

Faculty of Sciences and Technology
Department of Process Engineering
Ref :...../U.M/F.S.T/2026

كلية العلوم والتكنولوجيا
قسم هندسة الطرائق
رقم :..... / ج.م.ك.ع.ت/2026

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : **GÉNIE DES PROCÉDÉS**

Option : **GÉNIE DES PROCÉDÉS DES MATÉRIAUX**

THÈME

**Etude d'un nouveau matériau organique
pour les cellules solaires à pérovskite**

Présenté par

- 1- BESSOLTANE Mohamed
- 2- FORLOU Ibrahim

Soutenu le 14/06/ 2026 devant le jury composé de :

Président :	SAIDJ Merzouk	MCA	Université de Mostaganem
Examinatrice :	BOUBEGRA Naima	MCA	Université de Mostaganem
Encadrante :	BELKAFOUF Nour El Houda	MCB	Université de Mostaganem

Année Universitaire 2025/2026

Dédicace

Je dédie ce travail à ma famille surtout à ma mère et à mon père pour leur amour, leur soutien et leurs encouragements permanents.

À mes amis et à toutes les personnes qui m'ont accompagné durant ce parcours.

Et particulièrement à Mon Encadrante **Belkafouf Nour El Houda**, pour son encadrement, sa patience et ses précieux conseils qui ont grandement contribué à la réalisation de ce travail.

BESSOLTANE Mohamed

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à toutes les personnes ayant contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

Mes remerciements les plus sincères s'adressent particulièrement à mon encadrante Belkafouf Nour El Houda, pour son suivi attentif, sa disponibilité, ses conseils précieux et ses encouragements permanents.

Son accompagnement et son soutien ont été d'une grande importance tout au long de ce projet.

Je dédie ce travail à la mémoire de mon regretté père. Que son âme repose en paix. Ses prières et son amour continuent de me guider.

Enfin, j'adresse mes remerciements à ma famille et à mes amis pour leur soutien moral, leur patience et leurs encouragements qui m'ont aidé à accomplir ce travail dans les meilleures conditions.

FORLOU Ibrahim

Remerciements

Nous tenons à exprimer notre profonde gratitude à toutes les personnes ayant contribué, de près ou de loin, à la réalisation de ce travail.

*Mes remerciements les plus sincères s'adressent particulièrement à notre encadrante **Belkafouf Nour El Houda**, pour son suivi attentif, sa disponibilité, ses conseils précieux et ses encouragements permanents. Son accompagnement et son soutien ont été d'une grande importance tout au long de ce projet.*

*Nous tenons également à adresser nos sincères remerciements aux membres du jury, Madame **Boubegra Naima** et Monsieur **Saidj Merzouk**, pour l'honneur qu'ils m'ont fait en acceptant d'examiner ce travail, ainsi que pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce mémoire et leurs précieuses remarques.*

Nous remercions également tous les enseignants pour la qualité de la formation reçue ainsi que pour leurs efforts et leurs orientations.

Enfin, nous adressons nos remerciements à nos familles et à nos amis pour leur soutien moral, leur patience et leurs encouragements qui m'ont aidé à accomplir ce travail dans les meilleures conditions.

Liste des figures

Figure I.1. Structure des différentes architectures des cellules solaires Pérovskites : (a) structure mésoporeuse N-I-P, (b) structure planaire N-I-P, (c) structure planaire P-I-N, et (d) structures mésoporeuse P-I-N.....	- 5 -
Figure I.2. Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite), tirées de la littérature, dans des cellules solaires à Pérovskite. Ces valeurs peuvent changer en fonction des méthodes de dépôt et des traitements post-dépôt.....	- 7 -
Figure II.1. Potentiel électrostatique moléculaire de la molécule BZP.	- 15 -
Figure II.2. Représentation des orbitales moléculaires frontières de la molécule BZP.....	- 17 -
Figure II.3. (a) Architecture de la cellule solaire à pérovskite utilisant le BZP comme couche de transport de trous (HTL). (b) Dispositif SCAPS-1D correspondant à la cellule solaire proposée.....	- 18 -
Figure II.4. Alignement des bandes d'énergie des matériaux utilisés dans la cellule solaire proposée.	- 19 -
Figure II.5. Courbe J–V de la cellule solaire à pérovskite sans BZP.....	- 21 -
Figure II.6. Courbe J–V de la cellule solaire à pérovskite utilisant le BZP comme HTM.	- 22 -

Liste des tableaux

Tableau II.1. Paramètres physicochimiques de matériaux utilisés dans la cellule solaire simulée	- 20 -
Tableau II.2. Paramètres photovoltaïques de différentes structures de cellules solaires à base de CsSnBr ₃	- 23 -

Liste des abréviations

BZP	2-Amino-5-chlorobenzophenone
DFT	Théorie de la fonctionnelle de la densité
E_g	Gap énergétique
ETM	Matériau de transport d'électrons
FF	Facteur de forme
HTM	Matériau de transport de trous
HOMO	Orbitale moléculaire occupée la plus haute
J_{sc}	Densité de courant de court-circuit
LUMO	Orbitale moléculaire vide la plus basse
MEP	Potentiel électrostatique moléculaire
PCE	Efficacité de conversion énergétique
P_{max}	Puissance électrique maximale produite par la cellule
P_{in}	Puissance lumineuse incidente
SCAPS-1D	Solar Cell Capacitance Simulator-One Dimension
UV	Ultraviolet
V_{oc}	Tension en circuit ouvert
T	L'épaisseur de la couche
E_g	la largeur de la bande interdite
χ	l'affinité électronique
ε	la constante diélectrique relative

N_C	les densités effectives d'états dans la bande de conduction
N_V	les densités effectives d'états dans la bande de valence
V_e	les vitesses thermiques des électrons
V_h	les vitesses thermiques des trous
μ_n	les mobilités des électrons
μ_h	les mobilités des trous
N_D	les concentrations de dopage des donneurs
N_A	les concentrations de dopage des accepteurs
N_t	la densité totale des défauts

Résumé

Cette étude présente une analyse théorique d'un cristal organique, nommé BZP, utilisé comme matériau de transport de trous (HTM) dans les cellules solaires à pérovskite. Les propriétés structurales et électroniques de ce matériau ont été étudiées à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les résultats obtenus montrent que le BZP possède des caractéristiques favorables aux applications photovoltaïques. Les performances de ce matériau ont ensuite été simulées à l'aide du logiciel SCAPS-1D dans une cellule solaire à pérovskite. Les simulations ont révélé un rendement énergétique d'environ 24,05 %, confirmant ainsi le potentiel du BZP pour l'amélioration des performances des cellules solaires à base de CsSnBr_3 .

Mots-clés : HTM, DFT, Cellules solaires à pérovskite, SCAPS-1D, rendement énergétique.

Abstract

This study presents a theoretical analysis of an organic crystal, named BZP, used as a hole transport material (HTM) in perovskite solar cells. The structural and electronic properties of this material were investigated using Density Functional Theory (DFT). The obtained results show that BZP possesses characteristics favorable for photovoltaic applications. The performance of this material was then simulated using the SCAPS-1D software in a perovskite solar cell. The simulations revealed a power conversion efficiency of approximately 24.05%, thus confirming the potential of BZP for improving the performance of CsSnBr_3 -based perovskite solar cells.

Keywords: HTM, DFT, Perovskite solar cells, SCAPS-1D, power conversion efficiency.

الملخص

تقدم هذه الدراسة تحليلاً نظرياً لبلورة عضوية تُعرف باسم BZP، تُستخدم كمادة لنقل الثقوب (HTM) في الخلايا الشمسية البيروفسكايتية. تمت دراسة الخصائص البنوية والإلكترونية لهذه المادة باستخدام نظرية دالية الكثافة (DFT). أظهرت النتائج المتحصل عليها أن مادة BZP تمتلك خصائص واعدة للتطبيقات الكهروضوئية. بعد ذلك، تمت محاكاة أداء هذه المادة باستعمال برنامج SCAPS-1D ضمن خلية شمسية بيروفسكايتية. وقد بينت نتائج المحاكاة كفاءة تحويل طاقي بلغت حوالي 24.05%، مما يؤكد إمكانات مادة BZP في تحسين أداء الخلايا الشمسية البيروفسكايتية المعتمدة على CsSnBr_3 .

الكلمات المفتاحية: مادة نقل الثقوب (HTM)، نظرية دالية الكثافة (DFT)، الخلايا الشمسية البيروفسكايتية، SCAPS-1D، كفاءة تحويل الطاقة.

Table des matières

Dédicace	i
Remerciements	ii
Liste des figures	iii
Liste des tableaux	iv
Liste des abréviations	v
Résumé	vi
Introduction Générale.....	- 1 -
Références Bibliographiques	- 3 -
Chapitre I Cellules solaires à pérovskite et matériaux organiques à transfert de charge	- 4 -
I.1 Les cellules solaires à pérovskite.....	- 4 -
I.1.1 Structure et principe de fonctionnement.....	- 5 -
I.1.2 Paramètres photovoltaïques essentiels	- 8 -
I.2 Les matériaux organiques à transfert de charge	- 11 -
I.2.1 Rôle des matériaux à transfert de charge dans une cellule solaire	- 11 -
I.2.2 Panorama des matériaux à transfert de charge	- 12 -
Références Bibliographiques	- 13 -

Chapitre II Résultats et discussion	- 14 -
II.1 Introduction	- 14 -
II.2 Propriétés structurales et électroniques du matériau BZP	- 14 -
II.2.1 Optimisation géométrique	- 14 -
II.2.2 Potentiel électrostatique moléculaire.....	- 15 -
II.2.3 Orbitales moléculaires frontières.....	- 17 -
II.3 Étude des performances photovoltaïques du matériau BZP	- 18 -
II.3.1 Architecture de la cellule solaire étudiée.....	- 18 -
II.3.2 Simulation courant–tension	- 21 -
II.3.3 Analyse comparative des performances photovoltaïques.....	- 22 -
Références Bibliographiques	- 24 -
Conclusion générale et perspectives	- 25 -

Introduction Générale

Face aux défis énergétiques et environnementaux actuels, la transition vers des sources d'énergie renouvelables, propres et durables est devenue une priorité mondiale. L'énergie solaire, en raison de son abondance et de sa disponibilité quasi illimitée, représente l'une des solutions les plus prometteuses. Son exploitation repose sur l'effet photovoltaïque, phénomène par lequel l'énergie lumineuse est convertie directement en énergie électrique à l'aide d'un matériau semi-conducteur [1].

Parmi les technologies photovoltaïques émergentes, les cellules solaires à pérovskite ont suscité un intérêt scientifique considérable au cours de la dernière décennie. Ces matériaux, généralement décrits par la formule ABX_3 (où A est un cation organique ou inorganique, B est un métal tel que le plomb, et X est un halogène), possèdent des propriétés optoélectroniques remarquables, notamment un coefficient d'absorption élevé, une faible énergie de liaison excitonique, une grande mobilité des porteurs de charge et une longueur de diffusion importante. Grâce à ces propriétés, le rendement de conversion photovoltaïque est passé de 3,8 % en 2009 à plus de 25 % ces dernières années [2,3].

Outre leurs performances élevées, les pérovskites présentent l'avantage d'être déposées par des procédés en solution à basse température tels que le spin-coating, l'impression ou les techniques rouleau-à-rouleau, ce qui permet d'envisager une production à grande échelle à faible coût. L'architecture typique d'une cellule solaire à pérovskite comprend un substrat conducteur transparent (TCO), une couche de transport d'électrons (ETL), la couche active de pérovskite, une couche de transport de trous (HTL) et un contact métallique arrière [3].

Cependant, malgré ces avancées remarquables, plusieurs défis limitent encore la commercialisation de cette technologie, notamment les problèmes de stabilité thermique et environnementale, ainsi que la dépendance à certains matériaux de transport de charges coûteux ou sensibles à l'humidité. Par exemple, le Spiro-OMeTAD, largement utilisé comme matériau de transport de trous, nécessite l'ajout de dopants hygroscopiques susceptibles d'accélérer la

Introduction générale

dégradation des dispositifs. De même, le PEDOT : PSS peut présenter des problèmes de stabilité chimique à long terme [4,5].

Dans ce contexte, le développement de nouveaux matériaux organiques adaptés aux cellules solaires à pérovskite constitue un axe de recherche stratégique. Ces matériaux doivent présenter un alignement énergétique optimal avec la pérovskite, une mobilité élevée des porteurs de charge, une stabilité chimique accrue et un coût de synthèse réduit. L'ingénierie moléculaire offre aujourd'hui des perspectives prometteuses pour améliorer simultanément le rendement et la durabilité des dispositifs photovoltaïques [6].

Le présent travail s'inscrit dans cette dynamique scientifique et vise à étudier un matériau organique de la famille des benzophénones destiné à être intégré dans l'architecture d'une cellule solaire à pérovskite, afin d'évaluer son influence sur leurs performances photovoltaïques.

Ce mémoire est structuré en deux parties :

La première partie présente un aperçu général des cellules solaires à pérovskite ainsi que des matériaux organiques de transport de charge.

La seconde partie est consacrée à la présentation et à la discussion des résultats obtenus par l'étude des propriétés structurales et électroniques, ainsi qu'à l'évaluation des performances photovoltaïques d'un matériau organique synthétisé de formule chimique $C_{13}H_{10}ClNO$, connu sous l'acronyme BZP.

Enfin, ce travail de fin d'études s'achève par une conclusion générale et des perspectives.

Références Bibliographiques

- [1] Green, M. A., Ho-Baillie, A., Snaith, H. J. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nature Photonics*, 8, 506–514.
- [2] Kojima, A., Teshima, K., Shirai, Y., Miyasaka, T. (2009). Organometal halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells. *Journal of the American Chemical Society*, 131(17), 6050–6051.
- [3] NREL (2023). Best Research-Cell Efficiency Chart. National Renewable Energy Laboratory.
- [4] Jeon, N. J., Na, H., Jung, E. H., et al. (2018). A fluorene-terminated hole-transporting material for highly efficient and stable perovskite solar cells. *Nature Energy*, 3, 682–689.
- [5] Zhao, Y., Zhu, K. (2016). Organic–inorganic hybrid perovskites for photovoltaics: stability and interface engineering. *Chemical Society Reviews*, 45, 655–689.
- [6] Yang, Z., Zhang, W., et al. (2019). Molecular engineering of hole-transport materials for perovskite solar cells. *Advanced Energy Materials*, 9, 1803190.

Chapitre I

Cellules solaires à pérovskite et matériaux organiques à transfert de charge

I.1 Les cellules solaires à pérovskite

Les cellules solaires à pérovskite constituent une technologie photovoltaïque de troisième génération qui a suscité un intérêt croissant dans la recherche scientifique et industrielle depuis plus d'une décennie.

Les pérovskites constituent une nouvelle classe de matériaux utilisés dans le domaine photovoltaïque en raison de leurs caractéristiques physiques particulièrement intéressantes. Leur structure cristalline est généralement représentée par la formule ABX_3 , dans laquelle A correspond à un cation organique ou inorganique, B à un cation métallique, souvent le plomb ou l'étain, et X à un élément halogéné comme l'iode, le brome ou le chlore.

L'intérêt de ces matériaux réside principalement dans leur capacité à absorber efficacement le rayonnement solaire et à assurer un transport rapide des charges électriques générées après l'absorption des photons. Ces propriétés permettent d'obtenir des performances énergétiques élevées dans les dispositifs photovoltaïques [1].

De plus, contrairement aux technologies photovoltaïques conventionnelles nécessitant des procédés complexes et coûteux, les cellules à pérovskite peuvent être élaborées par des méthodes de fabrication simples fonctionnant à basse température. Les techniques de dépôt en solution et les procédés d'impression continue représentent ainsi des approches prometteuses pour réduire les coûts de production et faciliter la fabrication de modules photovoltaïques à grande échelle [2].

I.1.1 Structure et principe de fonctionnement

Il existe différentes architectures de cellules solaires à base de Pérovskite. À ce jour, deux principales architectures sont étudiées : la mésoporeuse et la planaire. Ces deux structures peuvent être de type N-I-P ou P-I-N. La Figure 1 présente une description des architectures qui existent et leur développement, ainsi que les principaux matériaux utilisés pour chaque type de structure [3].

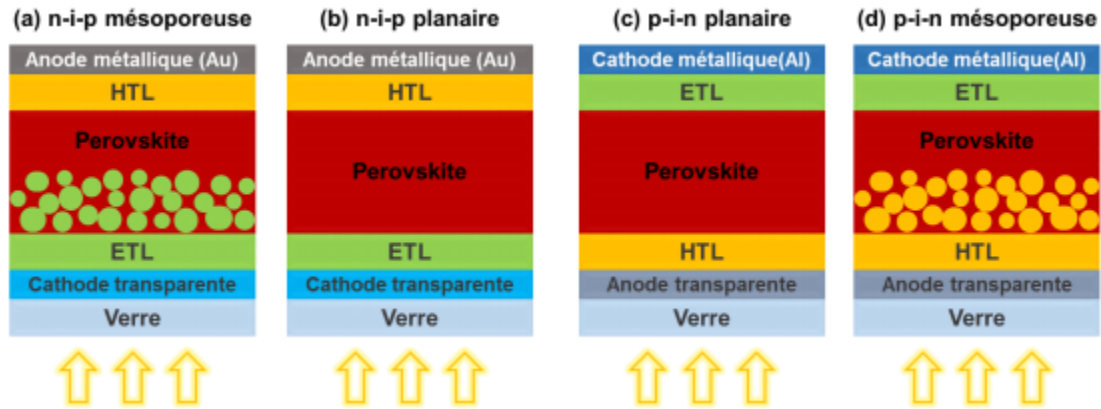


Figure I.1. Structure des différentes architectures des cellules solaires Pérovskites : (a) structure mésoporeuse N-I-P, (b) structure planaire N-I-P, (c) structure planaire P-I-N, et (d) structures mésoporeuse P-I-N.

- **Structure mésoporeuse et structure planaire :**

La première cellule solaire à base de Pérovskite, rapportée par le groupe de Miyasaka, adoptait la même structure que les cellules à colorants, et utilisait un électrolyte liquide. Depuis, cet électrolyte liquide a été remplacé par l'utilisation d'une couche d'oxyde métallique mésoporeuse (TiO_2 et Al_2O_3) comme support pour le dépôt de Pérovskite. Cette configuration mésoporeuse, illustrée à la Figure 1 (a), a permis l'obtention des premières cellules à rendements élevés. La morphologie de la pérovskite est dans ce cas principalement contrôlée par l'échafaudage mésoporeux sous-jacent, ce qui rend le dépôt de pérovskite facile et reproductible. Les principaux inconvénients de cette structure sont les faibles V_{oc} et la faible absorption de la lumière pour les longueurs d'onde supérieures à 700 nm. De plus, le dépôt de la couche mésoporeuse nécessite généralement un processus de recuit à haute température, ce qui est peu pratique pour la fabrication de dispositifs de grande surface sur des substrats

flexibles. Par conséquent, en optimisant les interfaces et en contrôlant la croissance de la pérovskite, il a été possible de s'affranchir de la couche mésoporeuse tout en obtenant des rendements élevés.

Des structures planaires, inspirées du photovoltaïque organique, ont ainsi été développées, dans lesquelles la pérovskite est déposée entre deux couches semi-conductrices : une couche de transport d'électrons (ETL) et une couche de transport de trous (HTL). Ces structures planaires peuvent être classées en deux catégories : les architectures directes de type N-I-P et les architectures inverses de type P-I-N. Dans ce travail, nous nous sommes focalisés sur l'étude de l'architecture planaire de type N-I-P.

- **Structure planaire N-I-P directe :**

Pour cette architecture, le TiO_2 a d'abord été utilisé comme couche de type n. Un premier dispositif, de structure FTO / TiO_2 / MAPbI_3 / P3HT / Ag, a été réalisé par Boyen et al avec un Efficacité de conversion énergétique (PCE) de 13,6 %, en utilisant une couche de TiO_2 traitée à basse température. Les travaux de recherche ont montré que la composition chimique ainsi que les conditions de traitement thermique de la couche de TiO_2 avaient des effets déterminants sur les performances du dispositif.

D'importants efforts ont ensuite été consacrés au remplacement de la couche de TiO_2 par d'autres couches de type n, afin d'assurer un transport de charge efficace tout en optimisant la croissance de la pérovskite et le contrôle de la densité des défauts créés dans cette couche. Outre les couches de type n à base de TiO_2 , d'autres matériaux ont également été développés, tels que les nanoparticules d'oxyde de zinc (ZnO), les nanocristaux de sélénure de cadmium (CdSe), le dioxyde d'étain (SnO_2), les oxydes de tungstène (WO_x), ainsi que des matériaux organiques comme le [6,6]-phényl-C61-butanoate de méthyle (PC61BM).

Après l'utilisation de couches minces de SnO_2 comme couche de type n par Tian et ses collaborateurs, les recherches se sont progressivement orientées vers l'exploitation de ce matériau en utilisant différentes méthodes de dépôt et de préparation des solutions, telles que la décomposition thermique, le spin-coating à partir d'une solution colloïdale ou encore le dépôt par couches atomiques (ALD). Plus récemment, le groupe de You a rapporté une efficacité de

20,9 % pour des cellules à base de SnO_2 , grâce à un contrôle précis de la couche de passivation de surface de PbI_2 .

Les couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL) jouent plusieurs rôles essentiels dans les cellules solaires à pérovskite, notamment l'extraction sélective des porteurs de charge et la réduction de leur recombinaison aux interfaces entre l'électrode et la couche de transport, ainsi qu'entre la couche de transport et la pérovskite. Il est donc important d'assurer un bon alignement des niveaux d'énergie entre ces couches et la pérovskite afin d'éviter la formation de barrières énergétiques à l'interface, susceptibles de limiter significativement l'extraction des porteurs de charge.

La Figure 2 présente un récapitulatif des différentes couches ETL et HTL (oxydes métalliques et matériaux organiques) généralement utilisées dans l'architecture planaire de type N-I-P. De manière générale, la couche ETL doit posséder une bande de conduction (CB) alignée ou légèrement inférieure à celle de l'absorbeur pérovskite. De même, la couche HTL doit présenter une bande de valence (VB) plus basse que celle de la pérovskite. Par ailleurs, les positions du minimum de la bande de conduction et du maximum de la bande de valence doivent également être convenablement adaptées.

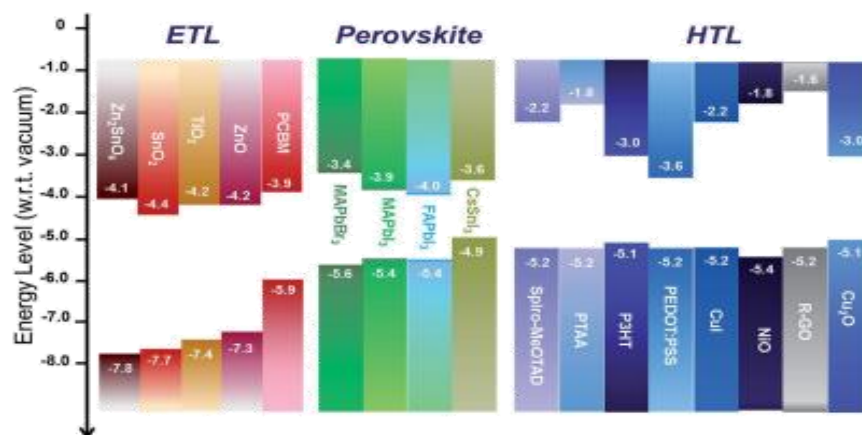


Figure I.2. Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite), tirées de la littérature, dans des cellules solaires à Pérovskite. Ces valeurs peuvent changer en fonction des méthodes de dépôt et des traitements post-dépôt.

- **Structure planaire P-I-N inverse :**

Dans la structure P-I-N, la couche de type p (HTL) est déposée en premier sur le substrat verre/ITO. Elle est généralement constituée d'un polymère conducteur d'une épaisseur comprise entre 50 et 80 nm, tel que le poly(3,4-éthylènedioxythiophène) (PEDOT) et le poly(styrène sulfonate) (PSS). La couche mince de pérovskite est ensuite déposée sur la couche HTL, puis le dispositif est complété par le dépôt de la couche de type n (ETL) au-dessus de la pérovskite. Cette dernière est, de manière générale, une couche organique, typiquement le PCBM, avec une épaisseur variant entre 10 et 60 nm, suivie d'une cathode métallique (Al/Ag).

Récemment, les rendements des dispositifs à architecture planaire de type P-I-N ont considérablement augmenté grâce à l'utilisation de méthodes de préparation plus avancées et au développement de cette structure intégrant des couches inorganiques, telles que les oxydes de nickel (NiO) et de zinc (ZnO), ce qui a permis d'élargir le choix des couches HTL.

Le principe de fonctionnement repose sur l'effet photovoltaïque : lorsqu'un photon est absorbé par la couche de pérovskite, une paire électron-trou est générée. Grâce à la faible énergie de liaison des excitons et à la grande longueur de diffusion des porteurs de charge, ces charges se séparent efficacement et migrent vers leurs collecteurs respectifs à travers les couches ETL et HTL, générant ainsi un courant électrique exploitable.

I.1.2 Paramètres photovoltaïques essentiels

La cellule photovoltaïque représente un certain nombre de caractéristiques, dont les plus importantes sont [4] :

- La densité de courant de court-circuit ;
- La tension en circuit ouvert ;
- Le facteur de forme ;
- Le rendement de conversion énergétique.

a) La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) :

Il s'agit de la densité de courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule est nul. C'est la plus grande densité de courant que la cellule peut fournir. Celle-ci dépend de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule et de la mobilité des porteurs de charge, et elle est approximativement linéairement dépendante de l'intensité lumineuse reçue.

b) La tension de circuit ouvert (V_{oc}) :

Il s'agit du potentiel maximum que la cellule peut fournir lorsque le courant est nul. Dans le cas des cellules photovoltaïques organiques, la tension de circuit ouvert (V_{oc}) dépend du niveau HOMO du matériau donneur d'électrons et du niveau LUMO du matériau accepteur d'électrons. Les pertes de charge aux interfaces matériau-électrode influencent également cette valeur.

c) Le facteur de forme (FF) :

Il s'agit d'un facteur qui rend compte de la qualité de la forme de la caractéristique densité de courant-tension. Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{P_{max}}{J_{sc}V_{oc}} = \frac{J_{max} \cdot V_{max}}{J_{sc} \cdot V_{oc}} \quad (1.1)$$

Où J_{max} et V_{max} représentent le couple densité de courant-tension pour lequel la puissance délivrée par la cellule est maximale (P_{max}). Le facteur de forme FF théorique est compris entre 0.25 et 1.

Le facteur de forme FF peut aussi donner des informations sur la qualité des interfaces matériau-électrode. Lorsque sa valeur descend en-dessous de 25 %, cela traduit généralement la présence d'un contact non-ohmique ou d'une couche oxydée et/ou isolante à l'interface matériau-électrode.

d) Le rendement de conversion énergétique (PCE) [5] :

Le rendement de conversion énergétique (Power Conversion Efficiency, PCE) constitue le paramètre fondamental permettant d'évaluer les performances d'une cellule solaire. Il représente le rapport entre la puissance électrique maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente reçue.

Il est défini par l'expression suivante :

$$\text{PCE} = \frac{P_{max}}{P_{in}} \times 100 \quad (1.2)$$

Où :

P_{max} : est la puissance électrique maximale produite par la cellule,

P_{in} : est la puissance lumineuse incidente (généralement 100 mW/cm² sous illumination standard AM 1.5G).

La puissance maximale correspond au point de puissance maximale (MPP) sur la courbe courant-tension (J-V) et s'exprime par :

$$P_{max} = V_{max} \times I_{max} \quad (1.3)$$

En pratique, le rendement peut également être écrit sous la forme :

$$\text{PCE} = (V_{oc} \times I_{sc} \times \frac{FF}{P_{in}}) \times 100 \quad (1.4)$$

Où :

V_{oc} : est la tension en circuit ouvert,

I_{sc} : est le courant de court-circuit,

FF : est le facteur de forme.

Le PCE dépend donc directement de ces trois paramètres photovoltaïques. Toute amélioration du transport des charges, de la qualité des interfaces ou de la réduction des recombinaisons contribue à l'augmentation du rendement global.

Dans les cellules solaires à pérovskite, les progrès réalisés ces dernières années ont permis d'atteindre des rendements supérieurs à 25 %, ce qui positionne cette technologie parmi les plus prometteuses du domaine photovoltaïque.

I.2 Les matériaux organiques à transfert de charge

I.2.1 Rôle des matériaux à transfert de charge dans une cellule solaire

Les matériaux à transfert de charge sont des composants essentiels des cellules solaires à pérovskite. Leur rôle principal est d'assurer la séparation et le transport efficace des porteurs de charge générés dans la couche active, tout en limitant leur recombinaison aux interfaces avec les électrodes. Ces matériaux peuvent être organiques ou inorganiques, mais les matériaux organiques offrent l'avantage d'une modification chimique facile, ce qui permet d'adapter leurs propriétés électroniques aux besoins spécifiques de la cellule [6].

Dans une cellule à pérovskite, les matériaux organiques à transfert de charge se divisent en deux catégories :

- Matériaux à transfert de trous (HTM) : ils transportent uniquement les trous vers l'anode et bloquent les électrons.
- Matériaux à transfert d'électrons (ETM) : ils transportent les électrons vers la cathode tout en bloquant les trous.

Leur efficacité détermine directement la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (I_{sc}) et la stabilité opérationnelle de la cellule. Un mauvais choix ou une mauvaise qualité de couche peut provoquer des recombinaisons non radiatives et réduire le rendement global de la cellule [7].

I.2.2 Panorama des matériaux à transfert de charge

Matériaux à transfert de trous (HTM)

Les Matériaux organiques à transfert de trous couramment utilisés incluent [7] :

- Spiro-OMeTAD : le plus classique, efficace mais coûteux, nécessite souvent un dopage pour augmenter leur conductivité.
- PEDOT : PSS : un polymère conducteur utilisé surtout dans les architectures inversées (p-i-n), facile à déposer par solution.
- PTAA ou P3HT : les polymères à haute mobilité de porteurs, offrant une meilleure stabilité thermique et chimique.

Matériaux à transfert d'électrons (ETM)

Les matériaux organiques à transfert d'électrons permettent l'extraction des électrons et bloquent les trous. Les plus étudiés sont [7] :

- PCBM (Phenyl-C61-butyric acid methyl ester) : dérivé fullerène, très efficace dans certaines architectures inversées.
- C60 ou C70 : utilisés pour améliorer l'extraction électronique dans certaines cellules hybrides.
- TiO₂ ou SnO₂ dopés : souvent combinés avec des polymères organiques pour optimiser le transport électronique.

Références Bibliographiques

- [1] Ren, X. & Jung, H. S. (2018). Recent Progress in Flexible Perovskite Solar Cell Development. *Journal of the Korean Ceramic Society*, 55(4), 325–336.
- [2] <https://dspace.univ-bba.dz/bitstreams/ed13024f-60cd-4443-abc1-e118a86b32d5/download>
- [3] Dally, P. (2019). Cellules Solaires à base de Matériaux Pérovskites: De la caractérisation des matériaux à l'amélioration des rendements et de la stabilité (Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes).
- [4] Fodil Ibtissem, H. A. Etude et simulation d'une cellule solaire $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$.
- [5] Green, M. A., Ho-Baillie, A., & Snaith, H. J. (2014). The emergence of perovskite solar cells. *Nature Photonics*, 8, 506–514.
- [6] Allali, R. (2022). Ingénierie des matériaux organiques pour les cellules solaires à pérovskite. Thèse de Doctorat en Science des Matériaux, Université de Blida.
- [7] Harrach, M. (2024). Étude comparative des matériaux HTL dans les cellules pérovskites. Mémoire de Master, Université d'Annaba.
- [8] R. Dennington, T. Keith, J. Millam, GaussView, Version 4.1.2, Semichem Inc., Shawnee Mission, K.S, 2007.
- [9] N. Belkafouf, Analyse structurale et spectroscopique de nouveaux matériaux fonctionnels, Thèse de doctorat, Université de Mostaganem, 2019.
- [10] P. Şen, S. Kansız, Crystal Structure, Spectroscopic and Computational Studies of N_2O_2 Type Salen-Based Schiff Base and Its Di-boron Complex, *Journal of Chemical Crystallography*. 52 (2022) 1-16

Chapitre II

Résultats et discussion

II.1 Introduction

Le développement de nouveaux matériaux organiques pour les cellules photovoltaïques, dont la couche active est constituée de semi-conducteurs organiques, représente une innovation prometteuse permettant de réduire les coûts de production, souvent élevés dans le domaine du photovoltaïque.

Dans ce chapitre, nous nous intéressons à l'étude des propriétés physicochimiques d'un matériau organique synthétisé, de formule chimique $C_{13}H_{10}ClNO$, connu sous l'acronyme BZP. L'analyse sera principalement axée sur sa structure électronique moléculaire afin d'évaluer ses performances photovoltaïques au sein d'une cellule solaire à pérovskite.

II.2 Propriétés structurales et électroniques du matériau BZP

II.2.1 Optimisation géométrique

La structure moléculaire BZP, appartenant à la famille des benzophénones, a été modélisée à l'aide du logiciel Gaussian 09 [1]. L'optimisation géométrique a été réalisée à partir des données expérimentales obtenues par diffraction des rayons X [2]. Les calculs ont été effectués dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en utilisant la fonctionnelle B3LYP et la base de calcul 6-311G (d, p). La fonctionnelle B3LYP a été choisie pour décrire les propriétés physicochimiques de la structure BZP en raison de sa fiabilité et de son efficacité reconnue dans l'étude des molécules organiques d'activité photovoltaïque [3-4]. La structure correspondant à l'énergie totale minimale de $-1091,652$ ua a été considérée comme la configuration la plus stable de la molécule BZP. Cette structure sera utilisée pour déterminer le potentiel électrostatique moléculaire ainsi que le gap énergétique.

II.2.2 Potentiel électrostatique moléculaire

La surface du potentiel électrostatique moléculaire, représentée par un diagramme tridimensionnel formé selon la taille et la forme de la molécule, permet de désigner les sites réactifs favorables pour une attaque électrophile ou nucléophile au niveau de la structure moléculaire [5]. La figure II.1 représente le graphique du potentiel électrostatique moléculaire (MEP) de la molécule BZP.

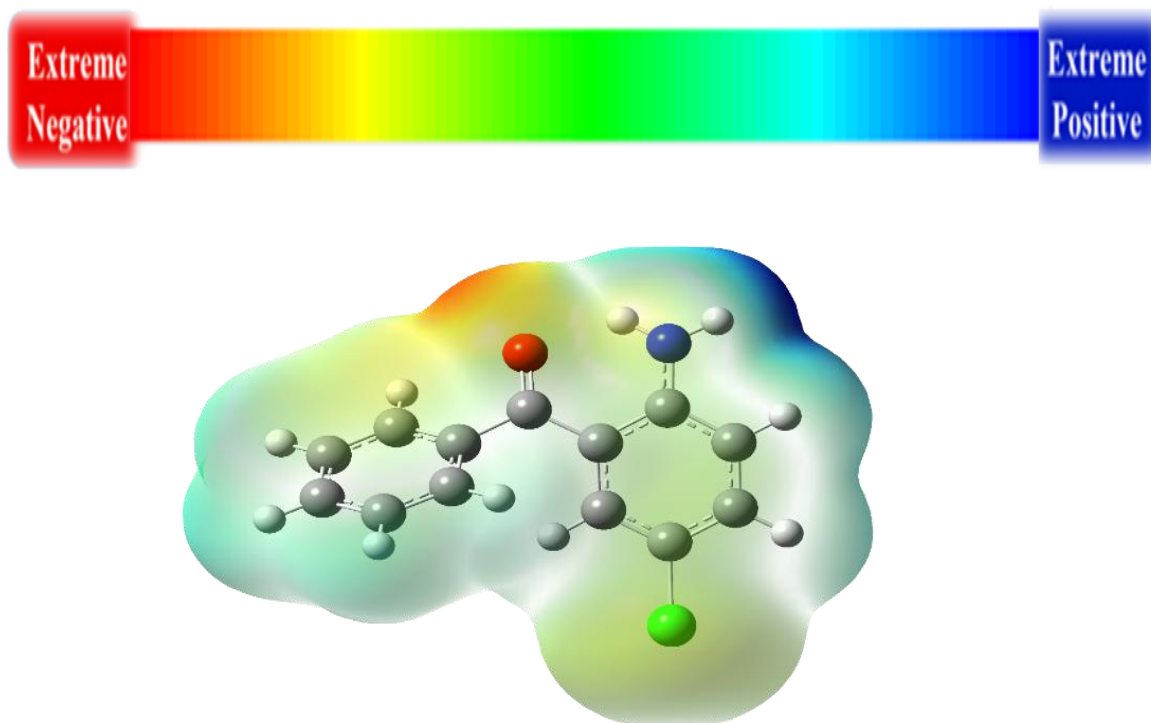


Figure II.1. Potentiel électrostatique moléculaire de la molécule BZP.

Les valeurs du potentiel électrostatique de la structure BZP ont été représentées par une échelle de couleurs comprise entre deux limites extrêmes : les régions rouges correspondent à un potentiel négatif élevé, tandis que les régions bleues indiquent un potentiel positif élevé. L'analyse de la carte du potentiel électrostatique de la molécule BZP montre que :

- Les régions moléculaires polarisées négativement sont représentées en rouge et en orange. Ces zones sont localisées principalement autour de l'atome d'oxygène du groupement carbonyle (C=O). Elles correspondent aux valeurs les plus faibles du potentiel électrostatique, où la densité électronique est la plus élevée en raison de la présence des doublets non liants de l'oxygène. On observe également une zone jaune/orangée au voisinage de l'atome de chlore (Cl), indiquant une densité électronique notable, mais moins importante que celle de l'oxygène.
- Les régions polarisées positivement sont représentées en bleu. Elles sont localisées principalement sur les atomes d'hydrogène liés au groupe amine (NH₂). Ces zones correspondent aux valeurs les plus élevées du potentiel électrostatique, où la densité électronique est plus faible. Elles constituent des donneurs potentiels de liaisons hydrogène.
- Les zones proches de la neutralité apparaissent en vert au sein de la structure moléculaire étudiée, notamment au niveau des cycles benzéniques. Cette couleur traduit un potentiel électrostatique intermédiaire, indiquant que les nuages électroniques des cycles aromatiques sont globalement équilibrés, tout en étant légèrement influencés par les effets inductifs des substituants (groupe amine et atome de chlore).

La carte de potentiel électrostatique de la molécule BZP représentée dans la figure II.1 permet également d'identifier les zones les plus favorables aux interactions intermoléculaires avec le matériau pérovskite au sein de la cellule solaire étudiée ultérieurement. En particulier, les régions riches en électrons, localisées autour des atomes d'oxygène et de chlore, constituent des sites potentiels d'interaction avec les espèces électrophiles de la pérovskite. De même, les zones déficitaires en densité électronique, notamment celles associées aux groupements hydrogène, peuvent favoriser la formation de liaisons hydrogène avec les atomes halogénés du réseau pérovskite. Ces interactions intermoléculaires jouent un rôle essentiel dans l'amélioration du transport de charges ainsi que dans la stabilité globale de la cellule photovoltaïque.

II.2.3 Orbitales moléculaires frontières

L'analyse des orbitales moléculaires frontières constitue une méthode fondamentale pour la description des systèmes organiques et la détermination de la nature des matériaux. Elle repose sur l'étude de deux niveaux énergétiques principaux : l'orbitale moléculaire occupée la plus haute (HOMO) et l'orbitale moléculaire vacante la plus basse (LUMO), dont la différence d'énergie correspond au gap énergétique. Cette grandeur est essentielle pour définir la nature du matériau considéré (conducteur, semi-conducteur ou isolant). Elle est caractérisée par sa largeur notée E_g , calculée par [6] :

$$E_g = E_{LUMO} - E_{HOMO}$$

Pour la structure moléculaire BZP, les résultats présentés dans la figure II.2 montrent une énergie de -5,87 eV pour le niveau HOMO et de -2,02 eV pour le niveau LUMO. Le gap énergétique entre ces deux orbitales est de 3,85 eV, ce qui indique que le BZP appartient à la famille des semi-conducteurs, et qu'il peut donc être utilisé pour la conversion photovoltaïque[6].

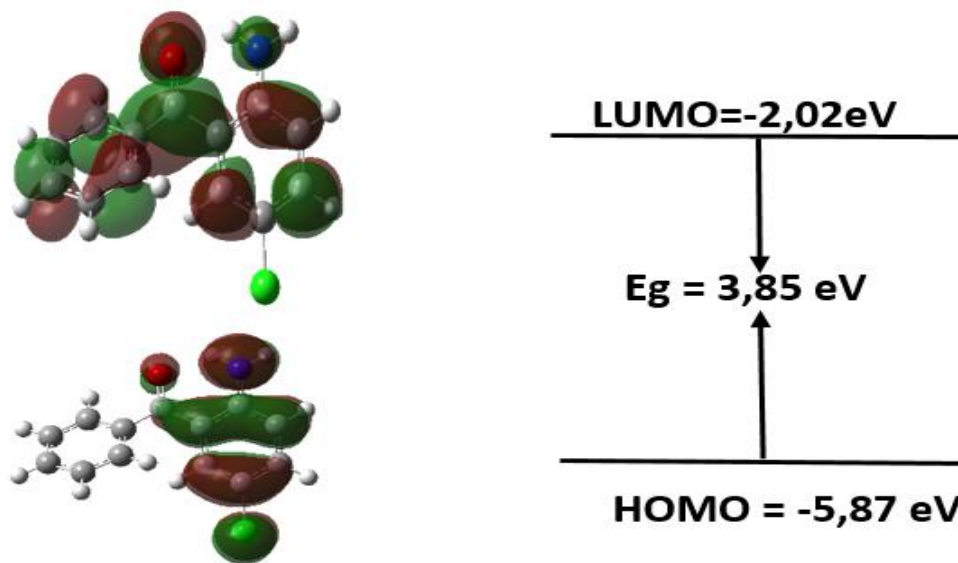


Figure II.2. Représentation des orbitales moléculaires frontières de la molécule BZP.

II.3 Étude des performances photovoltaïques du matériau BZP

II.3.1 Architecture de la cellule solaire étudiée

Afin d'évaluer les performances photovoltaïques du matériau BZP en tant que couche de transport de trous (HTL), celui-ci a été intégré dans une cellule solaire à pérovskite et étudié à l'aide du logiciel SCAPS-1D [6].

L'architecture de la cellule solaire à pérovskite proposée est illustrée dans la figure II.3 (a), tandis que le schéma du dispositif simulé sous SCAPS-1D est présenté dans la figure II.3 (b). L'oxyde d'indium-étain (ITO) est utilisé comme couche conductrice transparente, le PFN:Br comme couche de transport d'électrons (ETL), le bromure d'étain-césium (CsSnBr_3) comme couche absorbante de pérovskite, le BZP comme couche de transport de trous (HTL), et le nickel (Ni) comme contact arrière métallique.

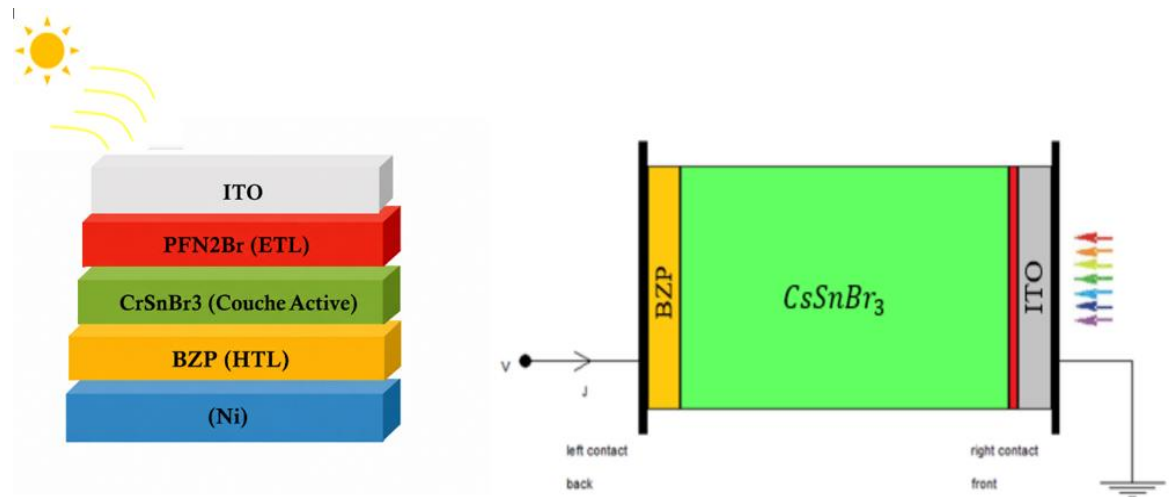


Figure II.3. (a) Architecture de la cellule solaire à pérovskite utilisant le BZP comme couche de transport de trous (HTL). (b) Dispositif SCAPS-1D correspondant à la cellule solaire proposée.

Pour assurer une extraction efficace des charges, l'alignement des bandes d'énergie des différents matériaux constituant la cellule solaire à pérovskite est crucial. Comme illustré sur la figure II.4, un alignement favorable entre le minimum de la bande de conduction de la pérovskite (CsSnBr_3) et celui de la couche de transport d'électrons (PFN:Br) induit un faible décalage de la bande de conduction, facilitant ainsi le transfert des électrons vers l'électrode ITO. De même, un faible décalage de la bande de valence entre CsSnBr_3 et la couche de transport de trous (BZP) favorise l'extraction efficace des trous vers l'électrode arrière (Ni).

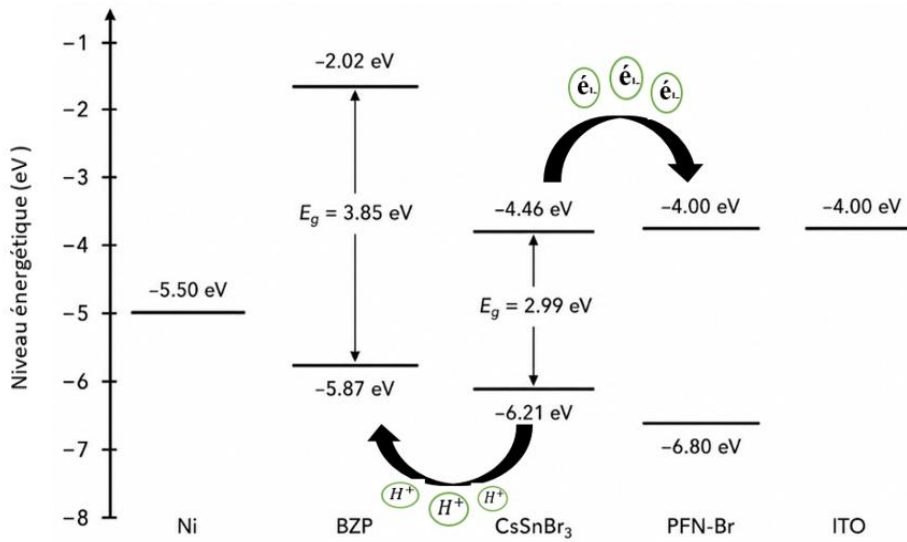


Figure II.4. Alignement des bandes d'énergie des matériaux utilisés dans la cellule solaire proposée.

La simulation de la cellule solaire à pérovskite étudiée a été réalisée en utilisant les paramètres des matériaux constituant chaque couche, répertoriés dans le tableau II.1. Les calculs ont été effectués dans des conditions de fonctionnement standard, à savoir à une température de 300 K et sous un spectre solaire AM 1.5 avec une puissance incidente de 1000 W/m². Les paramètres physicochimiques caractérisant les matériaux de chaque couche ont été extraits de la littérature [7].

Chapitre II : Résultats et discussion

Les principaux paramètres introduits dans le logiciel SCAPS sont : l'épaisseur de la couche T, la largeur de la bande interdite E_g , l'affinité électronique χ , la constante diélectrique relative ϵ , les densités effectives d'états dans la bande de conduction N_C et dans la bande de valence N_V , les vitesses thermiques des électrons V_e et des trous V_h , les mobilités des électrons μ_n et des trous μ_h , les concentrations de dopage des donneurs N_D et des accepteurs N_A , ainsi que la densité totale des défauts N_t .

Tableau II.1. Paramètres physicochimiques de matériaux utilisés dans la cellule solaire simulée

Paramètres physicochimiques	ITO	PFN:Br	CsSnBr ₃	BZP
T (μm)	0.1	0.03	1	0.1
E_g (eV)	3.6	2.8	1.75	3.85
χ (eV)	4	4	4.07	2.02
ϵ	9	5	5.9	9
N_C (cm ⁻³)	2.2×10^{18}	1×10^{19}	1×10^{19}	2×10^{19}
N_V (cm ⁻³)	1.8×10^{19}	1×10^{19}	1×10^{19}	1×10^{19}
V_e (cm s ⁻¹)	1×10^7	1×10^7	1×10^7	1×10^7
V_h (cm s ⁻¹)	1×10^7	1×10^7	1×10^7	1×10^7
μ_n (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	100	1×10^{-4}	2	2×10^1
μ_h (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	20	2×10^{-6}	2	1×10^1
N_D (cm ⁻³)	1×10^{18}	1×10^{19}	0	0
N_A (cm ⁻³)	0	0	1×10^{17}	1×10^{16}
N_t (cm ⁻³)	1×10^{15}	1×10^{15}	1×10^{14}	1×10^{10}

II.3.2 Simulation courant–tension

Les courbes courant–tension (J–V) de la cellule solaire à pérovskite simulée sont illustrées dans les figures II.5 et II.6. Ces courbes ont été obtenues pour deux configurations différentes : une cellule solaire sans couche de transport de trous (HTL) et une cellule solaire intégrant le BZP comme HTL.

D’après les caractéristiques J–V, la couche de transport de trous, située entre la pérovskite CsSnBr_3 et l’électrode de Ni, influence directement la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) et la tension de circuit ouvert (V_{oc}), et par conséquent le facteur de remplissage (FF) ainsi que le rendement de conversion de puissance (PCE) de la cellule solaire.

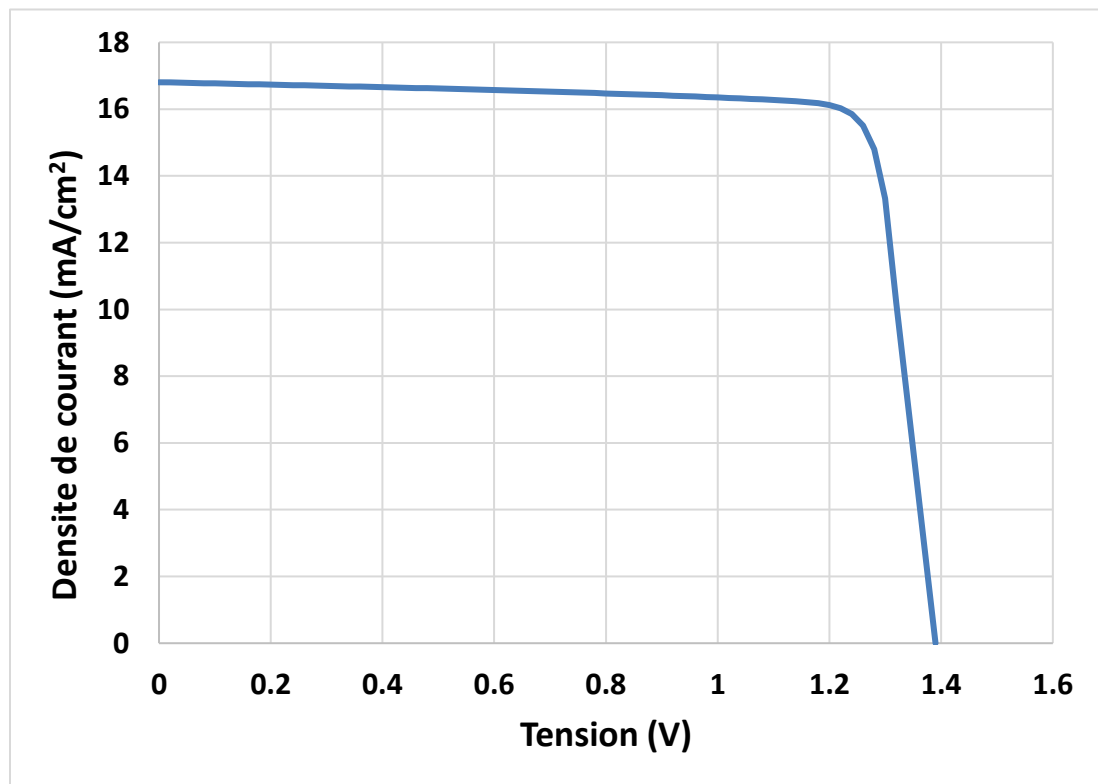


Figure II.5. Courbe J–V de la cellule solaire à pérovskite sans BZP.

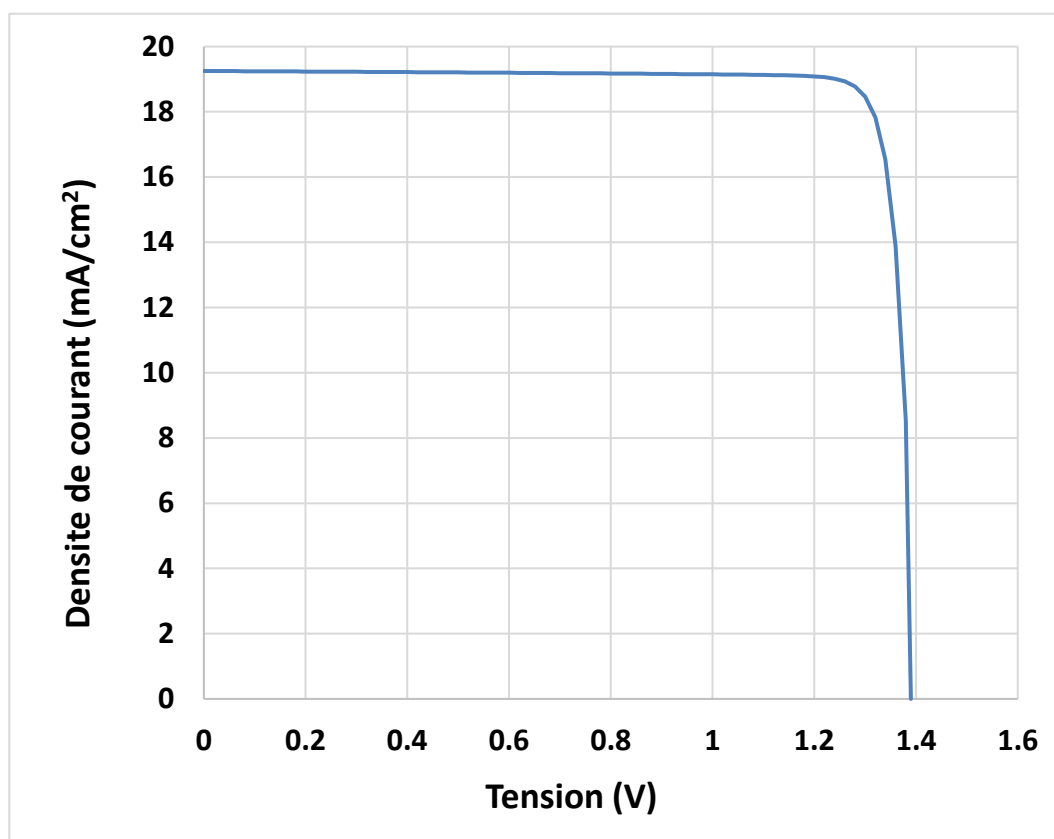


Figure II.6. Courbe J–V de la cellule solaire à pérovskite utilisant le BZP comme HTM.

II.3.3 Analyse comparative des performances photovoltaïques

Le tableau II.2 présente les paramètres de performance de différentes configurations de cellules solaires à base de la pérovskite CsSnBr_3 . L'objectif est d'évaluer l'impact des différentes couches de transport de trous (HTL) sur les performances globales du dispositif photovoltaïque.

Les résultats résumés dans le tableau II.2 montrent clairement que le dispositif intégrant le BZP présente des performances photovoltaïques supérieures à celles des autres configurations rapportées dans la littérature [7]. La cellule solaire à pérovskite utilisant le BZP comme couche de transport de trous (HTL) atteint un rendement de conversion de puissance (PCE) d'environ

24,05 %. La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) correspondante est d'environ 19,25 $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$, tandis que la tension en circuit ouvert (V_{oc}) atteint environ 1,39 V, avec un facteur de forme de 89,44 %. En l'absence de HTL, la cellule solaire étudiée présente des performances photovoltaïques nettement plus faibles.

De plus, les performances photovoltaïques de la cellule solaire à pérovskite étudiée, intégrant le BZP, surpassent celles des dispositifs utilisant d'autres matériaux de transport de trous (HTM), tels que le PTAA et le PEDOT : PSS [7]. Ces résultats indiquent que le BZP améliore l'efficacité d'extraction des trous, permettant un transport plus efficace de ces charges du CsSnBr_3 vers l'électrode de Ni. Cette amélioration est principalement attribuée à l'alignement favorable des bandes d'énergie entre le BZP et le CsSnBr_3 , ainsi qu'entre le BZP et le Ni.

Tableau II.2. Paramètres photovoltaïques de différentes structures de cellules solaires à base de CsSnBr_3 .

Structure d'une cellule solaire à pérovskite	V_{oc} (V)	J_{sc} (mA/cm^2)	FF(%)	PCE(%)
ITO/PFN : Br/ CsSnBr_3 /Ni	1.34	16.78	86.92	19.64
ITO/PFN : Br/ CsSnBr_3 /BZP /Ni	1.39	19.25	89.44	24.05
ITO/BFN-Br/ CsSnBr_3 / PTAA/Ni	1.39	18.67	88.8	22.96
ITO/BFN-Br/ CsSnBr_3 / PEDOT: PSS/Ni	1.39	18.89	88.93	23.35

Références Bibliographiques

- [1] M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, et al., Gaussian 09 (Wallingford, CT: Gaussian Inc., 2009).
- [2] S. Javed, M. S. H. Faizi, S. Nazia, T. Iskenderov, 2-Amino-5-chlorobenzophenone, IUCrData. 3 (2018) x181444.
- [3] N. Akdogan, M. Alp, A. Atilgan, A. Disli, Y. Erdogdu, A. Yildiz, An AZO dye with nitril anchoring to dye-sensitized solar cell performance: A theoretical and experimental investigation, Materials Letters. 351 (2023) 135075.
- [4] P. Prajontat, S. Suramitr, S. Nokbin, K. Nakajima, K. Mitsuke, S. Hannongbua, Density functional theory study of adsorption geometries and electronic structures of azo-dye-based molecules on anatase TiO₂ surface for dye-sensitized solar cell applications, Journal of Molecular Graphics and Modelling. 76 (2017) 551-561.
- [5] Belkafouf, N. Analyse structurale et spectroscopique de nouveaux matériaux fonctionnels, Thèse de doctorat. Université de Mostaganem, 2019.
- [6] M. Burgelman, P. Nollet, S. Degrave, Modelling polycrystalline semiconductor solar cells, Thin Solid Films. 361–362 (2000) 527-532.
- [7] A. I. Shimul, A. Ghosh, Md A. Bappy, Md B. Islam, S. O. Aljazzar, J. Y. Al-Humaidi, Y. E. Mukhrish, Numerical insights into CsSnBr₃ perovskite solar cells: Evaluating organic charge transport layers using DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS simulations, Optics Communications. 579 (2025) 131558.

Conclusion générale et perspectives

Au terme de ce travail, nous avons étudié les propriétés physicochimiques et photovoltaïques d'un nouveau matériau organique, le BZP ($C_{13}H_{10}ClNO$), destiné à être utilisé comme couche de transport de trous dans les cellules solaires à pérovskite. Cette étude s'inscrit dans le cadre du développement de matériaux organiques performants capables d'améliorer l'efficacité et la stabilité des dispositifs photovoltaïques de nouvelle génération.

Dans un premier temps, les propriétés structurales et électroniques de la molécule BZP ont été analysées par des calculs théoriques basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Les résultats obtenus ont montré que la structure optimisée présente une bonne stabilité moléculaire ainsi qu'un comportement semi-conducteur confirmé par une valeur de gap énergétique de 3,85 eV. L'analyse du potentiel électrostatique moléculaire a également permis d'identifier les sites réactifs favorables aux interactions avec le matériau pérovskite, ce qui favorise le transport des charges et la stabilité interfaciale.

Dans un second temps, les performances photovoltaïques du BZP ont été étudiées à l'aide du logiciel SCAPS-1D en l'intégrant comme couche HTL dans une cellule solaire à base de $CsSnBr_3$. Les résultats de simulation ont révélé une amélioration significative des paramètres photovoltaïques par rapport à la structure sans HTL et à certaines structures utilisant des matériaux conventionnels. La cellule solaire utilisant le BZP a atteint un rendement de conversion de puissance (PCE) d'environ 24,05 %, avec une tension en circuit ouvert élevée, une bonne densité de courant et un facteur de remplissage important. Ces performances sont principalement attribuées au bon alignement des niveaux d'énergie entre le BZP et les différentes couches de la cellule solaire.

Ainsi, cette étude démontre que le matériau BZP possède des propriétés électroniques et photovoltaïques prometteuses pour des applications dans les cellules solaires à pérovskite. Les résultats obtenus ouvrent des perspectives intéressantes pour le développement de nouveaux

matériaux organiques plus stables, moins coûteux et plus efficaces pour les technologies photovoltaïques futures.

Enfin, il serait intéressant dans les travaux futurs d'approfondir l'étude expérimentale du matériau BZP, d'évaluer sa stabilité à long terme dans des conditions réelles de fonctionnement et d'explorer son association avec d'autres matériaux de transport de charge afin d'optimiser davantage les performances des cellules solaires à pérovskite.