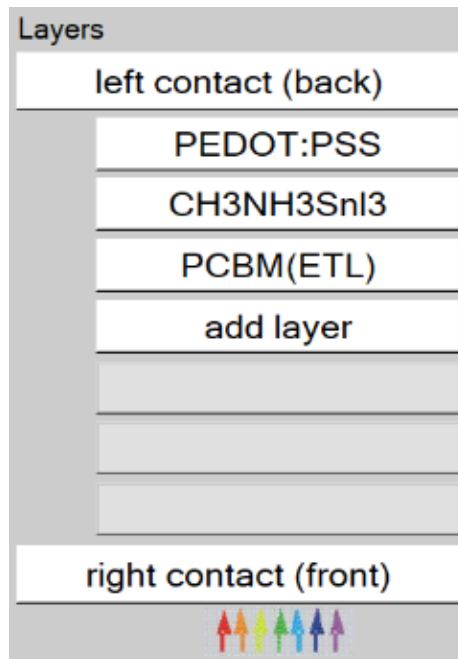


Figure III.4 : Définition de la structure d’une cellule solaire.

**III.2.1 Contacts de la cellule solaire:**

Les propriétés des contacts peuvent être introduits soit en cliquant sur le bouton du contact avant ou celui du contact arrière sur le panneau de définition de la cellule. Un panneau des propriétés de contact CONTACT PROPERTIES PANEL s’ouvre comme le montre la figure III.5.

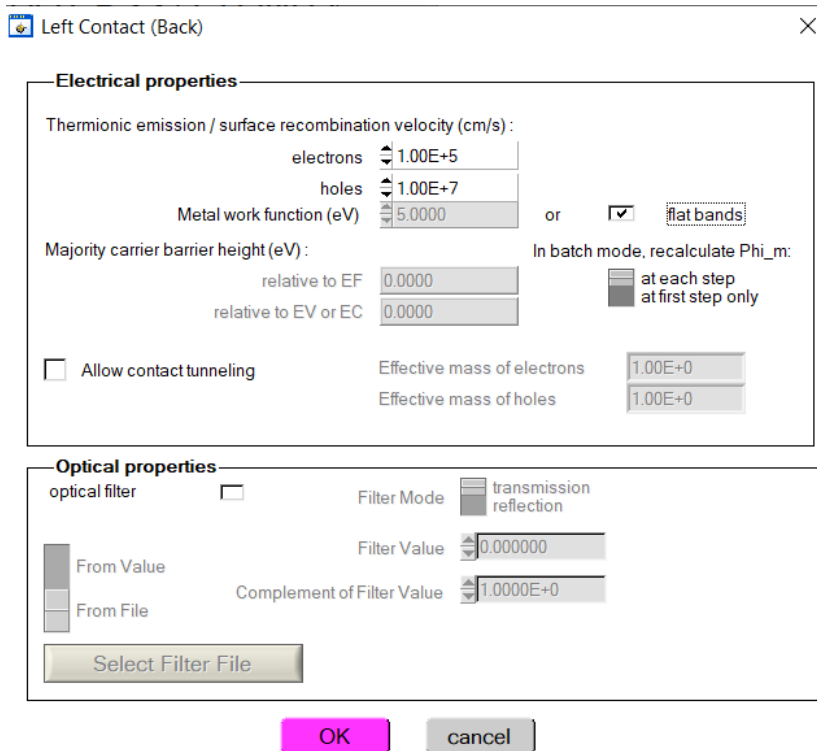


Figure III.5 : Panneau des propriétés des contacts.

Les propriétés des contacts se divisent en propriétés électriques et optiques. Dans les propriétés électriques, on définit :

- ✚ Les vitesses de recombinaison surfaciques des électrons et des trous libres ;
- ✚ Si le contact a un travail de sortie, ou il est idéal (régime de bande plates) ;
- ✚ La barrière des porteurs majoritaires ;
- ✚ L'effet tunnel (si on veut en tenir compte).

Pour les propriétés optiques, on peut définir :

- ✚ La transmission ou la réflexion par une valeur ou un fichier de données.

### III.2.2 Définition des couches de la cellule solaire:

En cliquant sur le bouton « add layer » dans la vue Solar Cell Definition Panel, une fenêtre s'ouvre qui contient les différents paramètres du matériau à introduire comme indiquée sur la figure III.6. Ces paramètres peuvent avoir des distributions uniformes ou non uniformes selon la physique du matériau. Les propriétés de la couche sont les suivants du haut au bas :

- ✚ Le nom de la couche (qui correspond au type du dopage) ;
- ✚ L'épaisseur de la couche ;
- ✚ La pureté du matériau et son profile ;
- ✚ Le gap d'énergie, l'affinité électronique, la permittivité diélectrique relative, les densités effectives des bandes de conduction et de valence, vitesse thermiques des électrons et des trous libres, les mobilités des électrons et des trous ;
- ✚ Les masses effectives des électrons et des trous si on tient compte du transport des porteurs par effet tunnel ;
- ✚ Si le matériau est un composé d'éléments avec des concentrations non uniforme, on peut introduire des variations graduelles des précédents paramètres ;
- ✚ Le type de dopage et la densité, le dopage aussi peut être introduit comme étant uniforme, comme il peut avoir des variations graduelles (linéaire, paraboliques,...) ;
- ✚ L'absorption de la couche comme le montre la figure III.7 peut être définie par le modèle analytique fourni par SCAPS comme elle peut introduite sous forme de données. SCAPS fourni un nombre de données de l'absorption pour plusieurs types de semi-conducteurs. On peut également utiliser d'autres données de l'absorption pour des semi-conducteurs non disponibles dans SCAPS à condition que le fichier ait la même extension des fichiers de l'absorption fournis par SCAPS.

SCAPS 3.3.08 Layer Properties Panel	
LAYER 2	CH3NH3SnI3
thickness (μm)	1.000
	uniform pure A (y=0)
The layer is pure A: y = 0, uniform	0.000
Semiconductor Property P of the pure material	pure A (y = 0)
bandgap (eV)	1.300
electron affinity (eV)	4.170
dielectric permittivity (relative)	8.200
CB effective density of states (1/cm <sup>3</sup> )	1.000E+18
VB effective density of states (1/cm <sup>3</sup> )	1.000E+18
electron thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
electron mobility (cm <sup>2</sup> /Vs)	1.600E+0
hole mobility (cm <sup>2</sup> /Vs)	1.600E+0
<input type="checkbox"/> Allow Tunneling	
effective mass of electrons	1.000E+0
effective mass of holes	1.000E+0
no ND grading (uniform)	
shallow uniform donor density ND (1/cm <sup>3</sup> )	0.000E+0
no NA grading (uniform)	
shallow uniform acceptor density NA (1/cm <sup>3</sup> )	3.200E+15

Figure III.6 : Propriétés de la couche ajoutée.

Absorption model	Show / Set alpha(composition; lambda)	
	alpha (y=0)	alpha (y=1)
	from model from file	from model from file
absorption constant A (1/cm eV <sup>1/2</sup> )	1.000E+5	1.000E+4
absorption constant B (eV <sup>1/2</sup> /cm)	0.000E+0	0.000E+0
	sorption\CuInSe2.abs	
	absorption file for y = 0	absorption file for y = 1

Figure III.7 : Modèle de l'absorption.

Le type des recombinaisons en volume présent est indiqué dans le côté droite du panneau des propriétés de la couche comme présenté sur la figure III.8. Tous les types des recombinaisons sont présents directs ou à travers des pièges.

Band to band recombination			
Radiative recombination coefficient (cm <sup>3</sup> /s)	1.000E-5	1.000E-5	uniform
Auger electron capture coefficient (cm <sup>6</sup> /s)	1.000E-25	1.000E-25	uniform
Auger hole capture coefficient (cm <sup>6</sup> /s)	1.000E-25	1.000E-25	uniform

Defect 4 of layer 1		
defect type	Single Donor (0/+)	
capture cross section electrons (cm <sup>2</sup> )	1.000E-15	
capture cross section holes (cm <sup>2</sup> )	1.000E-15	
energetic distribution	Gauß	
reference for defect energy level Et	Above EV (SCAPS < 2.7)	
energy level with respect to Reference (eV)	0.600	
characteristic energy (eV)	0.200	
Nt grading dependent on position x: Nt(x) exponential		
Nt total (1/cm <sup>3</sup> )	Left (x=0) 1.000E+15	Right (x=1) 1.000E+14
Nt peak (1/eV/cm <sup>3</sup> )	Left (x=0) 2.821E+15	Right (x=1) 2.821E+14

**Figure III.8 :** Définition des types de recombinaison présents.

Si on introduit les défauts (pièges), ils peuvent être uniformes ou non uniformes, discrets, avec des distributions gaussiennes, donneurs, accepteurs, neutres, monovalents ou divalents. On peut même définir des transitions de porteurs entre les différents niveaux d'énergie des pièges.



# Chapitre IV

Résultats Et Discussions

### IV.1 Introduction :

Dans ce travail, nous rapportons une modélisation numérique de cellule solaire à base de pérovskite à base de Tri-iodure d'étain méthylammonium  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  à l'aide du programme de simulation SCAPS-1D. Pour améliorer les performances du dispositif, l'amélioration de la structure du dispositif et des matériaux de transport d'électrons et de transport de trous est le moyen efficace. Par conséquent, cette étude est principalement axée sur le choix de matériaux de transport de trous (HTM) et des matériaux de transport d'électrons (ETM) potentiellement très stables pour améliorer la reproductibilité et la stabilité des cellules solaires à base de pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

### IV.2 Structure et propriétés des couches de cellule étudiée :

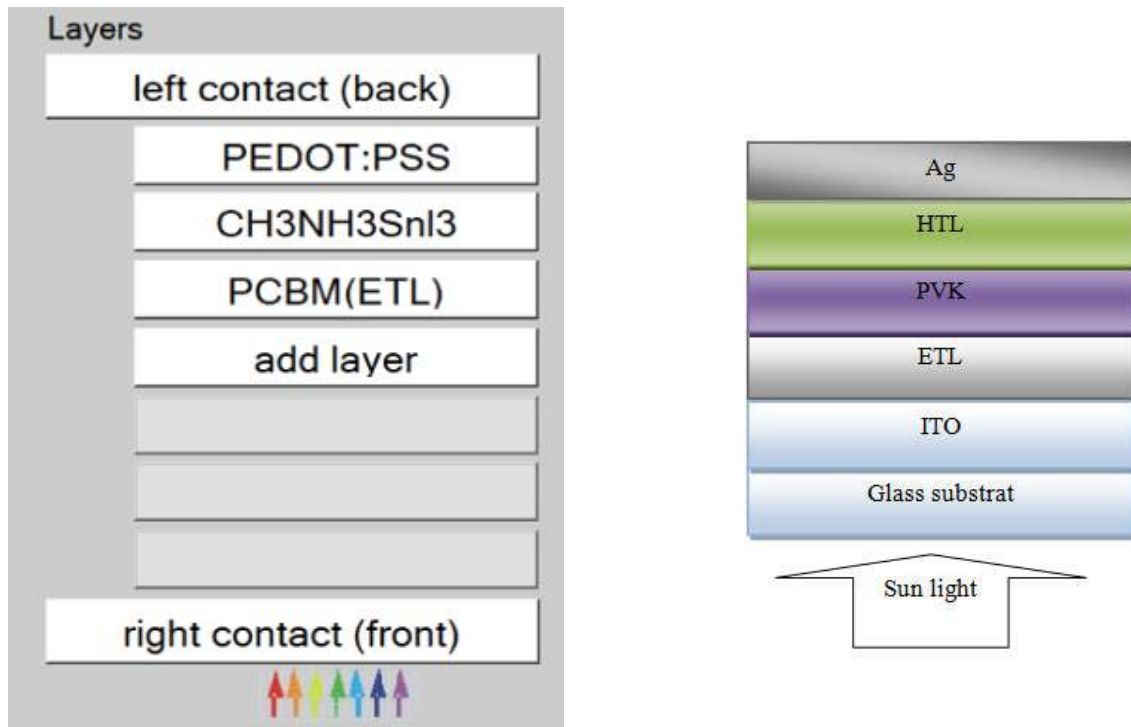
La structure N-I-P de cellule solaire de pérovskite proposée est donnée sur la figure IV.1 où une couche absorbante la pérovskite (PAL) est prise en sandwich entre un matériau de transport d'électrons (ETM) et un matériau de transport des trous (HTM). La conception PSC considérée est basée sur Tri-iodure d'étain méthylammonium  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  en tant que couche absorbante et PCBM en tant que matériau de transport d'électrons et PEDOT:PSS en tant que matériau de transport des trous, dans les cellules en pérovskite, l'HTL est connecté au contact arrière métallique (Ag) et l'ETL à l'oxyde d'indium-étain conducteur transparent (ITO).

Le tableau IV.1 résume les propriétés électriques et optiques de chaque couche soigneusement sélectionnés dans la littérature. La cellule solaire est exposée à un spectre solaire AM 1.5 standard sous une densité de puissance incidente de  $100 \text{ mW/cm}^2$ . Dans toutes les simulations, les valeurs de pré-facteur A et B (voir équation 01) sont considérées comme étant respectivement égales à  $10^5$  et 0 pour tous les matériaux utilisés pour la simplicité du calcul.

$$\alpha = (A + B / hv) \cdot (hv - E_g)^{1/2} \quad (01)$$

Où :  $\alpha$ ,  $h$ ,  $v$ ,  $E_g$  sont respectivement le coefficient d'absorption, la constante de Plank, la fréquence de la lumière et la bande interdite, et A et B sont des paramètres dépendants du modèle [29].





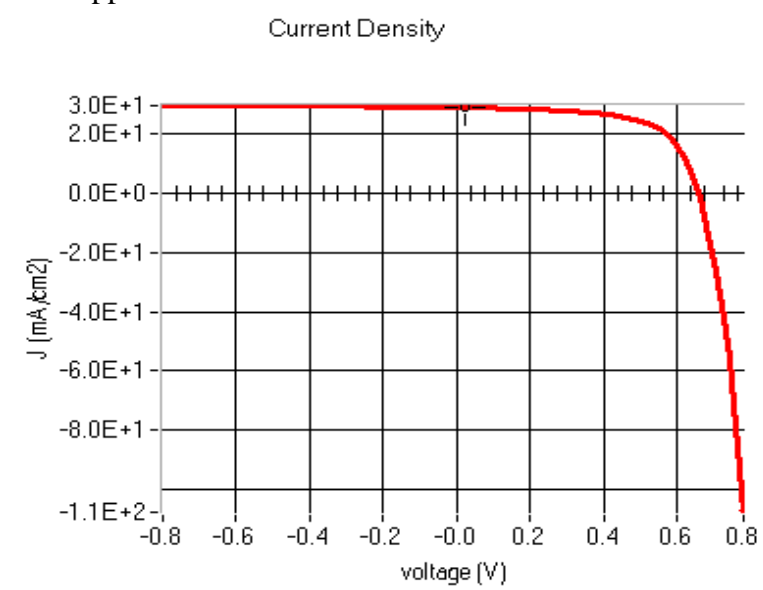
**Figure IV.1 :** Structure de la cellule solaire étudiée (ITO/PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS/Ag)

**Tableau IV.1:** Propriétés électriques et optiques des couches de la cellule (ITO/PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS/Ag).

	<b>ITO</b>	<b>PCBM ETM</b>	<b>CH3NH3SnI3 PAL</b>	<b>PEDOT:PSSHTM</b>
Épaisseur (µm)		Variable	Variable	Variable
Bande interdite (eV)	3.5	2	1.900	1.6
Affinité électronique (eV)	4	3.900	3.980	3.4
Permittivité diélectrique relative	9	3.900	10.000	3
CB densité effective d'états (cm <sup>-3</sup> )	2.200E+18	2.500E+21	1.000E+16	1.000E+22
VB densité effective d'états (cm <sup>-3</sup> )	1.800E+19	2.500E+21	1.000E+15	1.000E+22
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	1.000E+7	2.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Vitesse thermique des trous (cm/ s)	1.000E+7	2.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Mobilité des électrons (cm <sup>2</sup> / V.s)	20	2.000E-2	1.620E+1	4.500E-4
Mobilité des trous (cm <sup>2</sup> / V.s)	10	2.000E-2	1.010E+1	9.900E-5
Densité de donneur uniforme peu profonde Nd (cm <sup>-3</sup> )	2.000E+19	2.730E+17	1.000E+9	-
Densité d'accepteur uniforme peu profonde Na (cm <sup>-3</sup> )	0	-	1.000E+9	1.000E+22
Défauts Nt (cm <sup>-3</sup> )	1.000E+15	1.000E+15	1.000E+14	2.500E+15

### IV.3 Résultats et discussions:

Afin d'examiner et d'étudier la cellule solaire Sn-pérovskite, une modélisation numérique a été réalisée à l'aide du logiciel de simulation SCAPS-1D. Initialement, la conception N-I-P PSC :(ITO/PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS/Ag) avec des épaisseurs de couche de 30 nm, 400 nm et 30 nm pour ETM, PAL et HTM respectivement est étudiée. La figure IV.2 trace les caractéristiques J-V de la structure. Comme la montre la figure IV.2, la valeur de  $J_{sc}$  de la conception PSC est de 29.02 mA / cm<sup>2</sup>. De plus la valeur de  $V_{oc}$  est de 0.65 V. Par conséquent l'efficacité de conversion de puissance PCE est de 12.32 %. Les paramètres photovoltaïques de la conception PSC sont rapportés dans le tableau IV.2.



**Figure IV.2 :** Caractéristiques J-V de la cellule solaire à base pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>.

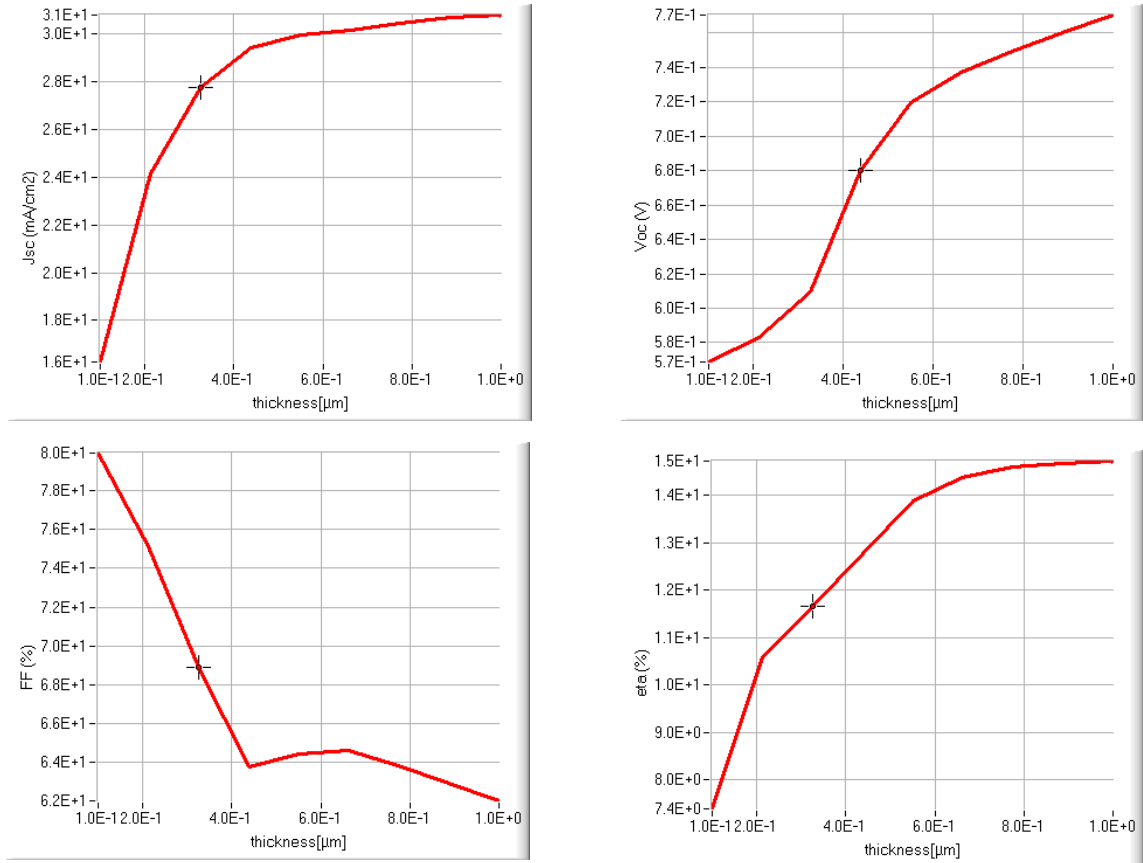
**Tableau IV.2 :** Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à base pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> avec PCBM comme ETM et PEDOT:PSS comme HTM.

	Epaisseur (nm)	$J_{sc}$ (mA / cm <sup>2</sup> )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	PCE (%)
PCBM	30	29.02	0.65	64.61	12.32
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub>	400				
PEDOT:PSS	30				

Pour améliorer encore les performances de la cellule solaire Sn-pérovskite avec plus de reproductibilité et une stabilité élevée, un processus d'optimisation est appliqué à la conception PSC par variation de l'épaisseur et la concentration de défauts  $N_t$  de la couche pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> sur l'intervalle de 0.1  $\mu$ m à 1  $\mu$ m et de 1.3E+16 cm<sup>-3</sup> à 1.8E+16 cm<sup>-3</sup> respectivement et la variation de la température T(K) de la valeur 280 K à 320 K. Les résultats de variation des paramètres photovoltaïques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE) en fonction de l'épaisseur et la

concentration de défauts  $N_t$  de la couche pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  et la température  $T(\text{K})$  sont discutés dans les sections IV.3.1, IV.3.2 et IV.3.3 respectivement.

### IV.3.1 Influence de l'épaisseur de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE :



**Figure IV.3 :** Variation des paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de l'épaisseur de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

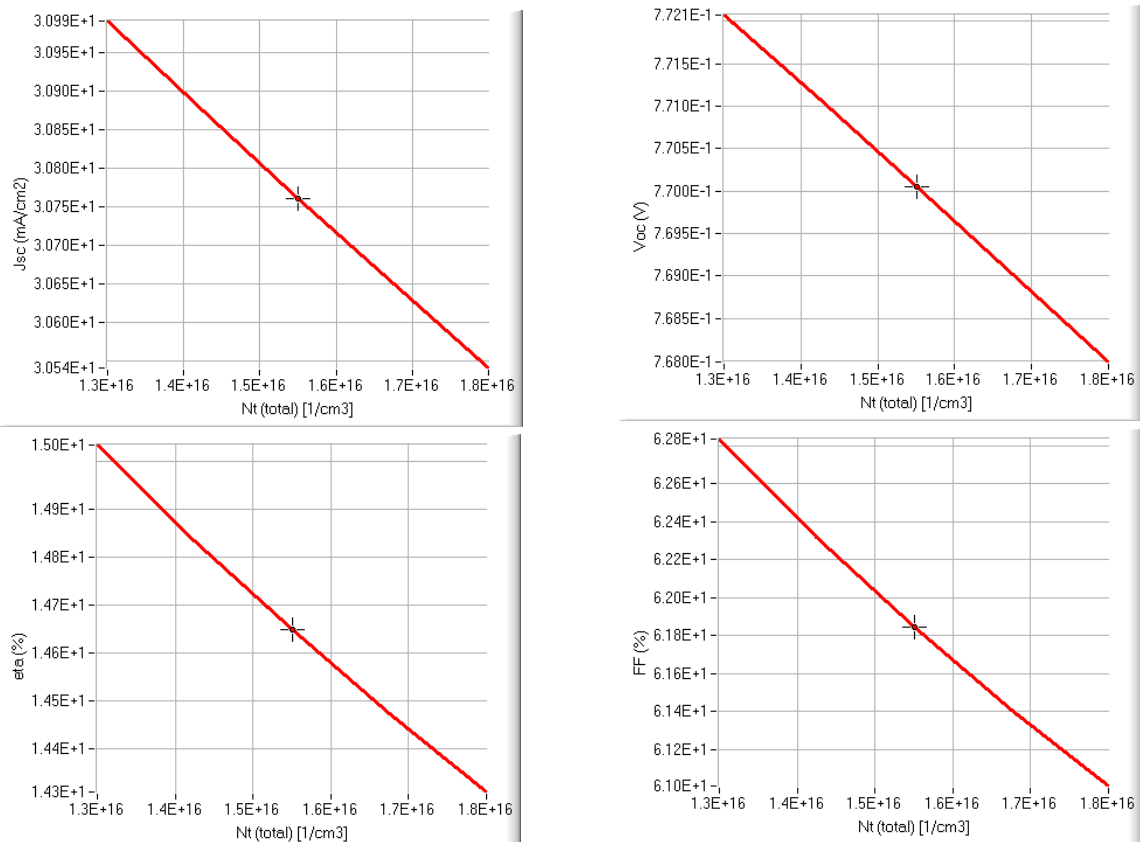
**Tableau IV.3:** Effet de l'épaisseur de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  sur les paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE.

Couche	Epaisseur ( $\mu\text{m}$ )	$J_{sc}$ ( $\text{mA} / \text{cm}^2$ )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	PCE (%)
$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$	0.1	16.25	0.56	79.94	7.38
	0.2	23.52	0.58	75.81	10.37
	0.4	29.02	0.65	64.61	12.31
	0.6	30.04	0.72	64.69	14.15
	0.8	30.54	0.75	63.64	14.61
	1	30.80	0.77	62.02	14.72

Nous avons simulé la variation des paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de la Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  de  $0.1 \mu\text{m}$  à  $1 \mu\text{m}$ . Les résultats obtenus sont affichés à la figure VI.3. Nous constatons que à partir de la valeur  $0.1 \mu\text{m}$

jusqu'au 0.6  $\mu\text{m}$  de l'épaisseur de la Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ . Le  $J_{sc}$  s'augmente de 16.25  $\text{mA}/\text{cm}^2$  à la valeur 30.04  $\text{mA}/\text{cm}^2$  avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite à cause de plus de matériel exposé à la lumière par conséquent plus d'énergie absorbé dans cette couche avec plus des pairs électrons-trous générés et l'augmentation de mobilités des électrons. Le  $V_{oc}$  s'augmente de 0.56V à la valeur 0.72V avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite tandis que le FF se diminue de 79.94% à 64.69% avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite et cela due à la recombinaison interne dans la Pérovskite à cause de durée de vie des porteurs de charge est courte et celui-ci ne donne pas de temps suffisant pour les porteurs de charge d'accéder à la bande de conduction de la pérovskite et enfin le PCE s'augmente de 7.38% à la valeur 14.15% avec l'augmentation de l'épaisseur de la pérovskite suite aux bons performances de la Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ . Tandis que à partir de la valeur 0.6  $\mu\text{m}$  jusqu'au 1  $\mu\text{m}$  de l'épaisseur de la Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ , les paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE sont presque constants et cela à cause de la saturation des couches ETL (PCBM) et HTL (PEDOT:PSS).

#### IV.3.2 Influence de la concentration de défauts $N_t$ ( $1/\text{cm}^3$ ) de la couche Pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE :



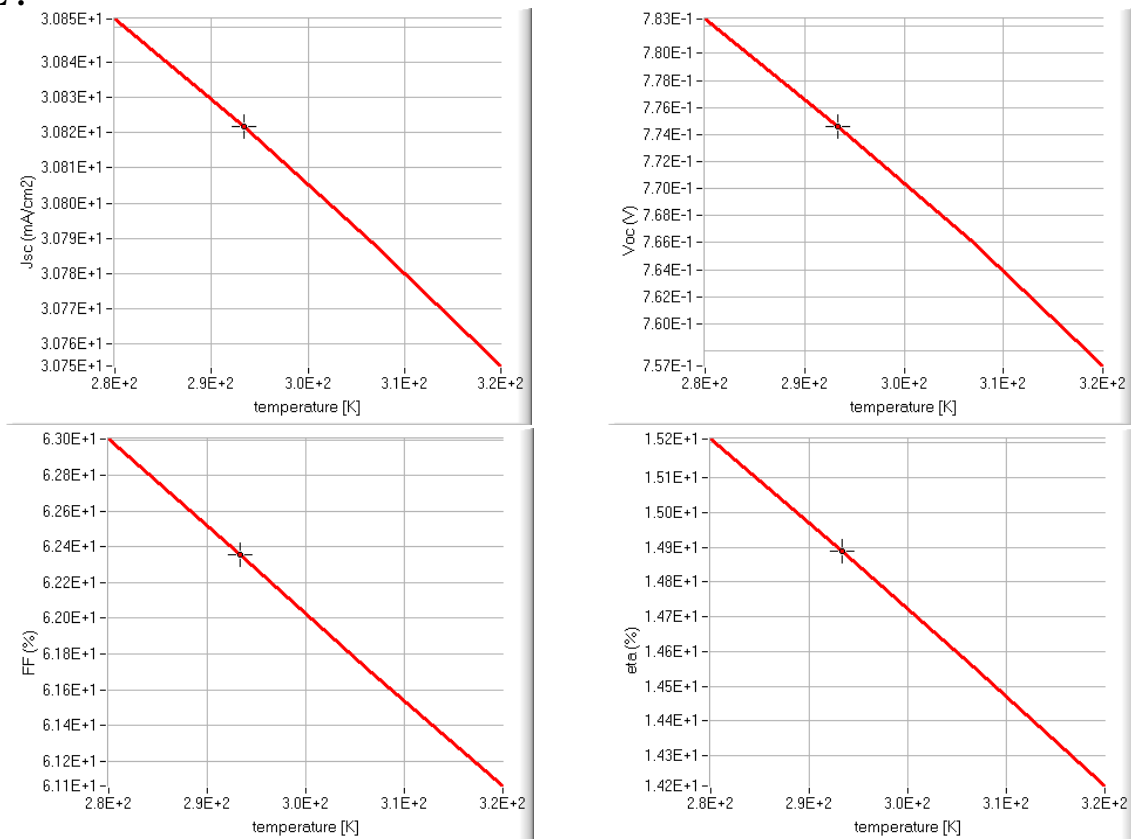
**Figure IV.4 :** Variation des paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de défaut  $N_t$  de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

**Tableau IV.4:** Effet de défauts  $N_t$  de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  sur les paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE.

Couche	Défaut $N_t$ ( $1/\text{cm}^3$ )	$J_{sc}$ ( $\text{mA} / \text{cm}^2$ )	$V_{oc}$ (V)	FF (%)	PCE (%)
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub>	1.3E+16	30.99	0.77	62.83	15.03
	1.4E+16	30.89	0.77	62.41	14.87
	1.5E+16	30.80	0.77	62.02	14.72
	1.6E+16	30.71	0.76	61.66	14.57
	1.7E+16	30.62	0.76	61.32	14.44
	1.8E+16	30.54	0.76	61.00	14.30

Pour étudier la dépendance des performances de la cellule solaire à base de pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  avec la concentration de défauts  $N_t$  de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ , nous avons simulé les performances de la cellule avec la variation de concentration de défauts de Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  de la valeur  $1.3\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$  à  $1.8\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$ , comme les montre la figure VI.4 les paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE sont légèrement diminuent avec l'augmentation de la concentration de défauts  $N_t$  de la couche Pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ .

#### IV.3.3 Influence de la température T (K) sur les paramètres photovoltaïques $J_{sc}$ , $V_{oc}$ , FF et PCE :



**Figure IV.5 :** Variation des paramètres photovoltaïques  $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF et PCE en fonction de la température T(K) de (ITO/PCBM/  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ /PEDOT:PSS/Ag).

**Tableau IV.5:** Effet de la température T(K) (ITO/PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS/Ag) sur les paramètres photovoltaïques J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE.

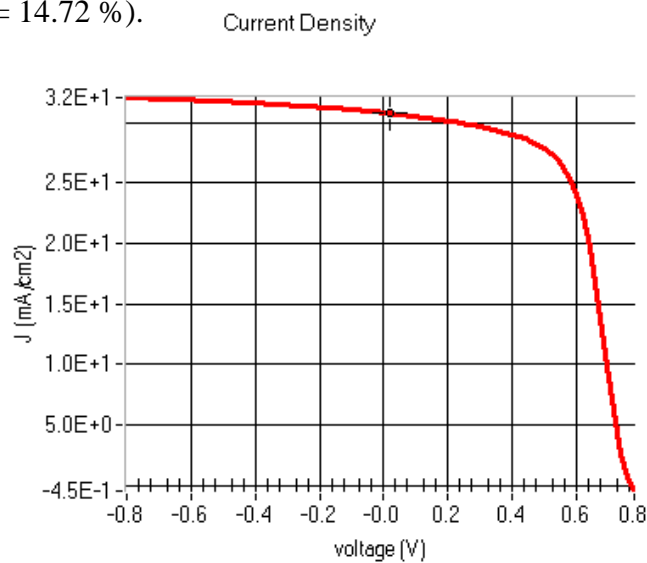
Structure	Température (K)	J <sub>sc</sub> (mA / cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	FF (%)	PCE (%)
(ITO/ PCBM/ CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub> / PEDOT:PSS/ Ag)	280	30.85	0.78	63.00	15.21
	290	30.82	0.77	62.51	14.96
	300	30.80	0.77	62.02	14.72
	310	30.78	0.76	61.52	14.46
	320	30.75	0.75	61.06	14.21

Etant donné que les panneaux de modules solaires sont affectés par le changement de température lorsqu'ils sont installés à l'extérieur. Il serait important d'examiner l'effet de la température sur les performances actuelles des cellules solaires à base de pérovskites. La figure IV.5 montre la variation des paramètres photovoltaïques J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE en fonction de la température T(K) de (ITO/PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS/Ag).

Nous observons que les paramètres photovoltaïques J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE sont légèrement diminuent avec l'augmentation de la température de la valeur 280 K jusqu'à 320 K.

#### IV.3.4 Courbe des caractéristiques I-V optimisée:

La courbe des caractéristiques I-V représentée sur la figure IV.6 est obtenue en maintenant tous les paramètres améliorés avec les épaisseurs des couches de 30 nm, 1000 nm et 30 nm pour PCBM, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> et PEDOT:PSS respectivement, la concentration de défauts N<sub>t</sub> de la couche Pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> N<sub>t</sub> = 1.00E+14 cm<sup>-3</sup> et la température de la cellule T = 300 K, les paramètres photovoltaïques trouvés sont (J<sub>sc</sub> = 30.80 mA / cm<sup>2</sup>, V<sub>oc</sub> = 0.7705 V, FF = 62.03 % et PCE = 14.72 %).



**Figure IV.6 :** Variation des caractéristiques J-V de la cellule solaire à base pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> optimisée.

Les valeurs des paramètres photovoltaïques optimisés de la conception PSC sont rapportées dans le tableau IV.3.

**Tableau IV.6:** Paramètres photovoltaïques optimisés de la cellule solaire à base pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> avec PCBM comme ETM et PEDOT:PSS comme HTM.

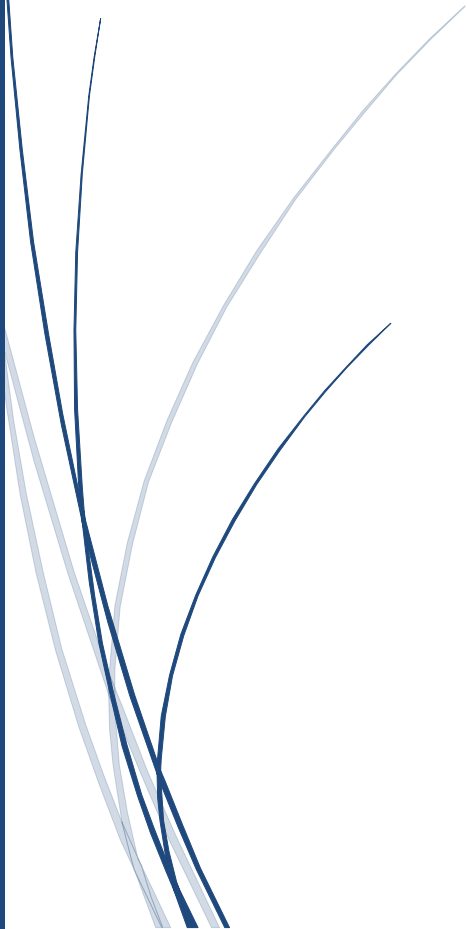
	Epaisseur (nm)	J <sub>sc</sub> (mA / cm <sup>2</sup> )	V <sub>oc</sub> (V)	FF (%)	PCE (%)
PCBM	30	30.80	0.7705	62.03	14.72
CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> SnI <sub>3</sub>	1000				
PEDOT:PSS	30				

#### IV.4 Conclusion:

Dans ce travail, après la simulation de la cellule étudiée, l'effet de l'épaisseur de la couche de pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> sur les différents paramètres J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE est présenté. On constate que la variation de l'épaisseur de la couche de pérovskite de la cellule solaire à base de CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> de la valeur 0.1 μm jusqu'au 0.6 μm a un effet important sur les paramètres électriques, au-delà de la valeur 0.6 μm, les paramètres photovoltaïques J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE sont presque constants et cela à cause de la saturation des couches ETL (PCBM) et HTL (PEDOT:PSS) de la cellule solaire. Tandis que, la variation de la concentration de défauts N<sub>t</sub> de la couche pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> et la température T(K) de la cellule étudiée, a une petite influence sur les paramètres photovoltaïques J<sub>sc</sub>, V<sub>oc</sub>, FF et PCE où ceux-ci sont légèrement diminuent avec l'augmentation de la concentration de défauts N<sub>t</sub> de la couche Pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> de la valeur 1.3E+16 cm<sup>-3</sup> à 1.8E+16 cm<sup>-3</sup> et la même chose avec l'augmentation de la température de la valeur 280 K jusqu'à 320 K. Les résultats obtenus après l'amélioration par optimisation des paramètres photovoltaïques (J<sub>sc</sub>= 30.80 mA/cm<sup>2</sup>, V<sub>oc</sub>= 0.7705 V, FF = 62.03 % et PCE = 14.72%) montrent que la pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> a des meilleures performances électriques.



# **Conclusion Générale**



## Conclusion Générale

Nous avons présenté la nouvelle génération de cellules solaires à base de matériaux pérovskite. Différents paramètres influents sur les performances de ces cellules tels que l'architecture, le type du matériau utilisé pour la couche active, les techniques de fabrication et préparation des différentes couches.

Les cellules solaires à base de matériau pérovskite ayant connu le développement le plus rapide de l'histoire cependant avec un potentiel encore important d'amélioration de la performance et des coûts de produits faibles, les cellules à base de pérovskite sont devenu commercialement attractive.

Dans ce mémoire, nous avons étudié et simulé la cellule solaire à base du matériau pérovskite à base de Tri-iodure d'étain méthylammonium  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  en architecture N-I-P à l'aide du programme de simulation SCAPS-1D. La pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  en tant que couche absorbante et PCBM en tant que matériau de transport d'électrons et PEDOT:PSS en tant que matériau de transport des trous, dans les cellules en pérovskite, l'HTL est connecté au contact arrière métallique (Ag) et le ETL à l'oxyde d'indium-étain conducteur transparent (ITO). Initialement les paramètres photovoltaïques trouvés sont  $J_{sc} = 29.02 \text{ mA} / \text{cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.65 \text{ V}$ ,  $FF = 64.61 \%$  et  $PCE = 12.32 \%$ .

Pour améliorer encore les performances de la cellule solaire Sn-pérovskite avec plus de reproductibilité et une stabilité élevée, un processus d'optimisation est appliqué à la conception PSC par variation de l'épaisseur et la concentration de défauts  $N_t$  de la couche pérovskite  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$  sur l'intervalle de  $0.1 \mu\text{m}$  à  $1 \mu\text{m}$  et de  $1.3\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$  à  $1.8\text{E}+16 \text{ cm}^{-3}$  respectivement et la variation de la température  $T(\text{K})$  de la valeur  $280 \text{ K}$  à  $320 \text{ K}$ , les paramètres photovoltaïques trouvés sont  $J_{sc} = 30.80 \text{ mA/cm}^2$ ,  $V_{oc} = 0.7705\text{V}$ ,  $FF = 62.03\%$  et  $PCE = 14.72\%$ .

## Bibliographie

- [1] Le photovoltaïque Module 3 – Fonctionnement et Technologies Novembre 2010 page 3, 4, 5, 6/10.
- [2] <https://www.futura-sciences.com/planete/dossiers/developpement-durable-cellules-photovoltaiques-coeur-panneaux-solaires-1688/page/5/>.
- [3] Energie solaire photovoltaïque.doc / B. Flèche - D. Delagnes / juin 07.
- [4] <https://slideplayer.fr/slide/13647291/>
- [5] <https://docplayer.fr/13747880-Institut-des-sciences-moleculaires-universite-de-bordeaux.html>.
- [6] [https://www.mediachimie.org/sites/default/files/chimie-climat-junior\\_chapitre2.pdf](https://www.mediachimie.org/sites/default/files/chimie-climat-junior_chapitre2.pdf)
- [7] <https://www.maxicours.com/se/cours/conducteurs-semi-conducteurs-supraconducteurs/>.
- [8] <https://www.hisour.com/fr/theory-of-solar-cells-39930/>
- [9] H. Mathieu, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", 2<sup>ème</sup> Edition, Masson, 1990.
- [10] [https://www.researchgate.net/figure/photovoltaiques-dune-cellule-solaire-organique-qui-sont-les-suivants-un-courant-de\\_fig11\\_335949789](https://www.researchgate.net/figure/photovoltaiques-dune-cellule-solaire-organique-qui-sont-les-suivants-un-courant-de_fig11_335949789)
- [11] RoshanakRadbeh «Réalisation et caractérisation des cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbones ». Thèse de doctorat, Université de Limoges, 2008.
- [12] A. Luque, Practical Handbook of Photovoltaics (Second Edition)-2012.
- [13] <https://www.photovoltaique.info/fr/realiser-une-installation/choix-dumateriel/caracteristiques-des-panneaux-photovoltaiques/technologies-de-cellules-solairesphotovoltaiques/>
- [14] [https://document.environnement.brussels/opac\\_css/elecfile/IF%20ENERGIE%20Mod3%20Fonctionnement%20technologies%20PV%20FR](https://document.environnement.brussels/opac_css/elecfile/IF%20ENERGIE%20Mod3%20Fonctionnement%20technologies%20PV%20FR)
- [15] <http://www.solar-kit.com/Panneau-solaire-polycristallin-ou-monocristallin>
- [16] Roger H. Mitchell, Perovskites-modern and ancient, Almaz Press, 2002 Site web <https://fr.m.wikipedia.org>.
- [17] Geologie, Perovskite, Cellules photovoltaïques perovskites Site web : [www.futura-sciences.com](http://www.futura-sciences.com).
- [18] M.Z. Mutalib, F. Aziz, A.F. Ismail, W.N.W. Salleh, N. Yusof, J. Jaafar, and N.A. Ludin, 'Towards high performance perovskite solar cells: A review of morphological control and HTM development', Applied Materials Today, Vol. 13, pp. 69 - 82, 2018.
- [19] G.E Eperon, V.M. Burlakov, P. Docampo, A. Goriely and H.J. Snaith, 'Morphological control for high performance, solution processed planar heterojunctionperovskite solar cells', Advanced Functional Materials, Vol. 24, N°1, pp. 151 - 157, 2014.
- [20] Abdoulwahab Adaine. Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université de Lorraine, 2018. Français. NNT :2018LORR0085.
- [21] Y. Xiao, L. Yang, G. Han, Y. Li, M. Li, and H. Li, 'Effects of methylammonium acetate on the perovskite film quality for the perovskite solar cell', Organic Electronics, Vol. 65, pp. 201 - 206, 2019.
- [22] R. Singh, and V.K. Shukla, 'ITIC-based bulk heterojunctionperovskite film boosting the power conversion efficiency and stability of the perovskite solar cell', Solar Energy, Vol. 178, pp. 90 - 97, 2019.

- [23] X. Li, J. Zhang, X. Zhu, J. Yu, and K. Fan, 'Effects of Ti precursors on the performance of planar perovskite solar cells', *Applied Surface Science*, Vol. 462, pp. 598 - 605, 2018.
- [24] S. Wang, Y. Zhu, W. Sun, X. Miao, Z. Ma, C. Yang and C. Wang, 'Large guanidiniumcation enhance photovoltage for perovskite solar cells via solution-processed secondary growth technique', *Solar Energy*, Vol. 176, pp. 118 - 125, 2018.
- [25] D. Selvakumar, G. Murugadoss, A. Alsalme, A.M. Alkathiri and R. Jayavel, 'Hteroatom doped reduced graphene oxide paper for large area perovskite solar cells', *olar Energy*, Vol. 163, pp. 564 - 569, 201
- [26] J.I. Kim, C.W. Jang, J.H. Kim, S. Kim and S.H. Choi, 'Use of AuCl<sub>3</sub>-doped graphene as a protecting layer for enhancing the stabilities of inverted perovskite solar cells'. *Applied Surface Science*, Vol. 455, 2018.
- [27] H. Tanaka, Y. Ohishi and T. Oku, 'Fabrication and Characterization of the copper bromides-added CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>-xCl<sub>x</sub> perovskite solar cells', *Synthetic Metals*, Vol. 244, pp. 128 - 133, 2018.
- [28] M. Burgelman "SCAPS manual" Version: 18 may 2020.
- [29] M. Burgelman, K. Decock, A. Niemegeers, J. Verschraegen, and S. Degrave, "SCAPS manual" ed: February 2016.

## Résumé

Ce mémoire rapporte la simulation et l'optimisation d'une cellule solaire photovoltaïque à base de pérovskite. L'objectif de ce travail est d'étudier et d'investiguer la structure de cellule solaire à base de matériaux pérovskites pour améliorer leurs performances. La cellule solaire simulée est réalisée en prenant en sandwich des couches de PCBM/ CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>/PEDOT:PSS où PCBM est la couche de transport d'électrons (ETL), PEDOT:PSS est la couche de transport de trous (HTL) et CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> est la couche absorbante de pérovskite (PVK). Par conséquent, l'épaisseur de la couche et la concentration de défauts  $N_t$  de la couche pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> et la température T(K) de la cellule sont modifiées afin de trouver des meilleures performances électriques de la cellule solaire. Les résultats obtenus montrent que les épaisseurs des couches qui fournissent des meilleures performances électriques sont de 30 nm, 30 nm et 1000 nm pour les matériaux PCBM, PEDOT:PSS et CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> respectivement, la concentration de défauts  $N_t$  de la couche pérovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> est  $N_t = 1.00E+14 \text{ cm}^{-3}$  et la température T(K) de la cellule est T = 300 K. La simulation numérique a été réalisée à l'aide du logiciel de simulation SCAPS.

**Mots-clés:** cellule solaire à base de pérovskite, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>, efficacité, caractéristique I-V, SCAPS-1D.

## Abstract

This thesis reports the simulation and optimization of a photovoltaic solar cell based on perovskite. The objective of this work is to study and investigate the structure of solar cells based on perovskite materials to improve their performance. The simulated solar cell is made by sandwiching layers of PCBM / CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> / PEDOT: PSS where PCBM is the electron transport layer (ETL), PEDOT: PSS is the hole transport layer (HTL) and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> is the absorbent layer of perovskite (PVK). Therefore, the layer thickness and concentration of defects  $N_t$  of perovskite CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> and the temperature T(K) of cell are changed in order to find better electrical performances of the solar cell. The results obtained show that the layer thicknesses which provide better electrical performances are 30 nm, 30 nm and 1000 nm for the materials PCBM, PEDOT: PSS and CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>, respectively, concentration of defects  $N_t = 1.00E+14 \text{ cm}^{-3}$  and the temperature T = 300 K. The digital simulation was carried out using the SCAPS simulation software.

**Keywords :** perovskite-based solar cell, CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub>, efficiency, I-V characteristic, SCAPS-1D.

**عنوان المذكرة : محاكاة وتحسين الخلايا الشمسية القائمة على البيروفسكايت CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> بنيه NIP****الملخص**

تشير هذه الرسالة إلى محاكاة وتحسين الخلايا الشمسية الكهروضوئية القائمة على البيروفسكايت. الهدف من هذا العمل هو دراسة والتحقيق في بنية الخلايا الشمسية على أساس مواد البيروفسكايت لتحسين أدائها. تتكون الخلية الشمسية المحاكاة من طبقات من PEDOT: PSS / CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> / PCBM حيث PCBM هي طبقة النقل الإلكتروني (ETL) ، PEDOT: PSS هي طبقة نقل الثقب (HTL) و CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> هي الطبقة الماصة من البيروفسكايت (PVK) لذلك، يتم تغيير سمك طبقة المواد المختلفة وتركيز العيوب Nt و درجه حراره الخليه T(K) من أجل العثور على أداء كهربائي أفضل للخلية الشمسية. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن سمك الطبقة التي توفر أداء كهربائي أفضل هي 30 نانومتر و 30 نانومتر و 1000 نانومتر للمواد PCBM و PEDOT: PSS و CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>SnI<sub>3</sub> على التوالي. و تركيز العيوب  $Nt = 1.00E+14$  cm<sup>-3</sup> و درجه حراره الخليه T = 300 K. تم تنفيذ المحاكاة الرقمية باستخدام برنامج محاكاة SCAPS.