



République Algérienne Démocratique et Populaire

**MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

Université Abdel Hamid Ibn Badis de Mostaganem

Faculté des sciences exactes et informatique

Domaine : science de la matière

Département de physique

MÉMOIRE de MASTER

Spécialité : Modélisation et caractérisation des matériaux

Thème

**PROPRIÉTÉS ÉLECTRIQUES DES CELLULES
PHOTOVOLTAÏQUES ORGANIQUES PAR SIMULATION**

Présenté par :

BELKAFOUF Nour el houda

Devant le Jury :

BEGHDAD Mohamed MCA Président et Examineur

BOURAHLA Ahmed MCA Encadreur

HADRI Baghdâd Professeur Co-encadreur

Année universitaire : 2014 -2015

Table des matières

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

Chapitre I: Généralités sur les semi-conducteurs organiques

1. Matériaux organiques semi-conducteurs.....	2
a. Définition.....	2
b. Différents types de matériaux organiques semi-conducteurs.....	3
2. polymères	3
a. Définition.....	3
b. Structure électronique des polymères.....	4
c. Longueur de conjugaison d'un polymère	5
d. Principe de dopage des polymères	6
e. Propriété physique des polymères conjugués.....	6
3. Panorama des matériaux utilisés dans le domaine photovoltaïque organique ..	8

Chapitre II: Généralités sur la conversion photovoltaïque organique

1. Rayonnement solaire	9
a. Définition.....	9
b. Caractéristiques du rayonnement solaire.....	10
2. Effet photovoltaïque.....	11
a. Définition.....	11
b. Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque organique	11
3. Caractéristique courant-tension.....	13
4. Différents types de cellule photovoltaïque organique.....	15
a. Structure monocouche	16
b. Structure bicouche	16
c. Structure à hétérojonction en volume.....	16
5. Avantages et inconvénients des cellules solaires organiques	17

Chapitre III: Elaboration de la cellule photovoltaïque organique étudiée

1. Architecture de la cellule photovoltaïque organique étudiée	19
a. Matériaux utilisés	20
b. Présentation des niveaux énergétiques	22

2.	Elaboration du dispositif photovoltaïque étudié	22
a.	Préparation des substrats	23
b.	Dépôt du PEDOT : PSS.....	23
c.	Dépôt de la couche active.....	24
d.	Dépôt de la cathode	24
3.	Effet des interfaces sur les performances de dispositif photovoltaïque étudié	24

Chapitre IV: Equations utilisées dans la simulation numérique

1.	Equations fondamentales de la physique des dispositifs semi-conducteurs ...	27
2.	Génération optique	30
3.	Mécanismes de recombinaisons.....	31

Chapitre V: Résultats et discussions

1.	Structure étudiée.....	34
2.	Caractéristique courant-tension de la structure étudiée	36
3.	Effet de l'épaisseur de la couche active sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique	39
4.	Effet de l'éclairement sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique	44
5.	Effet de la température sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique	48
	Conclusion générale	57
	Bibliographie	59
	Annexe.....	64

Introduction générale

L'énergie solaire constitue la plus importante source d'énergie renouvelable. Elle peut être utilisée comme source de chaleur ou convertie en énergie électrique par le biais de cellules photovoltaïques. Elle possède de nombreux avantages aussi bien sur le plan environnemental qu'économique : elle est gratuite, propre, abondante et inépuisable.

De nos jours, la problématique énergétique se révèle être de plus en plus urgente. Notre société a besoin d'énergie peu dispendieuse. Jusqu'alors et pour répondre à 85% de nos besoins, nous avons, malheureusement, exploité des combustibles fossiles qui se sont avérés très polluants. Cette problématique nous a ainsi contraint à chercher des solutions durables ayant à la fois un impact moindre sur l'environnement et un faible coût.

Comme nous le savons, les rayons du soleil sont une source qui, si nous réussissions à bien l'exploiter, nous donneraient plus d'énergie que nos besoins.

Dans ce contexte, la technologie des cellules photovoltaïques organiques aurait des chances de devenir une solution à notre problème.

La technologie des cellules photovoltaïques organiques est nettement plus facile et plus accessible, ce qui lui promet de très beaux jours. Elle peut être considérée comme une réelle alternative pour les pays dont les moyens sont limités. Il est impératif pour notre pays de prendre toutes les dispositions et mettre tous les moyens pour rattraper son retard dans ce domaine.

Le travail présenté dans ce mémoire concerne l'étude par simulation des propriétés électriques d'une cellule photovoltaïque organique à base de matériaux polymères semi-conducteurs organiques.

Nous nous sommes particulièrement intéressés à l'influence de l'épaisseur de l'éclairage et à la température sur le rendement de la cellule considérée.

Le premier chapitre de ce mémoire présente des généralités sur les semi-conducteurs organiques.

Le second chapitre est consacré à la conversion photovoltaïque organique.

Le troisième chapitre décrit l'élaboration de la cellule photovoltaïque organique étudiée.

Le quatrième chapitre concerne les équations utilisées dans la simulation numérique de la cellule solaire étudiée.

Le cinquième chapitre est un essai d'interprétation et de discussion des résultats trouvés à partir de la simulation numérique de la cellule solaire organique étudiée.

Introduction

L'émergence des semi-conducteurs organiques dans le monde de l'électronique et des technologies de l'information est désormais une réalité. Ces matériaux ont donné naissance à l'électronique organique qui est considéré comme une technologie de l'avenir.

Ce chapitre constitue un support théorique pour notre mémoire, il donne des généralités sur les semi-conducteurs organiques.

Dans la première partie, nous définissons ce qu'est un semi-conducteur organique et nous décrivons les différents types de ces matériaux.

Dans la deuxième partie, nous présentons les notions de bases du semi-conducteur organique objet de notre étude et qui est un polymère.

Dans la troisième partie, nous décrivons le panorama des matériaux utilisés dans le domaine du physique organique.

1. Matériaux organiques semi-conducteurs

a. Définition

Un semi-conducteur organique est un composé organique, sous la forme d'un cristal ou d'un polymère, qui montre des propriétés similaires aux semi-conducteurs inorganiques. Ces propriétés sont la conduction par les électrons et les trous, ainsi que la présence d'une bande interdite. Ces matériaux ont donné naissance à l'électronique organique, ou électronique des plastiques. [35], [54].

Par organique, on entend que les molécules utilisées sont à base de carbone. On dit organique par opposition aux semi-conducteurs inorganiques, tel que le silicium [52].

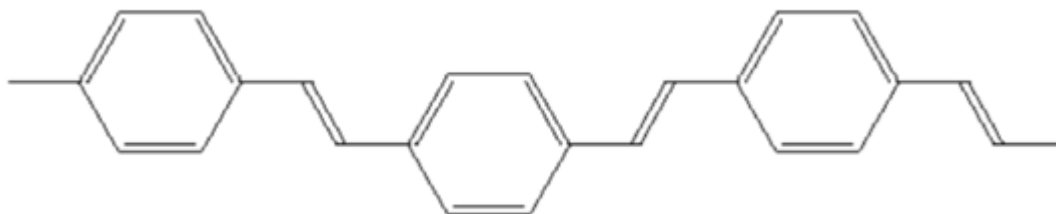


Figure 1 : Exemple de semi-conducteur organique, le PPV (poly-phénylvénylène) [3]

b. Différents types de matériaux organiques semi-conducteurs

Les matériaux organiques semi-conducteurs peuvent être classés en trois catégories: solubles, insolubles et cristaux liquides.

Ces derniers peuvent être classés également soit en molécules avec une structure qui se répète régulièrement et constituée de quelques unités (oligomères) ou d'une seule unité (monomère), soit en molécules qui ont plus de 10 unités (polymères).

Les oligomères et les monomères absorbent la lumière visible et ils sont appelés aussi les chromophores. Par convention, ils portent le nom des colorants s'ils sont solubles et le nom des pigments s'ils sont insolubles.

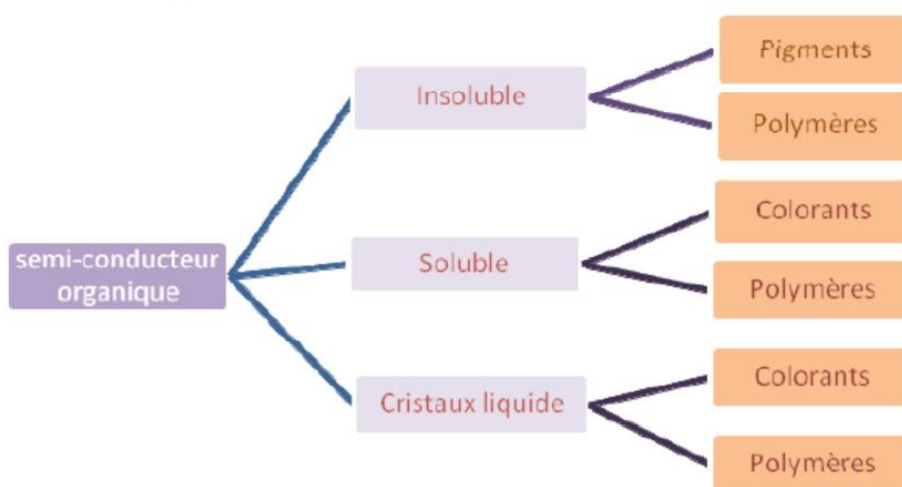


Figure 2 : Classement des semi-conducteurs organiques [3]

2. polymères

Au cours de ces dernières années, les polymères ont envahi notre vie quotidienne et se sont imposés dans tous les domaines de nos activités. Pour cette raison, une recherche intense s'effectue à l'heure actuelle sur des plastiques capables, par exemple, de conduire l'électricité aussi bien que les métaux, ou d'émettre de la lumière de différentes couleurs.

a. Définition

Les polymères sont des matériaux constitués de molécules de grande dimension (macromolécules) construites par la répétition d'un motif monomère. Tous reliés entre eux par des liaisons dites covalentes. Ces chaînes sont principalement constituées d'atomes de carbone sur lesquels sont fixés des éléments comme l'hydrogène ; l'oxygène ou d'autres éléments qui peuvent intervenir dans la composition de la chaîne (le chlore, l'azote ou le fluor) [10], [28].



Figure 3 : Structure chimique de polymère [53]

M: motif monomère (motif de répétition)

n: degré de polymérisation ; nombre de fois que l'on rencontre M dans la molécule.

Le tableau suivant montre un exemple de polymère le plus simple et le moins cher.

Molécule d'éthylène :	
Polyéthylène	

Tableau 1 : Exemple du polyéthylène [53]

b. Structure électronique des polymères

Le caractère semi-conducteur d'un polymère est dû à l'alternance des liaisons simples (σ) et doubles (σ, π) entre atomes de carbones le long de la chaîne. La double liaison C=C correspond à l'hybridation sp^2 de l'atome de carbone et la liaison simple C-C correspond à l'hybridation sp^3 [6], [54].

Les électrons de la liaison π sont beaucoup moins localisés que les électrons liés à la liaison σ . La molécule ainsi constituée possède donc un nuage d'électrons délocalisés et répartis le long de sa chaîne carbonée. Ce qui permet le transport de charges à travers la molécule [42].

Lorsque deux orbitales atomiques s'associent, elles donnent naissance à une orbitale moléculaire. Celle-ci peut avoir deux niveaux d'énergie. Dans le cas de la liaison π , la plus basse énergie π est dite liante, formant la bande de valence : HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital), alors que la plus haute π^* est dite anti-liante, formant la bande de conduction : LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) [11], [14].

Les orbitales π des molécules voisines doivent se chevaucher afin de permettre le déplacement des électrons et des trous entre les molécules.

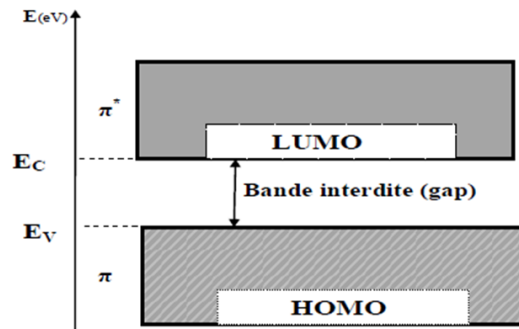


Figure 4 : Structure de bandes d'un polymère conjugué [10]

c. Longueur de conjugaison d'un polymère

La longueur de conjugaison se traduit par l'augmentation du nombre de motifs conjugués dans la chaîne. Plus la longueur de conjugaison est grande plus le gap entre HOMO et LUMO diminue [4], [54].

La figure ci-dessous décrit qualitativement le cas simple du polyacétylène qui est l'archétype du polymère conjugué. Cependant, un raisonnement similaire est valable pour des structures plus complexes comme le poly-para-phénylène-vinylène (PPV).

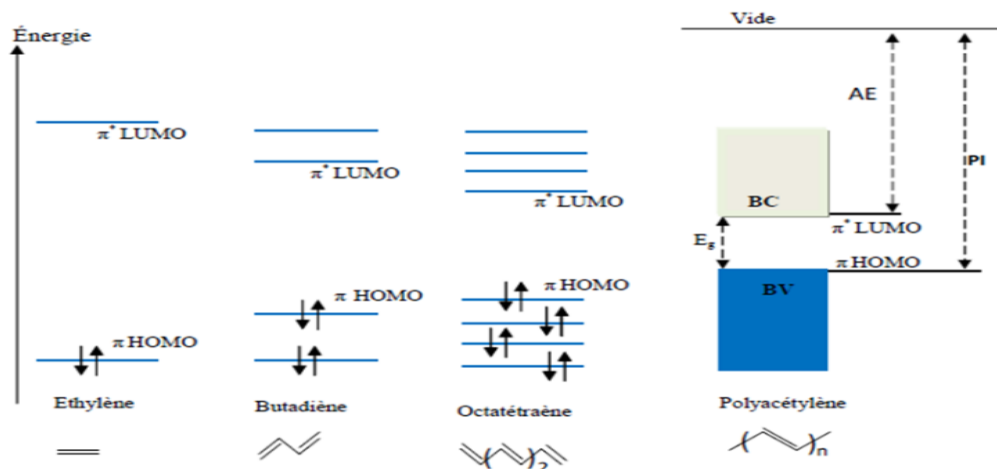


Figure 5 : Diagramme d'énergie des orbitales moléculaires π , obtenu suite à l'augmentation de la conjugaison [21]

La zone comprise entre la HOMO et la LUMO est appelée bande interdite ou gap en anglais. Elle est caractérisée par sa largeur notée E_g . On peut la définir aussi comme la différence entre le potentiel d'ionisation PI (l'énergie nécessaire pour céder un électron depuis le niveau HOMO) et l'affinité électronique AE (l'énergie nécessaire pour l'acceptation d'un électron dans le niveau LUMO) [57].

Le gap d'un polymère conjugué est typiquement compris entre 1.5 et 3 eV ceci implique qu'un polymère conjugué absorbe ou émet la lumière dans le domaine visible.

Polymères conjugués	Bande interdite (eV)
trans-polyacétylène (PA)	1,4-1,5
polythiophène (PT)	2-2,1
poly(p-phénylène) (PPP)	2,7
poly(p-phénylènevinylène) (PPV)	2,5
polypyrrole (PPy)	3,2
poly(3,4-éthylènedioxythiophène) (PEDOT)	1,6

Tableau 3 : Valeurs des bandes interdites de certains polymères conjugués [20]

Comparativement aux matériaux semi-conducteurs classiques, les polymères semi-conducteurs ont une grande résistance. Pour augmenter leur conductivité électrique, on peut les doper par des métaux conducteurs.

d. Principe de dopage des polymères

Le caractère N ou P d'un semi-conducteur provient de la capacité des électrodes à y injecter des électrons ou des trous. Au niveau du contact entre un métal et un semi-conducteur, il existe une barrière d'énergie avec respectivement la LUMO et la HOMO (voir figure suivante). Si la barrière pour l'injection des électrons est plus faible que celle pour l'injection des trous, alors le semi-conducteur est considéré de type N car l'injection des électrons y est facilitée et inversement pour le semi-conducteur de type P.

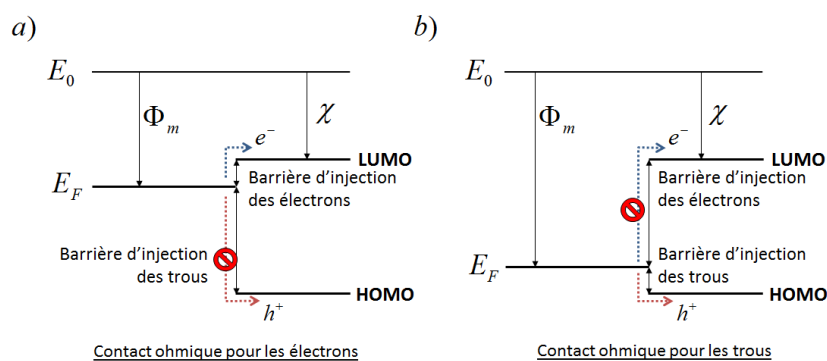


Figure 6 : Schéma de bande du contact entre un métal et un semi-conducteur respectivement de type N (a) et de type P (b) [2]

e. Propriété physique des polymères conjugués

Propriétés électronique

On distingue deux classes de matériaux semi-conducteurs organiques : les matériaux à caractère donneur d'électrons et les matériaux à caractère accepteur d'électrons. On définit le caractère donneur ou accepteur d'un matériau en comparaison des positionnements relatifs des niveaux HOMO et LUMO de chacun des matériaux :

Le matériau donneur d'électrons est celui qui possède le plus faible potentiel d'ionisation. Le matériau accepteur d'électrons est celui qui présente la plus forte affinité électronique.

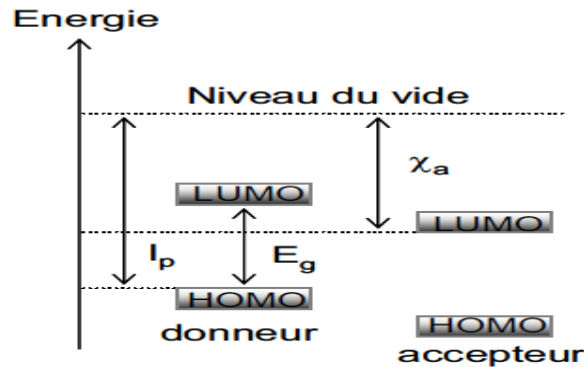


Figure 7 : Diagramme énergétique d'un matériau semi-conducteur donneur ou accepteur d'électron [12]

Propriété d'absorption

La largeur de la bande interdite (l'énergie de gap) E_g d'un semi-conducteur organique détermine sa réaction à la lumière. Elle influence directement sur les propriétés d'absorption du semi-conducteur organique.

Cette largeur de bande interdite détermine la longueur d'onde de la lumière nécessaire pour générer de l'énergie électrique. La relation reliant la bande interdite et la longueur d'onde est:

$$E_g (eV) = \frac{1240}{\lambda (nm)} \quad (I.1)$$

Le gap des polymères est généralement compris entre de 1,5 eV et 3 eV. Le spectre d'absorption de ces polymères se limite donc à 826 nm (pour un gap optique de 1.5 eV), donc l'absorption de ces matériaux se limite à l'énergie des photons du visible [24].

Le semi-conducteur organique présente également l'avantage de posséder un coefficient d'absorption important de l'ordre de 10^5 cm^{-1} ce qui permet de travailler avec des faibles épaisseurs (de l'ordre de nm) dans les applications technologiques [14].

Transport de charge

On peut définir deux types de transports de charges dans les matériaux semi-conducteurs organiques.

- Le transport intramoléculaire : se fait le long de la chaîne conjuguée.
- Le transport intermoléculaire : permet aux charges de passer d'une molécule à l'autre.

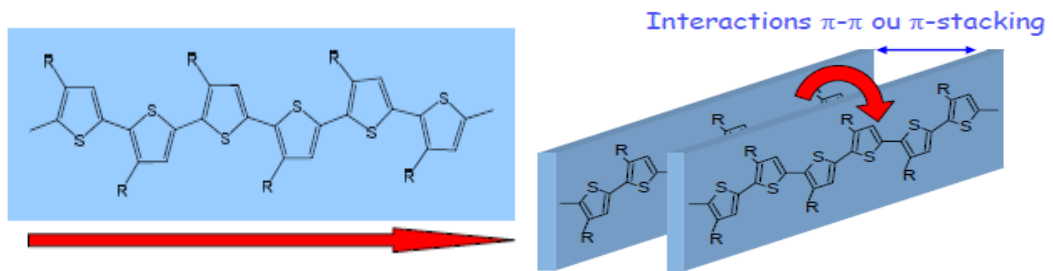


Figure 8 : Transport de charge dans les matériaux organiques [33]

3. Panorama des matériaux utilisés dans le domaine photovoltaïque organique

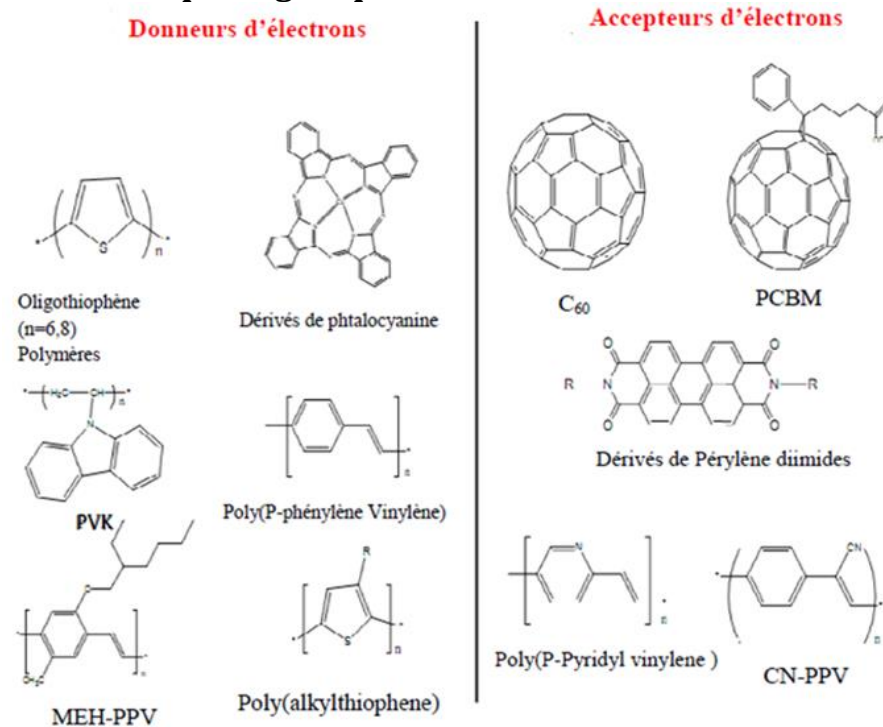


Figure 9 : Structure de donneurs et accepteurs utilisés dans les cellules photovoltaïques [10]

Conclusion

La recherche et le développement des cellules solaires à base des matériaux organiques ou des polymères est motivée grâce aux avantages présentés par ces matériaux : Faible coût, composants souples, matière première illimitée, facilité de mise en œuvre... [15], [41].

Introduction

Le soleil est la principale source d'énergie de lumière et de chaleur dans le système solaire. En une heure, l'énergie solaire qui arrive sur la surface de la terre est, environ, la même que la quantité consommée par l'ensemble des activités humaines en une année [5].

L'énergie solaire photovoltaïque provient de la transformation directe d'une partie du rayonnement solaire en énergie électrique. Cette conversion d'énergie s'effectue par le biais d'une cellule dite photovoltaïque, basée sur un phénomène physique appelé effet photovoltaïque qui consiste à produire un courant lorsque la surface de cette cellule est exposée à la lumière. Le constituant essentiel d'une cellule photovoltaïque responsable de l'effet photovoltaïque est un semi-conducteur.

Dans ce chapitre, nous présentons un certain nombre de concepts qui seront utilisés dans notre étude.

Dans la première partie, nous présentons le gisement solaire qui est considéré comme le facteur majeur dans la conversion photovoltaïque. Dans la deuxième partie, nous décrivons le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque organique et les principaux paramètres électriques qui peuvent être extraits de n'importe quelles cellules solaires. Dans la troisième partie, nous présentons les différentes structures de cellules photovoltaïques organiques.

1. Rayonnement solaire

a. Définition

Le rayonnement solaire constitue la ressource énergétique la mieux partagée sur la terre et la plus abondante. Contrairement aux autres énergies renouvelables, l'énergie solaire ne souffre pas de problème de gisement, elle est disponible partout sur notre planète. Cette énergie est transmise sous la forme d'ondes électromagnétiques, bien que ce soit sous son aspect corpusculaire (les photons) que la lumière intervient dans la conversion photovoltaïque [27].

Une partie de ce rayonnement peut être exploitée pour produire directement de la chaleur (solaire thermique) ou de l'électricité: c'est l'énergie solaire photovoltaïque[54].

Le Soleil émet un rayonnement électromagnétique compris dans une bande de longueur d'onde variant de 0.22 μm à 10 μm . L'énergie associée à ce rayonnement solaire se décompose, approximativement, ainsi :

- 9% dans la bande des ultraviolets $< 0.4\mu\text{m}$
- 47% dans la bande visible $0.4 \text{ à } 0.8 \mu\text{m}$
- 44% dans la bande des infrarouges $> 0.8\mu\text{m}$ [36].

b. Caractéristiques du rayonnement solaire

Constante solaire

La constante solaire exprime la quantité d'énergie solaire que recevrait une surface de 1m^2 exposée perpendiculairement aux rayons du Soleil. Si l'atmosphère terrestre n'existait pas elle serait égale à 1.367 KW/m^2 . L'atmosphère existe absorbe une partie du rayonnement, de sorte que la quantité d'énergie atteignant la surface terrestre n'est plus que de 0.925 KW/m^2 .

Masse d'air

La part d'énergie reçue sur la surface de la terre dépend de l'épaisseur de l'atmosphère à traverser. Celle-ci est caractérisée par le nombre de masse d'air AM_x où x est défini par la relation :

$$x = \frac{1}{\cos \alpha} \quad (\text{II.1})$$

α représente l'angle que fait la direction du soleil avec la verticale.

Le tableau ci-dessous montre un résumé des différentes distributions spectrales.

Hauteur	Position du soleil	Irradiance (intensité, puissance) (W/m^2)	Distribution spectrale
En dehors de l'atmosphère	-	1367	AM0
Surface	$\alpha = 0^\circ$	1000	AM1
Surface	$\alpha = 48^\circ$	963	AM1.5
Surface	$\alpha = 60^\circ$	691	AM2

Tableau 1 : Représentation de différentes distributions spectrales [36]

D'après ce tableau, on peut conclure que la puissance de la lumière devient plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande.

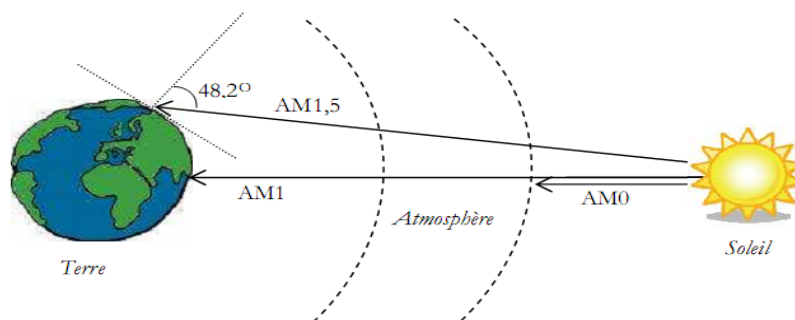


Figure 1 : Différentes constantes d'illumination [36]

La désignation AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de la couche atmosphérique à incidence normale, AM1 lorsque la lumière arrive à la surface de la terre. AM1.5 lorsque la lumière arrive obliquement (48.2°) sur la surface de la terre.

Généralement, les caractéristiques photovoltaïques délivrées pour les cellules sont obtenues à partir de leur illumination sous AM1.5 [14], [26].

2. Effet photovoltaïque

a. Définition

Une cellule photovoltaïque organique est un dispositif optoélectronique capable de capter et convertir directement l'énergie des rayons lumineux en électricité. Cette conversion est appelée la conversion photovoltaïque [57].

Cette cellule comprend une couche active organique (à base de polymère ou de petites molécules) insérée entre deux électrodes, l'une d'entre elle étant semi transparente afin de permettre la pénétration de la lumière dans la couche active [14], [42].

Une électrode transparente, généralement d'ITO (anode) est déposée sur un substrat transparent comme du verre. Pour la cathode, de l'aluminium est déposé par évaporation sur la couche active qui est composée généralement de deux matériaux, l'un transporteur de trous, l'autre transporteur d'électrons.

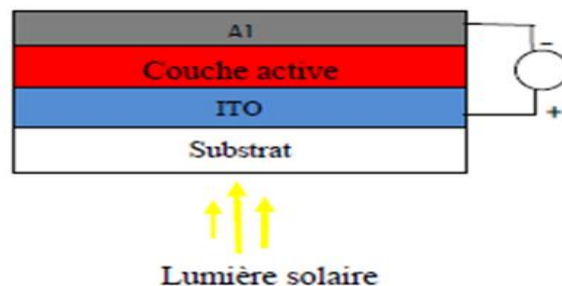


Figure 2 : Schéma général d'une cellule photovoltaïque organique.

La cellule solaire organique ne nécessite pratiquement aucun entretien ; elle ne pollue pas et ne produit aucun bruit. Elle est donc la façon la plus sûre et la plus écologique de produire l'énergie [4].

b. Fonctionnement d'une cellule photovoltaïque organique

Une cellule photovoltaïque est un dispositif qui permet de transformer l'énergie solaire en énergie électrique. Cette transformation est basée sur les trois mécanismes suivants :

1. Absorption des photons dont l'énergie est supérieure à l'énergie de gap par le matériau constituant le dispositif.
2. Transfert d'énergie de photons aux électrons présents dans la matière, qui se mettent alors en mouvement dans une direction particulière.
3. Recueillement de courant électrique continu par des fils métalliques très fins reliés aux matériaux.

La figure suivante montre les différentes étapes de la conversion photovoltaïque pour une cellule solaire organique.

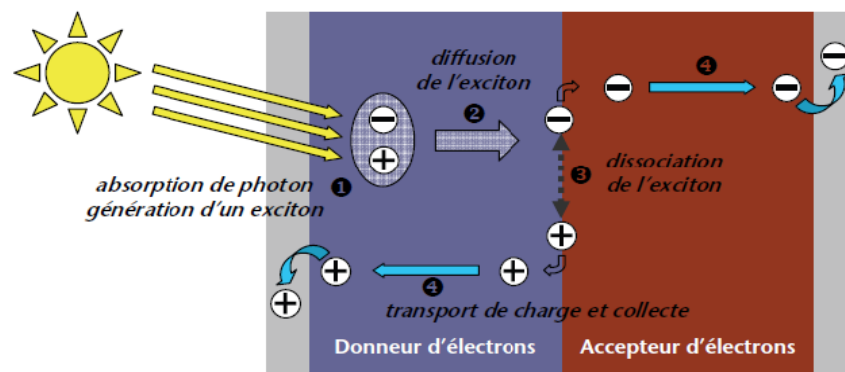


Figure 3 : Les étapes de la conversion photovoltaïque dans les cellules solaires organiques [34]

Absorption des photons et la génération des excitons:

Les photons incidents sont absorbés par le matériau de la couche active, ce qui provoque le passage d'un électron de l'état fondamental à l'état excité. Le photon absorbé permet la création d'un exciton qu'on peut considérer comme une paire électron-trou.

Diffusion des excitons jusqu'à l'interface entre donneur/accepteur (D/A):

Compte tenu des limitations propres aux matériaux organiques (durée de vie des excitons, faible mobilité des charges), seules une faible fraction des paires électrons-trous générées par les photons contribuent effectivement au photo courant.

Pendant leur durée de vie, seuls les excitons générés sur une distance inférieure à la longueur de diffusion peuvent atteindre un site de dissociation (interface D/A).

Dissociation des excitons en porteurs libres:

Lorsque les excitons rejoignent l'interface D/A, leur dissociation en porteurs libres nécessite un champ électrique qui peut être obtenu grâce à la différence de potentiel à l'interface des matériaux donneurs et accepteurs. Puis il y a un transfert de charge

(transfert de l'électron du donneur vers l'accepteur et transfert des trous de l'accepteur vers le donneur).

Transfert de charges libérées vers les électrodes et leur collecte :

Les charges alors libérées migrent à travers le matériau actif. Une fois qu'elles ont atteint les électrodes, ou elles sont collectées, elles génèrent ainsi un courant électrique [14], [35], [43], [54].

3. Caractéristique courant-tension

Une cellule solaire est constituée par une jonction PN. Lorsque la surface libre est éclairée les photons d'énergies supérieures à la largeur de la bande interdite E_g peuvent générer des paires électron-trou dans les régions quasi neutres P et N comme il est indiqué dans la figure suivante :

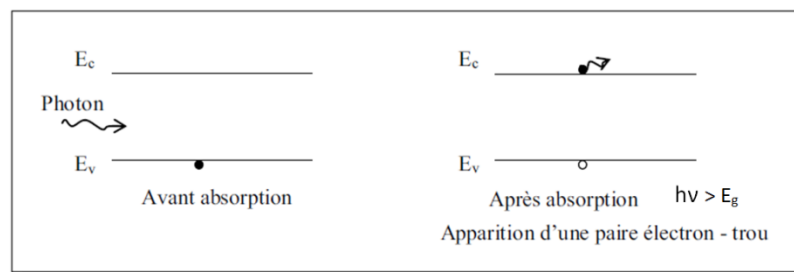


Figure 4 : Création de paire électron trou par photo excitation [59]

Si on relie la jonction PN à une résistance de charge R_c , un courant I la parcourt :

$$I = I_{ph} - I_d \quad (II.2)$$

I_{ph} : le photo-courant

I_d : courant d'obscurité de la diode

La variation de courant en fonction de la tension donne ce qu'on appelle la courbe caractéristique (courant-tension) de la cellule photovoltaïque représentée dans la figure ci-dessous :

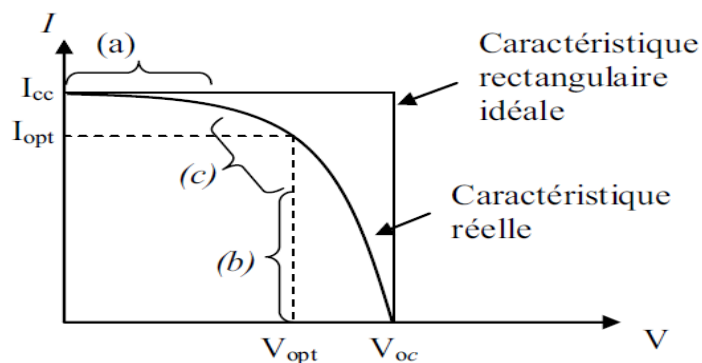


Figure 5 : Caractéristique courant tension d'une cellule photovoltaïque [59]

Nous pouvons décomposer la caractéristique $I(V)$ d'une cellule photovoltaïque en trois zones :

- La zone (a) où la cellule se comporte comme un générateur de courant I_{cc} ,
- La zone (b) où la cellule se comporte comme un générateur de tension V_{oc} ,
- La zone (c) où se trouve le point de fonctionnement pour lequel la puissance fournie par le générateur est maximale. Ce point est appelé point de puissance optimale, il est caractérisé par le couple (I_m, V_m) [30], [59].

Sous illumination, la cellule photovoltaïque organique est décrite par le circuit électrique suivant :

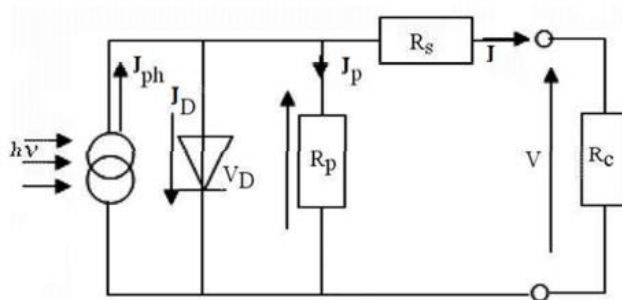


Figure 6 : Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire photovoltaïque réelle sous éclairage [3]

Ce modèle comporte:

- Un générateur de courant délivrant un photo-courant généré par la cellule.
- Une diode représentant la jonction PN dans le matériau considéré.
- Une résistance série R_s .
- Deux résistances parallèles : R_p représente la résistance shunt et R_c représente la résistance de charge quand la cellule est connectée à un circuit externe [1].

Paramètres essentiels caractérisant une cellule photovoltaïque

Il existe de nombreux paramètres qui permettent de caractériser une cellule solaire. Ces paramètres sont appelés paramètres photovoltaïques et sont déduits de la caractéristique $I(V)$ présentée dans la figure précédente. Parmi ces paramètres on a :

- Courant de court-circuit I_{cc}** : c'est le courant obtenu avec une différence de potentiel nulle aux bornes de la cellule ($V=0$). Il s'agit du courant le plus important que l'on puisse obtenir avec une cellule solaire. 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'éclairement.

- b. **tension de circuit ouvert V_{oc}** : c'est la tension obtenue quand le courant qui traverse la cellule est nul. Dans le cas de cellules solaires organiques, la V_{oc} est linéairement dépendante du niveau de la HOMO du matériau donneur et du niveau de la LUMO du matériau accepteur. Enfin, cette valeur décroît avec la température et varie peu avec l'intensité lumineuse.
- c. **facteur de forme FF** : c'est un indicateur de la qualité et de l'efficacité de la cellule solaire. Ce coefficient représente le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer la cellule $V_m * I_m$ et la puissance idéale $V_{oc} * I_{cc}$. Il est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_m}{I_{CC} \times V_{CO}} = \frac{I_m \times V_m}{I_{CC} \times V_{CO}} \quad (\text{II.3})$$

Où I_m et V_m correspondent au courant et tension maximums qui permettent d'en d'extraire le maximum de puissance P_m de la cellule.

- d. **rendement de conversion d'énergie η** : c'est un facteur qui désigne le rendement de conversion en puissance de la cellule photovoltaïque. Ce coefficient représente le rapport entre la puissance maximale que peut générer la cellule et la puissance lumineuse incidente P_{in} . Il est défini par la relation suivante :

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}} = \frac{V_m * I_m}{P_{in}} = \frac{FF * I_{CC} * V_{CO}}{P_{in}} \quad (\text{II.4})$$

Ce rendement peut être amélioré en augmentant le facteur de forme, le courant de court-circuit et la tension à circuit ouvert. Il est un paramètre essentiel. En effet, la seule connaissance de sa valeur permet d'évaluer les performances de la cellule solaire [14], [17], [31], [43], [57].

4. Différents types de cellule photovoltaïque organique

Dans le domaine des cellules photovoltaïques organiques, il existe trois principaux types de structures :

- Structure monocouche,
- Structure à hétérojonction bicouche,
- Structure à hétérojonction en volume.

a. Structure monocouche

C'est la plus simple des cellules photovoltaïques. Elle est constituée d'un film de polymère mis en sandwich entre deux électrodes. Elle a été décrite comme étant de type de Schottky. Cette structure se présente sous la forme ITO/semi-conducteur organique/métal, le rendement de conversion photovoltaïque de celle-ci est très faible [9], [35], [51].

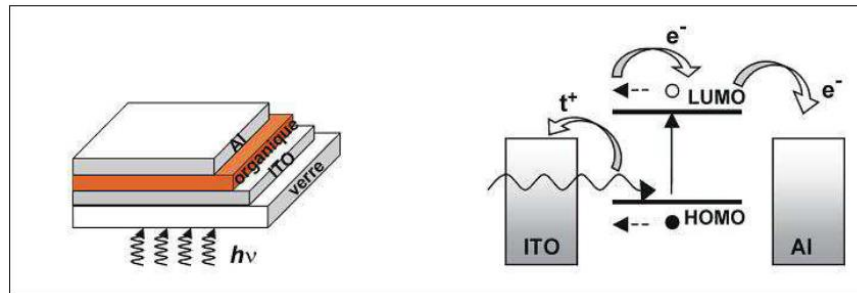


Figure 7 : Structure d'une cellule monocouche de structure ITO/organique/Al (à gauche). Représentation des niveaux d'énergie de ce dispositif (à droite) [8].

b. Structure bicouche

Elle est composée de deux matériaux semi-conducteurs de natures différentes (donneur et accepteur d'électrons) mis en contact avec deux électrodes métalliques. Par rapport à une structure monocouche l'hétérojonction D/A permet d'augmenter considérablement le taux de dissociation des excitons grâce au mécanisme de transfert de charge photo induit à l'interface D/A [14], [44].

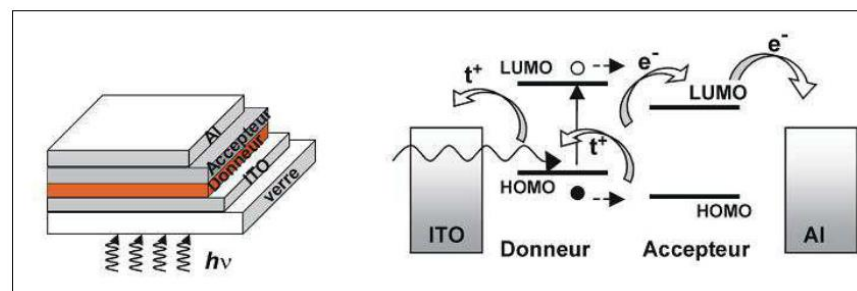


Figure 8 : Structure d'une cellule bicouche de structure ITO/ donneur: accepteur/ Al (à gauche) Représentation des niveaux d'énergie de ce dispositif (à droite) [8].

c. Structure à hétérojonction en volume

Dans ce type de cellule, des semi-conducteurs P et N sont mélangés intimement au sein d'une même couche. La surface de contact entre les deux semi-conducteurs est multipliée par plusieurs ordres de grandeur par rapport aux cellules bicouches, ce qui est permis d'augmenter le nombre d'excitons dissociés. Ce type de structure est utilisé pour

améliorer les rendements de conversion photovoltaïques des systèmes à hétérojonction [14], [50].

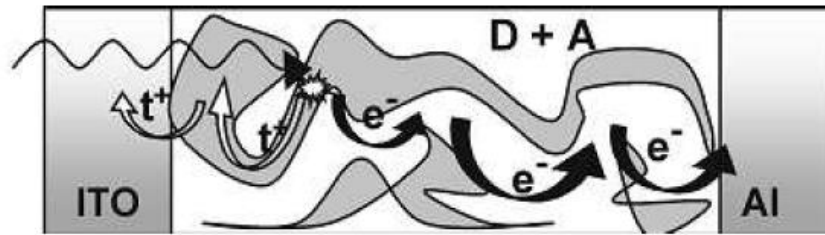


Figure 9 : Architecture d'une cellule à hétérojonction en volume [8]

5. Avantages et inconvénients des cellules solaires organiques

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons, en général, aux principaux avantages et inconvénients des cellules photovoltaïques organiques et en particulier à celles à la base de réseau interpénétré (structure à hétérojonction en volume).

a. Avantages

- Légèreté et flexibilité: les semi-conducteurs organiques sont très légers, ce qui peut être pratique pour des installations de grandes envergures. En plus, ils sont moins fragiles que les semi-conducteurs inorganiques, qui doivent être déposés sur des substrats plans et rigides.
- Dissociation excitonique plus efficace: dans les réseaux interpénétrés, tout le volume organique déposé est susceptible de collaborer à la conversion photovoltaïque du fait que tout exciton généré se trouve proche d'une zone de séparation, et ceci quel que soit la direction prise durant sa diffusion.
- Facilité de fabrication: les cellules photovoltaïques organiques peuvent être produites avec relativement peu de moyens en laboratoire, ce qui fait que leur processus de fabrication est facile et économique.
- Auto-assemblage: en effet, le génie chimique peut mettre au point des molécules qui s'auto assemblent. La preuve de cela, est qu'en 2001, Shmidt - Mende réalisèrent une cellule solaire auto-assemblée à base de cristaux liquides de hexabenzocoronène et pérylène.
- Essor de l'électricité organique: les avancées scientifiques et technologiques réalisées dans ce domaine peuvent présenter un avantage majeur pour la filière du photovoltaïque organique qui se base essentiellement sur les études et les recherches autour des matières organiques semi-conductrices.

- Solubilité: étant donné que les matériaux organiques sont solubles, on peut donc les obtenir sous forme liquide (encres, peintures) et donc les imprimer sur des matériaux divers.
- Transparence: il est possible de créer des cellules transparentes, qui ouvrent de nombreuses possibilités:
 - ✓ Utilisation bifaciale: l'énergie solaire peut être captée par les deux faces, donc il est possible d'utiliser ces cellules dans un environnement de faible luminosité.
 - ✓ Insertion dans des éléments architecturaux: ces cellules pourront être insérées dans des menuiseries (fenêtres, porte, ...) ou sur des éléments (toitures, parois...).
 - ✓ Utilisation multicouche: plusieurs couches transparentes peuvent être superposées, ce qui augmentera l'efficacité des cellules.

b. Inconvénients

- Absorption limitée: le gap des polymères est généralement compris entre 1.5 eV et 3 eV. Le spectre d'absorption de ces polymères se limite donc à 826 nm (pour un gap optique de 1.5 eV), malgré un spectre solaire qui s'étend jusqu'à 2500 nm. Ainsi, les cellules solaires organiques ne pourront pas tirer parti de l'intégralité de l'énergie solaire. En plus, on peut aussi avoir des pertes dues à la transmission et à la diffusion dans l'anode.
- Limite du rendement de collecte: les cellules photovoltaïques basées sur une hétérojonction dans le volume sont limitées par le transport des charges. La recombinaison électron-trou s'opérant dans le volume permet aux charges proches des électrodes, seulement, de contribuer au photo-courant.
- Mobilité réduite: la mobilité des porteurs de charge est très faible dans les matériaux organiques plutôt que dans les matériaux inorganiques.
- Instabilité dans le temps: une cellule solaire doit être capable de produire de l'électricité pendant vingt ans au moins sans baisse de rendement significative [9], [22], [38], [53].

Introduction

Notre études est basée sur une structure de type hétérojonction en volume. Dans cette structure, la couche active est constituée d'un mélange physique entre le donneur et l'accepteur d'électrons. Ce type de cellules permet de réduire les problèmes de pertes par recombinaison des excitons générés loin de l'interface.

Les différentes couches organiques et les électrodes sont réalisées sur un substrat transparent en verre. Ils sont déposés par des méthodes compatibles avec celles utilisées dans l'industrie, comme l'évaporation sous vide, la pulvérisation cathodique ou le dépôt à la tournette.

Ce chapitre expose les moyens mis en œuvre pour fabriquer les dispositifs organiques. La préparation des surfaces, la technique de dépôt constituent des facteurs essentiels qui conditionnent les performances des dispositifs fabriqués. Ainsi que les caractérisations des matériaux.

Dans la première partie, nous allons décrire, étape par étape, les techniques employées pour élaborer et déposer les différentes couches de nos dispositifs. Nous présenterons également les matériaux organiques utilisés dans la structure étudiée et les caractéristiques qui permettent d'améliorer les performances des dispositifs. Dans la deuxième partie, nous allons décrire les effets des interfaces sur les performances du dispositif photovoltaïque envisagé.

1. Architecture de la cellule photovoltaïque organique étudiée

La cellule photovoltaïque organique examinée, dans cette étude, est une cellule à base d'un matériau actif le (Poly [2-methoxy-5-(3',7'-dimethyloctyloxy)-1,4-Phenylenevinylene) et (methano-fullerene[6,6]-phenyl C₆₁-butyric acid methyl ester) (MDMO-PPV : PCBM) serré entre une couche de poly (3,4-éthylènedioxythiophène) : poly(styrène sulfonate) (PEDOT-PSS) qui est posée sur une électrode en Indium Tin Oxyde (ITO) transparent, une couche de Fluorure de Lithium (LiF) et un contact arrière en aluminium (Al). Cette structure est présentée sur la figure suivante :

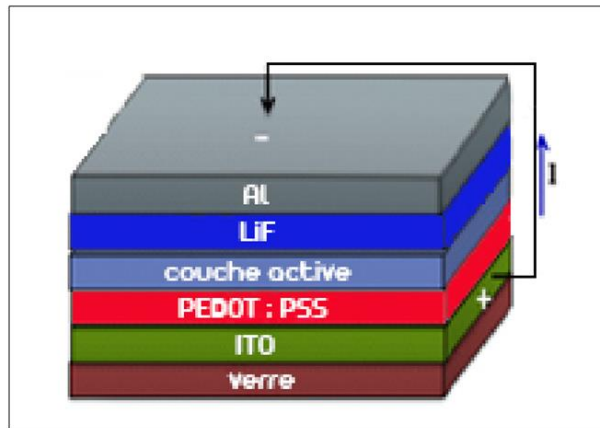


Figure 1 : Architecture de la cellule solaire organique étudiée

a. Matériaux utilisés

Les différents matériaux constituant cette cellule photovoltaïque sont :

ITO

L'oxyde d'indium et d'étain (ou oxyde d'indium dopé à l'étain ou ITO pour l'appellation anglaise : *Indium Tin Oxide*) est un semi-conducteur composé d'un mélange d'oxyde d'indium (III) (In_2O_3) et d'oxyde d'étain (IV) (SnO_2), dans la proportion massique typique de 90 % pour le premier et 10 % pour le second, dont le gap optique est de l'ordre de 4.70 eV. Sa caractéristique principale est la combinaison, à la fois, d'une conductivité électrique élevée et d'une bonne transparence dans le visible. Cet alliage possède une transmittance élevée entre 70% et 90% sur toute la gamme du visible, ce qui permet à la lumière de traverser l'anode et d'être absorbée par la couche active sans trop de perte [39], [44], [56].

PEDOT: PSS

Le PEDOT: PSS est un mélange de deux polymères, le (PEDOT) et (PSS) qui forment un polymère conducteur soluble dans l'eau. Il a une bonne adhérence sur la plupart des matériaux d'électrodes.

Le PEDOT : PSS permet d'améliorer l'injection des trous dans le polymère du fait de son potentiel d'ionisation compris entre le niveau HOMO du donneur et le niveau de Fermi de l'ITO. Enfin le PEDOT: PSS a une excellente transparence dans le domaine visible. Cette couche permet également d'améliorer le contact entre l'électrode d'ITO et la couche organique [3], [42], [54].

PCBM

En 1985, on découvrit un troisième arrangement des atomes de carbone, nommé fullerène par Kroto et al. Le fullerène et ces dérivés sont actuellement considérés comme accepteurs dans les cellules solaires organiques, tant du point de vue des niveaux énergétiques, que du transport des charges. Ce matériau a un gap d'ordre 1,8 eV, donc il absorbe la lumière à des longueurs d'onde inférieure à 688 nm [12], [14].

La structure moléculaire de fullerène (C₆₀) et un de ses dérivés le (PCBM) qui sont aujourd'hui les molécules les plus largement utilisées dans la réalisation des cellules solaires organiques, sont présentées sur la figure suivante :

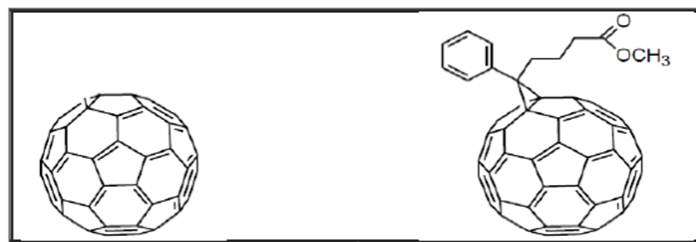


Figure 2 : Structures moléculaires du C₆₀ (à gauche) et du PCBM (à droite) [53]

MDMO-PPV

Fréquemment utilisé dans des cellules solaires organiques, le MDMO-PPV ou OC₁C₁₀-PPV est un polymère conjugué, de structure chimique représentée dans la figure suivante :

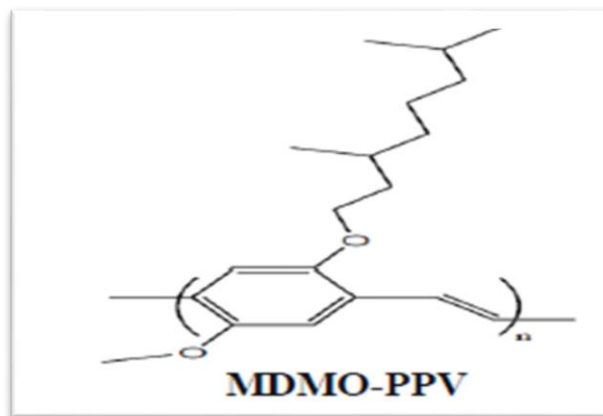


Figure 3 : Structure chimique de MDMO-PPV [16]

Ce matériau présente, grâce à ses chaînes, une meilleure solubilité que le PPV. Il a un gap d'ordre 2.2 eV, donc il absorbe la lumière à des longueurs d'onde inférieures à 563 nm [40], [45], [55].

Aluminium

L'aluminium est un métal qui possède une structure cristalline. Il est considéré comme l'électrode le plus utilisé dans les cellules solaires organiques grâce à leur travail de sortie qui est situé de part et d'autre de celle de l'ITO.

Fluorure de lithium

Le fluorure de lithium est un cristal classé parmi les fluorures alcalins les moins solubles. Il se présente généralement sous la forme d'une poudre cristalline. Il possède un point de fusion et une température d'ébullition élevés [25].

b. Présentation des niveaux énergétiques

On peut présenter les niveaux d'énergie de la structure précédente dans la figure suivante :

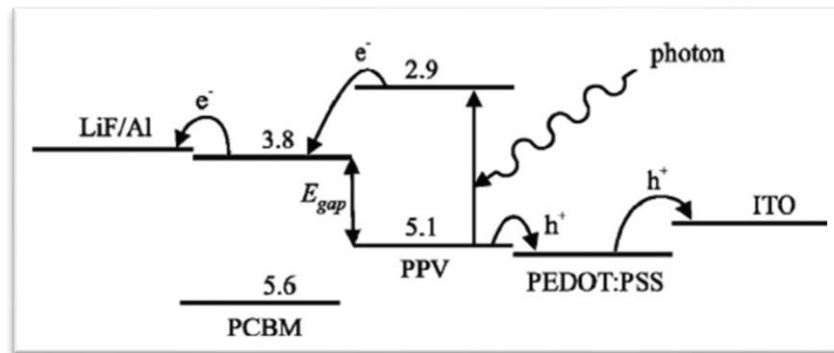


Figure 4 : Représentation des niveaux d'énergie de la structure étudiée [32]

A partir de ce schéma, nous pouvons constater que lors du fonctionnement sous illumination de la cellule solaire, les trous ne voient pas de barrière de potentiel en franchissant la couche de PEDOT : PSS pour être collectés à l'anode d'ITO. Nous pouvons aussi nous apercevoir de la faible barrière énergétique (par rapport à ces niveaux d'énergie) qu'ont à franchir les électrons pour passer du PCBM à la cathode d'Aluminium.

2. Elaboration du dispositif photovoltaïque étudié

La structure du dispositif photovoltaïque réalisé est la suivante :

Substrat de verre / ITO / PEDOT: PSS / Couche active / LiF/ Aluminium.

Cette structure est réalisée en quatre étapes :

- la préparation des substrats.
- le dépôt du PEDOT: PSS.

- le dépôt de la couche active.
- le dépôt de la cathode.

a. Préparation des substrats

La cellule solaire organique de type hétérojonction volumique envisagée au cours de cette thèse utilise un substrat qui est composé d'une lame de verre recouverte d'ITO.

L'ITO peut être déposé par différentes méthodes d'élaboration des matériaux, parmi lesquelles on peut citer la pulvérisation cathodique. Celle-ci s'effectue dans une enceinte sous vide, établi à l'aide d'une pompe.

Le système comporte une plaque porte-substrat et une cible en ITO. Le but est d'arracher des atomes de la surface de la cible et de les déposer sur le substrat.

Le schéma de fonctionnement est représenté sur la figure suivante :

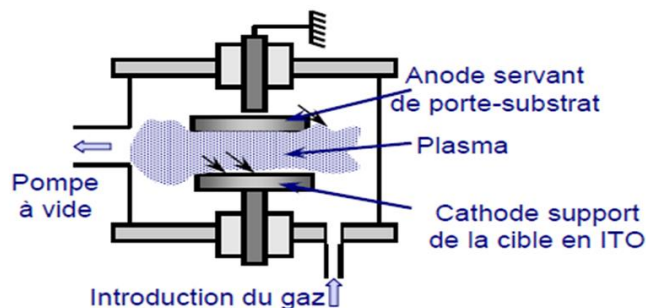


Figure 5 : Schéma de fonctionnement du réacteur de dépôt d'ITO [39]

b. Dépôt du PEDOT : PSS

Le dépôt du PEDOT : PSS s'effectue par voie humide sous condition atmosphérique en utilisant la technique de dépôt à la tournette dite de « spin coating ». Cette technique « empirique », très utilisée en laboratoire, consiste à déposer quelques gouttes de la solution du polymère sur le substrat et de les étaler par centrifugation en précisant les paramètres de rotation (accélération, vitesse et le temps). Après, le film est étuvé sous vide primaire pour éliminer toutes traces d'eau. Une fois cette étape terminée, les lamelles d'ITO sont séchées sur plaque chauffante. Ce traitement permet d'éliminer toute trace d'eau contenue dans le film de PEDOT : PSS et favorise aussi l'absorption de celui-ci sur la couche d'ITO [58]. La figure suivante présente les étapes de cette méthode :

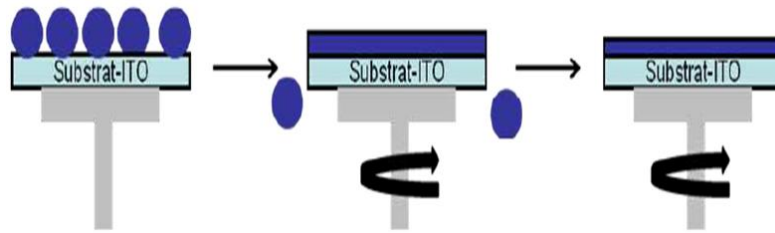


Figure 6 : De gauche à droite : dépôt de la solution organique, accélération jusqu'à la vitesse désirée, séchage du solvant et formation du film [44]

c. Dépôt de la couche active

La solution de la couche photo-active est composée d'un matériau donneur et d'un matériau accepteur d'électrons dont les concentrations optimales varient en fonction des matériaux utilisés. La solution est alors agitée pendant un certain temps à une certaine température afin de solubiliser les matériaux dans le solvant adéquat. Les films de la couche photo-active sont ensuite déposés à la tournette à une vitesse et une durée variant en fonction des matériaux utilisés [14], [40].

d. Dépôt de la cathode

La dernière étape consiste à déposer l'électrode par évaporation sous vide. Le métal considéré est alors placé dans un creuset en tungstène et se sublime par effet Joule. Une couche de LiF formée est suivie d'une couche d'aluminium [12], [58].

3. Effet des interfaces sur les performances de dispositif photovoltaïque étudié

Une autre approche physique pour les performances des cellules solaires ainsi que leur durée de vie est d'améliorer les interfaces électrodes/semi-conducteur organique. Ceci peut se faire en introduisant une couche tampon qui peut être de nature organique ou inorganique. Les matériaux les plus utilisés comme couches interfaciales dans les cellules solaires organiques sont présentés dans le tableau suivant :

P-Type (transport de trous)	N-Type (transport d'électron)
PEDOT:PSS	LiF
MoO ₃	C ₆₀
V ₂ O ₅	TiO _x
WO ₃	ZnO
NiO	C ₆₀

Tableau 1 : Les principaux matériaux interfaciales dans les dispositifs photovoltaïques organiques [14]

Dans notre travail on utilise le LiF comme une couche transporteuse d'électrons au niveau d'électrode négatif et le PEDOT : PSS comme une couche transporteuse de trous au niveau d'électrode positif.

a. L'effet de la couche LiF

L'insertion d'une fine couche de fluorure de lithium (LiF) entre la couche active et l'aluminium améliore les performances des cellules solaires. Plusieurs processus tentent d'expliquer l'origine de cette amélioration par :

- Une diminution du travail de sortie de l'aluminium,
- Une dissociation du LiF induisant un dopage de type N de la couche active au niveau de l'interface,
- Une formation d'une couche de dipôles orientés provoquant un abaissement de la barrière de potentiel à l'interface de la couche active / Al,
- Une protection de la couche organique contre les atomes d'aluminium pendant l'évaporation,
- Une amélioration du courant de court-circuit et de la tension de circuit ouvert de la cellule solaire organique [3], [12], [18], [39].

b. L'effet de la couche PEDOT : PSS

L'insertion de la couche PEDOT : PSS entre la couche active et l'ITO améliore sensiblement les performances de la structure, elle permet de :

- Réduire la rugosité de la surface de l'ITO et réduire les risques de court-circuit à travers les films minces organiques. Ces améliorations sont à priori susceptibles de prolonger la durée de vie des structures.
- Empêcher la diffusion de particules d'indium et d'oxygène depuis l'ITO vers les couches organiques pour améliorer la stabilité des dispositifs organiques.
- réduire la hauteur de la barrière de potentiel entre l'anode et les couches organiques, ce qui permet de favoriser la collecte des charges positives photo générées (porteur de trous), assurer une meilleure injection des porteurs, et augmenter le nombre de porteurs de charges au sein des couches organiques [3], [12].

Conclusion

La connaissance de l'architecture et des techniques d'élaboration de la cellule solaire étudiée, constituent des facteurs essentiels qui peuvent altérer les performances des dispositifs fabriqués. On en conclut que :

Les méthodes utilisées pour déposer les matériaux organiques dépendent de la nature de ceux-ci. La mise en phase des polymères est délicate (nécessité de travailler à haute température) et risque de briser les chaînes de polymères. Aussi, ces derniers sont plutôt étalés à la tournette (petit tour dont on programme l'accélération, la vitesse de rotation et la durée de fonctionnement pour conduire à l'épaisseur désirée).

Le rôle des électrodes est essentiel à la collecte et à l'extraction des charges inhérentes au bon fonctionnement des cellules photovoltaïques en général.

Le PEDOT-PSS et le LiF servent de couches protectrices à la couche émissive et augmentent le nombre de trous et d'électrons, provoquant ainsi une meilleure injection.

Introduction

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à la base des semi-conducteurs ont conduit à la réalisation d'un modèle mathématique. Ce modèle est capable d'opérer dans quasiment n'importe quel dispositif à base de semi-conducteurs. Il consiste en un ensemble fondamental d'équations qui rassemblent le potentiel électrostatique et les densités de porteurs de charge dans un domaine de simulation bien précis. Ces équations, qui sont résolues via des logiciels spécifiques de simulation des dispositifs à la base de semi-conducteurs, sont dérivées des équations de Maxwell. Elles sont principalement : L'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson lie les variations dans le potentiel électrostatique aux densités locales de charge. Les équations de continuité ou de transport décrivent le mode par lequel les densités d'électrons et des trous se comportent en fonction des processus de transport, de génération et de recombinaison.

Dans la première partie, nous présentons les équations fondamentales des semi-conducteurs. Dans la seconde partie, nous nous focalisons sur quelques points particulièrement intéressants tels que la recombinaison qui correspond aux mécanismes conduisant à la perte de paires électron-trou et la génération qui peuvent créer des porteurs de charges.

1. Equations fondamentales de la physique des dispositifs semi-conducteurs

a. Equation de Poisson

Toute charge d'espace $\rho(x, y, z)$ est accompagnée d'un champ électrique donné par la loi de Poisson s'exprime par:

$$\operatorname{div} \mathbf{E} = \frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad (\text{IV.1})$$

Le champ électrique est, d'autre part, relié au potentiel par la relation $\vec{E} = -\overrightarrow{\operatorname{grad}}V$ ce qui donne en explicitant le champ E

$$\Delta V = -\frac{\rho(x, y, z)}{\epsilon} \quad (\text{IV.2})$$

Où V représente le potentiel électrostatique, ϵ la permittivité électrique ($\epsilon = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r$, ϵ_0 est la permittivité du vide et ϵ_r est la permittivité relative du matériau), ρ est la densité volumique des charges.

C'est l'équation de Laplace, dont l'intégration permet de calculer la variation du potentiel dans un semi-conducteur à partir de la charge d'espace. La charge d'espace est calculée en tenant compte de toutes les charges qui existent en un point du semi-

conducteur, c'est-à-dire d'une part des charges mobiles qui sont les électrons et les trous, et d'autre part des charges fixes qui peuvent être localisées sur des donneurs ou accepteurs ionisés ou sur des centres profonds. Cette charge d'espace est donnée par :

$$\rho = -q[n - p + N_A^- - N_D^+ + \sum N_t] \quad (\text{IV.3})$$

Avec :

q : La charge élémentaire.

p, n : Les densités d'électrons et de trous libres.

N_D^+, N_A^- : Les densités d'atomes donneurs et accepteurs ionisés.

$\sum N_t$: La somme de pièges dans un centre profond ; elle est généralement négligeable.

[7], [37].

b. Equations de continuité

Cette équation traduit le bilan, par unité de temps, de la variation de la densité des porteurs dans un volume élémentaire de matériau semi-conducteur. Sa résolution permettra de définir les profils des densités de porteurs excédentaires dans les semi-conducteurs et, par conséquent de calculer les différents courants dans les structures. Elles régissent la condition d'équilibre dynamique des porteurs dans le semi-conducteur. Ce bilan met en œuvre les trois éléments qui peuvent modifier la densité des porteurs:

- les générations dues aux agents externes (qui sont souvent la création de paires électron-trou).
- les générations-recombinaisons internes.
- Le passage d'un courant électrique : les phénomènes de transport (par la présence des courants de conduction ou diffusion).

L'équation de continuité s'exprime par :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = (1/q) \text{div} J_n + G_n - R_n \quad (\text{IV.4})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = (-1/q) \text{div} J_p + G_p - R_p$$

G_n et G_p sont les taux de génération pour les électrons et les trous par des agents externes, R_n et R_p sont respectivement les taux de recombinaisons (internes) pour les électrons et les trous, J_n et J_p sont les densités des courants des électrons et des trous [27], [37].

c. Equations de transport

Les courants dans le semi-conducteur résultent du déplacement des porteurs de charge, électrons et trous, sous l'action d'une force. L'origine de la force peut être un champ électrique ou un gradient de concentration. Dans le premier cas, le courant est dit de conduction, dans le second il est dit de diffusion.

Courant de conduction

En présence d'un champ électrique le porteur de charge est accéléré entre deux collisions aléatoires. La direction est donnée par le champ électrique et génère un déplacement moyen avec une vitesse donnée par :

$$\begin{aligned}\vec{v}_n &= -\mu_n \vec{E} && \text{pour les électrons} \\ \vec{v}_p &= \mu_p \vec{E} && \text{pour le trous}\end{aligned}\tag{IV.5}$$

Dans les mêmes conditions de champ, les vitesses des électrons sont plus grandes que celle des trous. Donc nous avons beaucoup plus de chance de collecter des électrons que des trous. Le courant de drift est donné par :

$$\vec{J}_{n.drift} = -qn\vec{v}_n\tag{IV.6}$$

$$\vec{J}_{p.drift} = qn\vec{v}_p$$

Le courant résultant du déplacement des électrons et des trous sous l'action du champ électrique, s'écrit

$$\mathbf{J}_c = \mathbf{J}_n + \mathbf{J}_p = \sigma \mathbf{E}\tag{IV.7}$$

$$\sigma = ne\mu_n + pe\mu_p$$

Courant de diffusion

Lorsque les porteurs libres ne sont pas distribués uniformément dans le semi-conducteur, ils sont soumis au processus général de diffusion. Leur mouvement s'effectue dans un sens qui tend à uniformiser leur distribution spatiale.

Ce phénomène de diffusion est décrit quantitativement par la première loi de Fick qui montre la proportionnalité entre le flux de particules \mathbf{F} et le gradient de leur concentration ∇C selon la relation [29], [37]:

$$\vec{F} = -D \cdot \vec{\nabla} C\tag{IV.8}$$

Le facteur de proportionnalité D s'appelle coefficient de diffusion.

À partir de la relation précédente on peut trouver les densités des courants de diffusion donné par :

$$\vec{J}_{n.diff} = -q\vec{F}_n = qD_n \nabla n\tag{IV.9}$$

$$\vec{J}_{p.diff} = q\vec{F}_p = -qD_p \nabla p$$

Pour les électrons $C=n$, $D=D_n$ et pour les trous $C=p$, $D=D_p$

D_n et D_p sont les coefficients d'Einstein donné par l'expression:

$$D_n = \left(\frac{kT}{q}\right) \mu_n \quad (IV.10)$$

$$D_p = \left(\frac{kT}{q}\right) \mu_p$$

On obtient donc le courant total dans le semi-conducteur :

$$\mathbf{J}_n = ne\mu_n \mathbf{E} + eD_n \text{grad}n$$

$$\mathbf{J}_p = pe\mu_p \mathbf{E} - eD_p \text{grad}p \quad (IV.11)$$

2. Génération optique

La génération introduite dans les équations de continuité précédentes est due aux facteurs externes. Dans notre cas, le facteur externe est la lumière, donc nous avons une génération optique. Sous l'effet de la lumière, des porteurs de charge peuvent être générés dans le semi-conducteur.

La lumière incidente de puissance P fournit un nombre de photons

$$n_0 = \frac{P}{h\nu} \quad (IV.12)$$

Au temps t et à l'interface avec la surface du semi-conducteur, une partie de la lumière incidente est transmise, une autre réfléchi et une autre absorbée à la surface, ce qui est présenté dans la figure suivante :

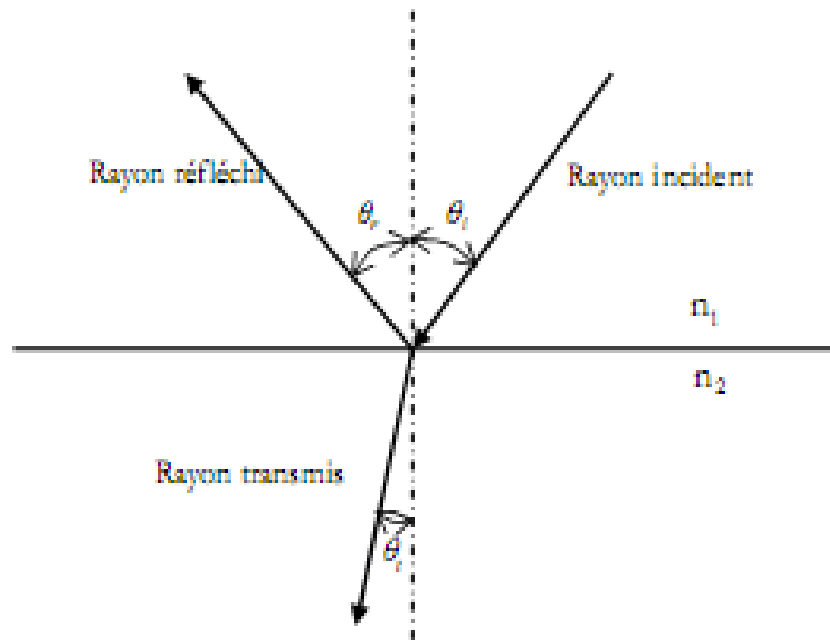


Figure 1 : Les angles d'incidence, de réflexion et de transmission d'un rayon incident de lumière

Les coefficients de réflexion R , et de transmission T , sont calculés ainsi :

$$R = \left(\frac{E_r}{E_i} \right)^2 \quad (\text{IV.13})$$

$$T = \left(\frac{E_t}{E_i} \right)^2 \frac{n_2 \cos \theta_t}{n_1 \cos \theta_i}$$

Où E_i est l'intensité du rayon incident sous l'angle d'incidence θ_i par rapport à la normale à la surface d'incidence, E_r est l'intensité du rayon réfléchi, E_t est l'intensité du rayon transmis, n_1 représente l'indice de réfraction du milieu dans lequel se trouve la source de lumière et n_2 représente l'indice de réfraction du semi-conducteur [23], [36].

3. Mécanismes de recombinaisons

Aujourd'hui deux types de recombinaisons ont été identifiés dans les couches organiques

a. La recombinaison bimoléculaire de Langevin

La recombinaison des charges bimoléculaire (un électron d'un exciton se recombine avec un trou appartenant à un autre exciton) décrite par la théorie de Langevin qui est supposée être un processus de recombinaison du second ordre en fonction de la concentration d'électrons libres et des trous, qui est donnée par le taux de recombinaison (production d'exciton) suit la théorie de Langevin :

$$R = k(pn - n_i^2) \quad (\text{IV.14})$$

Où k est le coefficient de recombinaison de Langevin qui est défini par :

$$k = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} (\mu_n + \mu_p) \quad (\text{IV.15})$$

n_i est la densité de porteur de charge intrinsèque, μ_n et μ_p sont respectivement les mobilités des électrons et des trous.

Ce type de recombinaison apparaît uniquement dans les matériaux à faible mobilité, ce qui est le cas des semi-conducteurs organiques. Elle provient de l'interaction coulombienne entre un électron de la bande de conduction (LUMO) et un trou de la bande de valence (HOMO). Si ces deux charges opposées sont suffisamment proches, c'est à dire à une distance inférieure au rayon de Coulomb r_c (rayon de capture d'un porteur par l'autre), ces charges vont se rapprocher, attirées par leur champ électrique, et vont se recombiner.

$$r_c = \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r kT} \quad (\text{IV.16})$$

Cette distance apparait comme relativement grande dans les organiques où ϵ_r est petit : pour $\epsilon_r = 4$, on obtient à température ambiante $r_c = 15$ nm.

D'autre part, si l'énergie d'interaction coulombienne entre les deux charges est supérieure à l'énergie thermique, les deux charges ne pourront plus se séparer et il y aura recombinaison [19], [38], [49].

b. La recombinaison Shockley-Read-Hall

Le formalisme de recombinaisons assistées par pièges, est décrit par le modèle Shockley Read Hall (SRH). Il est introduit en 2010 par les travaux théoriques de Giebink et al, et la confirmation expérimentale de Street et al, dans les matériaux organiques. Il décrit le processus de capture de charges dans un piège conduisant à la recombinaison d'une paire électron-trou [54].

Dans un semi-conducteur, il peut exister des états autorisés dans le gap. De nombreuses caractérisations ont confirmé la présence de ces états de gap dans les semi-conducteurs organiques [Kawano 2009, Street 2011, MacKenzie 2013]. Cela peut provenir de la présence de défauts ou d'impuretés. Ces pièges peuvent alors capturer des porteurs.

Lorsque ces porteurs sont piégés, on peut considérer qu'ils sont immobiles et ne participent pas au transport de porteurs correspondants.

Il existe alors deux types de pièges, les pièges accepteurs et les pièges donneurs. Si un piège devient chargé lorsqu'il libère un électron, nous dirons qu'il s'agit d'un piège donneur; s'il devient chargé lorsqu'il reçoit un électron, nous parlerons alors d'un piège accepteur.

Un piège accepteur situé très proche de la bande de valence est alors un dopant en trous. De la même manière, un piège donneur situé proche de la bande de conduction sera alors un dopant d'électrons.

Le taux de recombinaison assisté par piège est donné alors par :

$$U_{SRH} = \frac{pn - n_i^2}{c_p(n + n_t) + c_n(p + p_t)} \quad (\text{IV.17})$$

Avec c_n et c_p des constantes exprimant la durée de vie des électrons et des trous n_t et p_t sont les concentrations d'électrons et de trous, si le niveau de Fermi est situé à la position des niveaux de défauts E_t .

n et p les concentrations en porteurs libres à l'équilibre [26].

Ce mécanisme a été utilisé dans la modélisation des dispositifs organiques et peut se décomposer en quatre étapes comme illustré sur la figure :

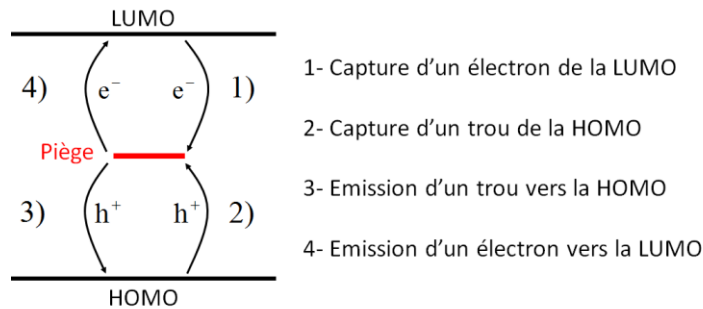


Figure 2 : Illustration des processus de capture et d'émission de charges par un état de gap, décrits par le formalisme de Shockley Read Hall [13].

Les différents mécanismes de recombinaisons dans les semi-conducteurs organiques sont résumés dans la figure suivante :

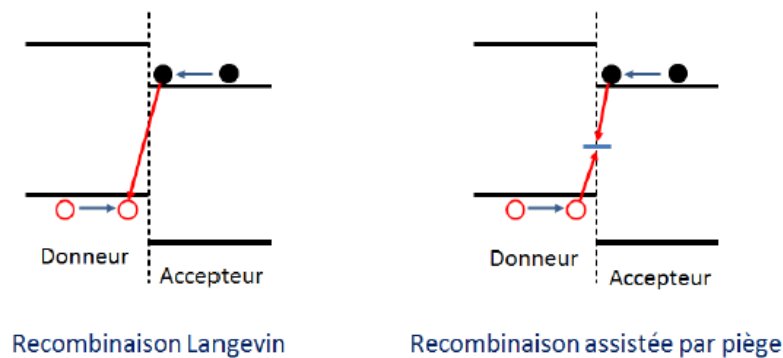


Figure 3 : Mécanismes de recombinaisons dans les couches organiques [13]

Le terme de recombinaison dans les équations de continuités est supposé être la somme de la recombinaison de Langevin et le processus de recombinaison par pièges, décrit par Shockley-Read-Hall.

Conclusion

En simulation, sont utilisées les équations des semi-conducteurs, les phénomènes de recombinaisons, et les phénomènes de génération de charges. Elles constituent une base pour comprendre les étapes de l'opération numérique mettant en évidence le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques.

Introduction

La conversion photovoltaïque est une application énergétique fortement dépendante des variations physiques, météorologiques et géométriques, tels que la température, l'éclairement solaire et l'épaisseur de la couche active de la cellule solaire.

Notre étude est basée sur l'influence des variations de ces paramètres qui permettent d'optimiser les caractéristiques électriques des cellules solaires, à savoir le courant de court-circuit (I_{cc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque (η).

Ce chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats obtenus de la simulation numérique à deux dimensions, sous SILVACO/ATLAS, de la structure à hétérojonction donneur accepteur (D/A) de la cellule photovoltaïque organique de type : ITO / PEDOT: PSS / MDMO-PPV: PCBM / LiF / Al

La plupart des études de ce type de cellule solaire organique atteignent un rendement maximal de 2.5% [14], [17], [46], [47].

Dans une première partie, nous présentons la structure à simuler ainsi que les paramètres physiques utilisés. Dans une deuxième partie, nous examinons l'effet de l'épaisseur de la couche active sur la caractéristique courant-tension sous un éclairement constant 1000W/m^2 . Dans une troisième partie, nous examinons l'effet de l'éclairement sur la caractéristique courant-tension sous une température constante de 300K et une épaisseur de 60 nm. Dans une quatrième partie, nous examinons l'effet de la température sur les caractéristiques mesurées courant-tension du même dispositif photovoltaïque à différentes températures afin d'explorer les effets de la température sur les paramètres électriques du dispositif photovoltaïque étudié.

1. Structure étudiée

L'étude, la simulation et l'optimisation des cellules solaires nécessitent la connaissance des paramètres physiques et structuraux de la structure étudiée. La structure choisie est une cellule photovoltaïque hétérojonction donneur accepteur (D/A). La figure ci-dessous montre l'effet photovoltaïque dans cette cellule.

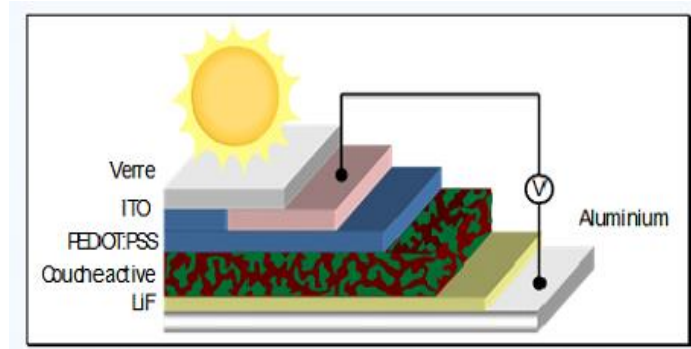


Figure 1 : L'effet photovoltaïque de la cellule solaire organique étudiée

Dans cette partie de travail, nous allons consacrer notre effort sur la caractérisation de cette cellule photovoltaïque organique de type ITO / PEDOT: PSS / MDMO-PPV: PCBM/LiF/Al sous un éclairement de 1000W/m^2 et une température de 300K.

On néglige les épaisseurs des électrodes pour éliminer leurs influences sur la couche active. En pratique, l'éclairement est effectué côté ITO qui transmet près de 80% de la lumière.

L'épaisseur considérée de l'ordre de 60 nm pour la couche active permet de diminuer les phénomènes d'interfaces ainsi les phénomènes de recombinaisons qui sont décrits par la recombinaison de Langevin dans notre étude. La figure ci-dessous montre la cellule photovoltaïque organique présentée sous le simulateur SILVACO.

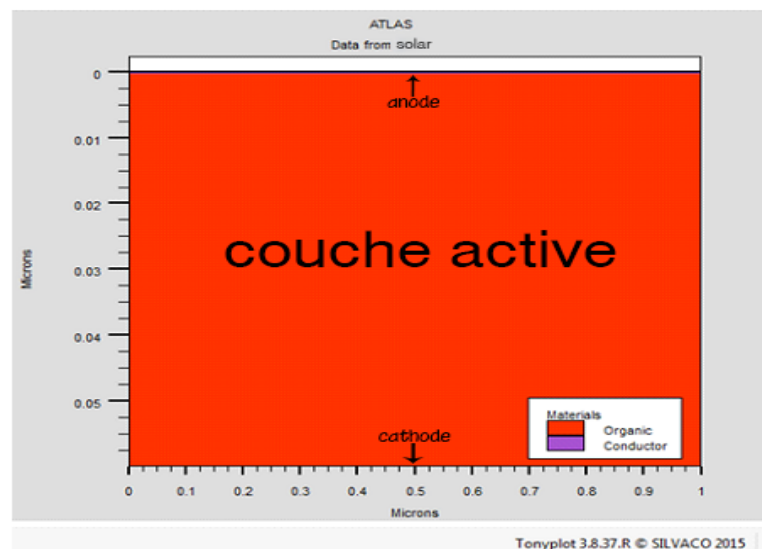


Figure 2 : Cellule photovoltaïque organique étudiée

Les paramètres caractéristiques de la cellule solaire étudiée sont représentés dans le tableau ci-dessous.

paramètre	symbole	valeur
bande interdite	E_g	1,34 eV
mobilité d'électron	μ_n	$2,5 \cdot 10^{-7} \text{ m}^2/\text{V s}$
mobilité de trou	μ_p	$3,0 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{V s}$
densité d'état	N_c	$2,5 \cdot 10^{25} \text{ m}^{-3}$
taux de génération	G	$2,7 \cdot 10^{27} \text{ m}^{-3}$
constante diélectrique	ϵ	$3 \cdot 10^{-11} \text{ F/m}$
taux de décroissance	k_f	$1,5 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$

Tableau 1 : Présentation des paramètres de la cellule solaire étudiée [32], [48], [50]

2. Caractéristique courant-tension de la structure étudiée

La courbe caractéristique d'une cellule photovoltaïque représente la variation du courant qu'elle produit en fonction de la tension aux bornes de la cellule depuis le court-circuit (tension nulle correspondant au courant maximum produit) jusqu'au circuit ouvert (courant nul pour une tension maximale aux bornes de la cellule).

Il est important d'étudier la relation entre la tension et l'intensité dans le circuit relié à la cellule solaire. À partir des courbes $I(V)$ on peut connaître les points caractéristiques de fonctionnement de cette cellule:

- Le courant de court-circuit noté I_{cc}
- La tension à vide notée V_{oc}
- Le courant de puissance maximale noté I_m
- La tension de puissance maximale notée V_m

Ces paramètres peuvent être obtenus sous l'effet des conditions standards d'éclairement et de température. C'est ce qu'on appelle les conditions STC (Standard Test Conditions):

éclairage solaire	1000 W/m ²
température de la cellule	25 °C
coefficient air-masse	1,5

Tableau 2 : Représentation du Condition STC (standard test conditions)

La mesure courant tension est la technique de caractérisation électrique la plus simple qui existe. On applique aux bornes de la cellule solaire une polarisation et on visualise le courant délivré. La courbe ci-dessous est obtenue par cette méthode.

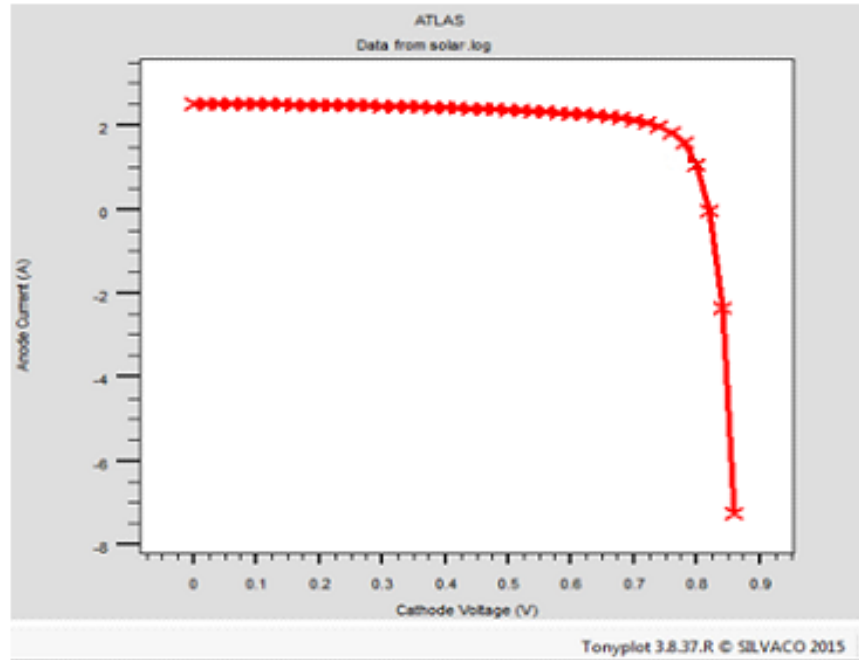


Figure 3 : Représentation de la caractéristique courant-tension de la cellule solaire étudiée

Les valeurs extraites de cette courbe sont données ci-dessous

I_m (A)	V_m (V)	I_{cc} (A)	V_{oc} (V)	P_m (W)	P_m (W/m ²)	η %	FF %
2,066	0,72	2,517	0,82	1,48752	24,792	2,4792	72,0718626

Tableau 3 : Représentation des paramètres caractéristiques de la cellule solaire étudiée

La courbe précédente montre qu'une cellule solaire a une température donnée et pour un ensoleillement constant, si l'on branche un circuit électrique à ces bornes, l'intensité I parcourant le circuit dépend de la tension V aux bornes de la cellule.

La puissance électrique délivrée par une cellule photovoltaïque est le produit de la tension par le courant qu'elle génère. Ces deux grandeurs, courant et tension, dépendent à la fois des propriétés électriques de la cellule mais aussi de la charge électrique à ses bornes ce qui provoque une variation de la puissance délivrée par cette cellule. Cette variation en fonction de la polarisation est présentée dans la figure suivante :

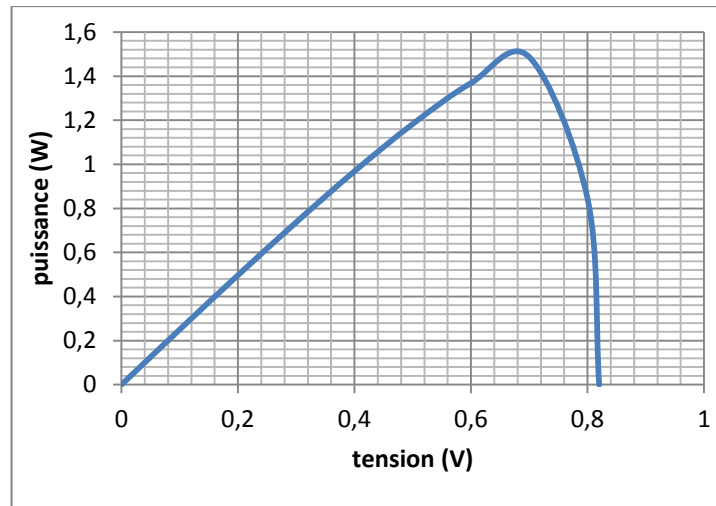


Figure 4 : Représentation de la puissance délivrée par la cellule solaire étudiée

La figure suivante montre que la cellule solaire étudiée est un « bon » générateur de courant (au début de la courbe le courant est pratiquement constant). Elle peut être également utilisée comme générateur de tension (fin de la courbe). Mais une cellule solaire est le plus souvent utilisée dans le coude de la caractéristique (zone où la puissance est maximale).

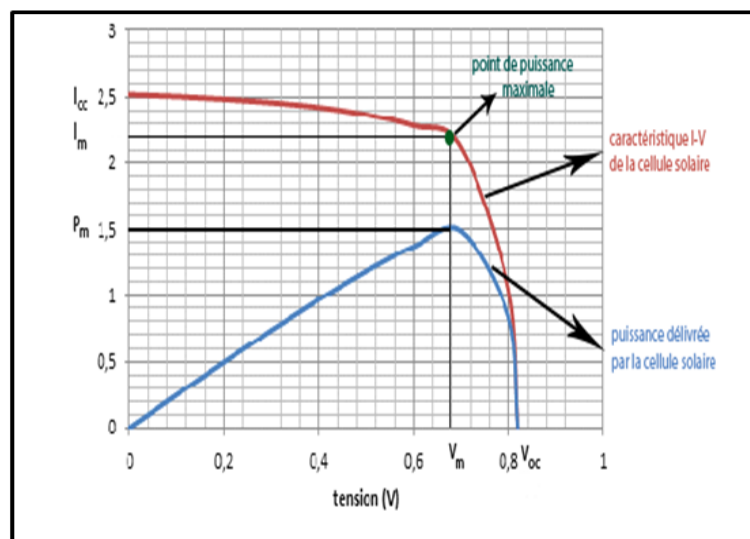


Figure 5 : Représentation de la relation entre la caractéristique courant-tension et la puissance délivrée par la cellule solaire

Les coordonnées du point P_m de fonctionnement optimal (V_m , I_m) ne sont pas fixes. Elles dépendent de la température, de l'éclairement et de l'épaisseur, ce que nous allons entamer dans la partie suivante de notre étude.

3. Effet de l'épaisseur de la couche active sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique

L'épaisseur de la couche active joue un rôle très important dans l'amélioration des performances de la cellule solaire organique. Les résultats de l'influence de ce paramètre sur la caractéristique $I(V)$ de la cellule solaire MDMO-PPV : PCBM sont représentés sur la figure suivante :

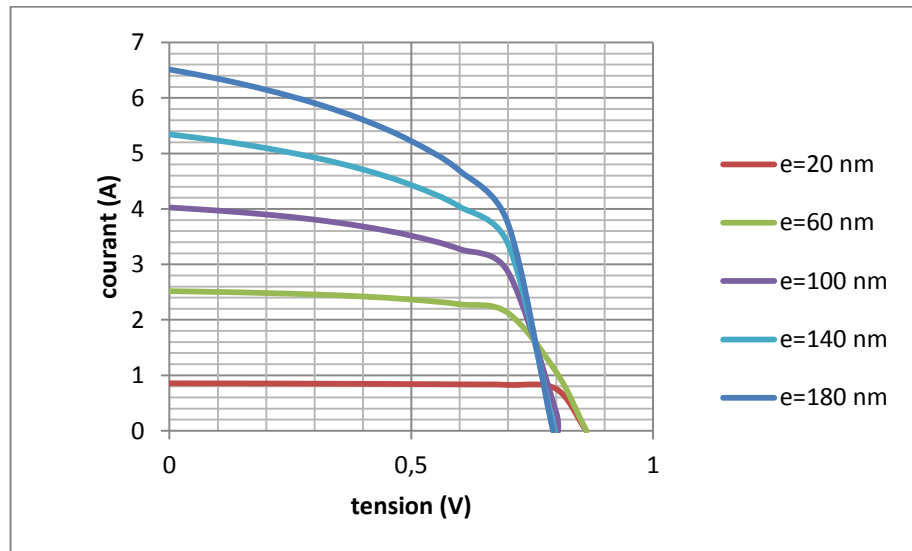


Figure 6 : Effet de l'épaisseur sur la caractéristique courant- tension

D'après la figure 6 on peut constater les remarques suivantes :

- Le courant de court-circuit est directement proportionnel au nombre de photons absorbés par la couche active. Lorsque l'épaisseur de cette couche augmente, il y a plus de possibilité d'absorption des photons, ce qui signifie l'augmentation de courant électrique. Mais chaque photon absorbé ne conduit pas nécessairement à un électron collecté du fait des phénomènes de désexcitation, recombinaison, et de piège de charges présents au sein de l'hétérojonction.
- La tension de circuit ouvert diminue légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur, sa valeur de diminution est non significative par rapport à la variation du courant de court-circuit. Cette diminution peut résulter en une faible longueur de diffusion de porteurs de charges.

L'augmentation de courant généré conduit à une élévation de la puissance délivrée par la cellule étudiée, ce qui est présentée dans la courbe suivante :

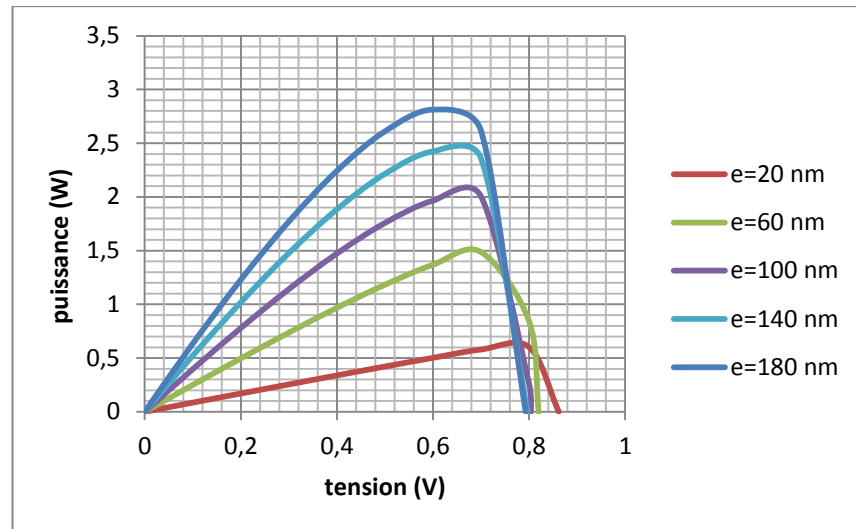


Figure 7 : Effet de l'épaisseur sur la puissance de la cellule photovoltaïque en fonction de la tension de polarisation

Mais cette puissance diminue en fonction de l'augmentation de la surface de la couche considérée (puissance par unité de surface), ce qui prouve l'intervention négative de l'épaisseur de la couche active.

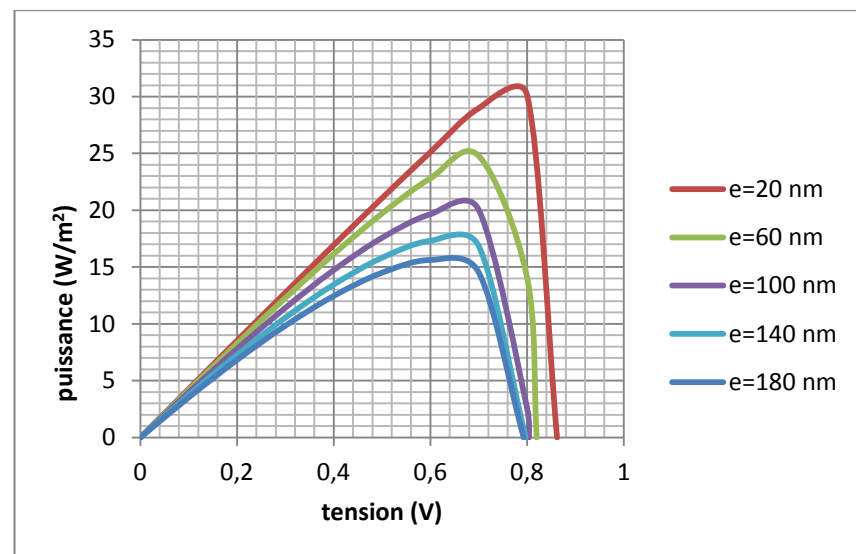


Figure 8 : Effet de l'épaisseur sur la puissance surfacique de la cellule photovoltaïque en fonction de la tension de polarisation

Les différents paramètres de la cellule déduits de la caractéristique I(V) présentée dans la figure 6, sont regroupés dans le tableau suivant :

e (nm)	I_m (A)	V_m (V)	I_{cc} (A)	V_{oc} (V)	P_m (W)	P_m (W/m ²)	η %	FF %
20	0,7914	0,78	0,8565	0,862	0,617292	30,8646	3,08646	83,6095749
40	1,515	0,74	1,697	0,836	1,1211	28,0275	2,80275	79,0234949
60	2,066	0,72	2,517	0,82	1,48752	24,792	2,4792	72,0718626
80	2,615	0,68	3,296	0,81	1,7782	22,2275	2,22275	66,6052379
100	3,068	0,66	4,025	0,804	2,02488	20,2488	2,02488	62,571614
120	3,404	0,66	4,706	0,8	2,24664	18,722	1,8722	59,6748831
140	3,83	0,64	5,343	0,797	2,4512	17,50857143	1,75085714	57,5619175
160	4,125	0,64	5,943	0,794	2,64	16,5	1,65	55,9471147
180	4,594	0,62	6,513	0,793	2,84828	15,82377778	1,58237778	55,1478283
200	4,815	0,62	7,058	0,791	2,9853	14,9265	1,49265	53,4724205

Tableau 4 : Représentation des paramètres caractéristiques de la cellule solaire sous l'effet de l'épaisseur

D'après les résultats de la simulation représentée dans le tableau ci-dessus, nous remarquons que lorsque l'épaisseur de la couche active augmente, il y a une légère décroissance de la tension de circuit ouvert et une élévation significative du courant de court-circuit, et par conséquent, le facteur de forme et le rendement diminuent. Ce résultat est expliqué par la recombinaison des paires électrons-trous, créées près de l'interface, lorsqu'ils transitent vers les régions où ils deviennent des porteurs majoritaires.

L'effet de l'épaisseur sur les paramètres électriques de la cellule (I_{cc} , I_m , V_{oc} , V_m , FF et η) sont illustrés par les Figures ci-dessous.

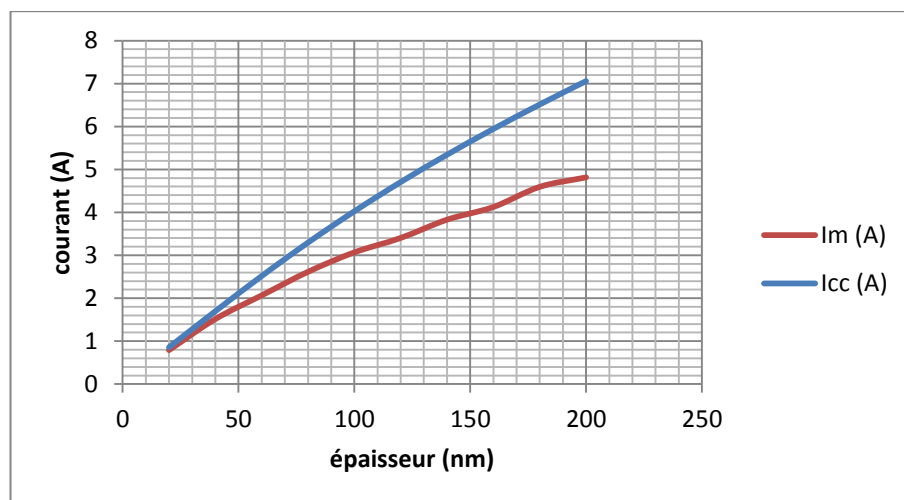


Figure 9 : Variation de courant en fonction de l'épaisseur

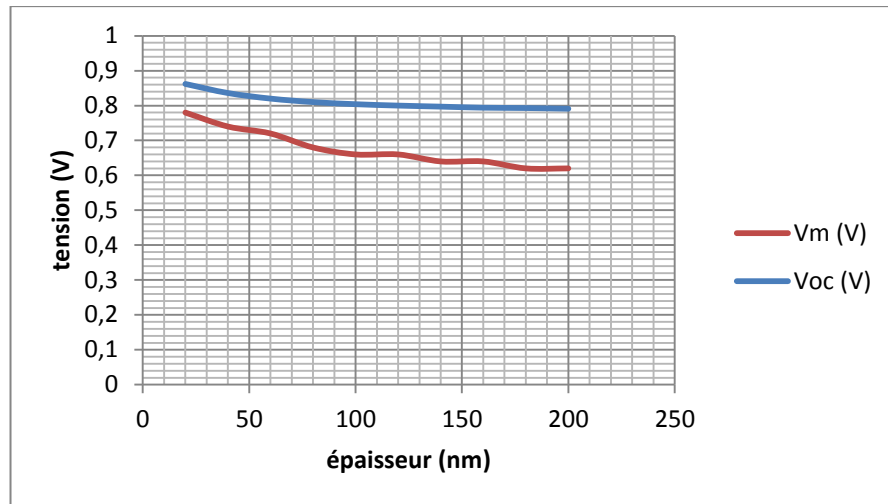


Figure 10 : Variation de la tension en fonction de l'épaisseur

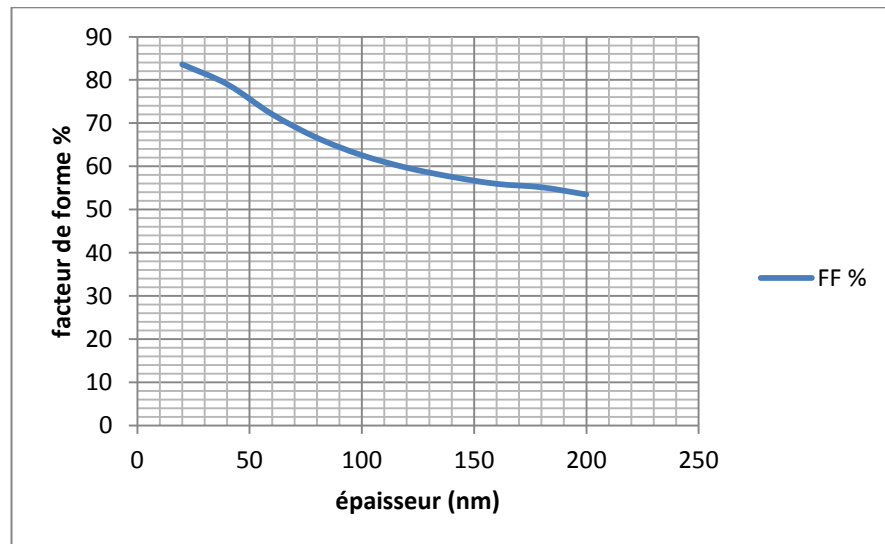


Figure 11 : Variation de facteur de forme en fonction de l'épaisseur

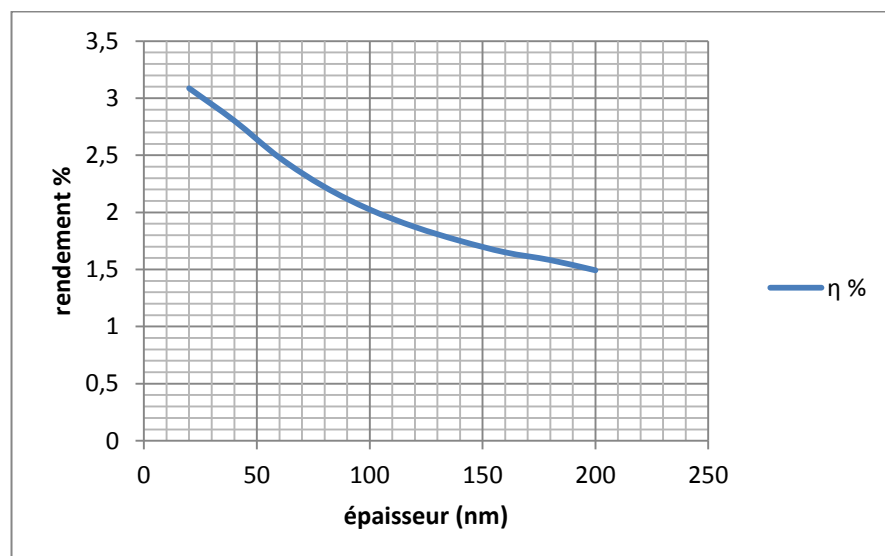


Figure 12 : Variation de rendement en fonction de l'épaisseur

Les diverses étapes de la conversion photovoltaïque auxquelles correspondent différents rendements peuvent expliquer la diminution de rendement en fonction de l'augmentation de l'épaisseur du système donneur accepteur :

- 1) Dans l'étape de l'absorption photonique (η_A) : la lumière incidente génère des paires électrons-trous dans le matériau donneur (D) dues aux transitions électroniques entre les bandes HOMO et LUMO. Le rendement (η_A) dépend de la valeur du coefficient d'absorption optique et de l'épaisseur.

Dans cette étape, il y a des pertes dues aux photons non absorbés lorsque la couche active est trop mince c'est-à-dire une épaisseur inappropriée du matériau. Alors une partie du rayonnement traverse l'échantillon sans être absorbée, et par conséquent, sans contribuer à la génération des charges.

Inversement, si l'échantillon est trop épais, d'une part une résistance excessive apparaît, et d'autre part la zone de génération des excitons se trouve trop éloignée de l'interface de dissociation.

Il est ainsi possible d'affirmer que deux compromis doivent être respectés. Tout d'abord, le matériau organique doit être suffisamment épais pour absorber le rayonnement, et suffisamment mince pour assurer une résistance acceptable afin de permettre la dissociation de l'exciton au voisinage de l'interface (D/A)

- 2) Dans l'étape de la diffusion de l'exciton (η_{diff}) : cette quasi-particule diffuse à travers la cellule les processus de recombinaison de la paire électron-trou qui entravent sa diffusion par des recombinaisons bimoléculaires et des recombinaisons dans des pièges volumiques.
- 3) Dans l'étape de séparation des charges (dissociation de l'exciton, η_{TC}) : le rendement de séparation des charges à l'interface (D/A) est réduit avec sans doute du piégeage à l'interface lorsque l'épaisseur augmente les charges sont plus piégées.
- 4) Transport des charges vers les électrodes (η_{tr}) : ce transport est limité par des pièges qui peuvent évidemment réduire la mobilité des charges. Donc les processus de transfert ainsi décrits peuvent être limités par des phénomènes tels que les recombinaisons bimoléculaires qui réduisent l'importance de la diffusion excitonique.
- 5) Dans l'étape de la collecte des charges aux électrodes respectives (η_{CC}) : dans ce cas, il existe des pièges aux interfaces organiques-inorganiques comme celles

des électrodes, une variété de différents pièges peut aussi exister dans cette interface.

Globalement, on obtient un rendement total ($\eta = \eta_A \eta_{diff} \eta_{TC} \eta_r \eta_{cc}$) qui se réduit en fonction de l'épaisseur.

4. Effet de l'éclairement sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique

La modification de l'intensité lumineuse incidente sur une cellule solaire, change tous ces paramètres, dont le courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement.

Le tableau suivant présente l'influence de l'intensité lumineuse sur les caractéristiques de la cellule solaire étudiée:

P_{inc} (W/m ²)	I_{cc} (A)	V_{oc} (V)	I_m (A)	V_m (V)	P_m (W/m ²)	η %	P_m (W)	FF %
400	1,007	0,798	0,8418	0,7	9,821	2,45525	0,58926	73,3288036
600	1,51	0,808	1,269	0,7	14,805	2,4675	0,8883	72,8067012
800	2,013	0,814	1,697	0,7	19,79833333	2,474791667	1,1879	72,495609
1000	2,517	0,82	2,066	0,72	24,792	2,4792	1,48752	72,0718626
1200	3,02	0,824	2,485	0,72	29,82	2,485	1,7892	71,899312
1400	3,524	0,827	2,905	0,72	34,86	2,49	2,0916	71,7690543
8000	20,13	0,868	16,31	0,74	201,1566667	2,514458333	12,0694	69,0752047

Tableau 5 : Représentation des paramètres caractéristiques de la cellule solaire sous l'effet de l'éclairement

D'après ce tableau, on remarque que l'élévation de l'ensoleillement provoque une augmentation de la création des paires électrons-trous. Il y'a une élévation du courant de court-circuit I_{cc} , proportionnelle à la variation de l'ensoleillement accompagnée d'une très légère augmentation de la tension V_{oc} et donc d'un décalage du point P_m du panneau solaire vers les puissances supérieures. (voir figures ci-dessous):

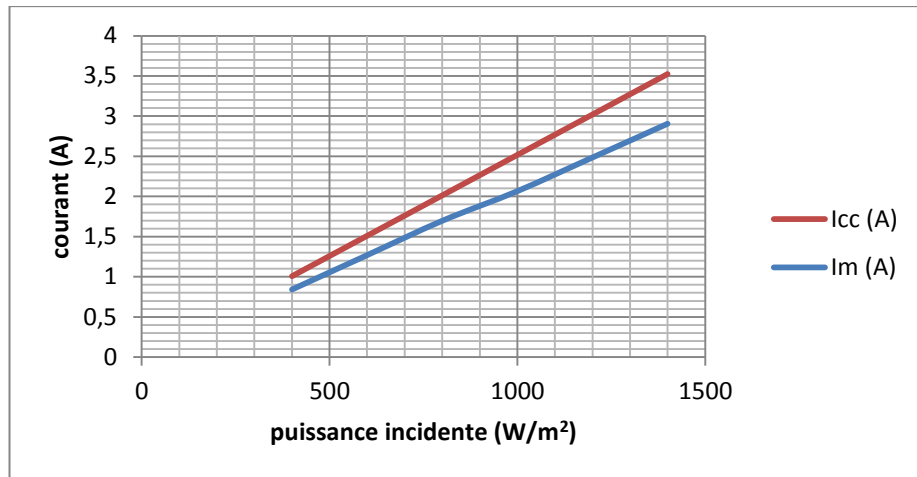


Figure 13 : Variation de courant en fonction de l'éclairement

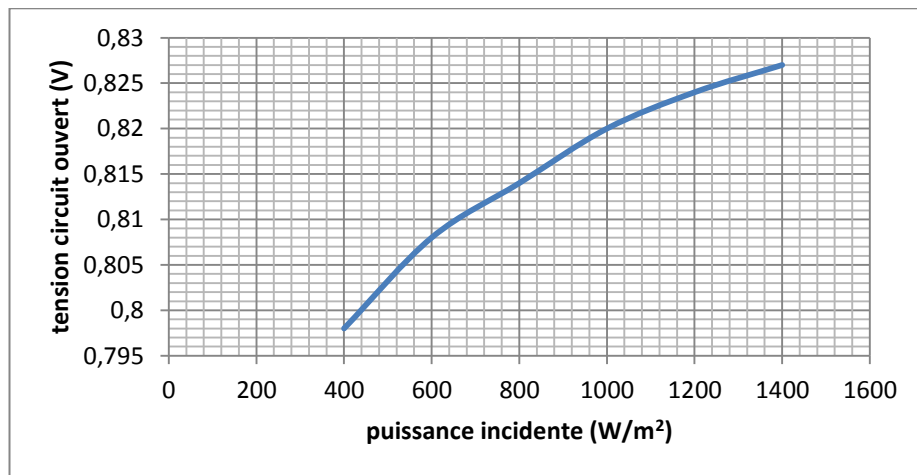


Figure 14 : Variation de tension de circuit ouvert en fonction de l'éclairement

D'après les figures 13, et 14, on constate que la tension optimale reste à peu près constante; par contre l'intensité optimale est pratiquement proportionnelle à l'éclairement.

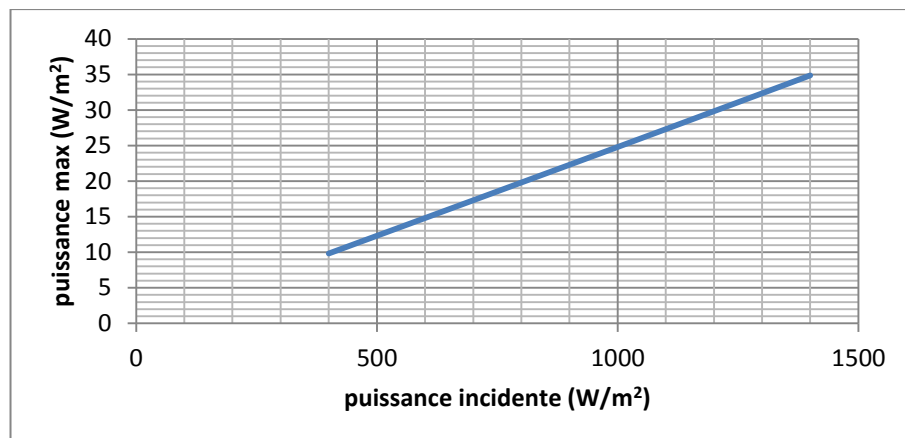


Figure 15 : Variation de la puissance maximale en fonction de l'éclairement

Dans cette courbe il y a une proportionnalité entre la puissance maximale délivrée par la cellule solaire étudiée et la puissance incidente sur leur surface. Si on analyse cette courbe de façon mathématique on peut dire que le rendement de notre cellule représente la pente de cette courbe qui est égale à 2.5%, ce qui correspond à notre résultat présenté dans le tableau 5.

Physiquement, on explique l'augmentation assez faible du rendement par l'effet du rayonnement lorsqu'il fournit assez d'énergie (si celle-ci est supérieure à la largeur de la bande interdite) il fait apparaître des paires supplémentaires d'électrons-trous dans la jonction. Une partie des porteurs générés par le rayonnement sera, elle aussi, soumise à divers phénomènes de recombinaison (disparition simultanée des porteurs de charges).

Cette faible augmentation du rendement est représentée sur le graphe suivant :

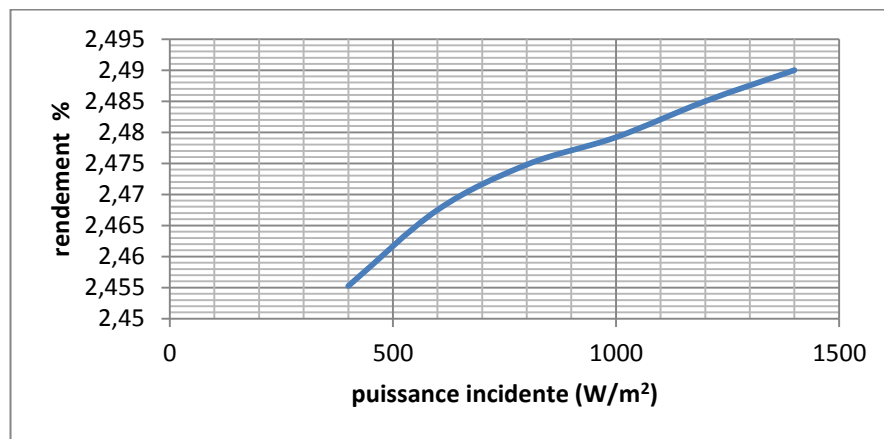


Figure 16 : Variation de rendement en fonction de l'éclairement

La qualité de notre cellule solaire diminue avec l'augmentation de la puissance incidente ce qui est présenté dans la figure suivante :

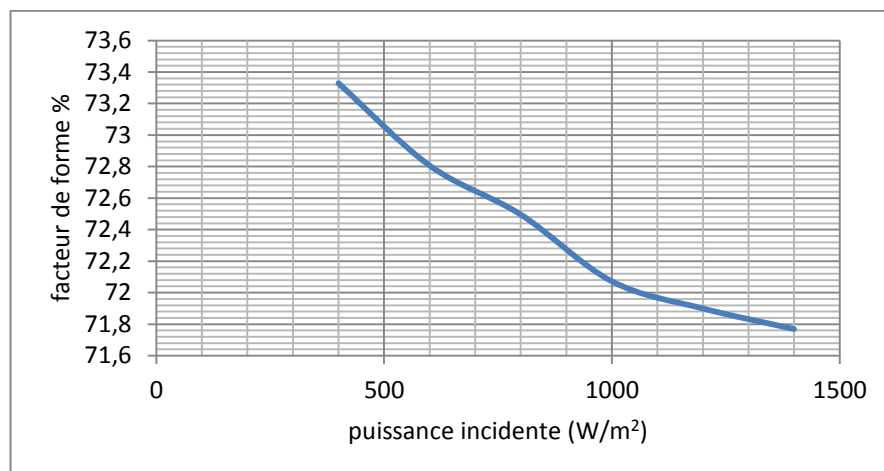


Figure 16 : Variation de facteur de forme en fonction de l'éclairement

D'après la figure 16, on peut dire que la diminution de facteur de forme en fonction de l'éclairement est liée principalement au courant généré par la cellule solaire étudiée.

D'une autre façon, au cours d'une journée, le niveau d'éclairement d'une cellule solaire va varier. Il est donc important de connaître l'évolution des caractéristiques courant-tension de cette cellule en fonction du niveau d'éclairement, ainsi qu'illustré sur le graphe ci-dessous :

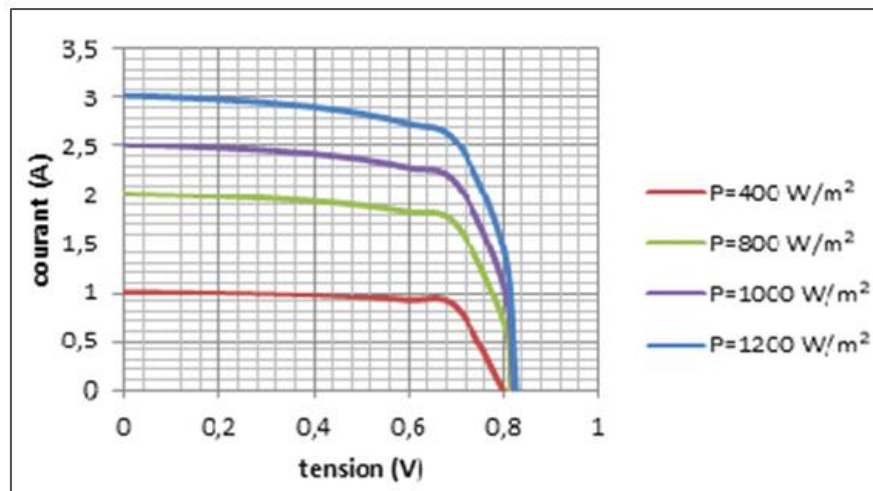


Figure 17 : Effet de l'éclairement sur la caractéristique courant- tension

La caractéristique courant-tension examinée à la figure ci-dessus correspond à des éclairements différents présentant la même allure.

Pour un éclairement différent de 1000 W/m^2 , on obtient une courbe présentant la même allure, mais située au-dessus (si l'éclairement est supérieur à 1000 W/m^2) ou en dessous (si l'éclairement est inférieur à 1000 W/m^2).

Cette courbe est remarquable par plusieurs aspects :

- La tension est presque indépendante de l'éclairement.
- Le point de fonctionnement de puissance maximale varie en fonction de l'éclairement.
- Le courant de court-circuit est proche du courant à puissance maximale.
- Il y a deux façons d'avoir une puissance nulle : travailler à tension max $I=0$ ou travailler à tension nulle ($I=\text{courant de court-circuit}$).

La courbe qui montre le décalage du point P_m du panneau solaire vers les puissances supérieures lorsque l'ensoleillement augmente est représentée dans la figure suivante :

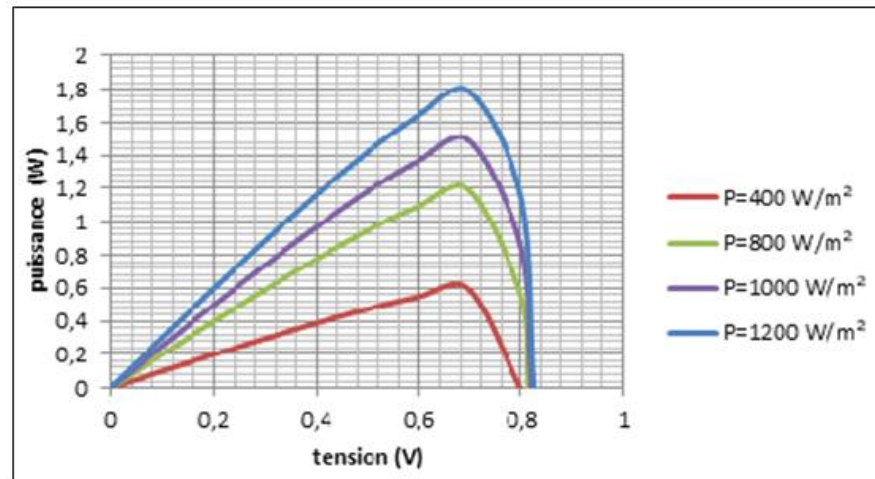


Figure 18 : Effet de l'éclairement sur la puissance de la cellule photovoltaïque en fonction de la tension de polarisation

A partir de cette figure, on peut dire que la photoconductivité de notre cellule solaire organique augmente avec l'augmentation de l'intensité lumineuse en raison de l'augmentation de la mobilité des porteurs libres des électrons et des trous avec l'intensité lumineuse. Ce qui provoque une augmentation de la densité de courant et donc l'augmentation de la puissance maximale délivrée par la cellule solaire.

5. Effet de la température sur la caractéristique courant-tension de la cellule solaire organique

Les paramètres caractéristiques des cellules solaires, à savoir le courant de court-circuit (I_{cc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion photovoltaïque (η) sont influencés par la température. La dépendance de ces paramètres avec la température est étudiée pour une cellule solaire organique dans la gamme (200-500K) sous un éclairement constant (1000 W/m²).

La figure suivante montre l'influence de la température, sur la caractéristique $I(V)$ de la cellule solaire organique étudiée.

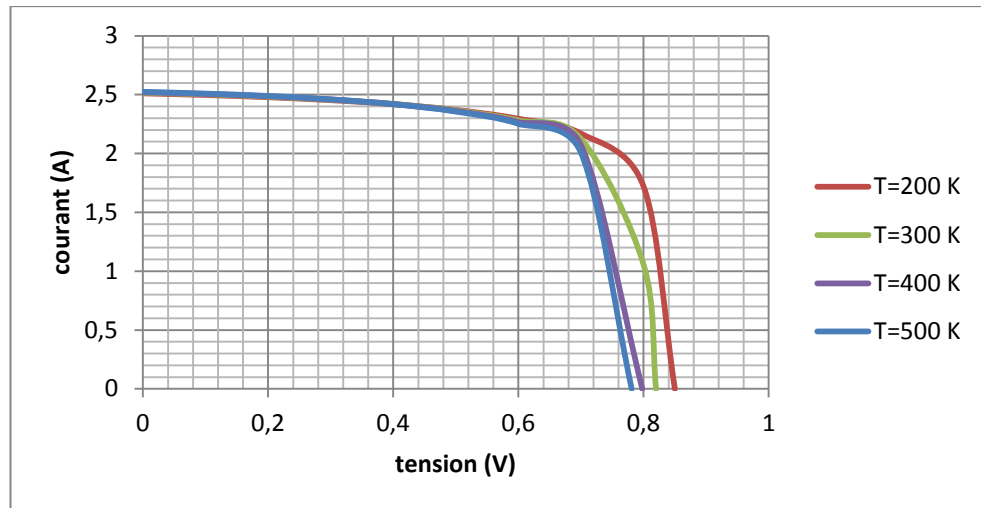


Figure 19 : Effet de la température sur la caractéristique courant-tension

On peut constater, d'après cette figure, que l'augmentation de la température provoque une augmentation légère du courant du court-circuit (I_{cc}), en même temps on assiste à une diminution nette de la tension en circuit ouvert (V_{oc}).

Cette augmentation de la température entraîne aussi une diminution de la tension (V_m) et un léger accroissement du courant (I_m) et par la suite une baisse relative de la puissance maximale (P_m) (décalage vers les puissances inférieures). Ce qui est illustré dans la figure suivante :

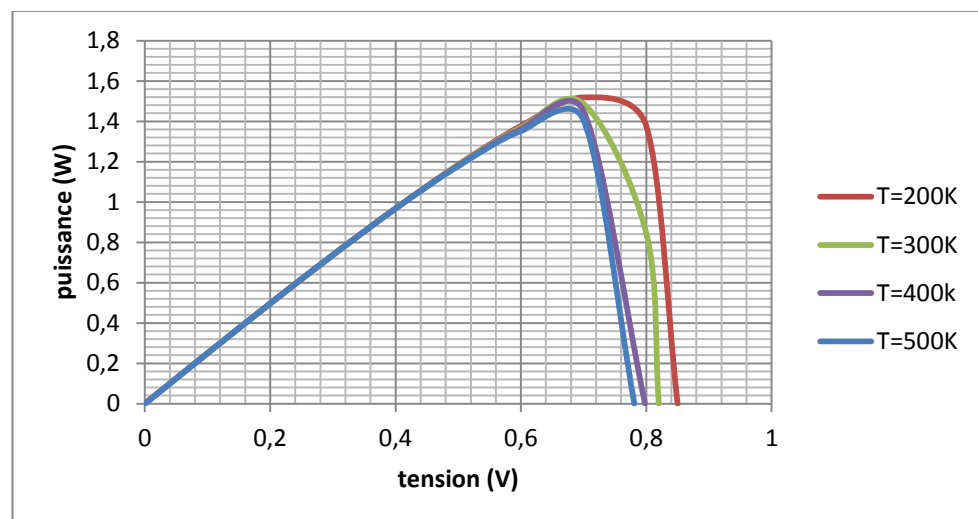


Figure 20 : Effet de la température sur la puissance de la cellule photovoltaïque en fonction de la tension de polarisation

Le tableau ci-dessous montre l'évolution des paramètres déduits de la caractéristique I(V) en fonction de la température.

T	I_{cc} (A)	V_{oc} (V)	Pm (W)	Pm (W/m ²)	η %	FF %
200	2,511	0,85	1,53994	25,6656667	2,56656667	72,1503034
250	2,514	0,833	1,512	25,2	2,52	72,200718
300	2,517	0,82	1,48752	24,792	2,4792	72,0718626
350	2,519	0,808	1,4693	24,4883333	2,44883333	72,1889875
400	2,521	0,798	1,4497	24,1616667	2,41616667	72,0613513
450	2,522	0,789	1,43548	23,9246667	2,39246667	72,139821
500	2,524	0,781	1,4212	23,6866667	2,36866667	72,096605

Tableau 6 : Représentation des paramètres caractéristiques de la cellule solaire sous l'effet de la température

L'effet de la température sur les paramètres caractéristiques de la cellule solaire est illustré sur les figures suivantes :

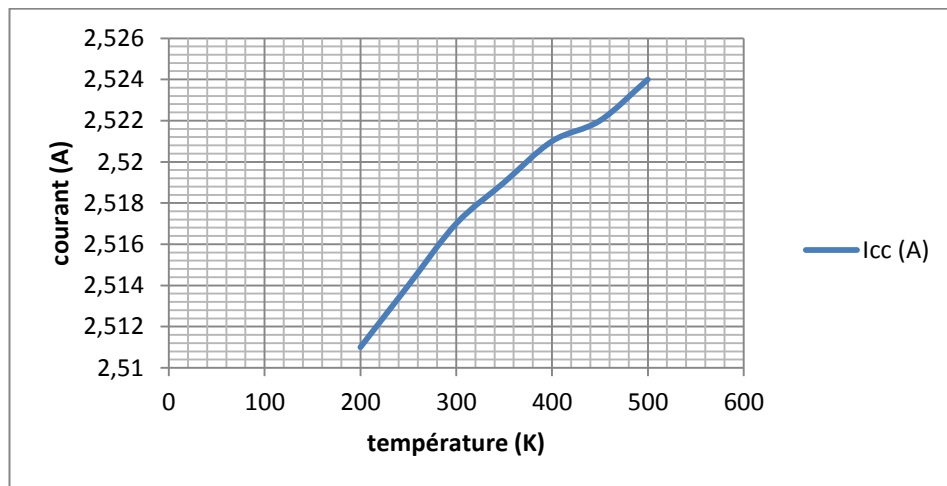


Figure 21 : Variation de courant en fonction de la température

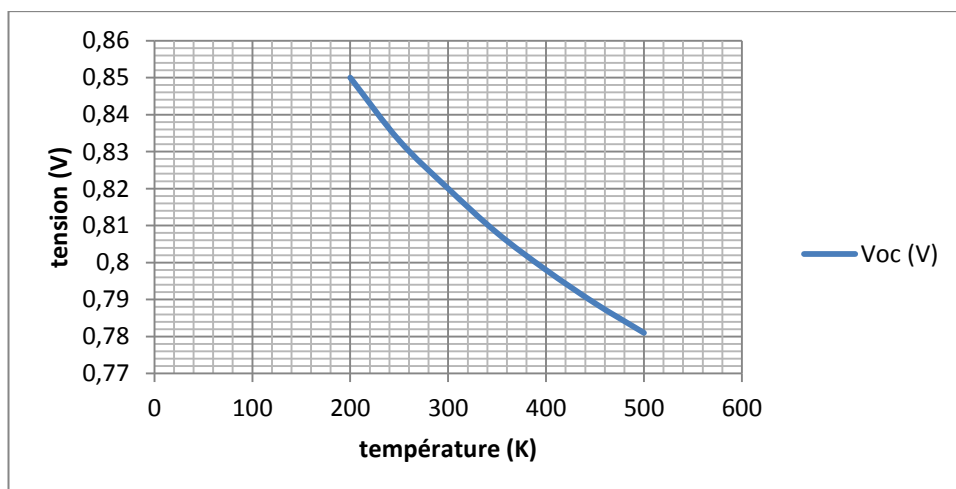


Figure 22 : Variation de la tension de circuit ouvert en fonction de la température

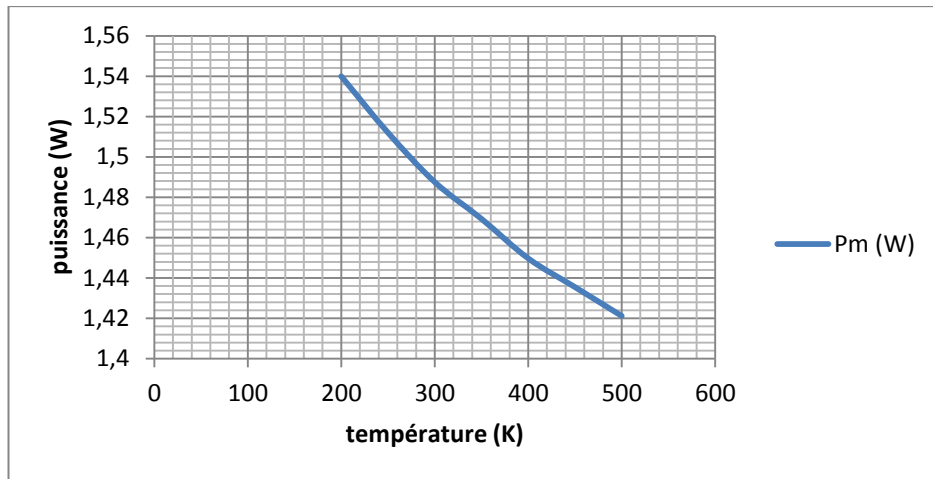


Figure 23 : Variation de la puissance en fonction de la température

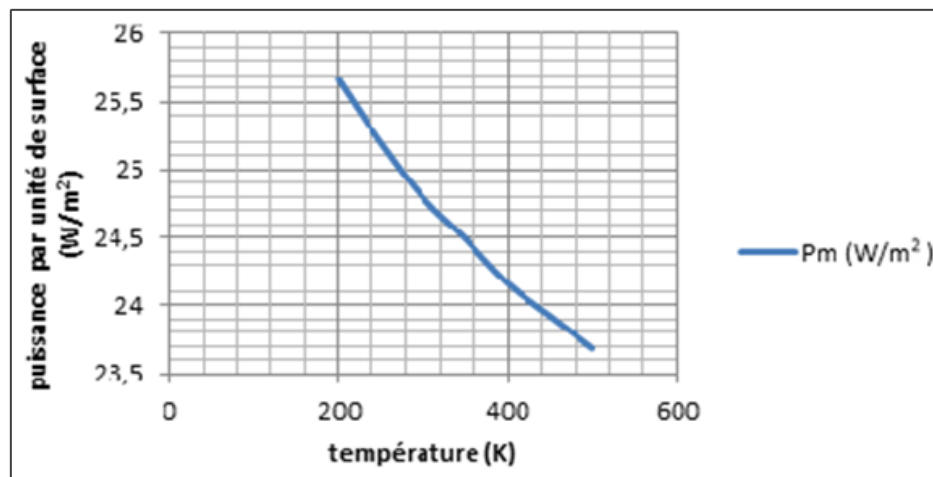


Figure 24 : Variation de la puissance surfacique en fonction de la température

Sous l'effet d'une hausse de la température, la figure 21, montre une légère augmentation du courant de la cellule. Cet accroissement du courant peut être négligé au point I_{cc} mais pas au point de puissance maximale où ce dernier connaît un décalage important qui influe sur le rendement de la cellule qui passe de 2.56 à 2.36 avec l'augmentation de la température. (Voir figure 25) :

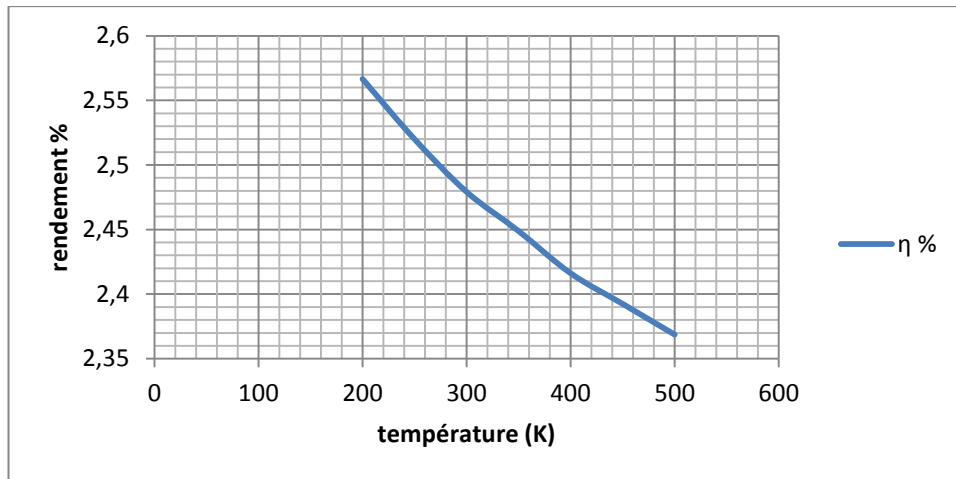


Figure 25 : Variation de rendement en fonction de la température

Dans la partie précédente, nous avons montré l'effet de la température sur la caractéristique $I(V)$ puis on en a déduit la sensibilité des différentes grandeurs électriques du générateur photovoltaïque organique (V_{oc} , I_{cc} , FF, et P_m) en fonction de la température.

Dans la partie suivante on explique la variation de ces grandeurs en fonction de la température.

Courant de court-circuit

Lorsque la température s'élève, sous l'effet de l'agitation thermique, des électrons réussissent à s'échapper et participent à la conduction. Ce sont les électrons situés sur la couche la plus éloignée du noyau qui s'impliquent dans les liaisons covalentes. Dans le polymère, ces électrons se situent sur des niveaux d'énergie appelée HOMO. Les électrons qui peuvent participer à la conduction possèdent des niveaux d'énergies appartenant à la bande de conduction appelée LUMO.

La bande de conduction ou de valence contient des densités d'états qui représentent le nombre d'états utiles à la température T . Cette densité augmente en fonction de la température (voir tableau 7) :

T (K)	N_c (cm ⁻³)	N_v (cm ⁻³)
200	1,36E+19	1,36E+19
250	1,90E+19	1,90E+19
300	2,50E+19	2,50E+19
350	3,15E+19	3,15E+19
400	3,85E+19	3,85E+19
450	4,59E+19	4,59E+19
500	5,38E+19	5,38E+19

Tableau 7 : Représentation de la densité d'état en fonction de la température

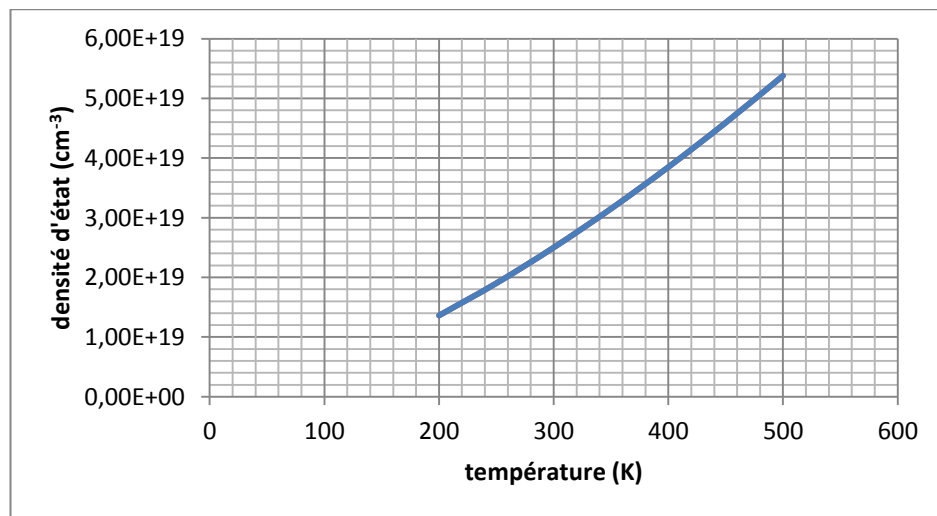


Figure 25 : Variation de la densité d'état en fonction de la température

Entre la bande de valence et la bande de conduction peut se situer une bande interdite. Pour franchir cette bande interdite l'électron doit acquérir de l'énergie (thermique, photon). Plus l'agitation thermique est importante, plus les électrons peuvent franchir cette bande et participer à la conduction, ce qui provoque une augmentation du courant généré.

Mais l'augmentation du courant est faible en fonction de la température à cause du mouvement des atomes dans le solide considéré, ce qui freine la circulation des électrons.

Tension de circuit ouvert

Les cellules solaires sont sensibles à la température. Les augmentations de température réduisent la largeur de bande interdite de semi-conducteur, en affectant ainsi la plupart des paramètres de matériau semi-conducteur. Le paramètre le plus affecté par une

augmentation de la température est la tension en circuit ouvert. Lorsque la température augmente, la tension en circuit ouvert diminue ceci est logique parce que le V_{oc} dépend essentiellement de la différence d'énergie entre la HOMO et la LUMO du matériau donneur et du matériau accepteur de la couche photo-active. Cette dernière se réduit lorsque la température s'élève.

Puissance maximale

La diminution de P_m est due à la réduction de la tension et la faible génération du courant. La cause en est l'abaissement des niveaux énergétiques en fonction de la température, les phénomènes de pièges et les recombinaisons entre les électrons et les trous au sein de la couche active.

Rendement

Lorsque la température de la cellule augmente, l'agitation thermique du système devient intense, c'est-à-dire que les vibrations des atomes augmentent. Le courant électrique est, en fait, un courant d'électrons bien organisé qui circule dans la cellule. Lorsque les électrons commencent à circuler dans la cellule, ils vont trouver des atomes plus agités (à cause de la température) ce qui augmenterait le nombre de collision. Ceci provoquerait une réduction de la mobilité et de la durée de vie des porteurs et, par conséquent, une réduction des longueurs de diffusion. Le mécanisme de recombinaison des porteurs devient plus fort.

Après étude des influences des paramètres physiques sur la cellule solaire organique, on peut dire que les principales raisons pour lesquelles notre cellule solaire organique ne donne pas des performances souhaitées sont :

- Absorption incomplète de la lumière incidente
- Présence des pièges obstructifs au sein de la couche active.
- Recombinaison non radiative des porteurs de charges générées.
- Chute de tension due à la résistance électrique entre le point de génération des électrons et le circuit extérieur.

Les perspectives proposées pour augmenter l'efficacité de cette cellule sont :

1. Amélioration de l'interaction rayonnement-matière :
 - Augmenter l'absorption en structurant la surface du matériau.
 - Réduire la réflexion par un traitement anti réfléchissant déposé sur la surface de la cellule.
 - Concentrer la lumière en utilisant des concentrateurs solaires.
2. Transformer et mieux adapter le spectre solaire :
 - Par up-conversion pour les photons proches infra-rouges.
 - Par down-conversion pour les photons ultra-violets.
3. Protection de dispositif photovoltaïque :
 - Utiliser des couches étanches à l'oxygène et à la vapeur d'eau.
4. Amélioration de la morphologie de la couche active :
 - Allonger la chaîne de polymère.
 - Augmenter les champs électriques formés à l'interface.

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons examiné l'influence des paramètres purement physiques sur les caractéristiques de la cellule solaire organique. Ces paramètres modifient la caractéristique $I(V)$ de la cellule solaire, pas dans sa forme générale mais pour les valeurs I_{cc} , V_{oc} , I_m et V_m . ces valeurs sont limitées par des phénomènes de pièges, de recombinaisons et des interactions électron phonon lors de fonctionnement de la cellule solaire.

D'après notre étude, nous avons remarqué que :

L'augmentation de la température avec un éclairage fixe entraîne une diminution nette de la tension de circuit ouvert (V_{oc}) et une augmentation légère du courant de court-circuit (I_{cc}), ainsi qu'une diminution de la puissance maximale (P_m). L'influence de la température est plus réduite par rapport à celle de l'ensoleillement, mais l'influence de la température n'est plus négligeable sur la caractéristique courant-tension de générateur.

L'évolution de l'éclairage avec une température fixe provoque une augmentation du courant où la cellule fonctionne comme un générateur du courant. Mais il y a une légère augmentation de la tension en circuit ouvert. Un courant débité par la cellule où le courant de court-circuit (I_{cc}) est clairement sensible à l'ensoleillement. On constate expérimentalement que le courant de court-circuit est directement proportionnel à l'éclairage, lorsque l'éclairage est multiplié par 2, le courant de court-circuit est également multiplié par 2.

L'élévation de l'épaisseur conduit à une meilleure absorption de la cellule solaire ainsi une augmentation de la concentration des pièges et des recombinaisons. Celles-ci provoquent une diminution de rendement. Cela signifie qu'il existe une épaisseur optimale pour de meilleures performances des cellules solaire organiques.

L'amélioration du rendement de conversion photovoltaïque dans le cas des cellules solaires organiques nécessite l'amélioration des mécanismes mis en jeu dans ce processus en faisant un bon choix pour la structure des dispositifs et une amélioration de contrôle des paramètres physiques.

Conclusion générale

Les résultats obtenus à partir de la simulation numérique de notre cellule solaire organique montrent que les caractéristiques électriques concernant la couche active (MDMO : PPV/PCBM) varient en fonction de la température, de l'éclairement et de l'épaisseur, de façon générale des conditions de fonctionnement.

Les principaux résultats obtenus sont :

- La température joue un rôle néfaste sur les performances de la cellule solaire étudiée. elle influence faiblement le rendement, ce qui peut être considéré comme un avantage pour les cellules photovoltaïques organiques.
- L'épaisseur joue un rôle intermédiaire entre deux compromis qu'il faut prendre en compte : une élévation de l'épaisseur améliore l'absorption de la lumière mais par contre il y a plus de chance que les électrons et les trous se recombinent et par conséquent n'influent que très peu sur la charge ce qui réduit le rendement.

Une réduction de l'épaisseur diminue l'absorption mais améliore l'abaissement des phénomènes de piégeage et de recombinaison.

Pour cela il faut assurer une épaisseur optimale pour limiter les recombinaisons et favoriser l'absorption.

- L'éclairement est considéré comme un paramètre avantageux pour augmenter le rendement de conversion photovoltaïque surtout lors de l'utilisation de concentrateurs solaires. Ces derniers peuvent atteindre un niveau très appréciable et donc augmentent les performances de la cellule organique.

Nos résultats sont en bon accord avec la littérature des cellules organiques de même nature. La plupart des études dans ce contexte atteignent un rendement maximal de 2.5%. Dans la présente étude, on a dépassé le rendement de 3% en réduisant l'épaisseur de la couche active.

Pour améliorer le rendement de la cellule photovoltaïque organique, il faut à notre avis s'intéresser à l'amélioration de :

- L'interaction rayonnement matière.
- La morphologie de la couche active.
- L'adaptation du spectre solaire.
- La protection de dispositifs photovoltaïque.

L'étude de ces points pourrait améliorer les caractéristiques des cellules organiques.

Bibliographie

1. **ABDELLI, MOHAMED CHAFIK.** *Etude des cellules photovoltaïques organiques.* [Thèse de master] Tlemcen : Université Abou Bakr Belkaid, 2013.
2. **ALTAZIN, STEPHANE.** *Caractérisation et modélisation de la diode organique.* [Thèse de doctorat] Grenoble : Université de Grenoble, 2011.
3. **AMEL, ANSRI.** *Caractérisations des cellules photovoltaïques à base des polymères conducteurs.* [Thèse de magister] Tlemcen : Université Abou Bakr Belkaid.
4. **AZIZ, ABDELHAK.** *Propriétés électriques des composants électroniques minéraux et organiques conception et modélisation d'une chaîne photovoltaïque pour une meilleure exploitation de l'énergie solaire.* [Thèse de doctorat] Toulouse : Université Paul Sabatier, 2006.
5. **B.FLECHE, D.DELAGNES.** *Energie solaire photovoltaïque.* [Livre] 2007.
6. **BALLET, JEROME.** *Contribution à l'élaboration de composants électroniques organiques à base de poly (3-octylthiophène).* [Thèse de doctorat] Toulouse : Université Paul Sabatier, 2006.
7. **BEDDIAFI, YAZID.** *Modélisation d'un transistor MESFET en GaAs en utilisant le simulateur SILVACO.* [Thèse de magister] Biskra : Université Mohamed Khider, 2013.
8. **BEJBOUJI, HABIBA.** *Optimisation des matériaux d'électrodes dans les diodes électroluminescentes organiques et les cellules solaires organiques.* [Thèse de doctorat] Settat : Université Hassan Premier, 2009.
9. **BELHOCINE, FARIDA NEMMAR.** *Etude et réalisation des cellules solaires photovoltaïques à base de matériaux organiques.* [Thèse de doctorat] Tizi-Ouzou : Université Mouloud Mammeri.
10. **BENSEBA, GHALIA.** *Etude des différents paramètres influençant le rendement et la stabilité d'une cellule solaire organique.* [Thèse de magister] Tizi-Ouzou : Université Mouloud Mammeri, 2013.
11. **BETTIGNIES, REMI.** *Cellules photovoltaïques organiques dérivées de nouveaux systèmes conjugués.* [Thèse de doctorat] Angers : Université d'Angers, 2003.
12. **BINIEK, LAURE.** *Polymères semi-conducteurs à faible largeur de bande interdite: de la synthèse au dispositif photovoltaïque organique.* [Thèse de doctorat] Strasbourg : Université de Strasbourg, 2010.
13. **BOUTHINON, BENJAMIN.** *Impact des états de gap sur les performances des photodiodes organiques.* [Thèse de doctorat] Grenoble : Université de Grenoble, 2014.
14. **C.H.CHOY, WALLACE.** *Organic solar cells materials and device physics.* [Livre]: Springer science et business media, 2013.

15. **C.KREBS, FREDERIK** *Stability and degradation of organic and polymer solar cells* . [Livre]: Wiley, 2012.
16. **CHAMBON, SYLVAIN**. *Etude du vieillissement de cellules solaires photovoltaïques plastiques*. [Thèse de doctorat] Clermont-Ferrand : Université Blaise Pascal, 2006.
17. **CHRISTOPH J.BRABEC, ANTONIO CRAVINO, DIETER MEISSNER, N.SERDAR SARICIFTCI, THOMAS FROMHERZ, MINZE T.RISPENS, LUIS SANCHEZ AND JAN C.HUMMELEN**. *Origin of the open circuit voltage of plastic solar cells*. [Article] : Advanced functional materials, 2001.
18. **CHRISTOPH J.BRABEC, SEAN E.SHAHEEN, CHRISTOPH WINDER, N.SERDAR SARICIFTCI AND PATRICK DENK**. *Effect of LiF/ metal electrodes on the performance of plastic solar cells*. [Article] : American institute of physics, 2002.
19. **COENS, ANTHONY**. *Diode électroluminescente organique en microcavité verticale à miroirs diélectriques multicouches*. [Thèse de doctorat] Paris : Université de Paris 13, 2013.
20. **CUENDIAS, ANNE**. *Copolymères à blocs constitués d'un bloc rigide conjugué: synthèse et auto assemblage en solution*. [Thèse de doctorat] Bordeaux : Ecole doctorale des sciences chimiques, 2007.
21. **DALILA, SALEM**. *L'effet d'interfaces électrodes couche active sur les performances de la cellule solaire organique à base P3HT:PCBM*. [Thèse de magister] Tizi-Ouzou : Université Mouloud Mammeri, 2013.
22. **DELPHINE LAURENT, GIOVANNI ANGELINI, JEAN-BAPTISTE LEPRETRE**. *Les panneaux photovoltaïques organiques état de l'art, rendement énergétique*. [Document] Montréal : Ecole polytechnique de Montréal , 2010.
23. **DIOUF, DJICHNOUM**. *Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structure interdigitée en face arrière*. [Thèse de doctorat] Paris : Université Paris Sud, 2010.
24. **ERNOULD, MARIE ELISE**. *Les polymères semi-conducteurs*. [Projet de physique appliquée] 2006.
25. *Fluorures alcalins et alcalino-terreux* : [Document] Institut national de recherche et de sécurité, 2007.
26. **IMEN, LAHRECHE**. *Mesure des propriétés externes d'une cellule photovoltaïque* . [Thèse de master] Biskra : Université Mohamed Khider, 2013.
27. **J.BRABEC, CHRISTOPH**. *Organic photovoltaics: concepts and realization*. [Livre] : Springer, 2003.
28. **JEAN PIERRE MERCIER, GERALD ZAMBELLI, WILFRIED KURZ**. *Introduction à la science des matériaux*. [livre] : PPUR presses polytechniques, 1999.

29. **JEAN-PIERRE COLINGE, FERNAND VAN DE WIELE.** *Physique des dispositifs semiconducteurs*. [Livre] : De Boeck, 1996.
30. **KAMELIA, HELALI.** *Modélisation d'une cellule photovoltaïque: étude comparative*. [Thèse de magister] Tizi-Ouzou : Université Mouloud Mammeri , 2012.
31. **KANAAN, HANI.** *Spectroscopie d'électro-absorption aux diodes électroluminescentes (OLEDs) et aux cellules photovoltaïques (OPVs)*. [Thèse de doctorat] Toulouse : Université de Paul Sabatier, 2009.
32. **L.J.A.KOSTER,E.C.P.SMITS,V.D.MIHAILETCHI,P.W.M.BLOM.***Device model for the operation of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells*. [Article] : Physical review, 2005.
33. **LECLERC, NICOLAS.***Propriétés électroniques des polymères en couches minces* . [Document] Strasbourg : Université de Strasbourg, 2010.
34. **MALLET, CHARLOTTE.** *Nouveaux semi-conducteurs organiques à base de motifs furylène-vinylènes ou de systèmes condensés dérivés du benzofurane et du benzothiènothiophène*. [Thèse de doctorat] Angers : Université d'Angers, 2010.
35. **MAOUCHA, ABDELHAK.** *Etude et identification paramétrique d'une cellule photovoltaïque organique*. [Thèse de magister] Batna : Université de Batna, 2011.
36. **MAROUF, YACINE.** *Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco*. [Mémoire de magister] Biskra : Université Mohamed Khider, 2013.
37. **MATHIEU, HENRY.** *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques* . [Livre] : Dunod, 2009.
38. **MOLITON, ANDRE.** *Electronique et optoélectronique organique*. [Livre] : Springer, 2011.
39. **NAVARRO, JOSE MIGUEL.***Cellules photovoltaïques organiques transparentes dans le visible*. [Thèse de doctorat] Toulouse : Université de Paul Sabatier, 2008.
40. **OMER, BUSHRA MOHAMED.** *Optical properties of MDMO-PPV and MDMO-PPV(6,6) phenyl C61 butyric acid 3 ethylthiophene ester thin films*. [Article] : International journal on organic electronic , 2013.
41. **P.ADRIAENSENS, R.DAMS,L.LUTSEN,D.VANDERZANDE,J.GELAN.** *Study of the nanomorphology of OC1C10-PPV precursor-PPV blends by solid state NMR relaxometry*. [Article] : Elsevier, 2004.
42. **QIAO, QIQUAN.** *Organic solar cells: materials, devices, interfaces,ans modeling*. [livre] : CRC press, 2015.
43. **RADBEH, ROSHANAK.** *Réalisation et caractérisation de cellules solaires organiques à couches composites polymères incluant des nanotubes de carbones*. [Thèse de doctorat] Limoges : Université de Limoges, 2008.

44. **ROUSSEAU, THEODULF.** *Elaboration et caractérisation de cellules solaires organiques à base de nouvelles classes de matériaux actifs.* [Thèse de doctorat] Nantes : Ecole doctorale matière, molécules, matériaux en pays de la Loire, 2014.
45. **S.ALEM, J.M.NUNZI, S.DABOS-SEIGNON, M.CARIOU, T.P.NGUYEN, H.H.HORHOLD.** *Nouveaux dérivés de poly(p-phénylène vinylène) pour les cellules photovoltaïques organiques en réseaux interpénétrés.* [Article] 2004.
46. **SARICIFTCI, HARALD HOPPE AND NIYAZI SERDAR.** *Morphology of polymer/fullerene bulk heterojunction solar cells.* [Article] : Journal of materials chemistry, 2005.
47. **SEAN E.SHAHEEN, CHRISTOPH J.BRABEC, N.SERDAR SARICIFTCI, FRANZ PADINGER, THOMAS FROMHERZ et al.** *2.5% efficient organic plastic solar cells.* [Article] : Applied physics letters, 2001.
48. Solar cells simulation and design. **SILVACO.** [En ligne] <http://www.silvaco.com/>.
49. **SOUHILA, BOUKLI HASENE.** *Modélisation et simulation des cellules solaires à base de P3HT:PCBM (effet de la mobilité et la vitesse de recombinaison en surface).* [Thèse de doctorat] Tlemcen : Université Abou Bakr Belkaid, 2014.
50. **standard, Simulation.** *Organic solar - organic solar cell simulation and tuning with optimizer.* [Article] : Journal for process and device engineers, 2008.
51. **SURESH C.JAIN, M.WILLANDER, AND SEMIMETALS.** *Conducting organic materials and devices .* [Livre] : Newnes, 2011.
52. **T.GHAITAOUL, M.LOUNIS, N.OUIS, T.BOUTCHACHA et N.BENHERRAT S.** *Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïque organique.* [revue des énergies renouvelables] Oron : USTO Mohamed Boudiaf, 2011.
53. **TAYAOU, FATIMA ZOHRA.** *Utilisation de composites à base de polymères conjugués dans les cellules photovoltaïques pour la conversion du rayonnement solaire.* [Thèse de master] Tlemcen : Université Abou Bekr Belkaid, 2013.
54. **TRESS, WOLFGANG.** *Organic solar cells: theory, experiment, and device simulation .* [livre] : Springer, 2014.
55. **V.KAZUKAUSKAS, M.PRANAÏTIS AND V.JANONIS.** *Charge carrier transport in non-homogeneous MDMO-PPV polymer.* [Article] : ACTA PHYSICA POLONICA, 2010.
56. **VAUFREY, DAVID.** *Réalisation d'OLED à émission par la surface: optimisation de structure ITO/ semi-conducteurs organiques.* [Thèse de doctorat] Lyon : Ecole centrale de Lyon, 2003.
57. **XIAODONG WANG, ZHIMING M.WANG.** *High efficiency solar cells: physics, materials, and devices.* [Livre] : Springer science et business media, 2013.

58. **YU, Peiqing.** *Caractérisations électriques de cellules solaires à base de nanotubes de carbone inclus dans une matrice de polymères conjugués.* [Thèse de doctorat] Paris : Université Pierre et Marie Curie, 2011.
59. **ZAKARIA, BENDJELLOULI.** *Contribution à la modélisation d'une cellule solaire.* [Thèse de magister] Bachar : Université de Bachar, 2009.

Annexe

Aperçu sur le logiciel SILVACO

Introduction

La résolution des trois équations fondamentales qui régissent le comportement des porteurs de charges nous permet de calculer la caractéristique $I(V)$ d'une cellule solaire ainsi que d'autres paramètres physiques tels que le champ E , le potentiel, ce qui fournit les renseignements utiles des performances d'une cellule solaire.

La résolution analytique étant compliquée et pratiquement impossible, nous avons recours à la résolution numérique qui nécessite un grand nombre d'itérations.

La simulation numérique est couramment utilisée pour l'optimisation des systèmes et composants optoélectroniques. Pour les cellules photovoltaïques, elle présente les avantages suivants :

- Elle permet d'éviter la fabrication de plusieurs prototypes de cellules avec des paramètres différents. Ce qui est très coûteux.
- Elle est indépendante de la technologie utilisée (on peut donc faire varier largement les paramètres).
- On peut séparer l'influence de chaque zone de la cellule dans le cas de paramètres interdépendants (par exemple: mobilité, longueur de diffusion et durée de vie).

La simulation permet donc un gain de temps, de matériau et par conséquent d'argent. Dans le cadre de notre travail, nous l'avons utilisée comme outil de visualisation d'expériences en utilisant le logiciel SILVACO. Nous avons choisi le « SILVACO » pour sa disponibilité dans notre unité de recherche, pour sa force et sa diversité de calcul.

1. Présentation du logiciel «SILVACO»

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est une société Américaine, ayant son siège à Santa Clara en Californie. Historiquement la compagnie a été fondée en 1984 par Dr. Ivan Pesic. Elle est un des principaux fournisseurs de chaînes professionnelles de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design).

Le SILVACO est un logiciel qui permet de concevoir, modéliser et simuler les performances des dispositifs à semi-conducteur, avant la fabrication des prototypes

d'essais. Il est très utile dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception de dispositifs.

L'entrée de SILVACO dans la technologie **TCAD** a eu lieu en 1989, et elle a été basée sur une recherche du Département des Dispositifs Physiques de l'Université de Stanford.

TCAD (Technology Computer-Aided Design) est une branche de la CAO électronique (Conception assistée par ordinateur électronique) visant à modéliser la fabrication des dispositifs à semi-conducteurs et leur fonctionnement. Ce simulateur permet la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique. Ceci nous permet d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Ces logiciels résolvent les équations différentielles qui régissent le fonctionnement des dispositifs électroniques par des méthodes numériques (éléments finis, Moindre Carré, méthode de Monte Carlo, etc.)

Le TCAD-SILVACO est constitué d'une gamme d'outils de simulation formant ce qu'on appelle la VWF (virtuelle wafer fabrication) signifie la fabrication virtuelle des substrats.

Les composants de base de VWF sont :

- a. **Les outils de simulation** : Ces outils simulent soit leurs processus de fabrication ou soit leurs comportements électriques.

Les outils de simulation les plus utilisés sont ATHENA, ATLAS et SDUPEM3.

ATLAS : simulateur physique de dispositifs à semi-conducteur 2D ou 3D qui permet de simuler le comportement électrique de structures spécifiées des dispositifs à semi-conducteur.

ATHENA : simulateur 2D de procédés technologiques qui permet de développer et optimiser la fabrication virtuelle des différents constituants d'un dispositif électronique. Il fournit une plate-forme pour simuler l'implantation ionique, la diffusion, la lithographie, et l'oxydation des matériaux semi-conducteurs. Il traite la simulation comme une série d'évènements consécutifs, et Il remplace des expériences coûteuses par des simulations.

SDUPEM3 : simulateur de procédé 1D avec prolongements simples de simulations des dispositifs.

- b. **Les outils interactifs** : Ces outils sont conçus pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une

interface utilisateur qui est graphique, le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficace. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnement des outils d'automatisation.

Parmi les outils interactifs on a :

DECKBUILD : environnement où est défini le programme de simulation. DeckBuild offre une aide et une prise en charge qui permet d'éviter l'apprentissage d'une syntaxe de commande généralement très complexe. Il permet aussi une exécution automatique et très pratique des programmes et des sauvegardes systématiques des étapes intermédiaires d'exécution.

Sous cet environnement nous pouvons visualiser sur une fenêtre d'information (Output Window) les résultats de simulation tels que les paramètres technologiques (profondeur, concentration des porteurs...) et les paramètres électriques (tension de seuil, courant, etc.).

TONYPLOT : environnement où sont tracés les résultats des simulations. Il donne des possibilités complètes pour la visualisation et l'analyse des caractéristiques de sortie (structure du composant électronique, profil de dopage, et caractéristiques électriques). Selon le programme de simulation utilisé, TONYPLOT peut donner des caractéristiques de sortie en une, deux ou trois dimensions.

Le TCAD-SILVACO inclut de nouveaux modèles physiques qui utilisent des méthodes et des algorithmes numériques efficaces, de nouvelles techniques de maillage, des solutions linéaires d'optimisation, etc. , tout en permettant d'obtenir des résultats de simulation très proches de celles de la pratique. L'avantage majeur de ce type de simulateurs est de visualiser dans l'espace des phénomènes physiques difficilement accessibles et observables et de s'approprier de manière pédagogique les procédés de fabrication.

Les modules de TCAD-SILVACO peuvent être utilisés pour :

- La simulation des étapes de fabrication technologique (ATHENA, SSupreme3, SSupreme4, etc.).
- La simulation électrique des dispositifs tels que, les Diodes, les MOSFET, les transistors bipolaires, etc. (ATLAS).

Le projet réalisé dans le cadre de ce travail de mémoire, a été basé principalement sur l'outil de simulation « Atlas » et sur l'environnement où est défini le programme de simulation « DeckBuild». Une fois la simulation effectuée sous « ATLAS », la

visualisation des résultats se fait via le logiciel « TonyPlot ». Par la suite nous allons développer la présentation de l'outil de simulation « ATLAS » que nous avons utilisé principalement pour effectuer la simulation de notre structure.

Présentation d'ATLAS

ATLAS est un simulateur physique 2D ou 3D des dispositifs basés sur la physique des semi-conducteurs, et un outil noyau dans le milieu de simulation VWF de SILVACO.

Il prédit le comportement électrique des structures semi-conductrices spécifiées et fournit des aperçus de mécanismes physiques internes associés au fonctionnement des dispositifs.

Ce simulateur est composé de deux parties :

- Une partie de traitement numérique (méthode d'intégration, de discrétisation...)
- Une partie formée des modèles physiques des composants semi-conducteurs (modèles de recombinaisons, de mobilités, ...).

Atlas possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix. Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel. En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme. Le composant étudié est représenté comme une structure maillée où chaque nœud a des propriétés qui lui sont associés telles que le type de matériau, le type de dopage, la concentration du dopant, etc. Les électrodes sont représentées par des surfaces sur lesquelles les conditions aux limites sont imposées, comme par exemple, les tensions appliquées.

Entrées et sorties d'ATLAS

La figure suivante montre les entrées et les sorties d'atlas. La plupart des simulations réalisées par ATLAS utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier est représenté par «Fichier de commande», c'est un fichier script contenant les commandes pour qu'ATLAS s'exécute. Le second fichier est un « Fichier de structure » qui définit la structure à simuler. A la sortie d'Atlas, nous avons trois types de fichier. Le premier de

ces fichiers est la sortie «Runtime» qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le « fichier log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé. Le troisième fichier de sortie est le « fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions dans le dispositif en un point donné. Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot » qui permet la visualisation de la structure et des paramètres de sorti tel que le rendement quantique, la réponse spectrale, I(V), etc.

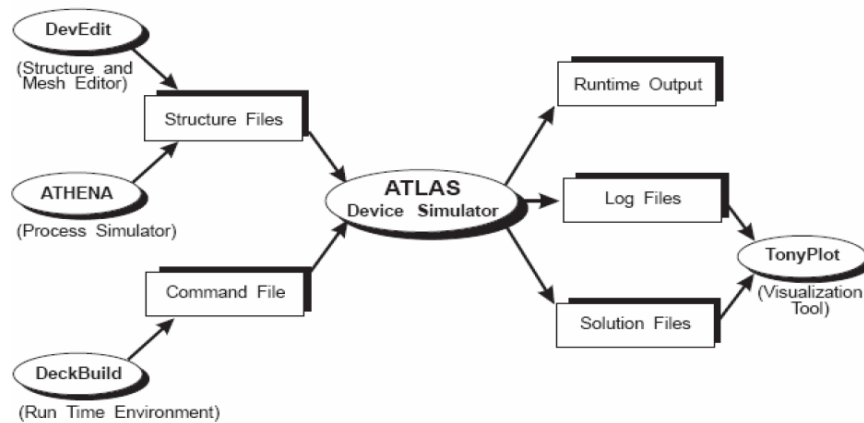


Figure 1 : Les chemins d'entrés et de sortie d'Atlas

Commandes dans un programme ATLAS

Nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes fondamentales dans un programme ATLAS (figure 2). Ainsi, il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement. Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte.

<i>Group</i>		<i>Statements</i>
1. Structure Specification	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material Models Specification	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical Method Selection	—————	METHOD
4. Solution Specification	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results Analysis	—————	EXTRACT TONYPLOT

Figure 2 : Les commandes d'Atlas

La forme des instructions des fichiers d'entrée à Atlas est:

<STATEMENT><PARAMETER> = <VALUE>

Le paramètre peut être: réel, entier, caractère ou logique.

Les commandes fondamentales sont :

1. Spécification de la structure

Il s'agit de définir la structure la plus réaliste. La construction de la structure consiste en quatre étapes : définition du maillage, définition des régions, définition des électrodes et définition des dopages.

MESH (définition du maillage) : le maillage divise la structure simulée en petites cellules pour pouvoir résoudre les équations fondamentales numériquement. L'élément de maille utilisé est le triangle. Pour assurer une bonne précision lors de la simulation, il faut avoir le maillage le plus fin possible. Par contre, si le maillage est très fin, le temps de calcul est très élevé, car il y a plus d'éléments à calculer. Il est donc nécessaire de trouver un compromis entre le temps et la précision de calcul.

REGION (définition des régions) : après avoir défini le maillage, il est nécessaire de définir les régions. Dans cette partie, nous définissons des régions rectangulaires, par exemple la région n°1 est définie comme un matériau de type silicium et la région n° 2 comme de l'oxyde (SiO₂), etc. Ainsi que les différentes dimensions sont définies en micromètre.

ELECTRODE (définition des électrodes) : la définition des électrodes permet de réaliser les contacts Grille, Anode et Cathode.

DOPING (définition des dopages) : le dernier aspect de la construction de la structure est le dopage. Le dopage peut être de type n ou p, aussi la distribution peut être uniforme, gaussien, etc.

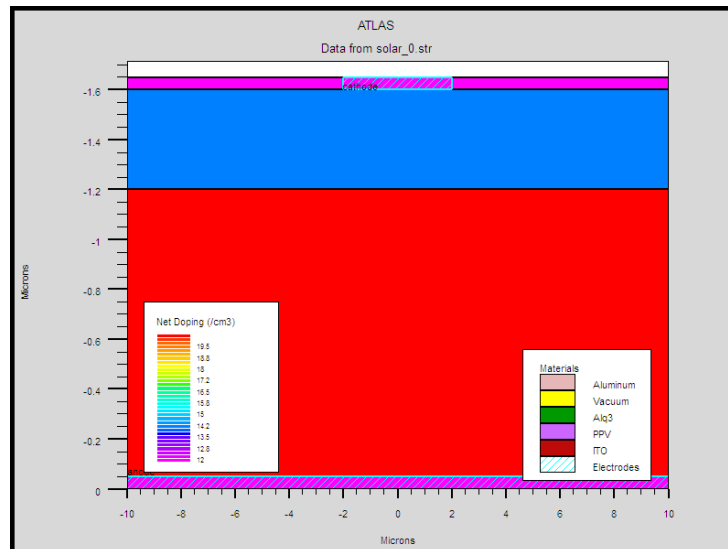


Figure 3 : Définition des régions, définition des électrodes, définition des dopages

2. Spécification des modèles physiques

Après la construction de la structure, il est nécessaire de préciser les modèles physiques et de définir les matériaux. La spécification de modèles et matériaux comporte quatre étapes:

MATERIAL : associe des paramètres physiques aux matériaux dans la maille. Le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standards.

MODELS : ils indiquent les inclusions de différents mécanismes physiques (recombinaison, mobilité, etc...). Le choix du modèle dépend des matériaux choisis pour la simulation.

CONTACT : indique les attributs physiques d'une électrode (résistivité, travail de sortie, ...).

INTERFACE : indique les paramètres d'interface aux frontières des semi-conducteurs ou des isolants. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière exceptés là où ils sont déjà indiqués.

3. Sélection de la méthode numérique

METHOD : dans ATLAS, il existe essentiellement deux méthodes numériques pour la résolution des équations : les méthodes dites de Newton et de Gummel.

La méthode de Newton correspond à la résolution itérative d'un système regroupant les trois équations différentielles régissant le fonctionnement de la structure.

La méthode de Gummel consiste à découpler en trois sous-systèmes le système global décrit précédemment : les trois équations sont résolues itérativement les unes après les autres jusqu'à atteindre la convergence globale des solutions. L'intérêt potentiel de cet algorithme par rapport à celui de Newton réside dans la réduction des dimensions des systèmes matriciels à résoudre, ce qui permet a priori de diminuer le temps de calcul.

4. Spécification des solutions

Après avoir sélectionné la méthode numérique il est nécessaire de déterminer les solutions. La spécification de solution est donnée par les déclarations : LOG, SOLVE, LOAD, et SAVE.

LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log). Notons que log en minuscule veut dire le type de fichier et LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme. Les informations sauvées sont de type électrique. Aussi n'importe quel paramètre spécifié par la commande PROBRE est stocké dans le fichier de type log. Si dans le programme, il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.

SOLVE : la déclaration SOLVE fait suite à la déclaration LOG. SOLVE effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.

LOAD : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conjectures initiales à d'autres points de polarisation.

SAVE : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.

5. Analyse des résultats

Une fois la solution a été trouvée pour un problème de dispositif à semi-conducteurs, les informations peuvent être affichées graphiquement.

EXTRACT : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou structure.

TONYPLOT : démarre le programme « TonyPlot » permettant une représentation graphique des données.

Une autre commande importante est BEAM, sa position est au niveau 4 des groupes de commande. BEAM indique un signal d'entrée optique sous forme d'un faisceau de

lumière (mono ou multi spectrale). Le faisceau ainsi déclaré est allumé et utilisé par la commande SOLVE, dans ce cas le module luminous2 est activé. Donc BEAM est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales.

Conclusion

Quel que soit la structure d'une cellule solaire, une optimisation de ses paramètres est nécessaire pour prédire son meilleur rendement avant de passer à la phase technologique. Habituellement, les paramètres à optimiser sont l'épaisseur de la cellule, les profils de dopage, la configuration des contacts et le confinement optique. Les valeurs optimales des paramètres dépendent, bien sûr, de la structure de la cellule solaire, de la qualité du matériau du substrat (durée de vie, mobilité), de la qualité des contacts ohmiques, de la vitesse de recombinaison, etc. L'optimisation de la cellule solaire comprend donc l'étude de l'influence de ces paramètres sur le rendement afin d'obtenir une structure conduisant au rendement maximal.

