

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université de Batna -2
Faculté de Technologie
Département d'Électronique



THÈSE

**Présentée pour l'obtention du diplôme de
DOCTORAT en SCIENCES
Spécialité: Électronique
Option: Instrumentation**

Par

LAKEHAL Brahim

Thème

Etude et modélisation des photopiles de troisième génération

Soutenue le 15/03/2018
Devant le jury:

BENHAYAI Abdelhamid	Prof.	Université Batna -2	Président
DIBI Zohir	Prof.	Université Batna -2	Rapporteur
MAHAMDI Ramdane	Prof.	Université Batna -2	Examineur
BELLEL Azzedine	Prof.	Université Constantine 1	Examineur
CHAABI Abdelhafid	Prof.	Université Constantine 1	Examineur
BOURIDAH Hachemi	Prof.	Université Jijel	Examineur

ملخص

إن الهدف الأساسي من إنجاز هذا البحث هو وضع نموذج محاكاة و دراسة عمل الخلايا الشمسية من الجيل الثالث. في الجزء الأول من هذه الدراسة ركزنا على دراسة الخلايا الشمسية من نوع مستويات الطاقة المتوسطة و بشكل خاص على اقتراح نهج جديد يقوم على الخوارزميات الجينية التي تزيد من المردودية للخلية الضوئية مع تحقيق المعايير الهندسية والفيزيائية المناسبة للخلية الشمسية. النهج المقترح يستطيع ان يعطينا ويبين لنا التأثيرات الفيزيائية لمستويات الطاقة المتوسطة وحالة الكثافة الإلكترونية على أداء الخلايا الشمسية من أجل التنبؤ على الخصائص المرغوب فيها قبل صنعها. الجزء الثاني من الدراسة خصصت لدراسة الخلايا ذات مستويات متوسطة و ذلك لوضع مخطط الكتروني بياني يمثل عمل هذه الخلايا من ناحية الخصائص الكهربائية باستعمال Matlab , الهدف من هذه الدراسة هو إنشاء قاعدة بيانات لهذا النموذج باستخدام تقنية الشبكات العصبية من أجل الحصول على نموذج مماثل للخلية الشمسية.

Résumé

Le travail de cette thèse consiste à mettre en place un modèle pour simuler et étudier le comportement des cellules solaires de troisième génération. La première partie a été consacrée à l'ensemble des étapes d'optimisation de la cellule photovoltaïque de type bande intermédiaire (IBSC). Nous nous sommes particulièrement concentrés sur la proposition d'une nouvelle approche basée sur les Algorithmes Génétiques qui permet de maximiser la conversion photovoltaïque des IBSC, tout en optimisant les paramètres géométriques et physiques. L'approche proposée sera utile pour renseigner et montrer les effets physiques de la bande intermédiaire et les effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire sur la performance de la cellule solaire afin de prédire les caractéristiques souhaitables, avant de les élaborer. La deuxième partie est dévolue à l'étude des cellules à bande intermédiaire (IBSC) qui nous permet d'avoir une structure électronique donnant la caractéristique I-V. A cet effet, l'environnement Matlab a été utilisé pour reproduire les résultats expérimentaux de la cellule. La modélisation effectuée a pour objectif de créer une base de données pour ce modèle ainsi que l'étape de vérification. La technique utilisée pour la modélisation est les réseaux de neurone afin de reproduire un modèle similaire à la cellule solaire.

Abstract

The goal of this thesis is to develop a model to simulate and study the behavior of third generation solar cells. The first part has been focused particularly on proposing new approach based on Genetic Algorithms that maximizes photovoltaic conversion while optimizing parameters Geometrical and physical of solar cell. The proposed approach will be useful for informing and showing the physical effects of the intermediate band and the effects of the density of the electronic states of the intermediate band on the performance of the solar cell in order to predict desirable characteristics before elaborating them. The second part is dedicated to the study of intermediate band cells (IBC), which allows us to have an electronic structure giving the I-V characteristic. For this purpose; Matlab has been used to reproduce the experimental results of the cell. The aim of the modeling is to create a database for this model and therefore for verification. The technique used for modeling is the neural networks in order to obtain a similar model to the solar cell.

Dédicaces

Je dédie ce travail à :

Ma mère,

Mon père,

Ma femme,

Mes filles,

Mes frères et mes sœurs,

Tous mes amis sans exception.

Remerciements

En premier lieu, je tiens à adresser mes remerciements à mon encadreur, Monsieur le Professeur DIBI Zohir vice-Recteur Chargé de la Pédagogie à l'université Batna 1 qui a suivi cette recherche avec rigueur et compétence scientifique. La confiance qu'il m'a accordée dès le début m'a permis de progresser aisément. Les conseils qu'il m'a prodigués au cours de ce travail ont toujours été clairs et appropriés, me facilitant ainsi la tâche et me permettant d'aboutir à la rédaction de ce manuscrit de thèse.

Je suis très reconnaissant à Monsieur Abdelhamid BENHAYAI, Professeur à l'université de Batna 2 de m'avoir fait l'honneur d'accepter de présider le jury de cette thèse.

Je tiens à remercier Monsieur Abdelhafid CHAABI, Professeur à l'Université de Constantine 1 de m'avoir fait l'honneur de juger ce travail.

Je remercie Monsieur, Ramdane MAHAMDI Professeur à l'Université de Batna 2 pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'examiner ce travail et de participer au jury.

Je remercie également Monsieur Hachemi BOURIDAH, Professeur à l'Université de Jijel pour sa participation au jury, c'est un grand honneur qu'il me fait.

Je remercie Monsieur Azzedine BELLEL, Professeur à l'Université de Constantine 1 pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'examiner ce travail et de participer au jury.

Je ne saurais oublier mes collègues notamment Lakhdar Nacereddine, Maître de Conférence A à l'université d'Oued-Souf, dont l'aide et l'amitié m'ont été un grand soutien au cours de la réalisation de ce travail.

Le dernier de mes remerciements n'est pas le moindre et s'adresse à ma famille et en particulier à mes parents pour leur aide et leur appui permanents au cours de ces longues années de formation et de travail de recherche.

SOMMAIRE

Sommaire

Introduction générale	9
-----------------------------	---

Chapitre I: Nouvelles cellules pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire

I.1 État de l'art de l'industrie photovoltaïque	15
I.2 Fonctionnement d'une cellule solaire	15
I.3 Facteurs limitant la conversion.....	20
I.4 Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques	21
I.4.1 La filière silicium.....	21
I.4.2 La filières Nano-cristaux semi-conducteurs	23
I.4.2.1 Cellules à multi-jonction (MJC) ou tandem	23
I.4.2.2 Cellules à bande intermédiaire (IBC)	25
I.4.2.3 Cellules à conversion de photons	28
I.4.2.4 Cellules à multi-génération d'excitons (MEG)	31
I.4.2.5 Cellules à porteurs chauds	31
I.4.3 La filière des cellules organiques	33
I.4.4 La filière des pérovskites	35
I.5 Conclusion	36
Bibliographie.....	37

Chapitre II: Identification des paramètres géométriques et physiques du IBSC en utilisant les algorithmes génétiques

II.1 Introduction	42
II.2 Description du modèle	43
II.3 Identification des paramètres en utilisant les algorithmes génétiques	47
II.3.1 Méthodologie de calcul	47
II.3.2 Principe de fonctionnement des algorithmes génétiques	48
II.3.3 Description détaillée.....	50
II.3.3.1 Codage.....	50
II.3.3.2 Sélection	52
II.3.3.3 La roulette	52
II.3.3.4 Le tournoi	52

II.3.3.5 Croisement	53
II.3.3.6 Mutation	53
II.3.3.7 Elitisme.....	53
II.4 Fonction d'évaluation (fitness) et le hasard	54
II.5 Les grandes étapes de l'algorithme génétique.	54
II.6 Initialisation de la population AG	55
II.7 Procédé d'évaluation (fonction de fitness).....	56
II.8. Résultats et discussions	57
II.8.1 Caractéristiques courant-tension	58
II.9. Conclusion.....	59
Bibliographie.....	60

Chapitre III: Etude de l'influence des paramètres géométriques et physiques sur les performances de la IBSC

III.1 Introduction.....	64
III.2 Influence des coefficients d'absorption sur la caractéristiques courant-tension	64
III.3 Influence du niveau d'énergie de la bande intermédiaire.....	65
III.3.1 Courant de court-circuit	66
III.3.2 Tension de circuit ouvert	67
III.4 Effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire	67
III.5 Effets de l'épaisseur du ZnTeO	68
III.6 Effets du dopage	69
III.6.1 La densité des donneurs	69
III.6.2 La densité des accepteurs.....	69
III.7 Effets de la résistance série et shunt	70
III.8 Conclusion	73
Bibliographie.....	74

Chapitre IV: Modélisation de la cellule solaire à bande intermédiaire

IV.1 Cellule solaire à bande intermédiaire	77
IV.1.1 Structure a optimisée	77
IV.2 Modélisation de la cellule solaire IBSC	78
IV.2.1 Choix de la base de données	78
IV.2 Création d'une base de validation	78

IV.2.3 Mesure de la performance du modèle obtenu	82
IV.3 Présentation du simulateur ORCAD-PSpICE	83
IV.3.1 Implantation du modèle ANN sur ORCAD-PSpICE	83
IV.3.2 Procédure de l'implantation du modèle	83
IV.4 Validation du modèle.....	85
IV.6 Conclusion	86
Bibliographie.....	87

Chapitre V: Modélisation de la cellule solaire organique

V.1 Théorie des calculs DFT et TDDFT	90
IV.1.1 Équation de Schrödinger	90
IV.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer	91
V.2 La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	92
V.3 Les systèmes étudiés	95
V.4 Résultats préliminaires	95
V.5 Conclusion	98
Bibliographie.....	99

Conclusion générale et perspectives

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Le photovoltaïque qui repose sur la transformation de l'énergie du soleil en électricité constitue une voie d'avenir pour la production d'énergie électrique renouvelable. Il existe différentes générations de modules photovoltaïques (PV), la première génération des cellules solaires à base des plaquettes (150-300 mm d'épaisseur) en silicium cristallin (monocristallin ou poly-cristallin) qui domine le marché photovoltaïque, représente un taux de l'ordre de 93 % de la production totale de modules PV.

Cette génération de modules doit son succès à la disponibilité du silicium, à la maîtrise des procédés de fabrication et à l'automatisation des étapes. Elle permet d'obtenir un rendement de conversion de 18 à 24 % en laboratoire et de 15 à 20 % en production industrielle, suivant la cristallographie du silicium[1].

La deuxième génération des cellules solaires à base des couches minces en matériaux semi-conducteurs simple (silicium amorphe et microcristallin) ou composé (cuivre-indium-gallium-sélénium CIGS, tellure de cadmium CdTe...), permet d'obtenir un rendement de conversion de 10 à 18 % [2]. Le principe des cellules en couches minces est d'utiliser un matériau absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique élevé par rapport au Si cristallin. A cet effet, des matériaux à gap direct sont généralement utilisés (le Si ayant un gap indirect). Il en résulte la possibilité d'utiliser des matériaux absorbeurs beaucoup plus fins, de l'ordre de 2 μm d'épaisseur (100x moins que le Si cristallin), réduisant ainsi la quantité de matière première nécessaire.

Ces cellules possèdent divers avantages et inconvénients :

- Elles permettent de fabriquer des modules d'une surface plus importante (4 voire 6 m^2), qui peuvent même être ensuite découpés.
- Elles ne craignent pas l'échauffement qui peut faire chuter le rendement des modules cristallins autour de 60°C, ce qui les rend plus aptes à l'intégration.
- Elles captent mieux le rayonnement diffuse et sont donc mieux adaptées à certains sites en phase industrielle, leur coût est en principe moins élevé.
- Industrialisation moins avancée.
- Matières premières limitées et en concurrence avec d'autres usages.
- Toxicité des matériaux.
- Recyclage plus complexe.

Afin de réduire les coûts de matière et d'ouvrir de nouvelles applications, une troisième génération de cellules photovoltaïques, associée éventuellement à la deuxième, a la prétention d'atteindre de très hauts rendements ($> 30\%$) et à réduire le coût. Pour atteindre des rendements de conversion aussi importants, le composant photovoltaïque doit contourner la limite théorique de Shockley-Queisser des composants à simple bande interdite qui limite le rendement à 30% [3], suivant le niveau de concentration de la lumière sur la cellule PV. Plusieurs concepts sont envisagés pour atteindre cet objectif [4-10] :

- Cellules de type Schottky.
- Cellules à porteurs chauds.
- Cellules à multi-génération d'excitons (MEG).
- Cellules à conversion de photons.
- Cellules à bande intermédiaire (IBC).
- Cellules à multi-jonction (MJC) ou tandem.

Pour bénéficier des avantages qu'offrent les cellules de troisième génération nous avons inscrit notre travail de thèse dans cette optique. On a visé l'étude des cellules solaires à bande intermédiaire (IBCS) tout en optimisant les paramètres physiques et géométriques afin d'obtenir un maximum rendement de conversion de la cellule. Comme on a exposé les différentes étapes de la conception et l'implantation de la cellule solaire à bande intermédiaire sur le simulateur PSPICE. La première partie a été consacrée à la proposition d'une nouvelle approche basée sur les Algorithmes Génétiques qui permet de maximiser la conversion photovoltaïque des IBSC, tout en optimisant les paramètres géométriques et physiques. La modélisation et l'analyse par les algorithmes génétiques sont utilisées pour améliorer ces paramètres et pour étudier systématiquement l'effet de la position énergétique de la BI, la densité de la BI sur le rendement de la cellule.

La deuxième partie est dévolue à l'étude de l'influence des coefficients d'absorption sur la caractéristique courant-tension, influence du niveau d'énergie de la bande intermédiaire, les effets de dopage sur le rendement, le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert, le facteur de forme, effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire N_i et afin de valider notre approche on a étudié les effets parasites tels que la résistance série et shunt.

La troisième partie concerne l'étude des cellules à bande intermédiaire (IBSC) qui nous permet d'obtenir une structure électronique donnant la caractéristique I-V. A cet effet l'environnement Matlab a été utilisé pour reproduire les résultats expérimentaux de la cellule, et de créer une base de données pour ce modèle et une autre pour la vérification.

Dans cette étude nous avons également fait appel à la configuration ABM (Analog Behavior Modeling) du simulateur PSPICE pour produire et simuler un réseau de neurones semblable à la cellule solaire. Le modèle obtenu par les ABM traduit fidèlement la caractéristique I-V.

Les études menées au cours de cette thèse ont été focalisées sur les différents problèmes d'optimisation des cellules solaires par les algorithmes génétiques, les réseaux de neurone et les procédures détaillées pour créer le schéma électronique d'un modèle Spice qui permet une simulation sous Orcad Pspice.

Cette thèse est divisée en cinq chapitres :

Le chapitre I, est une revue de littérature qui fera tout d'abord le point sur l'état de l'art de l'industrie photovoltaïque et les différentes générations de cellules solaires. Quelques notions sur la source d'énergie que représente le soleil, et son application dans le domaine photovoltaïque seront également rappelées, ensuite nous aborderons le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques, et enfin une dernière partie portera sur les cellules de troisième génération qui fera ultérieurement l'objet de notre étude.

Le chapitre II, présentera les notions de base sur la technique de modélisation concernant la description et l'évolution du processus d'optimisation par les algorithmes génétiques, ainsi que les avantages et les inconvénients de ce processus. Nous proposerons ensuite une nouvelle approche basée sur les Algorithmes Génétiques qui permet de maximiser la conversion photovoltaïque des IBSC, tout en optimisant les paramètres géométriques et physiques. La modélisation et l'analyse par les algorithmes génétiques sont utilisées pour améliorer ces paramètres.

Le chapitre III est consacré à l'applicabilité de notre approche pour l'étude de l'influence des paramètres géométriques et physiques sur les performances de la IBSC. Dans ce chapitre nous avons examiné systématiquement l'effet de la position énergétique de la bande intermédiaire (BI), la densité des états électroniques (N_i) sur le rendement de la cellule.

Le chapitre IV présentera les différentes étapes de la conception des modèles ANN et les procédures détaillées pour créer le schéma électronique d'un modèle Spice qui permet une simulation de la cellule solaire à bande intermédiaire sous OrcadPspice.

Le chapitre V donnera un aperçu sur le travail en cours qui est la modélisation moléculaire des composés formés de phtalocyanine et de différent métaux (Co, Cu, Na, Mn) (MPc) utilisés comme des cellules photovoltaïques. Les propriétés optiques de ces matériaux ont été obtenues grâce à la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TD DFT).

Références bibliographiques

- [1] Y. Park, V. Choong, Y. Gao, B. R. Hsieh and C. W. Tang, « Work function of indium thin oxide transparent conductor measured by photoelectron spectroscopy », Appl. Phys. Lett, vol. 68 , pp. 2699-2701, 1996.
- [2] G. Masson, M. Latour, M. Rekingier, I.T. Theologitis and M. Papoutsis. Global Market Outlook for photovoltaics. Technical report, EPIA, 2013.
- [3] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells », Appl. Phys. Lett, vol. 32, pp. 510-519, 1961.
- [4] X. Liu, X. W. Zhang, J. H. Meng, Z. G. Yin, L. Q. Zhang, H. L. Wang, and J. L. Wu « High Efficiency Schottky junction solar cells by co-doping of graphene with gold nanoparticles and nitric acid », Appl. Phys. Lett, vol. 106, pp. 233901-5, 2015.
- [5] T.Feng, D.Xie, Y.Lin, Y.Zang, T.Ren, R.Song, H.Zhao, H.Tian, X.Li, H.Zhu, and L.Liu « Graphene based Schottky junction solar cells on patterned silicon-pillararray substrate », Appl. Phys. Lett, vol. 106, pp. 233505-3, 2011.
- [6] H.Levard « Ingénierie phononique pour les cellules solaires à porteurs chauds », Thèse de Doctorat, Université pierre et marie curie, 2015.
- [7] S. Essig, S. Ward, M.A. Steiner, D. J. Friedman, J. F. Geisz, P. Stradins, D. L. Young « Progress towards a 30% efficient GaInP/Si tandem solar cell », 5th International Conference on Silicon Photovoltaics, Energy Procedia, vol. 77, pp. 464 – 469, 2015.
- [8] W. El-Huni « Modélisation de cellules solaires multi-tandem bas coût et très haut rendement à base de nitrures des éléments III-V », Thèse de Doctorat, Université Paris-Sud XI, 2016.
- [9] S. Asahi, H. Teranishi, K. Kusaki, T. Kaizu and T. Kita« Two-step photon up-conversion solar cells », Nature communications, vol. 8, pp. 1-9, 2017.
- [10] N.J.L.K. Davis, M.L. Bohm, M.Tabachnyk, F.W.Rivarola,T.C. Jellicoe1, C.Ducati, B. Ehrler and N.C. Greenham« Multiple-exciton generation in lead selenide nanorod solar cells with external quantum efficiencies exceeding 120% », Nature communications, vol. 6, pp. 1-6, 2015.

Chapitre I

Nouvelles cellules pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire

I.1 État de l'art de l'industrie photovoltaïque

Le photovoltaïque qui repose sur la transformation de l'énergie du soleil en électricité, constitue une voie d'avenir ;. Aujourd'hui, l'électricité solaire photovoltaïque devient une réalité économique dans des nombreux pays ou la production électrique cumulée produite par les modules photovoltaïques (PV) installés au niveau mondial a atteint en 2016, 73 gigawatts (GW). (Figure I. 1). [1]. L'Algérie s'éveille petit à petit dans ce domaine de grande concurrence.

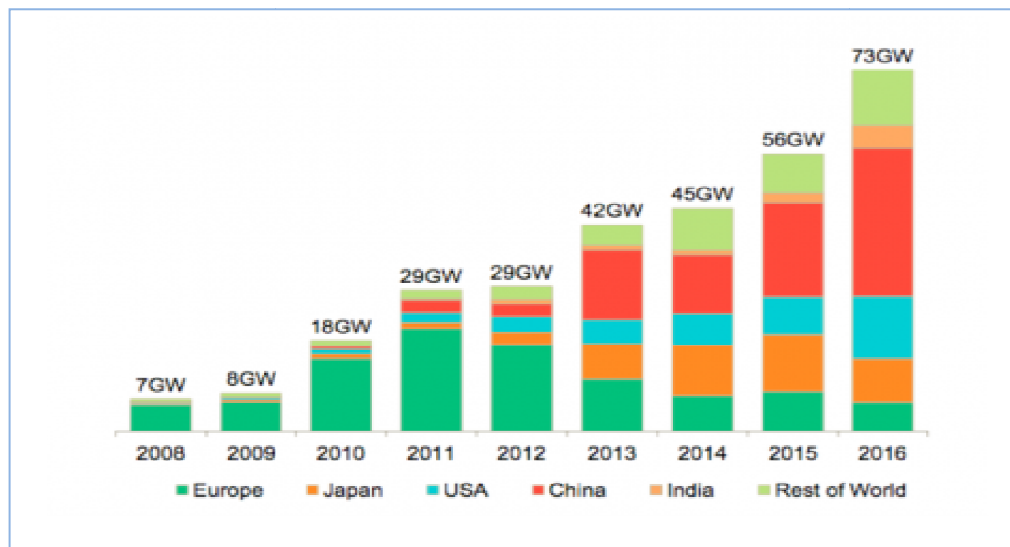


Figure I.1 – Évolution de la production annuelle de modules photovoltaïques depuis 2008[1]

I.2 Fonctionnement d'une cellule solaire

Le rayonnement solaire incident est constitué de photons dont la longueur d'onde s'étend de l'ultraviolet (0,2 mm) à l'infrarouge lointain (2,5 mm), avec une majorité d'entre eux dans le visible (0,4 mm pour le violet, à 0,7 mm pour le rouge) autour d'un pic à 0,6 mm partie verte de la figure I.2 [2].

La puissance de ce rayonnement est d'environ 1360 W/m^2 hors de l'atmosphère (constante solaire) et de 1000 W/m^2 (quand le soleil est au zénith et que le ciel est dégagé) au niveau de la Terre, du fait de l'absorption dans l'atmosphère. D'après la thermodynamique, le rendement de Carnot associé à la conversion de l'énergie solaire en supposant le soleil comme source chaude ($\approx 6000 \text{ K}$) et la terre comme source froide ($\approx 300 \text{ K}$) est de $\approx 85 \%$.

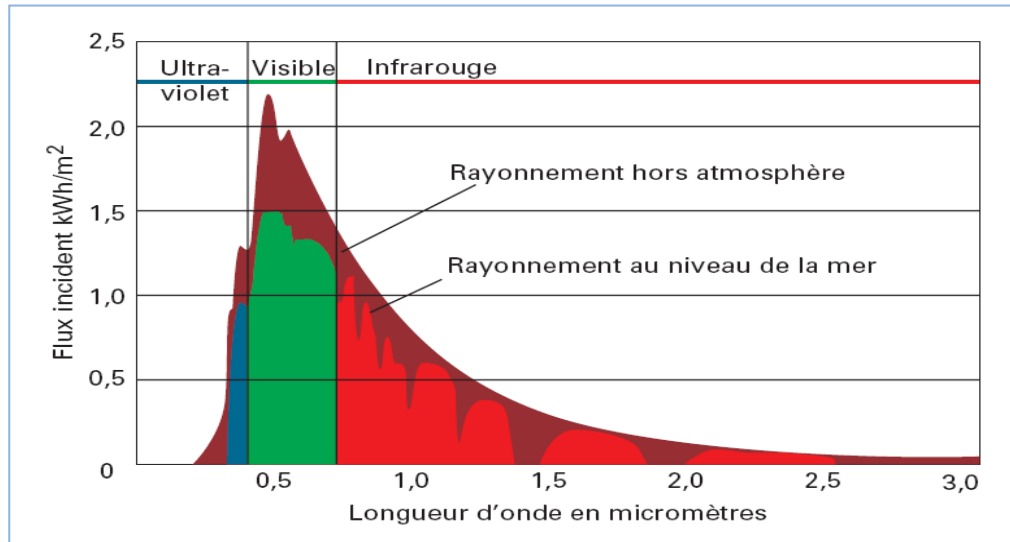


Figure I.2 – Rayonnement solaire incident hors atmosphère et au niveau de la mer [2]

La conversion photovoltaïque (PV) est précisément la transformation de l'énergie de la radiation lumineuse en énergie électrique (effet photoélectrique) grâce au processus d'absorption de la lumière par le semi-conducteur (SC). Les photons absorbés créent une paire électron-trou, les porteurs de charges ainsi photo générés sont ensuite séparés et collectés vers un circuit extérieur.

Dans la cellule solaire, la séparation des porteurs de charges se fait grâce à la jonction p-n. figure I.3.

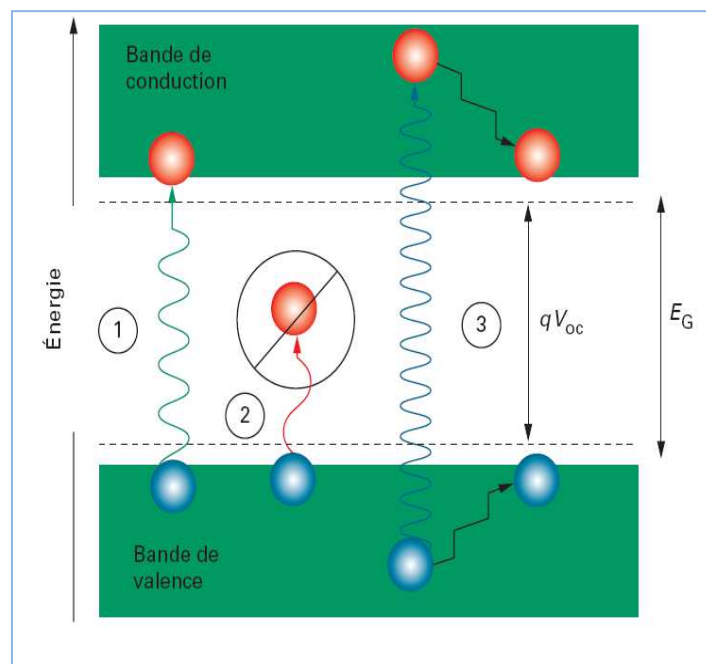


Figure I. 3 – Schéma de principe de création d'une paire électron trou[2]

Il s'agit de la juxtaposition de silicium avec un excès de trous (ou un défaut d'électrons) dû au dopage par un élément de la colonne III du tableau périodique, le silicium type p, avec du silicium de type n, qui comporte un excès d'électrons en raison du dopage par un élément de la colonne V. Généralement, la zone de type p est uniformément dopée au bore à hauteur de 10^{16} cm^{-3} , et forme la quasi-totalité de l'épaisseur de la plaquette, tandis que la zone de type n est fortement dopée au phosphore (densité de dopant supérieure à 10^{20} cm^{-3}). La juxtaposition des zones p et n forme un champ électrique, qui repousse les électrons vers la zone n et les trous vers la zone de type p. A la jonction de ces deux parties, il y a alors une déplétion en porteurs de charge, c'est la zone de charge d'espace (ZCE), figure I.4.

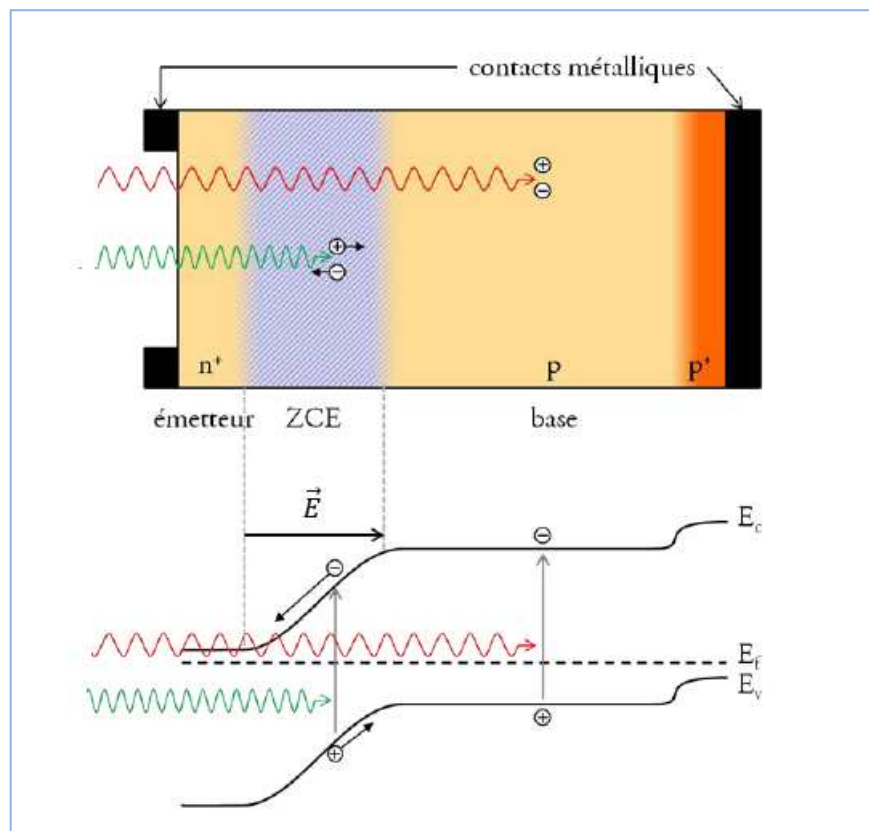


Figure I. 4 – Schéma d'une cellule solaire (haut) et schéma de la structure de bandes correspondant[3]

Lors de l'absorption d'un photon, un électron de la bande de valence du semi-conducteur va être excité et se retrouver en bande de conduction, laissant un défaut d'électron dans la bande de valence. Deux porteurs de charge mobiles sont donc générés, l'électron et le trou. Si cela se produit hors de la ZCE, les porteurs minoritaires (électrons dans le type p et trous dans le type n) vont diffuser dans le

matériau jusqu'à se recombiner ou arriver à la ZCE. Si un porteur se trouve dans la ZCE, que ce soit parce qu'il y a été généré ou qu'il s'est déplacé jusque là, le champ électrique le poussera vers la zone où il sera majoritaire : les électrons vers la zone n et les trous vers la zone p. Les charges sont ensuite collectées par des contacts métalliques sur les faces avant et arrière de la cellule. On aura un photo courant de génération. Le courant délivré sur une charge par une cellule photovoltaïque éclairée s'écrit:

$$I(V) = I_{ph} - I_{obsc}(V) \quad I.1$$

Avec: I_{ph} : densité de courant photo généré et I_{obsc} : densité de courant d'obscurité. Pour une cellule photovoltaïque idéale, l'équation (I.1) peut être écrite sous la forme suivante:

$$I(V) = I_{ph} - I_0 (\exp(qV/kT) - 1) \quad I.2$$

où

I_{ph} : est le courant photo généré

I_0 : le courant de saturation de la diode

q : la charge de l'électron

k : la constante de Boltzmann

T : la température en Kelvin

Ainsi, dans une cellule photovoltaïque, deux courants s'opposent: le courant d'éclairement et un courant de diode appelé courant d'obscurité qui résulte de la polarisation du composant. La caractéristique d'une cellule sous obscurité est identique à celle d'une diode. Sous éclairement, la caractéristique a l'allure présentée sur la figure I.5.

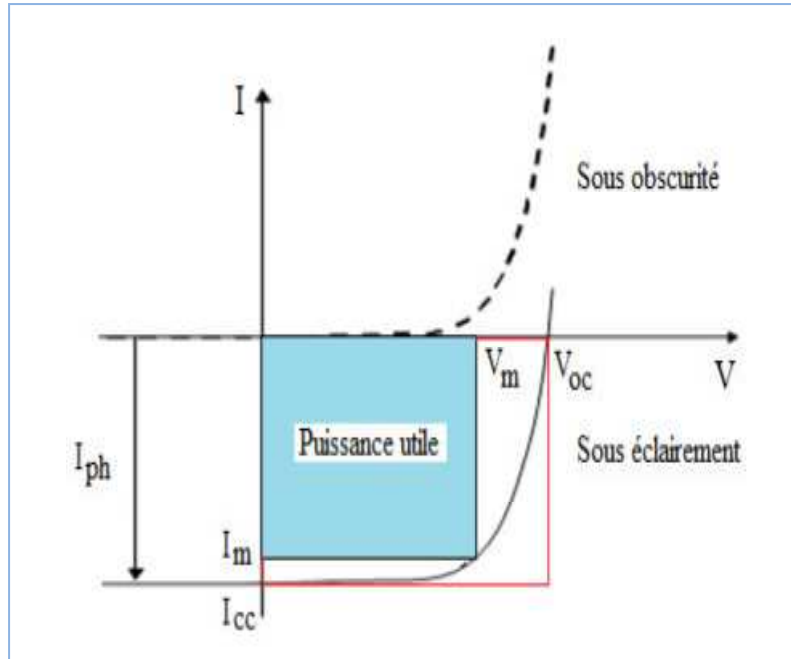


Figure I. 5 – Caractéristique courant-tension sous éclairage typique d'une cellule solaire[4].

Le rendement de conversion est donné par l'équation

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_i} = \frac{FF \cdot I_{cc} \cdot V_{co}}{P_i} \quad \text{I.3}$$

Où

- Le courant de court-circuit I_{cc} ($V=0$)
- La tension en circuit ouvert V_{co} ($I=0$)
- La puissance incidente P_i
- La puissance maximale : elle est le produit de la tension maximale (V_m) et le courant maximale (I_{max}). Elle est défini par la relation suivante: $P_{max} = V_m \cdot I_m$
- Le facteur de forme : le facteur de forme ou FF (Fill Factor) représente l'efficacité de la cellule solaire. C'est le rapport entre la puissance maximale débitée $V_m \cdot I_m$ (la surface du plus petit rectangle) et la puissance idéale $V_{co} \cdot I_{cc}$ (la surface du plus grand rectangle) [4]. Où V_m et I_m sont les valeurs de tension et du courant correspondant au point de fonctionnement pour lequel la puissance, qui est égale à $U \cdot I$, est maximale. Le FF, est donné par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad \text{I.4}$$

I.3 Facteurs limitant la conversion

Plusieurs facteurs limitent le rendement des cellules photovoltaïques. Il y a ceux inhérents à l'architecture de la cellule et à ses contacts (pertes ohmiques) et il y a ceux intrinsèques au matériau semi-conducteur utilisé. D'après la figure I. 4, deux types de pertes essentielles sont présents dans les cellules solaires à simple jonction (un seul matériau = un seul gap) :

- ✓ Les photons dont l'énergie est inférieure à E_G (processus 2 de la figure I.3) sont totalement perdus pour la conversion ;
- ✓ les photons d'énergie supérieure au gap (processus 3 de la figure I.3) ne transfèrent qu'au mieux la valeur de l'énergie du gap, le reste est cédé au réseau atomique sous forme de chaleur (en des temps très brefs $\approx 10^{-12}$ s). Par exemple, un photon vert d'une énergie de 2 eV ne va donner au mieux que 1 eV d'énergie électrique dans une cellule au silicium.

En tenant compte uniquement de ces deux considérations, le rendement de conversion théorique limite, établie par Shockley et Queisser en 1961[5], a été estimé à 31 % pour une cellule constituée d'un seul matériau semi-conducteur à gap optimum sans concentration du rayonnement solaire. Le rendement de conversion d'énergie des dispositifs réels à base d'un seul matériau semi-conducteur (silicium, germanium, GaAs, CdTe...) atteint 25 %.

Plusieurs approches développées actuellement cherchent à limiter fortement les pertes et à trouver des processus permettant de collecter l'énergie perdue par des mécanismes spécifiques, optiques ou électriques. Ces approches peuvent être différenciées par les procédés employés tels que [6]:

- ✓ L'empilement de plusieurs matériaux possédant des gaps décroissants permettant ainsi de collecter une plus large partie du spectre solaire. C'est ce qui est fait actuellement avec les cellules à multi-jonctions (MJC ou tandem) à base d'Arséniure de Gallium qui atteignent plus que 40 % de rendement mais sous lumière fortement concentrée moyennant des lentilles adaptées. Dans ce cas, le rayonnement solaire est concentré sur 1 à 2 cm². La combinaison des cellules à multi-jonctions sous concentration est la seule voie qui a effectivement montré un rendement dépassant la limite de 31 %. Elle est cependant difficile à mettre en œuvre technologiquement et est plus réservée aux applications spatiales [7];

- ✓ La modification du matériau absorbant par l'introduction de niveaux d'énergie dans le gap, servant à convertir efficacement les photons de faibles énergies. C'est le principe de la **cellule à bande intermédiaire (IBC)** ;
- ✓ la modification du spectre solaire avant son interaction avec la cellule ; les photons incidents sont convertis en photons dont l'énergie est effective pour créer des paires électron-trou. Par exemple, deux photons infrarouges donnent un photon visible (principe appelé **up** conversion), ou un photon bleu donne deux photons jaunes (principe appelé **down** conversion DC) ;
- ✓ la génération de plusieurs électrons à partir d'un seul photon (cellules à multiplication d'excitons ou MEG) ;
- ✓ la collecte directe de l'énergie des photons sans pertes (cellule à porteurs chauds ou HCC).

Il y a plusieurs approches éventuellement pour réaliser de manière explicite les concepts de cellules citées plus haut, dont certaines font intervenir les nanomatériaux ou la nano-structuration [8].

I.4 Différents types de filières technologiques des cellules photovoltaïques

I.4 .1 La filière silicium

Il existe différentes générations de modules photovoltaïques, la première génération des cellules solaires à base des plaquettes (150-300 mm d'épaisseur) en silicium cristallin (monocristallin ou poly-cristallin) domine le marché photovoltaïque représentant ensemble de l'ordre de 88 % de la production totale de modules PV figure I.6 [9].

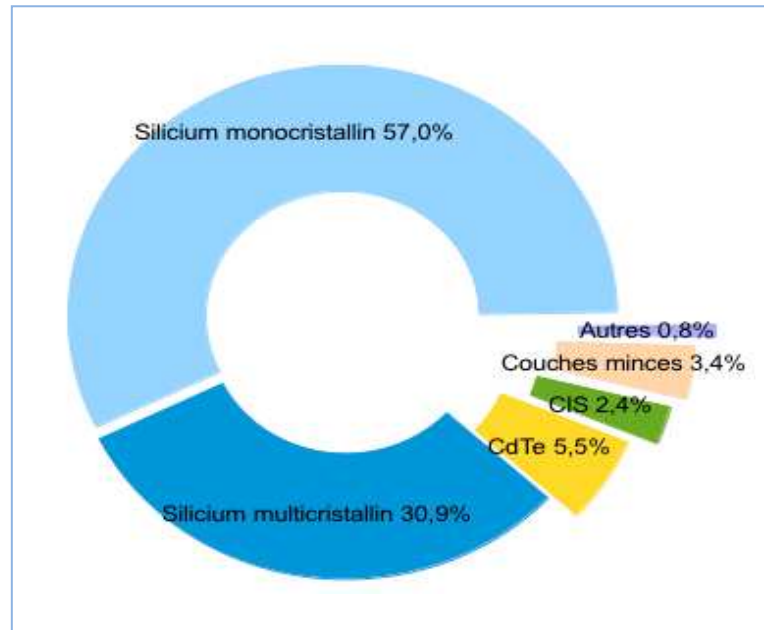


Figure I. 6 – Répartition de la production de modules par matériau en 2011[9]

Cette génération de modules doit son succès à la disponibilité du silicium, à la maîtrise des procédés de fabrication et à l'automatisation des étapes. Elle permet d'obtenir un rendement de conversion de 18 à 24 % en laboratoire et de 15 à 20 % en production industrielle, suivant la cristallographie du silicium.

La deuxième génération des cellules solaires à base des couches minces en matériaux semi-conducteurs simple (silicium amorphe et microcristallin) ou composé (cuivre-indium-gallium-sélénium CIGS, tellure de cadmium CdTe...). Elle permet d'obtenir un rendement de conversion de (de 10 à 18 %). Le principe des cellules en couches minces est d'utiliser un matériau absorbeur ayant un coefficient d'absorption optique élevé par rapport au Si cristallin. Dans ce but, des matériaux à gap direct sont généralement utilisés (le Si ayant un gap indirect). Il en résulte la possibilité d'utiliser des matériaux absorbeurs beaucoup plus fins, de l'ordre de 2 μm d'épaisseur (100x moins que le Si cristallin), réduisant ainsi la quantité de matière première nécessaire. Ces cellules possèdent divers avantages et inconvénients [9]:

- Elles permettent de fabriquer des modules d'une surface plus importante (4 voire 6 m^2), qui peuvent même être ensuite découpés
- Elles ne craignent pas l'échauffement qui peut faire chuter le rendement des modules cristallins autour de 60°C, ce qui les rend plus aptes à l'intégration.

- Elles captent mieux le rayonnement diffus et sont donc mieux adaptées à certains sites en phase industrielle, leur coût est en principe moins élevé.
- industrialisation moins avancée.
- matières premières limitées et en concurrence avec d'autres usages.
- toxicité des matériaux.
- recyclage plus complexe.

I.4 .2 La filières Nano-cristaux semi-conducteurs

Afin de réduire les coûts matière et d'ouvrir de nouvelles applications, une troisième génération de cellules photovoltaïques, associée éventuellement à la deuxième, a la prétention d'atteindre des très hauts rendements ($> 30\%$) et à réduire le coût. Pour atteindre des rendements de conversion aussi importants, le composant photovoltaïque doit contourner la limite théorique de Shockley-Queisser des composants à simple bande interdite qui limite le rendement à 30% [3], suivant le niveau de concentration de la lumière sur la cellule PV. Plusieurs concepts sont envisagés pour atteindre cet objectif [10]:

- Cellules à porteurs chauds.
- Cellules à multi-génération d'excitons (MEG).
- Cellules à conversion de photons.
- Cellules à bande intermédiaire (IBC).
- Cellules à multi-jonction (MJC) ou tandem.

Dans ce chapitre, nous présentons les concepts et les défis des cellules photovoltaïques de troisième génération et les matériaux nano-structurés qui peuvent approcher les limites thermodynamiques pour la conversion de l'énergie solaire.

I.4.2.1 Cellules à multi-jonction (MJC) ou tandem

Le principe de la cellule solaire à multi-jonction (ou tandem) est l'empilement de plusieurs cellules de gaps décroissants, chacune optimisée pour une partie différente du spectre solaire. Le plus haut rendement expérimentalement obtenu avec cette approche a été réalisé avec des monocristaux en semi-conducteurs III-V (combinant un élément de la colonne III-b et un de la colonne V-b de la classification périodique). La croissance monolithique de l'empilement est effectuée par des

procédés d'hétéro-épitaxie, consistant en une reproduction de la structure cristalline et du paramètre de maille lors de la croissance, même en changeant de matériau. En utilisant par exemple une triple jonction en GaIn/GaInS/Ge obtenue par épitaxie à jet moléculaire, il a été possible d'atteindre un rendement supérieur à 40 % sous une concentration de 240 soleils, avec un potentiel vers 50 % en cas de maîtrise parfaite de la croissance et adaptation des courants de sortie des cellules connectées en série. Cependant, compte tenu de leur coût de fabrication lié essentiellement au type de matériaux (semi-conducteur III-V) et des méthodes (l'épitaxie par jet moléculaire...), ces cellules ne sont attractives économiquement que dans le cas d'une utilisation sous concentration[11].

Ce concept devrait pouvoir être étendu à des systèmes moins chers et/ou plus exploratoires. L'approche la plus pertinente pourrait être la cellule tandem à base de silicium nanocristallin pour tirer avantage du confinement quantique (figure I.7).

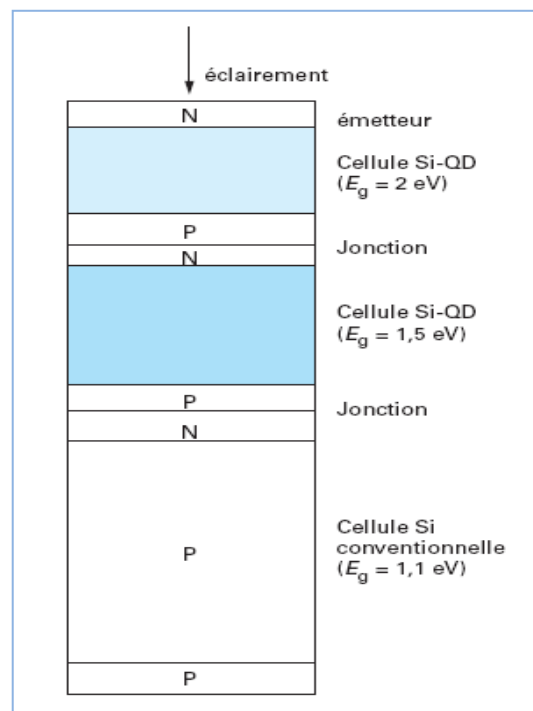


Figure I.7– Schéma d'une cellule tandem « tout silicium »[11]

L'ingénierie de la bande interdite peut se faire en utilisant des puits quantiques (QW) ou des boîtes quantiques (QD) en silicium de différentes dimensions insérés dans des couches de diélectriques tels que SiO₂, SiN ou SiC. Le concept exploite la variation

de la bande interdite du semi-conducteur en fonction des dimensions de l'objet du fait du confinement quantique. Pour des QW ou QD très rapprochés, une vraie mini bande énergétique est formée créant effectivement un matériau à plus grand gap. Par exemple, pour des QD de 2 nm (QW de 1 nm), un gap effectif de 1,7 eV peut être obtenu, idéal pour une cellule tandem sur silicium [10]. Les avantages évidents sont de ne pas utiliser de produits rares ni de produits toxiques, d'employer les technologies de la microélectronique et de faciliter le recyclage. Les films diélectriques contenant les nanoparticules peuvent être formés par pulvérisation ou dépôt chimique en phase vapeur (CVD) suivi d'un recuit à températures élevées pour cristalliser les QD). Les QW en silicium peuvent être formés par croissance CVD en utilisant comme catalyseur des métaux comme l'or. Des calculs ont montré que ce type de cellules pourrait fournir des rendements dépassant 50 % dans le cas de trois jonctions, bien supérieurs à la valeur théorique optimale de 31 % pour le silicium massif. Plusieurs études sont encore en cours pour valider le concept et concernent l'ingénierie des procédés (maîtrise de la taille, de la densité, des distances...), la réduction des défauts de structure et la fabrication des cellules [13].

I.4.2.2 Cellules à bande intermédiaire (IBC)

Ce sont les cellules qui font essentiellement l'objet de notre étude. L'approche consiste à introduire un ou plusieurs niveaux d'énergie dans la bande interdite de manière à ce qu'ils absorbent les photons de faible énergie, en parallèle avec le fonctionnement normal de la cellule à simple gap. Cela réduit fortement les pertes notées 2 dans la figure I.3. Ces sous-bandes absorbantes additionnelles peuvent exister sous forme de niveaux d'énergie discrets ou sous forme d'une bande continue semi-métallique, isolée des bandes de conduction et de valence de la cellule principale. Un tel composant a le même rendement théorique limite que celui d'une cellule tandem à trois niveaux 63 % sous concentration maximale, 48 % sous 1 soleil.

Parmi les tentatives de réalisation des cellules à niveaux intermédiaires, on peut citer l'utilisation de multiples puits quantiques (MQWSC) [14]. Les figures I.8a et I.8b montrent respectivement la structure et le schéma du diagramme de bande d'une cellule incluant deux puits quantiques. Les puits quantiques sont des couches de quelques nanomètres d'épaisseur d'un matériau à faible énergie de bande interdite

(BI) dans un matériau à grande énergie de bande interdite. Ceci étend l'absorption de la structure en dessous de l'énergie gap du matériau massif puisque ces photons de plus faibles énergies peuvent également générer des paires électrons-trous [13].

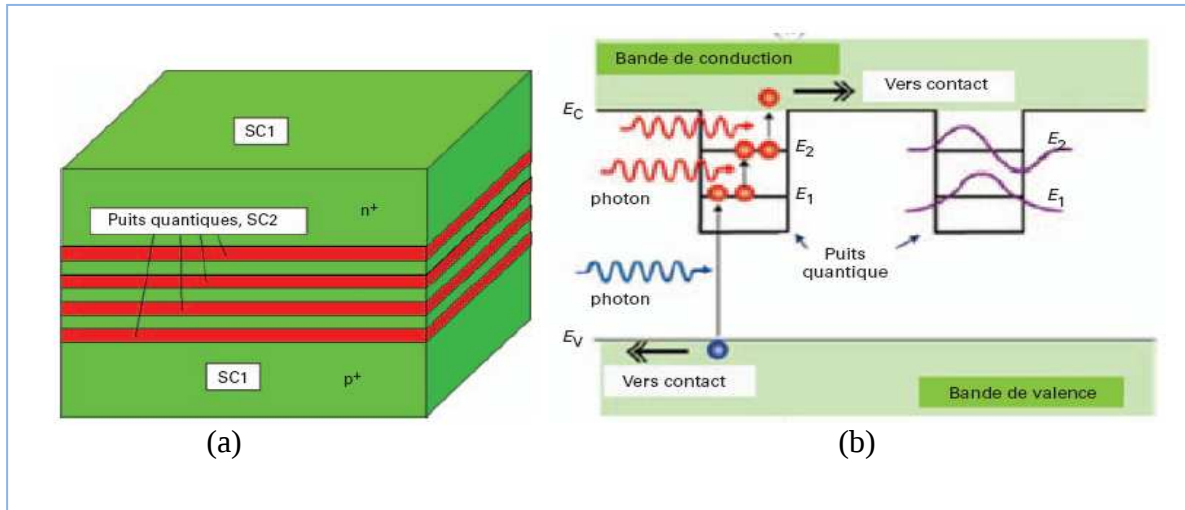


Figure I. 8– Structure d'une cellule solaire à puits quantiques et le schéma de son diagramme de bande d'énergie[14]

Plusieurs structures ont été réalisées expérimentalement (par épitaxie par jet moléculaire MBE, par exemple), en particulier par l'insertion de multicouches nanométriques de semi-conducteurs InGaAs, InAsP ou de InGaAsP séparées par des couches nanométriques de semi-conducteur InP ou GaAs. Cependant, le rendement de ces cellules est très faible en partie à cause de la différence d'accord de maille entre les multicouches qui induit des défauts cristallographiques. Pour palier en partie à ce problème technique de croissance mais également pour améliorer la probabilité de transition des porteurs et réduire la recombinaison radiative, des structures consistant en puits quantiques à différentes bandes interdites ont été fabriquées en variant les matériaux ou la composition pour un même matériau. Ceci a pour conséquence de compenser les contraintes mais rend la fabrication encore plus compliquée et plus coûteuse [16].

Les travaux se sont alors orientés vers le développement de structures photovoltaïques à base de boîtes quantiques (QD pour quantum dots). Dans le cas particulier où les boîtes quantiques sont suffisamment proches spatialement les unes des autres, leurs fonctions d'onde respectives se confondent (voir figure I.9a), ce qui

donne naissance à une bande métallique (virtuelle) intermédiaire qui serait à moitié pleine. Ainsi, des photons de plus faible énergie pourraient facilement être absorbés et donc participer à la création de porteurs supplémentaires. Dans ce cas, des rendements dépassant 55 % sont théoriquement possibles (figure I.9b), en choisissant correctement la position de l'énergie de la bande intermédiaire, elle-même contrôlée par les propriétés des boîtes quantiques. Les rendements de ces structures sont même bien supérieurs à ceux attendus pour la structure tandem à plusieurs semi-conducteurs de différentes bandes interdites [17].

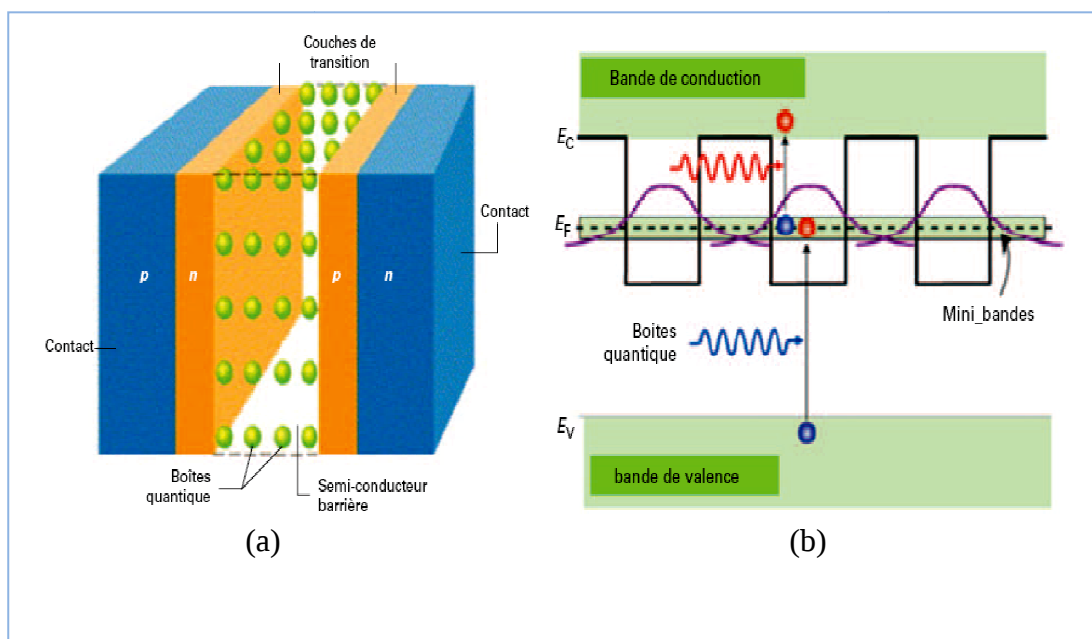


Figure I.9 – Schémas d'une cellule contenant un réseau de boîtes quantiques et de la structure de bande en présence de boîtes quantiques[17]

Le choix des matériaux adéquats d'une part et la réalisation effective d'une telle structure d'autre part sont les facteurs clés de la réussite d'un tel concept. Ce dernier pourrait révolutionner le développement des cellules photovoltaïque de demain. En particulier, l'absorption optique dans les QD et le transport des charges entre eux restent encore à optimiser.

I.4.2.3 Cellules à conversion de photons

La modification du spectre incident par conversion énergétique de photons est un concept très séduisant puisqu'aucune modification de la partie active de la cellule n'est nécessaire mais une simple implémentation de la couche de conversion suffit. Dans le cas du concept de down-conversion (**DC**), il s'agit d'insérer à l'avant de la cellule conventionnelle une couche de conversion générant – idéalement – plus d'une charge par photon incident de grande énergie (figure I.10) ; les photons résultants ont alors une énergie juste au-dessus de la bande interdite du semi-conducteur actif, ce qui correspond à l'absorption la plus efficace énergétiquement. D'un point de vue purement théorique, l'approche DC semble très prometteuse puisque des rendements de 35 à 40 % sous concentration ont été calculés. Cependant, aucun développement expérimental n'a encore atteint ces valeurs [18,19].

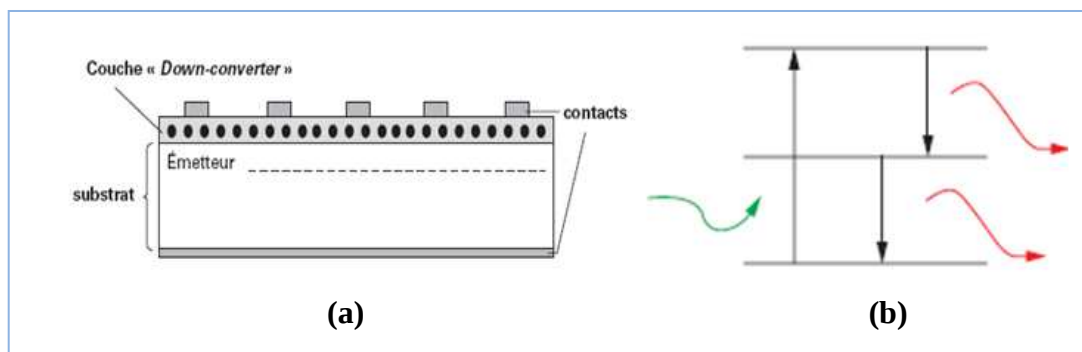


Figure I. 10 – Schémas de la cellule avec modification du spectre par une couche « down-converter » et du principe de la « down conversion pour l'augmentation de la performance des cellules[18]

Il y a plusieurs défis pour implémenter le film DC dans un composant ou module PV. Les cellules solaires encapsulées ont trois couches transparentes au-dessus du composant silicium : une couche antireflet (CAR), l'encapsulant (habituellement de l'acétate vinyle éthylène EVA) et un verre. En conséquence, une couche DC peut être insérée entre (ou incorporée dans) les différentes couches ci-dessus [20].

Le matériau DC idéal pour une cellule solaire absorberait tous les photons d'énergie supérieure à $2 E_G$, et en réémet à une énergie légèrement supérieure à E_G , tout en restant transparent aux photons dans l'intervalle $E_G - 2E_G$ (figure I.10b). Pour les cellules silicium par exemple, la couche DC devrait absorber les photons d'énergie

supérieure à 2,2 eV. En fait, il faut faire une distinction basée sur le nombre de photons émis[20].

Dans le cas d'un seul photon émis avec une énergie décalée vers le rouge, nous parlerons de déplacement photonique (ou down shifter, DS). C'est une conversion assistée par photoluminescence. Ainsi, si la surface de la cellule conventionnelle est recouverte d'une couche qui permet de « convertir » les photons bleus en photons rouges par luminescence via des nano-cristaux semi-conducteurs, alors le rendement de conversion dans la région de forte absorption est augmenté via un décalage de la radiation et/ou une augmentation du photo-courant. Cet aspect pourrait paraître marginal puisque un photon bleu donne un photon rouge, mais cela permet de convertir des photons bleus qui ne participent pas à la conversion auparavant.

Dans le cas de deux photons de faible énergie émis, le rendement quantique est supérieur à 1 et l'effet attendu sur le rendement de conversion serait plus important.

En pratique, des rendements quantiques élevés (mais encore inférieurs à 1) ont été mis en évidence par des phosphores luminescents. Récemment les recherches se sont orientées vers l'utilisation de verres à base de boîtes quantiques (QD). Ces structures QD sont des cristaux semi-conducteurs de tailles nanométriques à partir desquels la longueur d'onde d'émission peut être contrôlée par leur taille due au confinement quantique. Ainsi, l'utilisation d'une couche contenant des QD en CdS (émettant à 610 nm) recouvrant la surface d'une cellule en silicium multi-cristallin a montré une augmentation du courant de circuit de $\approx 28 \%$ et un rehaussement relatif du rendement de $\approx 6 \%$ dans le cas d'un rayonnement AM1.5 diffus. Plus récemment, ce sont des films transparents comprenant des nano-cristaux de silicium (ncSi) qui ont été testés comme couche de conversion. Ainsi, des analyses de photoluminescence à température ambiante sur des couches SiO_2 contenant des nano-cristaux de silicium obtenues par pulvérisation ont mis en évidence des spectres émettant fortement dans le visible, quand excitées à la lumière UV. Les nano-cristaux de silicium peuvent être fabriqués en situ à partir de silicium poreux réduit en poudre et placés dans une suspension liquide siliceuse SiO_2 avant d'être déposés par centrifugation sur la cellule solaire, ou bien in situ par dépôt de couches de nitrure de silicium (SiN_x) riche en silicium et recuit thermique pour assurer la démixtion. Par ailleurs, la multi-

génération d'excitons discutés ci-dessus peut également être adaptée à produire une couche DC [21,22].

Puisque l'émission de nano-cristaux de silicium dans une matrice oxyde telle que SiO₂ est peu efficace, une alternative serait d'associer ces nano-cristaux dans une matrice oxyde dopée par des ions terres rares, comme le néodyme (Nd) par exemple. Dans ce cas, il est connu que les nano-cristaux de silicium permettent une excitation très efficace des ions terres rares. Ceci est vérifié dans le cas de l'erbium (Er) et devrait être vrai dans le cas du néodyme (figure I.11) [23].

L'avantage de la présence des ions Nd est que l'émission de cette terre rare est située à 1064 nm, alors que celle des nano-cristaux se trouve dans le visible moins favorable. Des études fondamentales sont encore nécessaires, même si déjà des tentatives d'implémentation dans des cellules réelles sont menées afin de valider le concept.

L'incorporation effective des éléments terres rares peut se faire lors du procédé qui permet de fabriquer les nc-Si ; par exemple par pulvérisation. Ils peuvent être introduits in situ par pulvérisation, ou ex situ par implantation ionique.

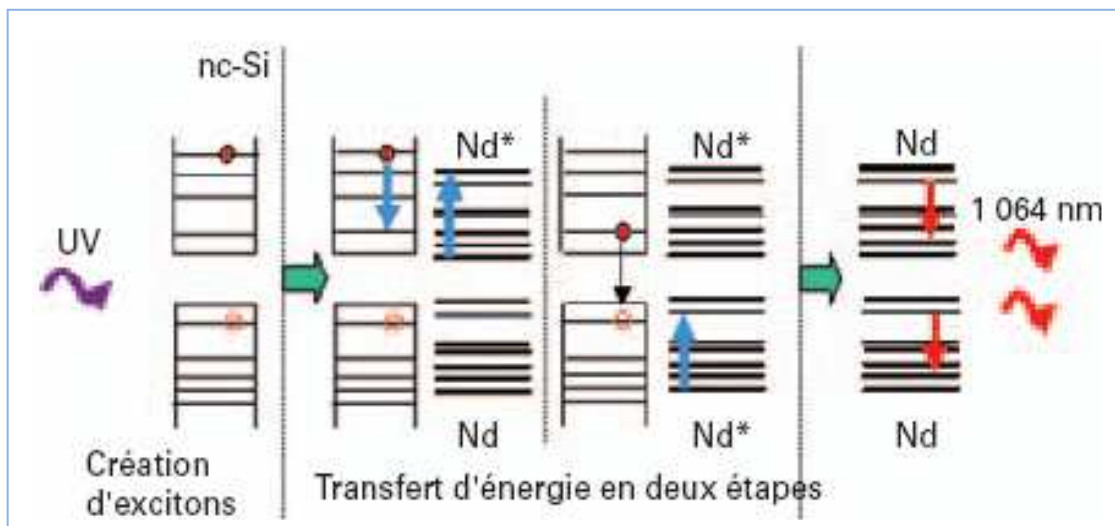


Figure I.11 – Concept de down-conversion dans le cas d'un système ncSi dopé Nd[23]

I.4.2.4 Cellules à multi-génération d'excitons (MEG)

Le concept de multi-génération d'excitons (MEG) est justement basé sur la possibilité d'obtenir plus qu'un exciton (paire électron-trou) à partir d'un seul photon d'excitation. Ceci a été montré très récemment dans le cas de l'excitation d'une boîte quantique (QD) par un photon de grande énergie. En effet, dans un QD de gap E_G , le confinement des porteurs combiné à la forte interaction coulombienne entre les électrons et les trous engendre une augmentation importante du taux des processus Auger. Ainsi un photon de très grande énergie va créer un premier exciton. L'énergie qu'il perd lors de sa désexcitation est fournie au système pour générer un autre exciton, qui en se désexcitant fournit son énergie pour créer un exciton ; et ainsi de suite. Idéalement, un tel composant aurait une tension de sortie $n \times E_G$ et un rendement quantique n fois 100 %, où n est le nombre de paires électron-trou généré par un photon [23].

Ce procédé a été démontré expérimentalement après excitation par un seul photon dans le cas de boîtes quantiques semi-conductrices telles que PbS, PbSe, PbTe, CdSe ou InAs de quelques nanomètres en taille, avec une génération allant jusqu'à 8 excitons pour certaines. Plus intéressant encore est l'observation de la multi-génération d'excitons pour la première fois avec encore des nano-cristaux de silicium. Cette dernière découverte est un pas gigantesque vers la réalisation de cellules photovoltaïques de troisième génération, avec des rendements potentiels de 42 % sous un soleil. En fait, le concept MEG est le seul nouveau concept dont les mécanismes physiques ont été démontrés expérimentalement, même si tout n'a pas encore été compris. Cependant, il reste beaucoup à maîtriser : comment fonctionnaliser ces nanoparticules de semi-conducteurs composés ou de silicium par exemple avec d'autres matériaux et surtout comment dissocier efficacement les excitons en charges élémentaires (électrons et trous séparés) et les amener jusqu'aux contacts [25].

I.4.2.5 Cellules à porteurs chauds

Une autre option pour augmenter le rendement est de permettre l'absorption d'un grand nombre de photons énergétiques et de collecter les porteurs photo-générés avant qu'ils ne se thermalisent (qu'ils ne donnent leur énergie au réseau cristallin sous

forme de chaleur). Le concept sous-jacent de ces cellules est de ralentir la vitesse de refroidissement des porteurs photo-excités et d'assurer leur collecte, alors qu'ils sont « chauds » (à des niveaux d'énergie élevés). Ceci permettra de générer des grandes tensions de sortie. Le système fonctionne en fait comme un élément thermoélectrique idéal, c'est l'un des concepts les plus proposés actuellement. En plus d'un matériau absorbant qui ralentit le taux de relaxation des porteurs, une cellule à porteurs chauds doit permettre l'extraction de porteurs du composant vers les contacts qui n'acceptent qu'un domaine d'énergie étroit (contacts à énergie sélective) comme illustré sur la figure I.12. C'est là que peuvent intervenir les matériaux nano-structurés comme les puits ou boîtes quantiques qui possèdent une distribution d'énergie discrétisée [26].

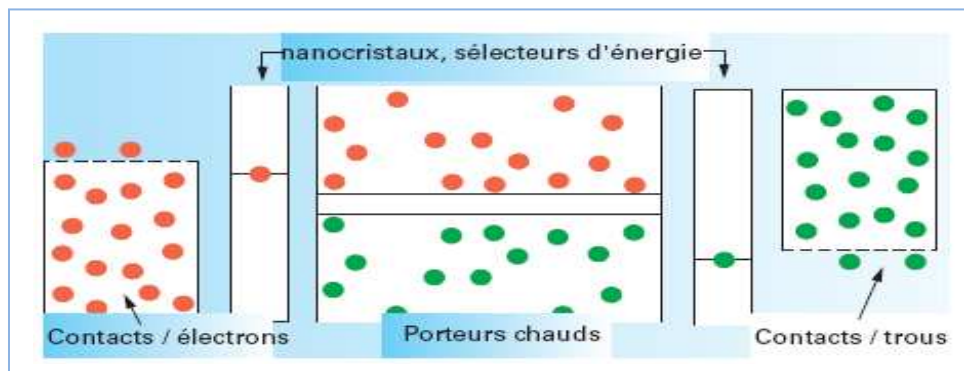


Figure I.12 – Schéma idéal d'une cellule solaire à porteurs chauds[26]

Les défis à relever pour de telles cellules à porteurs chauds sont les suivants :

- ✓ L'absorption et la retardation des mécanismes de thermalisation par rapport aux taux de recombinaison radiatives ;
- ✓ la capacité des contacts à collecter les porteurs chauds sans génération d'entropie.

La possibilité de combinaison de ces différentes propriétés dans un même matériau semi-conducteur, même nano-structuré, est improbable. Concernant les matériaux absorbants, les semi-conducteurs GaN (nitrure de gallium) et InN (nitrure d'indium) ont pu montrer quelques propriétés quant à la relaxation très lente des porteurs. Par ailleurs la diminution de la vitesse de refroidissement des porteurs a été observée dans les super-réseaux (composés de multicouches nanométriques comme pour fabriquer les lasers) à base de semi-conducteurs III-V. Il est apparu que les vitesses de thermalisation peuvent saturer dans certaines nanostructures à un niveau suffisant

d'illumination. Les contacts à porteurs chauds peuvent être assurés par des boîtes quantiques car on peut moduler les positions des niveaux d'énergie en fonction de leur taille et de leur forme géométrique. Le plus difficile technologiquement est d'assurer un bon accord de maille, lors de la croissance cristalline, entre l'absorbant et le contact[27].

Si l'on prend en compte la thermalisation des porteurs dans les modèles de cellule à porteur chauds, on obtient des rendements qui pourraient dépasser 50 % sous concentration de lumière dans des matériaux technologiquement accessibles. Cette valeur de rendement correspond à une faisabilité à la limite des possibilités actuelles. Enfin, le rendement de conversion est très sensible à la largeur énergétique des contacts au-delà de quelques meV, car ils introduisent alors une perte thermique par transfert de chaleur. Il faut cependant noter que les expériences et les modélisations sont difficiles et tout cela prendra du temps avant que les cellules à porteurs chauds ne soient disponibles[28].

I.4.3 La filière des cellules organiques

L'effet photovoltaïque a été observé dans les matériaux organiques depuis plus de 40 ans, les premières cellules présentaient des très faibles rendements de l'ordre de 10^{-5} %. En 1978, Merritt [29] prévoyait que le rendement (η) pourrait dépasser 1%, mais ce n'est qu'en 1986 avec les travaux de Tang [30] que ce rendement a été atteint $\eta = 0.95\%$. Cette valeur a parfois été reproduite avec des matériaux différents dans les années qui ont suivi, [31] mais elle n'a jamais été améliorée. Ce n'est que depuis le début du XXI^{ème} siècle que le rendement a recommencé à croître, atteignant 2,5 % avec les travaux publiés par Shaheen et al [32], 3,6 % avec ceux de Peumans et al [33] sous éclairement AM1,5 avec une puissance lumineuse de 100 mW.cm^{-2} et 4,2 % avec une double hétéro structure de fullerène (C_{60}) et de phthalocyanine de cuivre (CuPc) [34].

Les cellules photovoltaïques organiques ont connu le meilleur taux de croissance parmi les différentes filières photovoltaïque durant les 12 dernières années. Les dernières avancées dans le domaine: 13,2 % (taille $1,1 \text{ cm}^2$) Heliatek [35] Heliatek est un des leaders dans la technologie mondial de développement et de production de films organiques solaires à base de petites molécules, par dépôt sous vide dans un

processus continu (roll-to-roll) à basse température. Son développement à grande échelle est aujourd'hui freiné par la faible mobilité des porteurs de charges dans le matériau, limitant le rendement, et la faible durée de vie des cellules. Sur ce dernier point, des améliorations sont attendues dans les procédés d'encapsulation contre la dégradation des cellules qui est principalement due aux réactions avec l'eau et l'oxygène lors d'une exposition à l'air. D'autres recherches portent aussi sur l'optimisation de l'absorbeur et l'utilisation d'architectures multi jonctions.

La cellule photovoltaïque de base est constituée d'une ou plusieurs couches actives entourées par des électrodes. Chaque couche de l'empilement doit vérifier certains critères. La représentation de cet empilement est schématisée sur la figure I-13

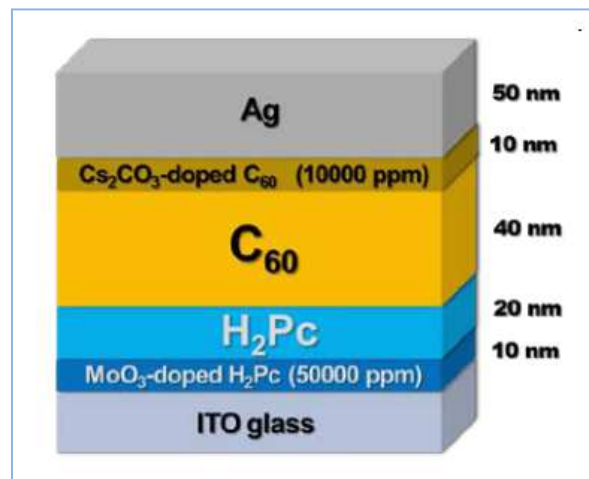


Figure I-13: Structure d'une cellule photovoltaïque organique[36]

Les éléments importants sont :

- ✓ Substrat : rigide (verre) ou flexible (polymère, métal).
- ✓ Anode transparente : généralement composée d'oxyde d'indium dopé à l'étain mais il existe d'autres possibilités (nanotubes de carbone, polymères conducteurs...).
- ✓ Couche active : composée des semi-conducteurs organiques. Lorsqu'il s'agit de petites molécules, elles sont déposées par sublimation sous vide ou par voie humide. Pour des polymères (molécules plus grosses), elles sont déposées par voie humide, notamment des techniques de couchage rotatif ou de jet d'encre.
- ✓ Cathode : Elle est déposée par évaporation sous vide et est le plus souvent composée d'aluminium ou d'argent.

Il faut d'abord vérifier que la lumière incidente ne soit pas absorbée dans les premières couches avant d'atteindre la couche organique. Pour cela on choisit généralement une électrode transparente placée avant la couche organique. Cette électrode transparente est généralement une couche d'oxyde d'Etain et d'Indium (ITO) qui peut être utilisée en tant qu'anode (dans les cellules classiques) ou cathode (dans les cellules inverses). Puis les couches photo actives constituées de semi-conducteurs organiques sont déposées à la suite de cette couche d'oxyde. De plus l'ajout d'une électrode métallique épaisse à la fin de l'empilement permet de réfléchir les rayons lumineux transmis dans l'empilement et de faire traverser une seconde fois la couche active. Sans cette couche métallique l'absorption serait diminuée.

I.4.4 La filière des pérovskites

C'est un nouveau type des cellules photovoltaïques. Elle n'est pas encore sortie des laboratoires. La perovskite est une structure cristalline calquée sur celle du titanate de calcium CaTiO_3 . Cette molécule est formée de 8 octaèdres dont le centre de chacun est occupé par un cation (le calcium) et les sommets par des anions (l'oxygène), le titane se trouvant au centre du cristal.

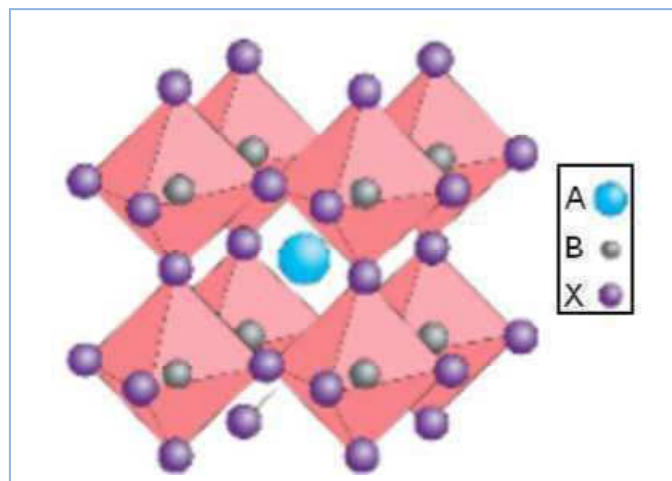


Figure I-14 : Structure d'un cristal de perovskite générique ABX_3

Ses qualités photovoltaïques, la capacité d'absorption des photons 10 fois supérieure au silicium, la bonne séparation des charges électriques et leur mobilité, sont en revanche le fruit d'une découverte très récente. Cette découverte revient à deux experts du domaine : Michael Graetzel, de l'Ecole polytechnique de Lausanne, et Henry Snaith, de l'université d'Oxford. L'université de Toin au Japon a inventé la

première cellule photovoltaïque avec un rendement de 3,8 % en 2009 [37]. Et le record mondial de cette filière a été obtenu par l'Ecole Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) [38]. Mais le grand défi pour les cellules solaires perovskite est la stabilité à long terme et la présence de plomb dans sa molécule.

Mais les cellules à perovskites ne peuvent pas concurrencer le silicium car elles se dégradent à partir de 40°C, et aussi elles sont instable lorsque l'humidité dépasse 35 %. Donc l'intérêt des chercheurs n'est pas toujours de trouver des meilleurs rendements, mais ils cherchent aussi à améliorer la stabilité des ces cellules.

I.5 Conclusion

Le premier chapitre avait pour but de présenter des généralités sur l'industrie photovoltaïque, nous avons vu les différentes filières technologiques des cellules photovoltaïques et l'implication des nanomatériaux et nanotechnologies dans le domaine de la conversion photovoltaïque est en expansion, nous avons décrit aussi la structure et les caractéristiques des cellules photovoltaïques et nous avons explicité le mécanisme mis en jeu dans la conversion photovoltaïque.

Références bibliographiques

- [1] J.J. Wanègue, « L'énergie solaire photovoltaïque : l'une des réponses aux défis énergétiques 21ème siècle. », Master degré, UPMC Sorbonne Université 2011.
- [2] M. Stéphane, «Nouvelles architectures distribuées de gestion et de conversion de l'énergie pour les applications photovoltaïques .»,thèse de doctorat, Université Toulouse III .2009.
- [3] M. Grau, «Réalisation de nouvelles structures de cellules solaires photovoltaïques à partir de couches minces de silicium cristallin sur substrat de silicium préparé par frittage de poudres.»,thèse de doctorat, Institut des Nanotechnologies de Lyon .2013.
- [4] N. Touafek, «Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$. »,thèse de doctorat, Université des frères mentouri - Constantine .2015.
- [5] W. Shockley et H. J. Queisser, « Detailed Balance Limit of Efficiency of p-n Junction Solar Cells », Journal of Applied Physics, vol. 32, p. 510, mars 1961.
- [6] A. Luque and A. Martí, « Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels », Phys. Rev. Lett., Vol. 78, pp. 5014,1997.
- [7] M.A. Green , « Third Generation Photovoltaic's », Advanced solar energy conversion, Springer science business media,ISBN 3540401377,2003.
- [8] D. Lincot, L. Escoubas, J. Francois, J.J.Simon, A. Slaoui, « Nanomatériaux pour la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire », Noel Nanomatériaux, Chapitre 5, pp 193,2013.
- [9] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, « Solar cell efficiency », Progress in Photovoltaics: Research and Applications , vol. 19, N°. 5, pp. 565–572, 2011.
- [10] A. Luque and A. Martí,« The Intermediate Band Solar Cell: Progress Toward the Realization of an Attractive Concept »,Adv. Mater,Vol.22,pp.160–174, 2010.
- [11] D .Lincot. , « La conversion photovoltaïque de l'énergie solaire », Decouverte http://www.photovoltaique.info/IMG/pdf/recherche_et_innovation_Lincot_2008.pdf

- [12] O.Rahli., R.Bennacer., K.Bouhadeb., D.E.Ameziani. , « Three-dimensional mixed convection heat and mass transfer in a rectangular duct: Case of longitudinal rolls », Numerical Heat Transfer; Part A, Vol 59, pp 349-371, 2011
- [13] R.M. Swanson., « The Promise of Concentrators », Photovolt. Res. Appl. Vol 8, 2000.
- [14] R. Strandberg and T. W. Reenaas., « Drift-diffusion model for intermediate band solar cells including photofilling effects», Prog. Photovolt. Res. Appl, Vol. 19, pp. 21–32, Jan. 2011.
- [15] A. Martí, L. Cuadra, and A. Luque., « Partial filling of a quantum dot intermediate band for solar cells», IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 48, pp. 2394–2399, Oct. 2001.
- [16] R. Strandberg and T. W. Reenaas., « Optimal Filling of the Intermediate Band in Idealized Intermediate-Band Solar Cells», IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 58, pp. 2559 - 2565, Aug. 2011.
- [17] S. P . Bremner and C.B. Honsberg , «Intermediate band solar cell with non-ideal band structure under AM1.5 spectrum», IEEE PVSC 38th, 2012.
- [18] H. Shpaisman, O. Niitsoo, I. Lubomirsky and D. Cahen, « Can up-and down-conversion and multi-exciton generation improve photovoltaic's », Sol. Energy Mat. and Solar Cells, Vol. 92, pp. 1541-1546, 2008.
- [19] T. Trupke, M. A. Green and P. WOrfel, « Improving solar cell efficiencies by down-conversion of high energy photons », J. Appl. Phys., Vol. 92, pp. 1668-1674, 2002.
- [20] T. Trupke, M. A. Green and P. WOrfel, « Improving solar cell efficiencies by up-Conversion of sub-band-gap light », J. Appl Phys., Vol. 92, pp. 4117-4122, 2002
- [21] A.C. Atre, A. G. Etxarri, H. Alaeian and J. A Dionne, « Toward high-efficiency solar up conversion with plasmonic nanostructures », J Opt, Vol. 14, pp. 024008, 2012.
- [22] B.S. Richards, « Enhancing the performance of silicon solar cells via the application of passive luminescence conversion layers », Sol. Energy Mat. & Solar cells, Vol. 90, pp. 2329-2337, 2006.
- [23] L. Aarts, B. van der Ende, M. F. Reid, and A. Meijerink, « Down conversion for solar cells in YF_3 : Pr^{3+} , Yb^{3+} », Spectroscopy Lett, Vol. 43, pp. 373-381, 2010.

- [24] M. C. Hanna and A. J. Nozik, « Solar conversion efficiency of photovoltaic and photoelectrolysis cells with carrier multiplication absorbers », *Applied Physics Letters*, Vol.100, pp. 074510, 2006.
- [25] R. Schaller, V. Klimov, « High efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: Implications for solar energy conversion », *Physical Review Letters*, Vol. 92, 2004.
- [26] J. Rodière et al, « Experimental evidence of hot carriers solar cell operation in multi-quantum wells hetero structures », *Appl. Phys. Lett.* Vol.106, pp.183901, 2015.
- [27] F. Chen, A. N. Cartwright, H. Lu, et W. J. Schaff, « Time-resolved spectroscopy of recombination and relaxation dynamics in InN », *Appl. Phys. Lett.* Vol.83, pp.4984-4986, 2003.
- [28] D. Zanato, N. Balkan, B. K. Ridley, G. Hill, and W. J. Schaff, « Hot electron cooling rates via the emission of LO-phonons in InN », *Semicond. Sci. Technol.* Vol.19, pp.1024, 2004.
- [29] J. Bekker, V. Alberts, and M. J. Witcomb, « Influence of selenization techniques on the reaction kinetics of chalcopyrite thin films », *Thin Solid Films*, Vol. 387 pp. 40- 43, 2001.
- [30] V. Y. Merritt, « Organic photovoltaic materials: squarylium and cyanine-TCNQ dyes », *IBM Journal of Research and Development*, Vol.22, pp.353-371, 1978.
- [31] C. W. Tang, « Two layer organic photovoltaic cell », *Applied Physics Letters*, Vol.48, pp.183-185, 1986.
- [32] S. E. Shaheen, C. J. Brabec, N. S. Sariciftci, F. Padinger, T. Fromherz and J. C. Hummelen, « 2.5% efficient organic plastic solar cells », *Applied Physics Letters*, Vol.78, pp. 841-843, 2001.
- [33] P. Peumans and S. R. Forrest, « Very-high-efficiency double-heterostructure copper phthalocyanine/C60 photovoltaic cells », *Applied Physics Letters*, Vol.79, pp.126-128, 2001.
- [34] J. Xue, S. Uchida, B. P. Rand and S. R. Forrest, « Organic small molecule solar cells with a homogeneously mixed copper phthalocyanine: C60 active layer », *Applied Physics Letters*, Vol.84, pp. 3013-3015, 2004.
- [35] M. Y. Chan, S. L. Lai, M. K. Fung, C. S. Lee, and S. T. Lee, « Doping-induced efficiency enhancement in organic photovoltaic devices », *Applied Physics Letters*, Vol.90, pp.023504, 2007.

- [36] M. Hiramoto, M. Kubo, Y. Shinmura, N. Ishiyama, T. Kaji, K. Sakai, T. Ohno and M. Izaki, « Bandgap Science for Organic Solar Cells », Electronics, Vol.03, pp. 351-380, 2014.

- [37] J. Drechsel, B. Männig, F. Kozlowski, M. Pfeiffer, and K. Leo, « Efficient organic solar cells based on a double p-i-n architecture using doped wide-gap transport layers », Applied Physics Letters, Vol.86, pp.244102, 2005.

- [38] G. Dennler, H. J. Prall, R. Koeppe, M. Egginger, R. Autengruber, and N. S. Sariciftci, « Enhanced spectral coverage in tandem organic solar cells », Applied Physics Letters, Vol.89, pp.073524, 2006.

Chapitre II

*Identification des paramètres
géométriques et physiques de IBSC
en utilisant les algorithmes
génétiques*

II.1 Introduction

Outre les transitions de la bande de valence à la bande de conduction qui ont lieu dans les semi-conducteurs sous l'effet du rayonnement, certains matériaux peuvent absorber des photons de plus basse énergie via des niveaux intermédiaires situés dans la bande interdite, qui jouent le rôle d'une "échelle à électrons" [1].

L'un des grands avantages de l'utilisation de ces matériaux est la réalisation d'un dispositif analogue à une multi jonction pour ce qui est des rendements, mais avec la simplicité de l'élaboration d'une simple jonction. Une bonne absorption des niveaux intermédiaires suppose qu'ils soient à moitié occupés (c'est aussi la condition pour la vitesse de recombinaison la plus élevée). Il faut donc chercher des systèmes dans lesquels ces niveaux ont un caractère "métallique", sans pour autant trop accroître la vitesse de recombinaison non radiative. [2,3].

Plusieurs approches ont été proposées pour réaliser pratiquement une IBSC, y compris les puits quantiques, le dopage d'impureté, et les alliages semi-conducteurs dilués [4,5]. Théoriquement avec des matériaux à bande intermédiaire (BI), il est possible d'aller au-delà de la limite d'efficacité de Shockley-Queisser. Un exemple de ces matériaux est ZnTe dopé par l'oxygène (ZnTe:O) [6-8]. La Figure. II.1 montre le diagramme de bande de la structure du dispositif ZnTe:O à base de (IBSC), où la couche P (incorporant les états d'oxygène) est l'absorbeur principal.

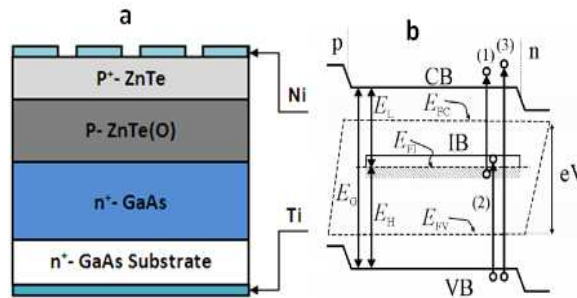


Figure. II.1. Le diagramme de bande de la structure du dispositif ZnTe:O[38]

Cette approche est conçue pour fournir une performance supérieure à celle des cellules solaires à un seul gap en utilisant l'énergie des photons de la sous-bande gap [9,10], caractérisée par l'existence d'une bande intermédiaire (BI) située dans la bande interdite entre la bande de conduction et la bande de valence (BC et BV, respectivement) [9].

En raison de la présence de cette bande (BI) Figure. II.2, les photons ayant moins d'énergie que celle nécessaire pour pomper un électron de la BV à la BC peuvent être absorbés par des transitions qui pompent un électron de la BV à la BI et qui sont également capables de pomper des électrons de la BI à la BC. Ainsi, une transition électronique complète BC vers BV (appelé également génération de paires électron-trou) peut être réalisée au moyen de deux photons d'énergie inférieure à la bande interdite [11,12]. L'amélioration de l'absorption due au mécanisme de collecte de photons plus bas contribue à l'amélioration du photo-courant de la cellule [11].

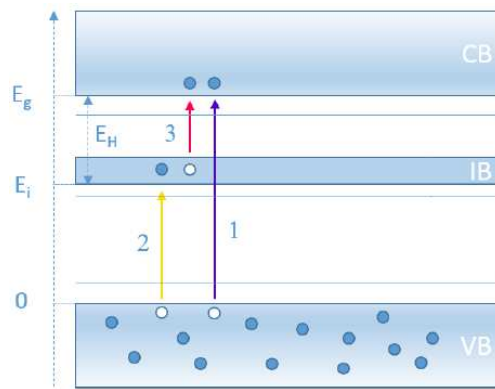


Figure. II.2. Schéma de la cellule solaire de la bande intermédiaire avec les trois transitions

Dans ce chapitre, l'objectif principal est de proposer une nouvelle approche basée sur les Algorithmes Génétiques qui permet de maximiser la conversion photovoltaïque des IBSC, tout en optimisant les paramètres géométriques et physiques. La modélisation et l'analyse par les algorithmes génétiques sont utilisées pour améliorer ces paramètres et pour étudier systématiquement l'effet de la position énergétique de la BI, la densité de la BI sur le rendement de la cellule.

II.2 Description du modèle

Le modèle dont nous avons appliqué la technique des algorithmes génétiques (AG) est une structure des cellules solaires à bande intermédiaire de type P-i-N, avec les régions d'absorption faiblement dopée et fortement dopée pour les couches N et P pour fixer la tension thermique (V_{bi}) et maintenir une grande tension de circuit-ouvert.

La densité de photo-courant due aux transitions optiques de la bande de valence à la bande de conduction de la structure du dispositif ZnTe:O à base de (IBSC) peut être exprimé sous la forme [12-15]

$$J_{ph} = J_{L0}D[1 - \exp(-1/D)] \quad \text{II.1}$$

$$D = l_c(1 - V_a/V_{bi})/W \quad \text{II.2}$$

Où W est la largeur de l'absorbeur, est J_{L0} la densité du photo-courant à une grande polarisation inverse.

La longueur de collection l_c est définie par : $l_c = l_n + l_p = \mu_n F \tau_{n,tot} + \mu_p F \tau_{p,tot}$.

Où μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et de trous, $\tau_{n,tot}$ et $\tau_{p,tot}$ la durée de vie totale de recombinaison des électrons et des trous, F est le champ électrique, l_n et l_p la longueur de dérive des électrons et de trous.

Les taux de génération des porteurs de charge des photons sont définis dans les équations ci-dessous:

$$G_{IC}(x) = \int_{E_I}^{E_C} \alpha_{IC}(E) I_{li}(E) \exp(-\alpha_{tot}(E)x) dE \quad \text{II.3}$$

$$G_{VI}(x) = \int_{E_V}^{E_G} \alpha_{VI}(E) I_{li}(E) \exp(-\alpha_{tot}(E)x) dE \quad \text{II.4}$$

Où G_{IC} est le taux de génération de la bande intermédiaire à la bande de conduction et G_{VI} le taux de génération à partir de la bande de valence à la bande intermédiaire, $I_{li}(E)$ est la lumière incidente du spectre solaire, E représente l'énergie et α_{IC} , α_{VI} les coefficients d'absorption de la BI à la BC et de la BV à la BI respectivement. La lumière incidente du spectre solaire est donnée par:[12]

$$I_{li}(E) = f_s X \frac{2\pi}{h^3 C^2} \frac{E^2}{\exp\left(\frac{E}{KT_s}\right) - 1} \quad \text{II.5}$$

Où $f_s = 1/46050$ est l'angle solide sous-tendu par le soleil, X est la concentration de l'énergie solaire, et $T_s = 5963 \text{ K}$ est la température du soleil, K est la constante de Boltzmann, C est la vitesse de la lumière, et h la constante Planck.

Les coefficients d'absorption pour les transitions optiques dépendent de l'occupation des porteurs dans les états électroniques intermédiaires, représentés par [12,16]:

$$\alpha_{IC} = \alpha_{IC0} f, \alpha_{VI} = \alpha_{VI0}(1 - f) \quad \text{II.6}$$

Où α_{IC} et α_{VI} sont les coefficients d'absorptions de la BI à la BC et de la BV à la BI respectivement, f caractérise le remplissage de la bande BI.

Cette formule représente l'effet de remplissage des électrons dans la BI sur le processus d'absorption, où la présence d'un électron (trou) est nécessaire pour BI (BV) à BC (BI).

Les constantes de coefficient d'absorption α_{IC0} and α_{VI0} représentent la force d'oscillation pour les transitions et la densité des états dans les bandes énergétiques.

Les Coefficients d'absorption optique et la durée de vie totale de recombinaison sont donnés par les relations linéaires suivantes: [12,16,25,26]

$$\alpha_{IC} (Ni) = \alpha_{IC0} f = \sigma_{opt,n} Ni f \quad \text{II.7}$$

$$\alpha_{VI} (Ni) = \alpha_{VI0} (1-f) = \sigma_{opt,p} Ni f \quad \text{II.8}$$

$$\tau_{tot}(Ni) = 1/C_p Ni \quad \text{II.9}$$

Où $\sigma_{opt,n}$, $\sigma_{opt,p}$ sont les ouvertures de la fenêtre optique pour les électrons et les trous respectivement. C_p est le coefficient de capture, τ_{tot} c'est la dure de vie totale de recombinaison et Ni la densité des états électroniques de la bande intermédiaire.

La densité de courant d'obscurité peut être exprimée par :

$$I_o = I_{diff} + I_{r,CV} + I_{r,Ci} + I_{nr} \quad \text{II.10}$$

Le premier terme I_{diff} est le courant de diffusion représentée par:

$$I_{diff} = \left(\frac{qn_i^2 D_n}{W_p N_D} + \frac{qn_i^2 D_p}{W_n N_A} \right) \left(\exp \left(\frac{qV_a}{KT} \right) - 1 \right) \quad \text{II.11}$$

Où V_a est la polarisation appliquée, W_p et W_n sont la largeur des couches d'émetteur de type p et n , N_A et N_D sont la densité de l'accepteur et donneur, n_i c'est la densité intrinsèque, D_n et D_p sont les coefficients de diffusion des électrons et des trous.

Le terme $I_{r,CV}$ est la densité du courant radiative donnée par [12-19].

$$I_{r,CV} = q \frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{E_g}^{\infty} E^2 (1 - \exp(W\alpha_{vc})) \exp\left(\frac{-E}{KT}\right) dE \times \left(\exp\left(\frac{qV_a}{KT}\right) - 1\right) \quad \text{II.12}$$

La densité du courant de recombinaison radiative due à l'IB peut être décrite par [17-23]

$$I_{r,CI} = I_{0,r,CI} \left(\exp \frac{qV_a(1-\xi)}{KT} - 1 \right) \quad \text{II.13}$$

Où

$$I_{0,r,CI} = q \frac{2\pi}{h^3 c^2} \int_{E_I}^{E_C} E^2 (1 - \exp(W\alpha_{Ic})) \exp\left(\frac{-E}{KT}\right) dE \quad \text{II.14}$$

Le paramètre ξ est déterminé en faisant correspondre les densités de courant de recombinaison des électrons et des trous via BI dans l'obscurité, Le paramètre ξ est une valeur comprise entre 0 et 1 dans l'obscurité.[12 17]

Le dernier terme pour la densité du courant de recombinaison non radiative I_{nr} peut être donné :

$$I_{nr} = \frac{qn_i W}{2\tau_{tot}\gamma} \left(\exp\left(\frac{qV_a}{KT}\right) - 1 \right) \quad \text{II.15}$$

Généralement une valeur de 10 est attribuée à γ correspondant à un rendement radiatif de 90%, qui est une valeur typique pour un matériau semi-conducteur à bande interdite directe tels que GaAs.[12 18]

La densité du courant totale est déterminée par la somme du courant d'obscurité, du photo-courant de la bande de valence à la bande de conduction et des transitions radiatives de la bande intermédiaire.

$$I = I_D - (I_{ph} + I_{ph;IB}) \quad \text{II.16}$$

Le rendement de conversion d'une cellule solaire est le rapport de la puissance maximale pouvant être extraite sur la puissance incidente.

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_s} = \frac{FF \cdot I_{cc} \cdot V_{co}}{P_s} \quad \text{II.17}$$

Où

- Le courant de court-circuit I_{cc} ($V=0$)
- La tension en circuit ouvert V_{co} ($I=0$)
- La puissance maximale : elle est le produit de la tension maximale (V_m) et le courant maximale (I_m). Elle est définie par la relation suivante: $P_{max} = V_m \cdot I_m$
- Le facteur de forme FF : C'est le rapport entre la puissance maximale fournie par la cellule sur le produit $I_{cc} \cdot V_{oc}$. Il est défini par la relation suivante:

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{co} \cdot I_{cc}} \quad \text{II.18}$$

II.3 Identification des paramètres en utilisant les algorithmes génétiques

II.3.1 Méthodologie de calcul

Notre objectif est de maximiser l'efficacité de la cellule IBSC, pour ce faire, nous avons utilisé une stratégie d'optimisation basée sur un algorithme génétique (AG) appliqué pour déterminer les paramètres géométriques et physiques de la cellule solaire. Nous décrivons brièvement la base AG utilisé dans notre processus d'optimisation, résumant les principales étapes.

Les algorithmes génétiques tentent de simuler le processus d'évolution naturelle suivant le modèle darwinien dans un environnement donné. Ils utilisent un vocabulaire similaire à celui de la génétique naturelle. Cependant, les processus naturels auxquels ils font référence sont beaucoup plus complexes. On parlera ainsi d'individus dans une population. L'individu est représenté par un chromosome constitué de gènes qui contiennent les caractères héréditaires de l'individu. Les principes de sélection, de croisement, de mutation s'inspirent des processus naturels de même nom. La figure II.3 représente un Schéma général d'un algorithme génétique [27,30].

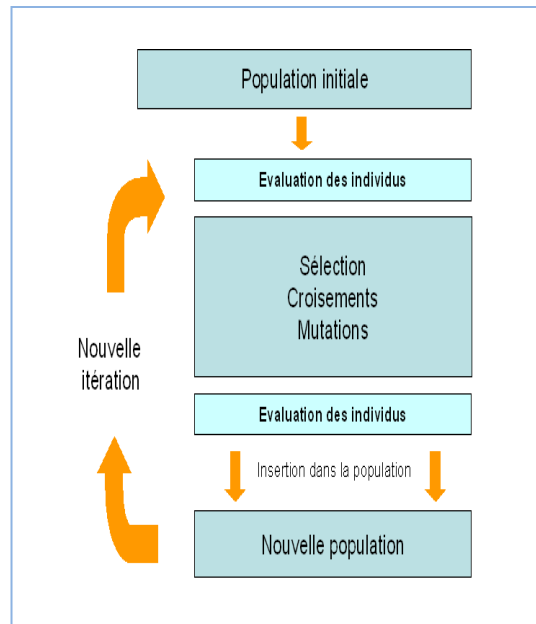


Figure II.3 : Schéma général d'un algorithme génétique[30].

II.3.2 Principe de fonctionnement des algorithmes génétiques

Un algorithme génétique recherche le ou les extrema d'une fonction définie sur un espace de données. Pour l'utiliser, on doit disposer des cinq éléments suivants:

1. Un principe de codage de l'élément population. Cette étape associe à chacun des points de l'espace d'état une structure de données. Elle se place généralement après une phase de modélisation mathématique du problème traité. La qualité du codage des données conditionne le succès des algorithmes génétiques. Les codages binaires ont été très utilisés à l'origine. Les codages réels sont désormais largement utilisés, notamment dans les domaines applicatifs pour l'optimisation de problèmes à variables réelles.
2. Un mécanisme de génération de la population initiale. Ce mécanisme doit être capable de produire une population d'individus non homogène qui servira de base pour les générations futures. Le choix de la population initiale est important, car il peut rendre plus ou moins rapide la convergence vers l'optimum global. Dans le cas où l'on ne connaît rien du problème à résoudre, il est essentiel que la population initiale soit répartie sur tout le domaine de recherche.

3. Une fonction à optimiser : Celle-ci retourne une valeur appelée *fitness* ou fonction d'évaluation de l'individu.
4. Des opérateurs permettant de diversifier la population au cours des générations et d'explorer l'espace d'état. L'opérateur de croisement recompose les gènes d'individus existant dans la population, l'opérateur de mutation a pour but de garantir l'exploration de l'espace d'états.
5. Des paramètres de dimensionnement: Taille de la population, nombre total de générations ou critère d'arrêt, probabilités d'application des opérateurs de croisement et de mutation [28,30].

Le principe général du fonctionnement d'un algorithme génétique est représenté sur la figure II.4 on commence par générer une population d'individus de façon aléatoire. Pour passer d'une génération k à la génération $k+1$, les trois opérations suivantes sont répétées pour tous les éléments de la population k . Des couples de parents P_1 et P_2 sont sélectionnés en fonction de leurs adaptations. L'opérateur de croisement leur est appliqué avec une probabilité P_c (généralement autour de 0.6) génère des couples d'enfants C_1 et C_2 . D'autres éléments P sont sélectionnés en fonction de leur adaptation. L'opérateur de mutation leur est appliqué avec la probabilité P_m (P_m est généralement très inférieur à P_c) et génère des individus mutés P_0 . Le niveau d'adaptation des enfants (C_1, C_2) et des individus mutés P_0 sont ensuite évalués avant insertion dans la nouvelle population. Différents critères d'arrêt de l'algorithme peuvent être choisis :

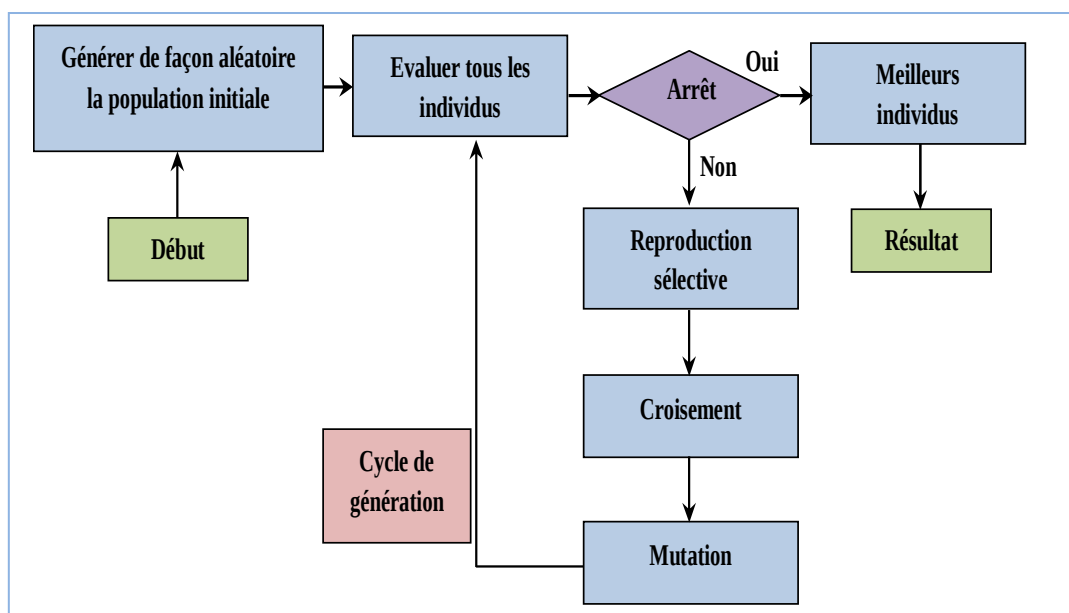


Figure II.4 : Principe général des algorithmes génétiques

- Le nombre de générations que l'on souhaite exécuter peut être fixé à priori. C'est ce que l'on est tenté de faire lorsque l'on doit trouver une solution dans un temps limité.
- L'algorithme peut être arrêté lorsque la population n'évolue plus ou plus suffisamment rapidement.

Nous allons maintenant détailler chacun de ces points [29,30].

II.3.3 Description détaillée

II.3.3.1 Codage

Le premier pas dans l'implantation des algorithmes génétiques est de créer une population d'individus initiaux. En effet, les algorithmes génétiques agissent sur une population d'individus, et non pas sur un individu isolé. Par analogie avec la biologie, chaque individu de la population est codé par un *chromosome* ou *génotype*. Une population est donc un ensemble de chromosomes. Chaque chromosome code un point de l'espace de recherche. L'efficacité de l'algorithme génétique va donc dépendre du choix du codage d'un chromosome [30].

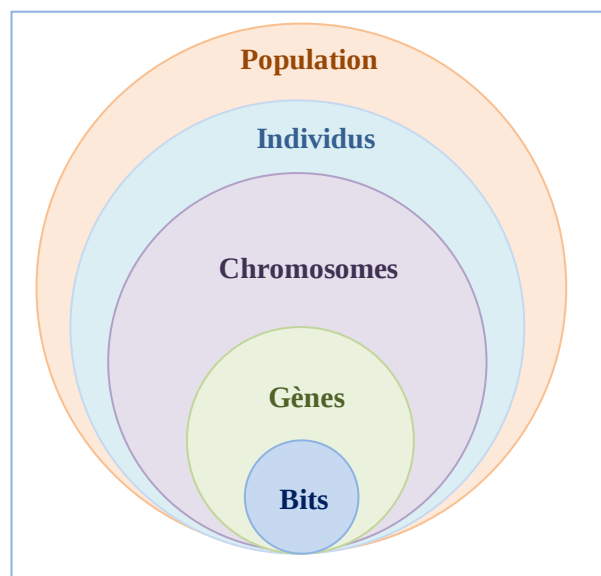


Figure II.5: Les cinq niveaux d'organisation d'un algorithme génétique

Il y a trois principaux types de codage utilisables, et on peut passer de l'un à l'autre facilement:

- **Le codage binaire** : c'est le plus utilisé. Chaque gène dispose du même alphabet binaire $\{0,1\}$. Si un gène est représenté par un entier long (32 bits), les chromosomes qui sont des suites de gènes sont représentés par des tableaux de gènes et les individus de notre espace de recherche sont représentés par des tableaux de chromosomes.
- **Le codage réel** : les nombres binaires étant pour nous moins évocateurs que les nombres réels, des difficultés surviennent pour exprimer la fonction objective et traiter les problèmes à plusieurs variables. En outre, les opérations de conversion des solutions potentielles (réelles) en chaînes de bits et des solutions obtenues en une forme réelle facilitant leur interprétation sont coûteuses en temps-machine. De plus, elles sont répétées un grand nombre de fois à chaque génération. La représentation réelle propose un compromis intéressant : elle élimine toutes les opérations de conversion, mais en contrepartie elle rend les algorithmes génétiques plus dépendants des problèmes.

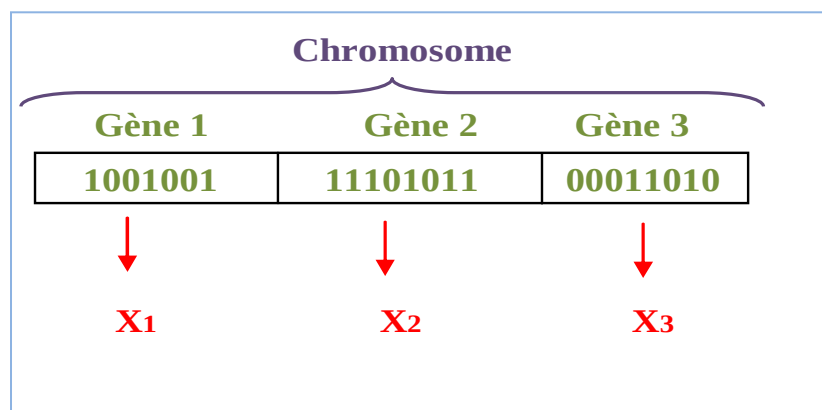


Figure II.6: Illustration schématique du codage des variables réelles

- **Le codage de Gray**: dans le cas d'un codage binaire on utilise souvent la "distance de Hamming" comme mesure de la dissimilarité entre deux éléments de population, cette mesure compte les différences de bits de même rang de ces deux séquences. Et c'est là que le codage binaire commence à montrer ses limites. En effet, deux éléments voisins en termes de distance de Hamming ne codent pas nécessairement deux éléments proches dans l'espace de recherche. Cet inconvénient peut être évité en utilisant un "codage de Gray" qui est un codage qui a comme propriété qu'entre un élément n et un élément $n+1$, donc voisin dans l'espace de recherche, un seul bit diffère.

Il existe deux types de difficultés dans le choix d'un codage. D'une part, celui-ci doit pouvoir être adapté au problème de façon à limiter au mieux la taille de l'espace de recherche, et aussi de façon que les nouveaux chromosomes engendrés par les opérateurs de recherche soient significatifs le plus souvent possible, c'est à dire qu'ils puissent coder des solutions valides respectant les contraintes du problème [30,31].

II.3.3.2 Sélection

La sélection permet d'identifier statistiquement les meilleurs individus d'une population et d'éliminer les mauvais. On trouve dans la littérature un nombre important de principes de sélection plus ou moins adaptés aux problèmes qu'ils traitent. Les deux principes de sélection suivants sont les plus couramment utilisés [30,32].

II.3.3.3 La roulette

Cette méthode exploite la métaphore d'une roulette de casino. La roue est divisée en autant de secteurs que d'individus dans la population. La taille de ces secteurs est proportionnelle à l'adaptation de chaque individu. En faisant tourner la roue, l'individu pointé à l'arrêt de la boule est sélectionné. Les individus les mieux adaptés ont donc plus de chance d'être tirés au sort, lors du déroulement du jeu. [30,33]

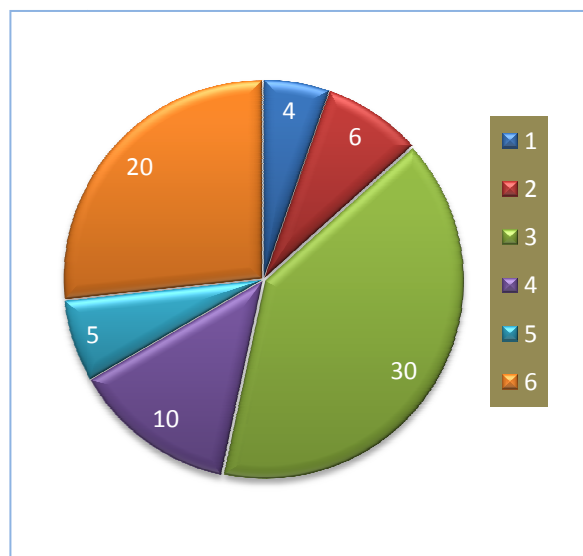


Figure II.7: La roulette

II.3.3.4 Le tournoi

Cette méthode ressemble plus à ce qui se passe dans la réalité. Comme son nom l'indique, elle fait affronter deux ou plusieurs individus afin que le meilleur gagne.

Plusieurs variantes existent. On peut par exemple faire varier le nombre d'individus qui doivent s'affronter au départ, ou encore permettre ou non que le même individu soit éligible plusieurs fois lors d'un même tournoi[30,34].

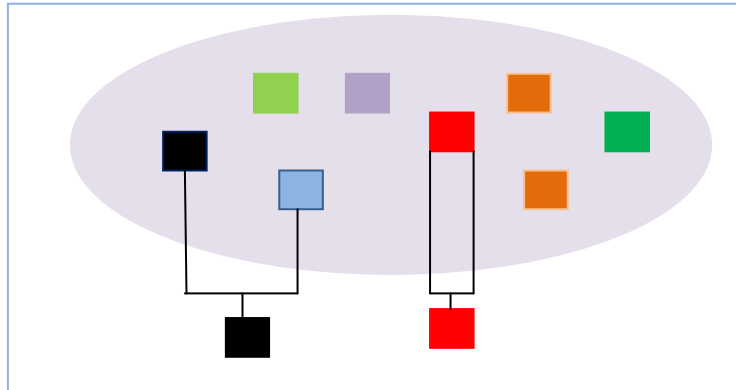


Figure II.8: Le tournoi entre deux individus avec rééligibilité

II.3.3.5 Croisement

Le croisement a pour but d'enrichir la diversité de la population en manipulant la structure des chromosomes. Classiquement, les croisements sont envisagés avec deux parents et génèrent deux enfants.

Initialement, le croisement associé au codage par chaînes de bits est le croisement à découpage de chromosomes (slicing crossover). Pour effectuer ce type de croisement sur des chromosomes constitués de M gènes, on tire aléatoirement une position dans chacun des parents.

II.3.3.6 Mutation

La mutation est un processus qui consiste à permuter un bit choisi au hasard dans un chromosome. On attribue à ce processus la fréquence à laquelle la mutation se produit. Si on lui associe une probabilité de 0.005, un chromosome aura cinq chances sur mille d'être muté. La mutation modifie aléatoirement la valeur d'une position d'une chaîne. Elle est utile pour ramener du matériel génétique qui aurait été oublié par les opérateurs de croisement. Certaines implantations vont automatiquement changer la valeur du bit choisi, d'autres vont générer aléatoirement une nouvelle valeur de bit, ce qui n'entraîne aucune mutation [30].

II.3.3.7 Elitisme

L'élitisme est un opérateur optionnel particulier. Il permet de garder l'individu le mieux adapté d'une génération à la suivante. En effet, l'opérateur de sélection peut

ne pas le sélectionner, le croisement avec un autre individu peut donner des individus moins adaptés si les gènes ne sont pas bien recombinaés ou encore sa mutation peut également le rendre moins adapté [30,35].

II.4 Fonction d'évaluation (fitness) et le hasard

Contrairement à bon nombre de méthodes qui requièrent beaucoup d'informations pour pouvoir fonctionner efficacement, les AGs nécessitent peu d'informations, ils fonctionnent essentiellement de manière aveugle. Pour effectuer une recherche de solutions meilleures, ils n'ont besoin que des valeurs des fonctions objectives associées aux chaînes individuelles. Ces valeurs ont pour but d'évaluer si un individu est mieux adapté qu'un autre à son environnement. Ce qui signifie qu'elle quantifie la réponse fournit au problème pour une solution potentielle donnée. Ainsi, les individus peuvent être comparés entre eux [30,36]. Les individus déterminés par la fonction objective (fitness) vont servir au processus de sélection des candidats aptes à la reproduction et au processus de survie des espèces. Cette fonction, propre au problème, est souvent simple à formuler lorsqu'il y a peu de paramètres. Au contraire, lorsqu'il y a beaucoup de paramètres ou lorsqu'ils sont corrélés, elle est plus difficile à définir. Dans ce cas, la fonction devient une somme pondérée de plusieurs fonctions. Un ajustement des coefficients est alors nécessaire.

Par ailleurs, les AGs utilisent des règles de transition probabilistes plutôt que déterministes pour guider leur recherche. Le choix des chromosomes à perturber est réalisé de façon probabiliste. Dans le processus de croisement, le lieu de croisement est choisi aléatoirement à l'intérieur du chromosome. De même, le gène devant subir une mutation à l'intérieur d'un chromosome est choisi selon une certaine probabilité. Le hasard occupe donc une place importante dans le fonctionnement des AGs.

II.5 Les grandes étapes de l'algorithme génétique

Le principe d'un algorithme génétique consiste à évaluer une population et à en générer une autre de façon itérative grâce aux actions opérées par les opérateurs génétiques. Le nombre de chromosomes dans une population reste inchangé à travers les diverses générations. Pour mettre en œuvre un AG, il faut disposer d'un schéma pour coder les solutions du problème, une fonction d'évaluation, une procédure d'initialisation, un ensemble d'opérateurs et un ensemble de paramètres qui gouvernent l'élaboration de la population initiale, l'exécution des opérateurs et l'arrêt

de génération de nouvelles populations. De façon générale, un AG fonctionne selon les étapes suivantes :

Étape 1 : On génère une population initiale de taille n , représentant le nombre de chromosomes. Puis, on choisit au hasard les gènes qui composent chaque chromosome. La qualité de la population initiale est très importante pour la génération de meilleures solutions. La diversité de la population est très importante pour éviter la convergence prématurée vers des minimums locaux. Cette diversité de population se définit initialement et se maintient en combinant diverses stratégies de croisement et de mutation.

Étape 2 : On évalue chaque chromosome par la fonction objective, ce qui permet de déduire sa valeur d'aptitude.

Étape 3 : On exécute les cycles de génération de populations. Chaque nouvelle génération remplace la précédente. Le nombre de cycle x est déterminé au départ. Dans chaque cycle, n chromosomes sont choisis pour reproduction et croisement deux à deux. Après la création de la $x^{\text{ème}}$ population, les chromosomes vont évoluer de façon que cette dernière génération contienne des chromosomes qui sont meilleurs que ceux des générations précédentes[30].

II.6. Initialisation de la population AG

L'étape initiale d'un AG construit la population initiale des individus, déterminés par leurs «chromosomes», ces derniers sont des ensembles générés de façon aléatoire. Nous considérons une population initiale de 20 individus. Dans notre cas, chaque chromosome contient un ensemble de quatre paramètres qui sont $N_A = N_D$, $\alpha_{IC0} = \alpha_{VIO}$, W et τ_{tot} . Ces paramètres sont choisis dans les plages suivantes, fournies par le modèle analytique précédent[12,37,38]:

N_A :de 10^{14} à 10^{21} cm^{-3}

N_D :de 10^{14} à 10^{21} cm^{-3}

α_{IC0} :de 10^0 à 10^4 cm^{-1}

α_{VIO} : de 10^0 à 10^4 cm^{-1}

W :de $1\mu\text{m}$ à $10\mu\text{m}$

τ_{tot} :de 1ns à 10 us

Ces gammes assurent qu'une valeur optimale existe, et qui a été confirmée par notre algorithme[38].

II.7 Procédé d'évaluation (fonction de fitness)

La fonction fitness est utilisée pour l'évaluation des chromosomes et l'ajustement des paramètres.

Dans notre cas, la fonction fitness c'est le rendement de la cellule. Cela nécessite un ensemble des simulations du dispositif pour chaque individu, afin de déterminer la caractéristique I-V de la cellule correspondante[37].

L'organigramme de notre approche évolutionnaire proposé pour trouver les paramètres optimaux convenables à ceux de l'analytique est présenté dans la figure II.9.

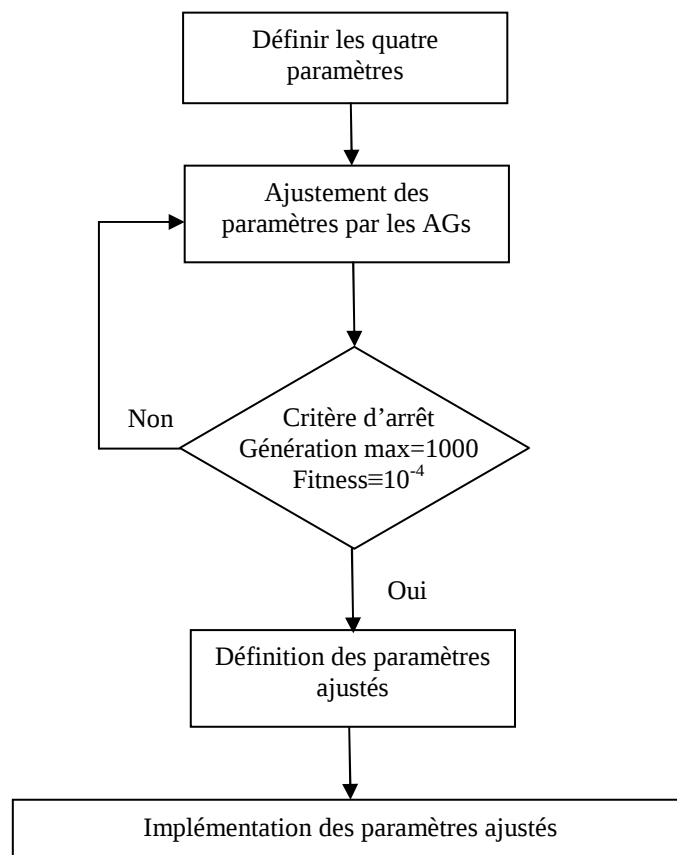


Figure II.9: Organigramme de l'approche évolutionnaire proposée pour la détermination

II.8. Résultats et discussions

Pour l'implémentation de la technique AGs, des règles de la boîte d'outil, sous MATLAB, de AG sont utilisées:

- Le tournoi: est la méthode utilisée pour la sélection, cette méthode sélectionne chaque parent par le choix aléatoire des individus puis elle choisit le meilleur individu pour être individu parent.

- Le croisement dispersé 'Scattered crossover': il crée un vecteur binaire aléatoirement, puis il sélectionne les gènes suivant le vecteur créé où le '1' sélectionne le gène du premier parent et le '0' sélectionne le gène du deuxième parent, la combinaison des gènes sélectionnés a le rôle de produire l'enfant de la prochaine génération.

La mutation uniforme : est un processus en deux étapes. D'abord, l'algorithme choisit une fraction du vecteur d'entrées de l'individu pour la mutation, où chaque entrée a une probabilité d'être mutée (taux de mutation). Dans la deuxième étape, l'algorithme remplace chaque entrée choisie par un nombre aléatoire choisi uniformément à partir du vecteur d'entrées.

Notre processus d'optimisation est assuré par une population de 20 individus pour chaque génération. Les paramètres utilisés dans cette étude sont résumés dans le tableau II.I.

Les paramètres de AG	Valeurs
La taille de la population	20
Le nombre Maximum de générations	1000
Type de la fonction fitness	Proportionnel
La sélection	Tournoi
Le croisement	Dispersé
La mutation	Uniform
Taux de mutation	0.5
Taux de reproduction	0.1

Tableau II.I. Paramètres de AG utilisés dans cette application

Pour la configuration obtenue d'AG, nos résultats après le processus d'optimisation sont comparés avec des résultats analytiques résumés dans le tableau II.2.

paramètres	Résultats analytiques [12]	Résultats AG[38]
N_A [cm ⁻³]	10^{19}	1.72×10^{20}
N_D [cm ⁻³]	10^{19}	1.72×10^{20}
α_{IC0} [cm ⁻¹]	10^4	9.65×10^3
α_{V10} [cm ⁻¹]	10^4	9.65×10^3
τ_{tot} [us]	1	0.972
W[um]	1	1.5
J_{cc} (mA/cm ²)	17.21	17.73
V_{oc} (V)	1.825	1.825
FF	0.922	0.923
η (%)	28.96	29.87

Tableau II.2 : Comparaison entre les résultats analytiques [12] et les Résultats AG pour différents paramètres électriques et photovoltaïques

II.8.1 Caractéristiques courant-tension

Les paramètres électriques correspondants sont représentés sur le tableau II-2. La figure (II.10) représente les caractéristiques courant-tension du modèle analytique [12] et du modèle de notre approche[38].

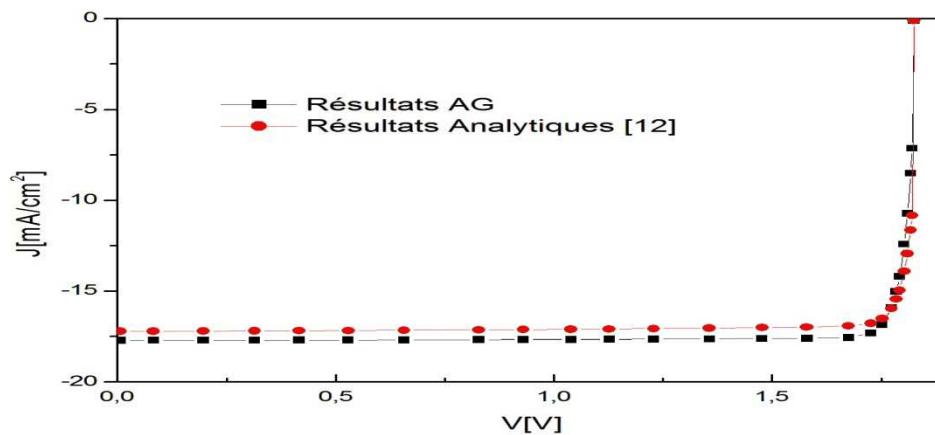


Figure II.10. Caractéristiques courant-tension du modèle analytique et le modèle obtenue par les AGs .

II.9. Conclusion

A travers ce chapitre nous avons exposé les bases théoriques des algorithmes génétiques puis nous les avons utilisé avec un algorithme adéquat afin d'extraire la caractéristique courant tension.

D'après les résultats obtenus on remarque qu'il y a une validation du rendement avec un taux de 3.14 % par rapport au modèle analytique. Cette amélioration montre que les AG mono-objectifs peuvent donner des informations sur les meilleurs paramètres physiques et géométriques à considérer par les concepteurs.

Références bibliographiques

- [1] B.D. REZGUI, «Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules photovoltaïques à haut rendement.», thèse de doctorat, Institut des Nanotechnologies de Lyon .2010.
- [2] T. Tanaka, K. M. Yu, P. R. Stone, J. W. Beeman, O. D. Dubon, L. A. Reichertz, V. M. Kao, M.Nishio, and W. Walukiewicz,J. , « Demonstration of homojunction ZnTe solar cells », Appl. Phys, Vol 108, pp.024502, 2010.
- [3] A. Martí, E. Antolín, E. Cánovas, N. López and A. Luque, « Progress in quantum-dot intermediate band solar cell research», 21st European photovoltaic Solar Energy Conference, Dresden, Germany, pp. 99–102, 2006
- [4] A. Marti, E. Antolin, C. R. Stanley, C. D. Farmer, N. Lopez, P. Diaz, E. Canovas, P. G. Linares, and A. Luque, « Production of photocurrent due to intermediate-to-conduction-band transitions: a demonstration of a key operating principle of the intermediate-band solar cell», PHYS. REV. LETT, Vol.97, pp.247701, 2006.
- [5] S. Khelifi, H. Mazari, A. Belghachi, K.Ameur, Z. Benamara, M. Mostefaoui, and L. Boudaoud, « Analysis of intermediate band photovoltaic solar cell based on ZnTe:O », Jour of Nan and Opt, Vol. 10, pp.333–335, 2015.
- [6] C. Ling, L. Q. Zhou, D. Banerjee, H. Jia, « Band structures of ZnTe:O alloys with isolated oxygen and with clustered oxygen impurities », J of Alloys and Compounds, Vol. 584, pp. 289–294, 2014.
- [7] T. Tanaka, Y. Nagao, T. Mochinaga, K. Saito, Q. Guo, M. Nishioa, K. M. Yu, W. Walukiewicz, « Molecular beam epitaxial growth of ZnCdTeO epilayers for intermediate band solar cells », J of Crystal Growth, Vol.378, pp 259–262, 2013.
- [8] Y. Shoji, K. Akimoto and Y. Okada, « Self-organized InGaAs/GaAs quantum dot arrays for use in high-efficiency intermediate-band solar cells », J. Phys. D: Appl. Phys, Vol.46, pp.024002, 2013.
- [9] A. Martí, N. López, E. Antolín, E. Cánovas, A. Luque et al, « Emitter degradation in quantum dot intermediate band solar cells, Appl. Phys. Lett, Vol.90, pp.233510, 2007.
- [10] A. Martí, E. Antolín, E. Cánovas, N. López, P.G. Linares, A. Luque, C.R. Stanley, C.D. Farmer, « Elements of the design and analysis of quantum-dot intermediate band solar cells », Thin Solid Films, Vol. 516, pp. 6716–6722, 2008.

- [11] A. Luque and A. Martí, « The Intermediate Band Solar Cell: Progress Toward the Realization of an Attractive Concept », *Adv. Mater.*, Vol. 22, pp. 160–174, 2010.
- [12] A. S. Lin, W. Wang and J. D. Phillips, « Model for intermediate band solar cells incorporating carrier transport and recombination », *J. Appl. Phys.* Vol 105, pp 064512, 2009.
- [13] R. S. Candall, « Modeling of thin-film solar cell: Uniform field approximation », *J. Appl. Phys.*, Vol. 54, pp. 7176, 1983.
- [14] S. S. Hegedus, « Current voltage analysis of a-Si and a-SiGe solar cells Including voltage-dependent photocurrent collection », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, Vol. 5, pp. 151, 1997.
- [15] T. Markvart and L. Castaner, « Solar cells: materials, manufacture and operation », Oxford, UK: Oxford: Elsevier Advanced Technology, 2005.
- [16] A. Luque, « Operation of the intermediate band solar cell under non ideal space charge region conditions and half filling of the intermediate band », *J. Appl. Phys.*, vol. 99, pp. 094503, 2006.
- [17] A. Luque and A. Martí, « Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels », *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 78, pp. 5014, 1997.
- [18] G. Wei, K.-T. Shiu, N. C. Giebink, and S. R. Forrest, « Thermodynamic limits of quantum photovoltaic cell efficiency », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 91, pp. 223507, 2007.
- [19] A. Luque and A. Martí, « A Metallic Intermediate Band High Efficiency Solar Cell », *Prog. Photovolt. Res. Appl.*, Vol. 9, pp. 73, 2001.
- [20] L. Cuadra, A. Martí, and A. Luque, « Influence of the overlap between the absorption coefficients on the efficiency of the intermediate band solar cell », *IEEE Tran. Electron Dev.*, Vol. 51, pp. 1002, 2004.
- [21] T. Tanaka, M. Miyabara, Y. Nagao, K. Saito, Q. Guo et al, « Photocurrent induced by two-photon excitation in ZnTeO intermediate band solar cells », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 102, pp. 052111, 2013.
- [22] T. Tanaka, S. Kusaba, T. Mochinaga, K. Saito, Q. Guo et al, « Molecular beam epitaxial growth and optical properties of highly mismatched ZnTe_{1-x}O_x alloys », *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 100, pp. 011905, 2012.
- [23] C. Chen, J. Zheng, K. Nguy, F. Naab, and J. D. Phillips, « Distinguishing optical behavior of oxygen states and native deep level emission in ZnTe », *J. ELECT. MAT.*, Vol 43, pp. 879-883, 2014.

- [24] S.W. Pak et al, « Oxygen incorporation in ZnTe thin films grown by plasma-assisted pulsed laser deposition », *Current Applied Physics*, Vol 14, pp S49-S52, 2014.
- [25] M. Schmeits and A. A. Mani, « Impurity photovoltaic effect in c -Si solar cells. A numerical study », *J. Appl. Phys.*, Vol. 85, pp. 2207-2212, 1999.
- [26] M. J. Keevers and M. A. Green, « Efficiency improvements of silicon solar cells by the Impurity photovoltaic effect », *J. Appl. Phys.*, Vol. 75, pp. 4022-4031, 1994.
- [27] Nicolas Barnier ,Pascal Brisset , « Optimisation par algorithme génétique sous contraintes », *Technique et science informatiques*, Vol 18,pp 1-29, 1999.
- [28] H. Hachimi, « Hybridations D’algorithmes Métaheuristiques En Optimisation globale et leurs Applications », thèse de doctorat, Université Mohammed V - Agdal,Rabat, 2013.
- [29] J. H.Holland, « Adaptation in Natural and Artificial Systems », A Bradford Book, The MIT Press, Cambridge, MA, 1975.
- [30] LAKEHAL Brahim, « Propriétés électriques d’une cellule solaire », French Edition, Publishing European university, ISBN: 978-613-1-53791-2, 2011.
- [31] R. L. Haupt and S. E.Haupt, « Practical Genetic Algorithms », Second Edition,John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2004.
- [32] M. Melanie, « An Introduction to Genetic Algorithms », MIT Press. Cambridge, Massachusetts , London, England. Fifth printing, 1999.
- [33] J. M.Johnson andY.Rahmat-Samii, « An Introduction to Genetic Algorithms in Electromagnetics Optimization by Genetic Algorithmes »,Wiley, pp. 181-210, 1999.
- [34] D. E.Goldberg, « Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning », Reading MA Addison Wesley, 1989.
- [35] T. Back, « Evolutionary Algorithms in theory and Practice: Evolution strategies, evolutionary programming, genetic algorithms », Oxford University Press, USA, 1996
- [36] J. Kennedy, R-C. Eberhart, « Particle swarm optimization », In proceedings of the IEEE International conference on Neural Networks, Vol. 5, pp. 1942-1948, 1995.
- [37] Brahim. Lakehal, Zohir. Dibi, Nacerdinne. Lakhdar, « Modeling of solar cell using genetic algorithms », 2nd international conference on computational and experimental science and engineering, antalya-turkey,2015

- [38] Brahim. Lakehal, Zohir. Dibi, Nacerdinne. Lakhdar, « Performance enhancement of ZnTeO solar cell by optimizing physical and geometrical parameters», The International Conference on Green Energy & Conversion Systems, IEEE ,2017

Chapitre III

Etude de l'influence des paramètres géométriques et physiques sur les performances de la IBSC

III.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre, est l'étude de l'influence des paramètres physiques et géométriques de la cellule solaire à bande intermédiaire en utilisant le modèle de notre approche basée sur les AGs décrit dans le chapitre II. Nous chercherons à obtenir les paramètres physiques et géométriques optimaux qui assureront les meilleures caractéristiques, pour le bon fonctionnement de la cellule solaire à bande intermédiaire qui doit être partiellement remplie. Ce remplissage assure à la fois les états vides dans la bande intermédiaire *BI* pour recevoir les électrons de la bande de valence *BV* et les états remplis pour fournir des électrons à la bande de conduction *BC*. Récemment, l'effet de l'occupation de l'*BI* sur l'efficacité de la cellule a été observé et l'efficacité optimale a été calculée pour les dispositifs *BI*. L'expression analytique pour le remplissage optimal de l'*BI* a été exploitée pour différents scénarios d'accouplement entre *BI-BC* et de largeur de la région *BI* [1-5].

Dans ce chapitre nous avons étudié l'influence des coefficients d'absorption sur la caractéristiques courant-tension, l'influence du niveau d'énergie de la bande intermédiaire, les effets de dopage sur le rendement, le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert, le facteur de forme, l'effet de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire *Ni* et afin de valider notre approche sur les effets parasites tel que la résistance série et shunt.

III.2 Influence des coefficients d'absorption sur la caractéristiques courant-tension

Les caractéristiques courant-tension de la cellule IBSC avec les différents coefficients d'absorption pour la *BI* sont représentées sur la figure III.1 où la densité de courant de court-circuit J_{cc} augmente clairement avec l'augmentation de α_{IC0} et α_{V10} qui représentent la force d'oscillation pour les transitions et la densité des états dans les bandes énergétiques.

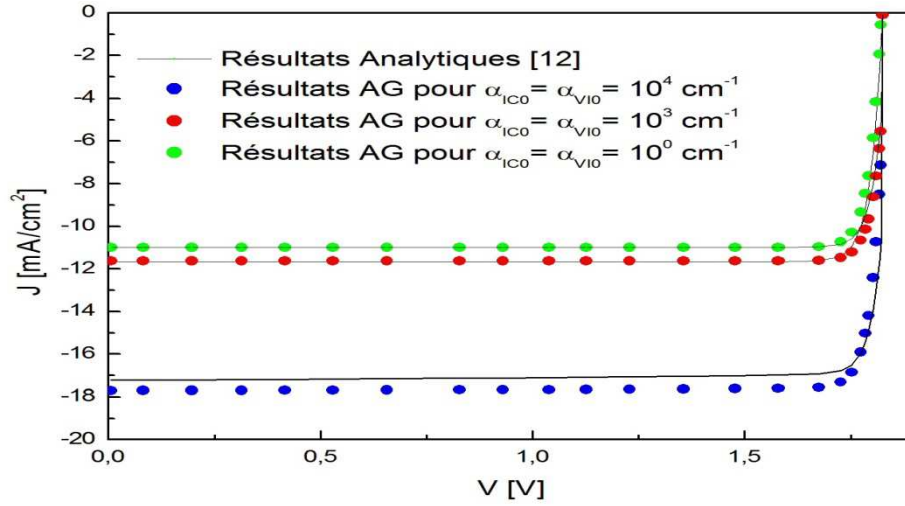


Figure III.1. Les caractéristiques courant-tension avec différents coefficients d'absorption

Tandis que la tension du circuit ouvert V_{co} ne change pas de manière significative. L'augmentation de la J_{cc} de la cellule de base (le cas de $\alpha_{IC0} = \alpha_{VI0} = 0$) est due à l'absorption des photons dans la sous bande gap[6].

III.3 Influence du niveau d'énergie de la bande intermédiaire

L'utilisation de notre approche peut fournir des renseignements concernant les effets de la bande intermédiaire et les effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire sur la performance de la cellule solaire qui est l'objectif principal de ce chapitre.

Dans le premier cas, les effets du niveau d'énergie E_i sur la performance de la cellule sont illustrés par la figure III.2.

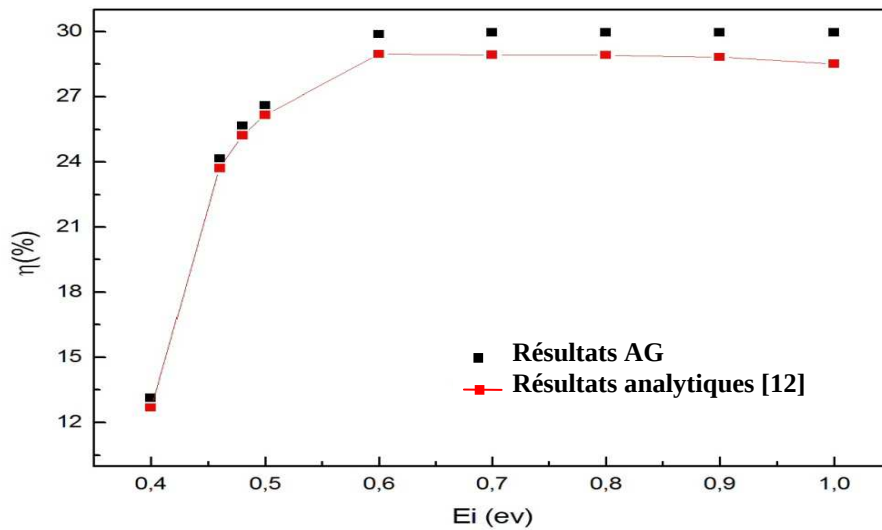


Figure III.2. Variation du rendement en fonction du niveau d'énergie (E_i)

On remarque que l'augmentation de la position énergétique (BI) de 0,4 eV à 0,6 eV, augmente l'efficacité de 14,91% à sa valeur maximale 28.97%, au-delà de 0,6 eV elle diminue légèrement [6].

III.3.1.Courant de court-circuit

La figure III.3 montre la densité du courant de court-circuit par rapport au niveau d'énergie E_i de la bande intermédiaire BI. Le courant de court-circuit varie de manière significative avec l'occupation de l'BI. On observe que la densité du courant court-circuit, J_{CC} augmente en raison de l'absorption supplémentaire du photon à partir de la bande intermédiaire qui permet finalement la production du photocourants dans la cellule[7].

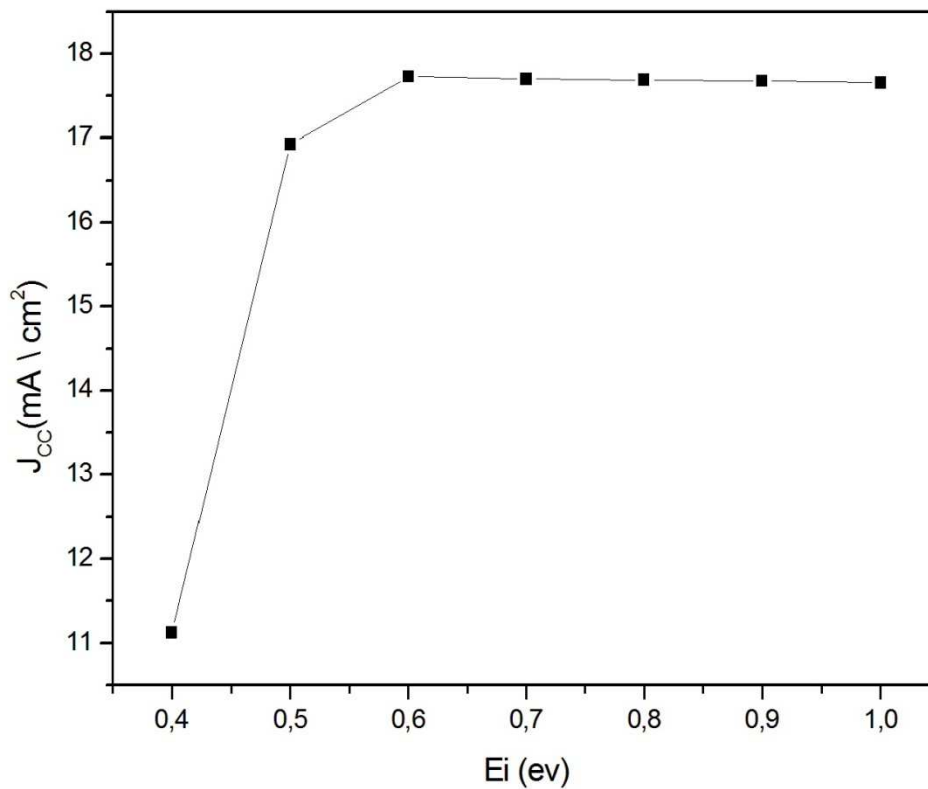


Figure III.3.Variation du courant de court-circuit en fonction du niveau d'énergie E_i

III.3.2. Tension de circuit ouvert

La figure III.4 montre la relation entre la tension de circuits ouverts, V_{CO} et le niveau d'énergie E_i de la bande intermédiaire BI. Bien que V_{CO} augmente avec l'augmentation du niveau d'énergie E_i , cette augmentation s'effectue par des petites valeurs par rapport à J_{CC} [8].

C'est-à-dire le facteur de remplissage f n'influe pas de manière significative sur la tension de circuit ouvert.

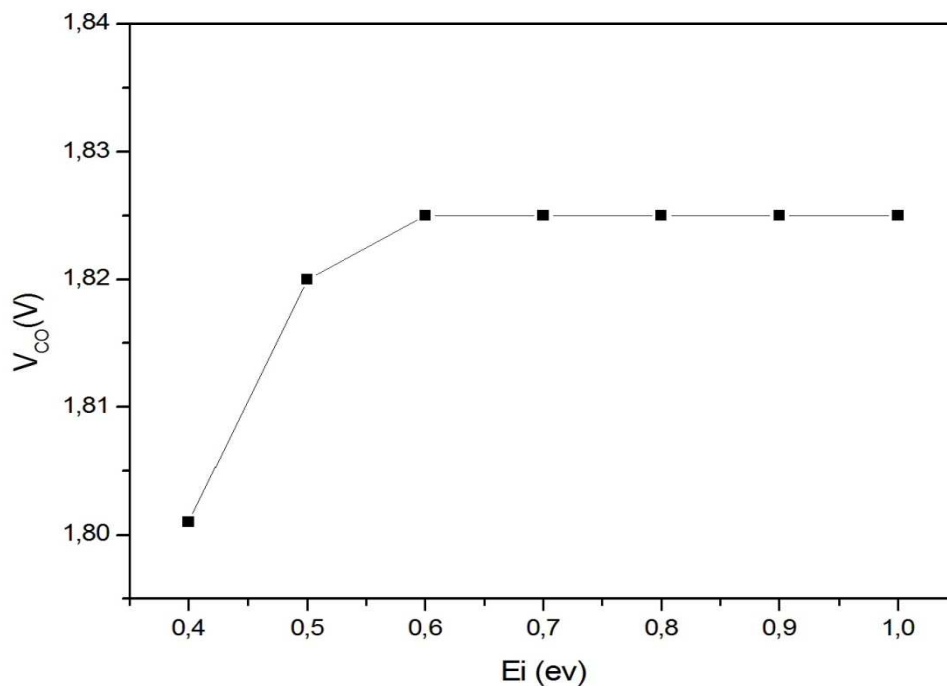


Figure III.4. Variation de la tension de circuit ouvert en fonction du niveau d'énergie E_i

III.4 Effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire

Les processus physiques associés à la BI dépendront de la nature et de la densité des états électroniques N_i et seront spécifiques au matériau et aux procédés. En premier ordre d'approximation, la dépendance de l'absorption optique et la durée de vie des charges est liée à la densité des états électroniques de la bande intermédiaire N_i [10]. On suppose que les coefficients d'absorption et la durée de vie de recombinaison totale sont reliés avec des relations linéaires comme décrit dans l'équation (II.7, II.8 et II.9) .

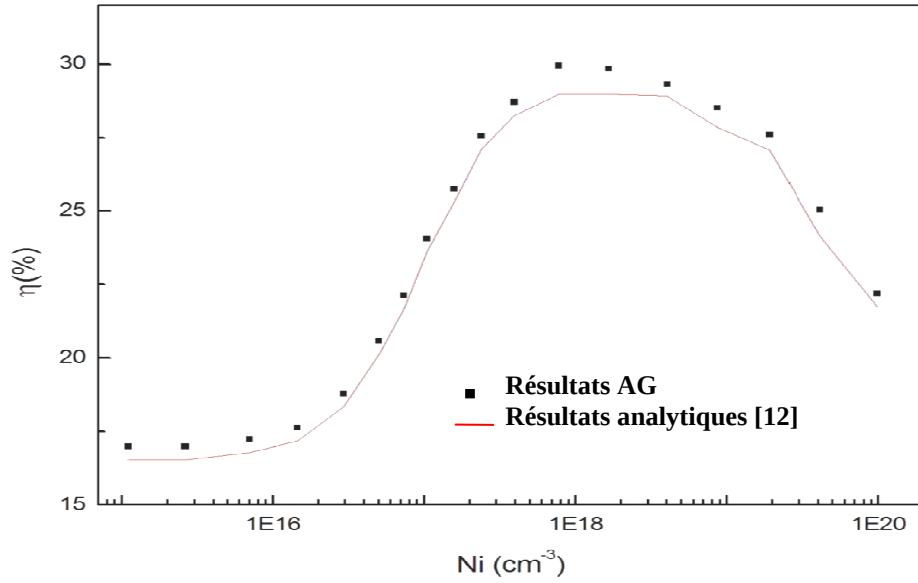


Figure III.6. Variation du rendement en fonction de la densité des états (N_i)

Concernant l'influence de la densité des états électroniques N_i dans la bande intermédiaire BI sur l'efficacité de conversion η , on voit sur la figure III.6 qu'une augmentation de la densité des états électroniques N_i de 10^{15} cm^{-3} à 10^{18} cm^{-3} révèle une bonne amélioration de l'efficacité qui passe de 16 % à sa valeur maximale 28%. Au-delà de 10^{18} cm^{-3} elle décroît progressivement.

III.5 Effets de l'épaisseur du ZnTeO

La fonction principale de la bande intermédiaire pour les cellules photovoltaïques est de convertir des photons à basse énergie (photons sous-band gap) en électrons par un processus impliquant deux photons sans abaissant la tension ouverte du dispositif photovoltaïque ce qui permet une plus haute efficacité de conversion[11].

La figure III.7 illustre la variation du rendement de la cellule solaire IBSC en fonction de l'épaisseur du ZnTeO.

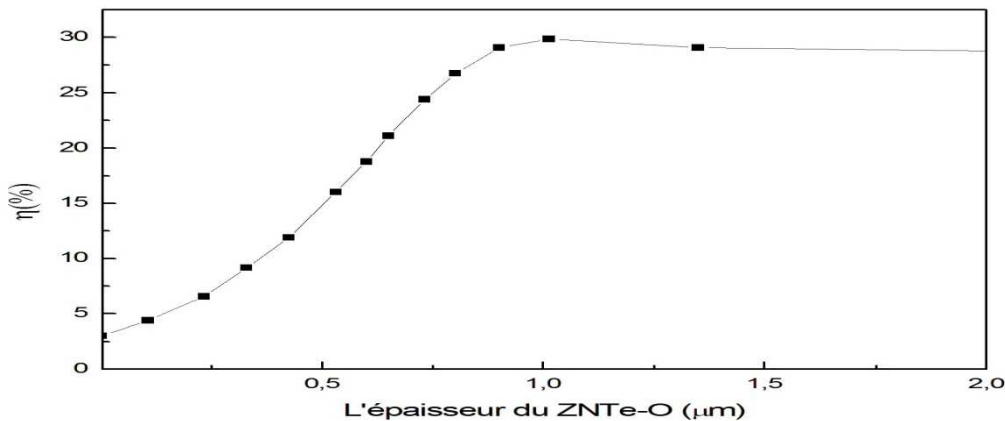


Figure III.7. Variation de l'épaisseur du ZnTeO en fonction de la densité des états N_i

On observe que l'efficacité de conversion de la cellule solaire augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche ZnTe-O jusqu'au point de saturation qui correspond au rendement maximal.

III.6 Effets du dopage

III.6.1 La densité des donneurs

Malgré l'absence d'absorption de sous-bande dans le côté n de la cellule, deux facteurs intégrant la densité du donneur N_d dans cette région remodelent la conversion efficace. L'une est l'augmentation du potentiel d'auto-construction et la diminution du courant de diffusion pour une forte densité des donneurs, ce qui permet d'augmenter la tension de circuit ouvert V_{co} . D'autre part, la largeur de diffusion du trou l_p et la largeur de la zone de charge d'espace côté n (x_n) sont plus courts en augmentant la densité des donneurs avec une modification négligeable de la longueur de diffusion d'électrons l_n et la largeur de la zone de charge d'espace côté p , [12,13]. Ceci réduit l'absorption et l'efficacité comme le montre la figure III.8.

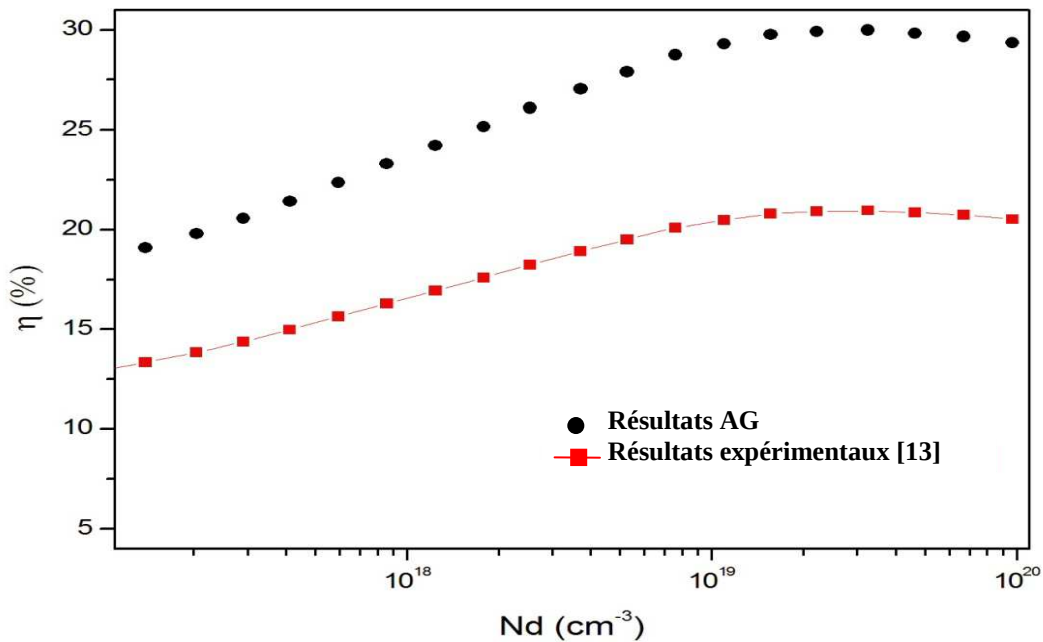


Figure III.8 La variation du rendement en fonction de N_d

III.6.2 La densité des accepteurs

L'augmentation de la densité des accepteurs N_a entraîne également un grand potentiel auto-construit et un faible courant de diffusion d'électrons, ce qui entraîne une grande

tension de circuit ouvert et une efficacité de conversion élevée comme le montre la figure III.9.

Cependant, des effets néfastes, tels que la réduction de la largeur de la zone de charge d'espace, apparaît seulement lorsque N_a atteint le même niveau de densité d'électrons de l'IB dans la région de déplétion dont les valeurs dépendent de l'ouverture de la fenêtre optique comme indiqué dans la Figure III.9.

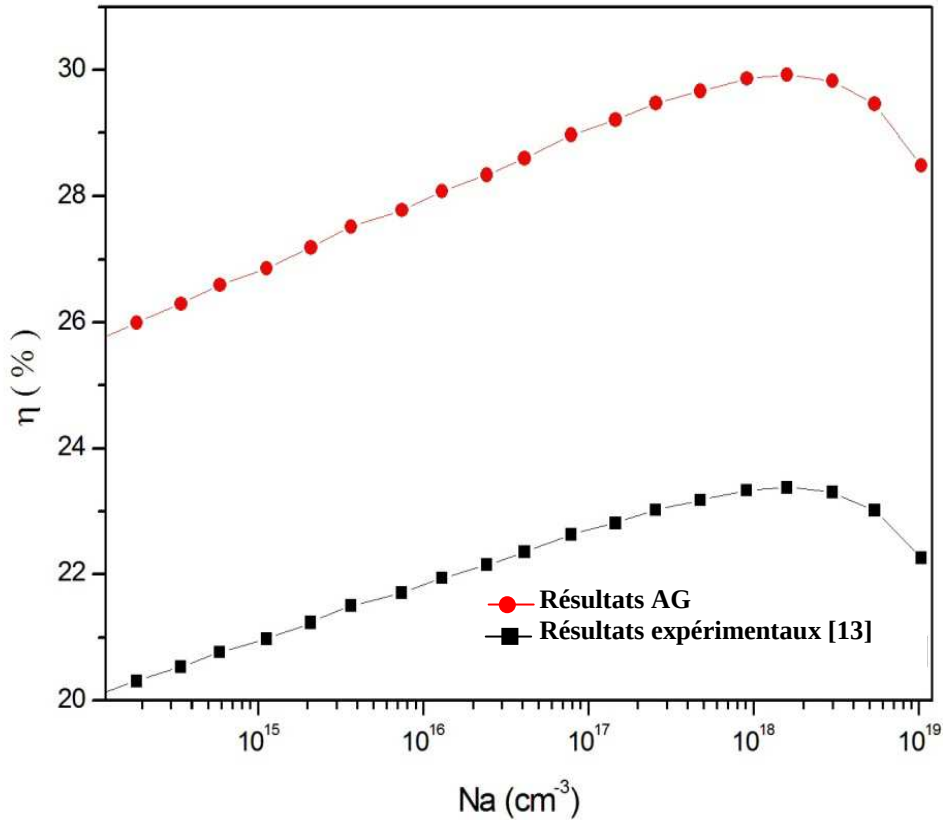


Figure III.9 La variation du rendement en fonction de N_a

III.7 Effets de la résistance série et shunt

Afin de valider notre approche, les résultats obtenus figures (III.11, III.12) en tenant compte des deux paramètres parasites, la résistance série R_s et la résistance parallèle R_{sh} , listées dans le modèle de circuit équivalent représenté sur la figure III.10 et dans la relation courant-tension (J-V) décrite par l'équation (III.1) sont comparés avec des données expérimentales (Tableau III.1).

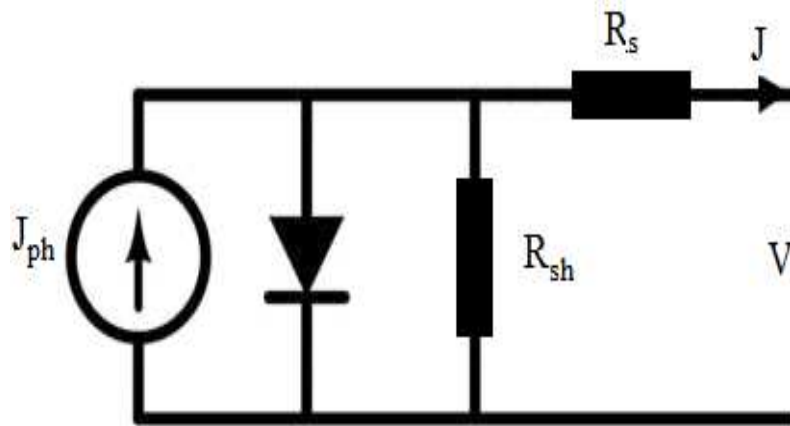


Figure III.10. Cellule solaire décrite par le modèle à simple exponentielle

$$J = J_0 [\exp (q(V - J R_s / n K T) - 1) + (V - J R_s / R_{sh}) - J_{ph}] \quad \text{III.1}$$

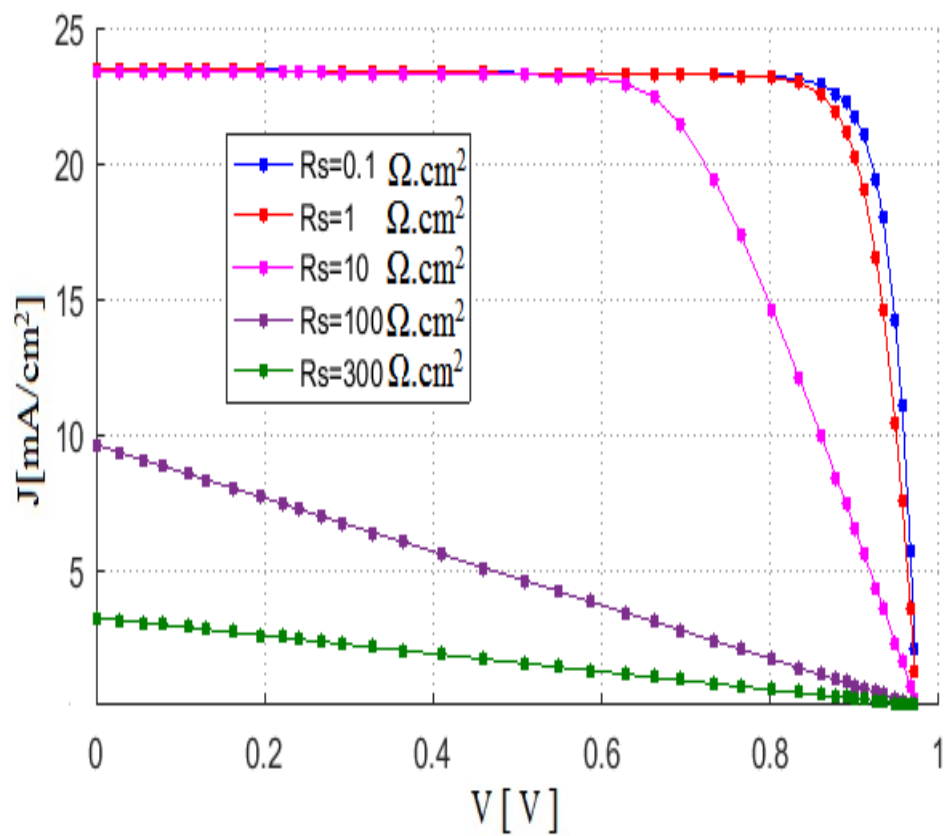


Figure III.11. Influence de la résistance série sur la caractéristique J-V

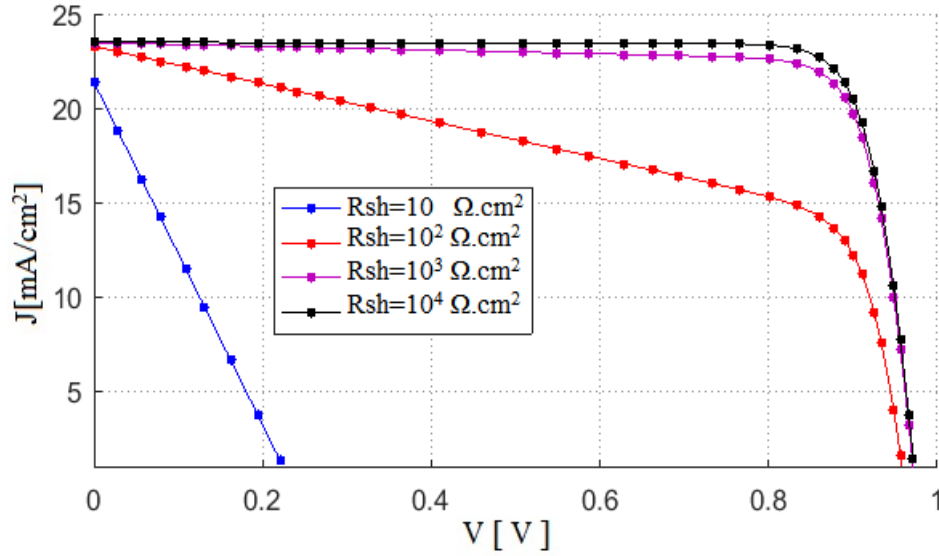


Figure III.12. Influence de la résistance shunt sur la caractéristique J-V.

On observe qu'une grande valeur de la résistance série R_s dégrade principalement le courant de court-circuit J_{cc} , Fig III.11 et la diminution de la résistance shunt R_{sh} dégrade principalement la tension des circuits ouverts V_{co} comme le montre la figure III.12. Ces deux éléments peuvent détériorer (dégrader) le facteur de forme de manière significative ce qui a pour conséquence de limiter le rendement de conversion. On note qu'une bonne conversion est atteinte lorsque R_s est inférieur à $1\Omega.cm^2$ et R_{sh} dépasse $1k\Omega.cm^2$.

D'après le tableau (III.1), l'utilisation de notre approche basée sur l'optimisation GA peut améliorer le rendement par identification des paramètres géométriques et physiques.

Paramètres	Résultats expérimentaux [13]	Résultats AG[6]
N_A [cm ⁻³]	10^{19}	1.72×10^{20}
N_D [cm ⁻³]	2×10^{18}	1.72×10^{20}
α_{IC0} [cm ⁻¹]	/	9.65×10^3
α_{V10} [cm ⁻¹]	/	9.65×10^3
τ_{tot} [us]	/	0.972
W[um]	1	1.5
RS[Ω.cm ²]	300	300
Rsh[Ω.cm ²]	3×10^3	3×10^3
J_{cc} (mA/cm ²)	3.6	3.234
V_{oc} (V)	0.38	0.9715
FF(%)	31	25
η (%)	0.43	0.786

Tableau III.1. Comparaison entre les résultats expérimentaux [13] et les Résultats AG pour différents paramètres électriques et photovoltaïques

Nous avons observé une grande amélioration du rendement avec un taux de 45%. Il apparaît ainsi que l'approche proposée dans ce travail peut être considérée comme un outil important dans le domaine de la conception des cellules solaires.

III.8. Conclusion

Nous venons de présenter un travail de modélisation basée sur l'optimisation AG qui nous a permis la recherche du maximum possible de rendement de conversion. Ce modèle nous a permis d'étudier l'influence des paramètres géométriques et physiques sur les performances de la IBSC tel que (niveau d'énergie, dopage, l'épaisseur du ZnTeO...); l'approche est proposée dans le but d'augmenter les performances des cellules solaires à base d' IB. L'approche proposée dans ce travail peut être considérée comme un outil important dans le domaine de la conception des cellules solaires.

Références bibliographiques

- [1] A. Luque and A. Marti, « A Metallic Intermediate Band High Efficiency Solar Cell», Prog. Photovolt. Res. Appl., Vol. 9, pp. 73, 2001.
- [2] A. Martí, L. Cuadra, and A. Luque, « Quantum dot intermediate band solar cell», Proceedings of the 28th IEEE Photovoltaics Specialists Conference, New York, pp. 940–943, 2000.
- [3] A. Marti, L. Cuadra, and A. Luque, « Partial filling of a quantum dot intermediate band for solar cells», IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 48, pp. 2394–2399, Oct. 2001.
- [4] R. Strandberg and T. W. Reenaas, « Drift-diffusion model for intermediate band solar cells including photofilling effects», Prog. Photovolt. Res. Appl, Vol. 19, pp. 21–32, Jan. 2011.
- [5] R. Strandberg and T. W. Reenaas, « Optimal Filling of the Intermediate Band in Idealized Intermediate-Band Solar Cells», IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 58, pp. 2559 - 2565, Aug. 2011.
- [6] Brahim. Lakehal, Zohir. Dibi, Nacerdinne. Lakhdar, « Performance enhancement of ZnTe:O solar cell by optimizing physical and geometrical parameters», The International Conference on Green Energy & Conversion Systems, IEEE ,2017.
- [7] M. Schmeits and A. A. Mani, « Impurity photovoltaic effect in c -Si solar cells. A numerical study », J. Appl. Phys., Vol. 85, pp. 2207-2212, 1999.
- [8] S. Khelifi, H. Mazari, A. Belghachi, K.Ameur, Z. Benamara, M. Mostefaoui, and L. Boudaoud, « Simulation Analysis of Intermediate Band ZnTe O Based Thin Film Solar Cell », Journal of Nan and Opt, Vol. 12, pp. 460-464, 2017.
- [9] S. S. Hegedus, « Current Voltage Analysis of a-Si and a-SiGe Solar Cells Including Voltage-dependent Photocurrent Collection », Prog. Photovolt. Res.Appl., Vol. 5, pp. 151, 1997.
- [10] Augustin McEvoy L. Castaner Tom Markvart, « Solar cells 2nd Edition: materials, manufacture and operation », Elsevier, 2012.
- [11] K. Yoshida, Y. Okada and N. Sano, « Self-consistent simulation of intermediate band solar cells: Effect of occupation rates on device characteristics », Appl. Phys. Lett., Vol. 97, pp.133503, Sept. 2010.
- [12] A. S. Lin, W. Wang and J. D. Phillips, « Model for intermediate band solar cells incorporating carrier transport and recombination », J. Appl. Phys. Vol 105, pp.064512, 2009.
- [13] W. Wang, «Intermediate Band Solar Cells based on ZnTeO.»,thèse de doctorat, Université de Michigan .2010.

Chapitre IV

Implantation de la cellule solaire à bande intermédiaire sur ORCAD- PSPICE

A travers ce chapitre on s'est intéressé à la principale caractéristique I-V de la cellule solaire IBSC. Une exploration de la capacité des réseaux de neurones dans la modélisation a été effectuée. Ainsi, nous avons étudié un modèle à base de réseaux de neurones (modèle ANN) conçu à l'aide du logiciel Matlab. Ce modèle doit tenir compte de l'influence de la température, et l'éclairement. L'implantation du modèle ANN sur le simulateur ORCAD-PSPICE ainsi que les résultats de simulation obtenus sont également reportés. L'utilisation des ANN présente l'avantage d'utiliser une petite base de données qui peut représenter la caractéristique électrique. Les résultats obtenus par notre modèle peuvent être utilisés dans un simulateur électrique.

IV.1 Cellule solaire à bande intermédiaire :

IV.1.1 Structure à optimisée

La limite théorique de conversion des cellules photovoltaïques à simple jonction établie par Shockley et Queisser en 1961 [1] est de 31% en raison d'une capture partielle du spectre solaire limitée à la valeur du gap du semi-conducteur. Pour accroître le rendement, il convient d'adapter le spectre d'absorption des cellules au spectre d'émission du soleil. Une des voies consiste à exploiter le concept de cellules à bande intermédiaire (BI), proposé par Marti et Luque [2] ou à connecter en série des cellules dont le domaine d'absorption est complémentaire et permet de couvrir au mieux celui du spectre solaire[3,6,7,8].

Pour cela, les cellules solaires à bande intermédiaire (IBSCs) présentent un nouveau concept. La limite de l'efficacité de conversion théorique pour les cellules solaires à bande intermédiaire est d'environ 63%, comparable à l'efficacité théorique des cellules solaires à triple jonction possédant les mêmes rendements [4,5].

La structure étudiée dans notre travail de (IBSC) basé sur ZnTe: O est présenté sur la figure IV.1[9].

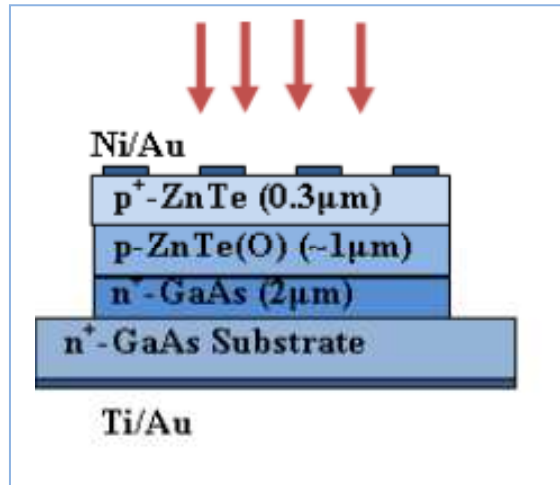


Figure IV. 1. Structure de la cellule solaire à bande intermédiaire

IV.2 Modélisation de la cellule solaire IBSC

Pour créer le modèle ANN de la cellule solaire (IBSC) au moyen des réseaux de neurones on a choisit une base de données caractérisée, dans notre cas, par l'éclairement appliquée à la cellule solaire et la température de l'environnement. Dans une deuxième étape on sépare la base d'apprentissage et celle de test, puis vient l'étape d'entraînement d'un réseau de neurones sur la base d'apprentissage au moyen de l'algorithme de rétro propagation. Finalement une mesure de la performance du modèle obtenu avec la base réservé au test a été effectuée [10].

IV.2 .1 Choix de la base de données

La cellule solaire que nous avons étudiée sur un éclairement de AM1.5G et de température fixe de 300k. La base de données doit couvrir cet ensemble de valeurs [9]. En se basant sur les résultats expérimentaux du modèle choisis qui est décrit dans le paragraphe IV.1, notre base de données possède donc 2 vecteurs de la forme X (T, E), et l'apprentissage du réseau de neurones est fait avec une base de données de 300 éléments.

IV.2 .2 Création d'une base de validation

Comme son nom l'indique cette base de données est utilisée pour tester « valider » les résultats obtenus après l'apprentissage. On doit noter ici qu'il n'y a pas de règles précises concernant cette séparation. Les deux bases de données ainsi obtenues par cette séparation doivent impérativement couvrir l'espace de fonctionnement.

L'apprentissage nécessite une base de données, une base de tests, le nombre de couches et des neurones utilisés dans chaque couche. Le bon choix de type des fonctions d'activations et du nombre d'itérations nécessaires pour avoir le seuil d'estimation voulue « Th ». La valeur minimale de l'erreur quadratique moyenne « EQM » qu'on désire obtenir, est aussi nécessaire pour faire notre apprentissage. Dans notre cas la base d'apprentissage est composée de 300 éléments, quant à la base de test elle est composée de 100 éléments. Il est important de ne pas utiliser aucun élément de la base de test pendant toute la durée de l'apprentissage. Cette base est réservée uniquement à la mesure finale de la performance. Autrement dit, elle sert à vérifier si le réseau de neurones a une bonne performance sur les exemples qu'il n'a pas appris « base de test ». Avec les réseaux de neurones, il existe toujours le risque de sur-apprentissage, c'est-à-dire, quand le réseau a pris trop de paramètres pour représenter une fonction qui n'est pas très complexe. La base de validation permet de mettre en évidence le problème s'il se présente. Le sur apprentissage se traduit par une augmentation de l'erreur sur la base de validation [11].

La figure IV.2 représente l'organigramme qui interprète notre programme structuré en Matlab.

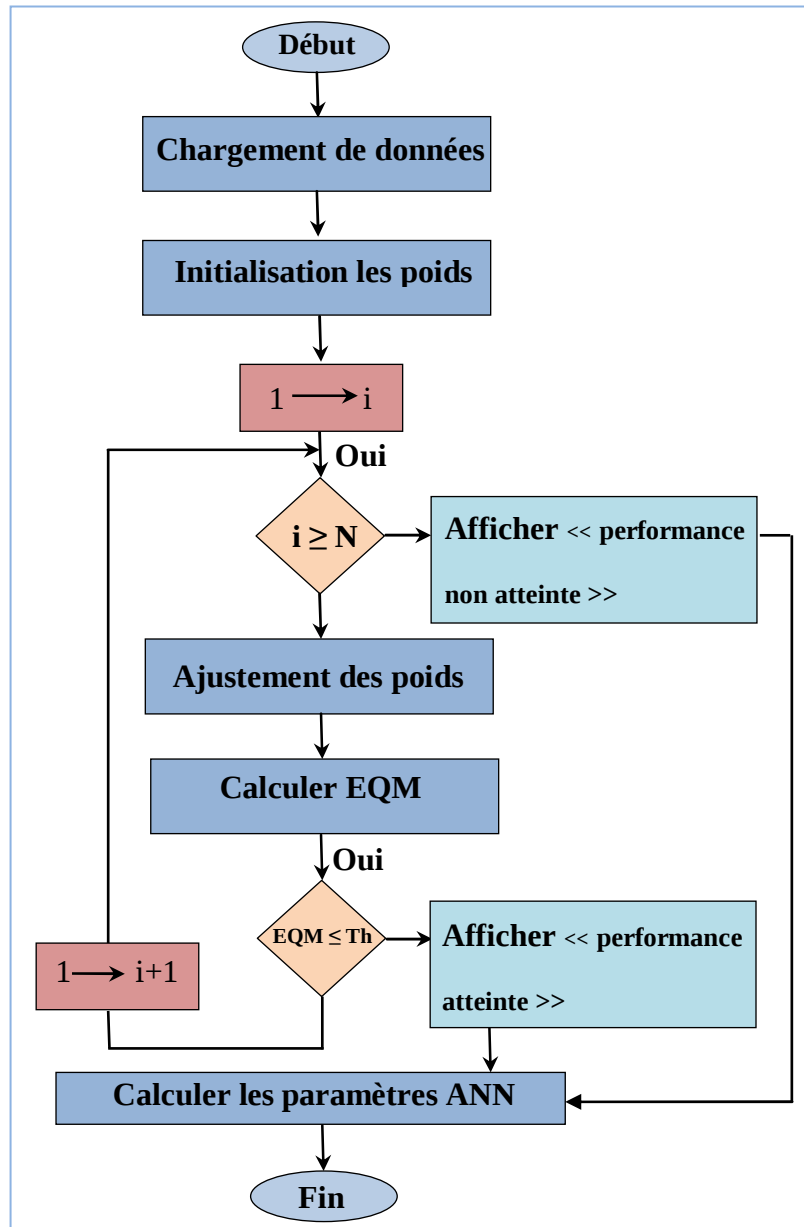


Figure IV.2 Organigramme pour le programme d'apprentissage

Dans notre cas, puisque le nombre des neurones dans la couche de sortie est déterminé par le nombre de sorties du système à modéliser, la cellule solaire possède une seule sortie I « courant » donc un neurone pour la couche de sortie.

Pour que le modèle ANN exprime fidèlement la variation de la réponse de la cellule solaire, il s'agit de trouver le nombre optimal des couches cachées et le nombre de neurones par couche. Nous avons envisagé deux couches, 4 neurones pour la première couche et 5 neurones pour la deuxième couche cachée « figure IV.3 ».

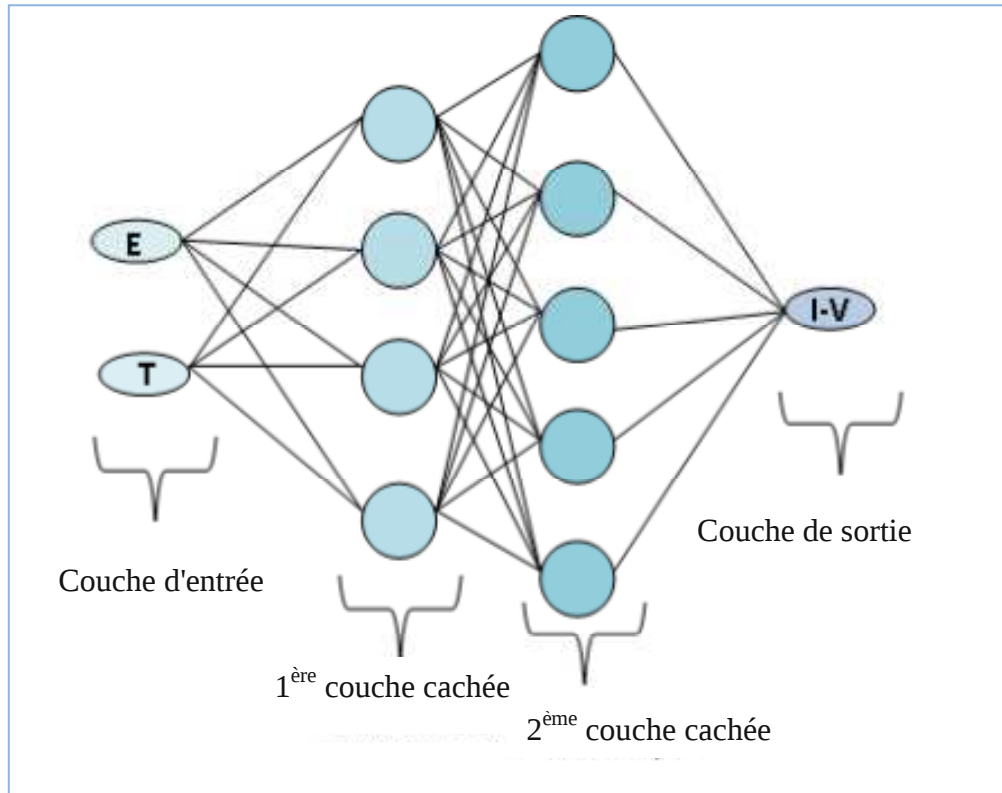


Figure IV.3 - Schémas des couches de neurones de l'architecture optimisée

On a choisi cette architecture par un test de réseau avec plusieurs nombre de neurones dans la première et la deuxième couche (variation de nombre des couches). Après les différents résultats obtenus on a observé que la variation de l'erreur de test converge vers le minimum dans cette architecture ce qui justifie notre choix.

De même pour les choix des types de fonctions d'activations, nombre maximum d'itération. Le test et l'observation, de la variation de l'erreur, pour les différentes valeurs est la solution pour avoir les meilleurs résultats.

Le tableau IV.1 résume tous les paramètres utilisés pour l'optimisation du modèle ANN de la cellule solaire (IBSC).

Base de données		Nombre de neurones		Fonction de transfert
Base de d'apprentissage	300	Couche d'entrée	02	—
Base de test	100	1 ^{ère} couche cachée	04	Log sig
Base de validation	100	2 ^{ème} couche cachée	05	Log sig
		Couche de sortie	01	linear

Tableau IV.1 : Paramètres optimisés du réseau de neurones

IV.2 .3 Mesure de la performance du modèle obtenu

La comparaison entre la base de données initiale et celle obtenue après l'apprentissage, utilisant la base de test, indique que notre modèle exprime fidèlement la variation de la caractéristique I-V de la cellule solaire. Figure IV.4

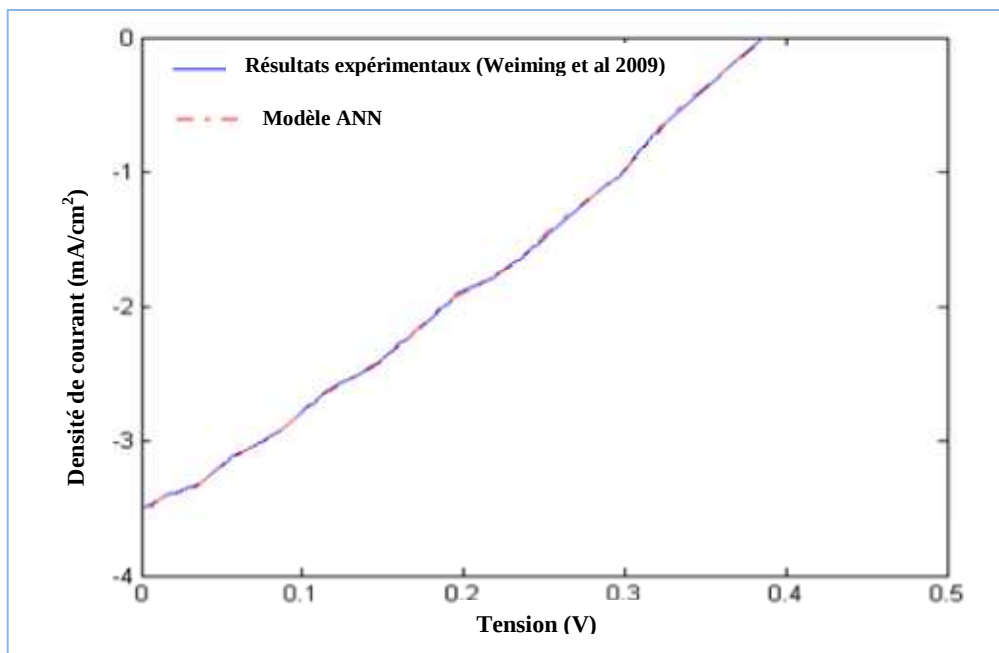


Figure IV.4 Variation de la densité de courant de la cellule en fonction de la tension avec les paramètres ; $T=300K$ et $E= AM1.5$

Après la modélisation, par les réseaux de neurones, de la caractéristique I-V de la cellule solaire (IBSC) on va procéder à l'implantation de ce modèle ANN sur le simulateur ORCAD-PSPICE. Le modèle conçu sur le simulateur servira à la simulation comportementale du modèle direct de la cellule solaire.

IV.3 Présentation du simulateur ORCAD-PSPICE

ORCAD-PSPICE est un programme de simulation qui modélise le comportement d'un circuit électrique contenant des composants analogiques. Il est utilisé avec ORCAD Capture pour la conception. ORCAD-PSPICE permet l'analyse statique, transitoire et dynamique des circuits électroniques, ainsi que l'analyse Paramétrique et Monte-Carlo. Les circuits peuvent contenir les différents dispositifs électroniques résistances, condensateurs, inductances, des sources de tension et de courant, ainsi que des modèles de dispositifs actifs : diodes, transistors bipolaires, transistors à effet de champ à jonction (une bibliothèque de modèles de plus de 11300 modèles analogiques)[10]. ORCAD-PSPICE supporte aussi la modélisation comportementale analogique. Donc on peut décrire les blocs fonctionnels des circuits avec des expressions mathématiques [12-15].

IV.3.1 Implantation du modèle ANN sur ORCAD-PSPICE

L'évaluation des performances d'un circuit avec le logiciel ORCAD-PSPICE avant sa réalisation nous permet d'obtenir un temps de conception réduit et limité ainsi que les coûts de production. La qualité des résultats obtenus de la conception et de la simulation des circuits électroniques dépend de la précision des modèles utilisés. Dans ce cadre, nous proposons une implantation du modèle ANN sur le simulateur ORCAD-PSPICE, cette implantation va nous permettre de tester les performances du modèle [14-16].

IV.3.2 Procédure de l'implantation du modèle

L'utilisation des boîtes ABM « Analog Behavioral Modelling » de la bibliothèque de PSPICE, nous permet d'implanter le modèle ANN sur ce simulateur. Le modèle ANN de la cellule solaire (IBSC) possède 10 neurones, 4 pour la première couche

cachée, 5 pour la deuxième et un seul pour la couche de sortie, chaque neurone du réseau est remplacé par une boîte ABM sur PSPICE. La figure IV.5 représente la structure du réseau des ABM de notre modèle.

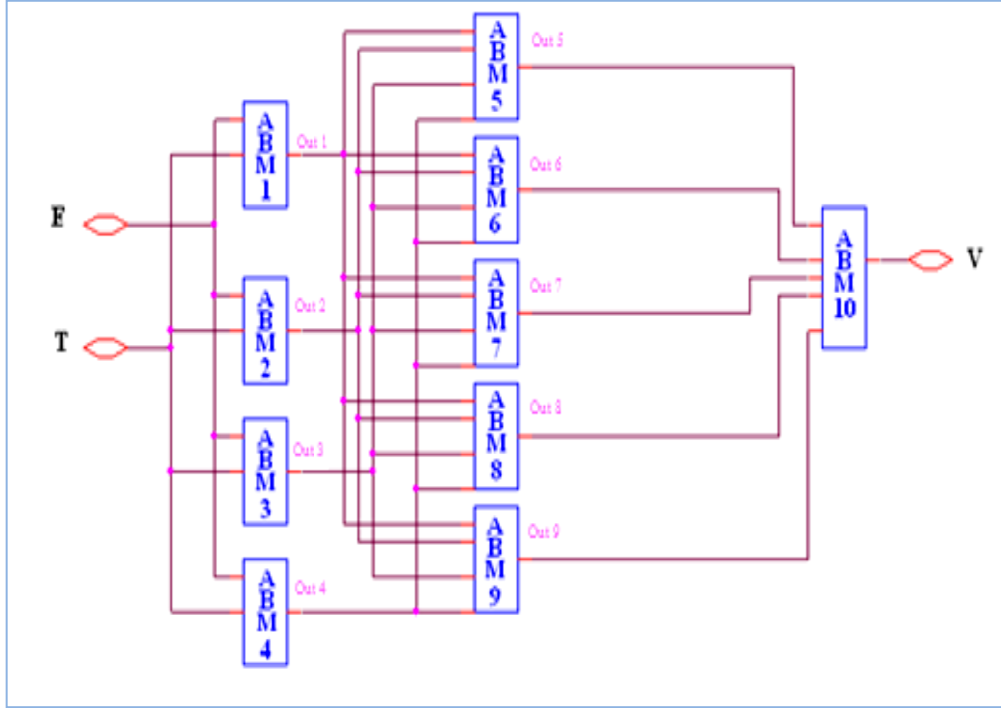


Figure IV.5 Implantation du modèle ANN sur PSPICE

La forme exponentielle dans l'équation est due au choix de la fonction de transfert dans la première couche cachée. B11 est la première bias pour la première couche cachée dans la matrice du bias. "Bni", où n représente le nombre de couches cachée et i le nombre de ABM dans la première couche cachée ($i = 1 \dots 4$). W111 et W112 sont respectivement le premier et le second poids pour la première couche cachée dans la matrice de points. "Wnij", j varie de 1 au nombre d'entrées ($j = 1 \dots \text{nombre d'entrées}$). IN1 et IN2 représentent des paramètres d'entrée qui sont respectivement la température et l'éclairement. Ainsi, nous avons 10 équations à 10 polarisation ($4+5+1$) et 33 poids [$(4 \times 2) + (5 \times 4) + (1 \times 5)$].

La forme générale de l'équation dans la première et la deuxième couches cachées des ABM est de donnée par :

$$\text{Out } i = 1/(1+\exp(-(Bni+Wnij*V(INj)+Wnij*V(INj)+\dots+Wnij*V(INj)))) \quad \text{IV } 1$$

Par exemple, l'équation de ABM1 peut être donné par:

$$\text{Out } 1 = 1/(1+\exp(-(B11+W111*V(IN1)+W112*V(IN2)))) \quad \text{IV-2}$$

IV.4 Validation du modèle

Afin de valider notre modèle ANN proposé, nous avons introduit sur simulateur PSpice ces paramètres d'entrée (la température est fixée à 300 K et sous éclairement E (AM1.5). La figure 6 montre la variation de courant en fonction de la tension de sortie par l'application de notre modèle ANN proposé dans le simulateur PSpice. En utilisant l'analyse, PARAMETRIC DC SWEEP, nous pouvons observer un bon accord entre les données expérimentales et les résultats fournis par simulateur PSpice.

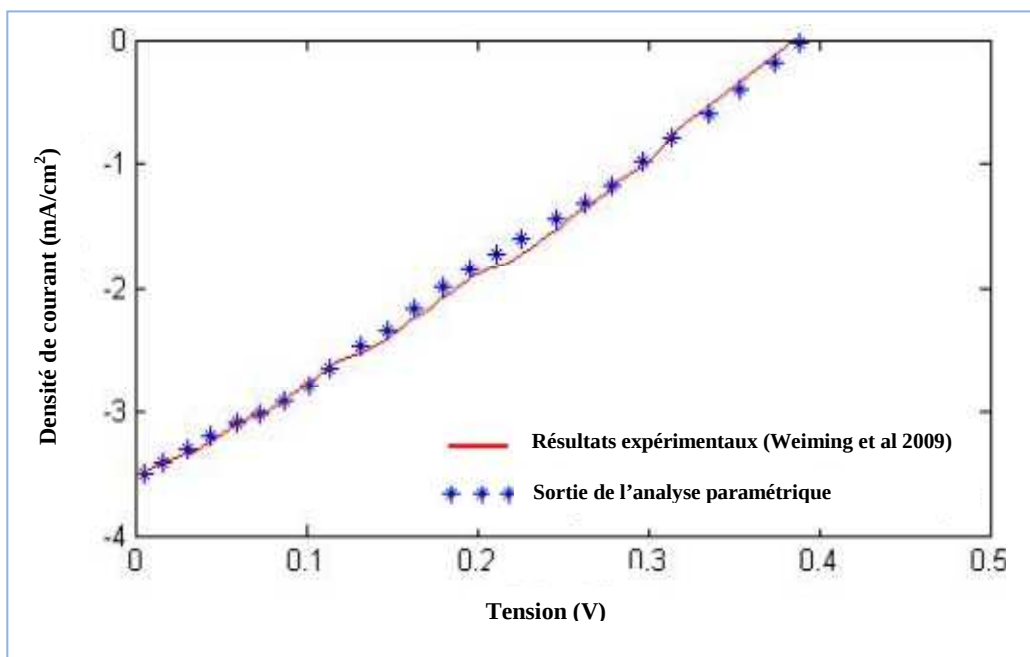


Figure IV.6 Variation de la densité de courant de la cellule en fonction de la tension utilisant le simulateur PSpice

Les résultats obtenus pour notre modèle sont résumés au tableau IV.2. EQM étant l'erreur quadratique moyenne, Th est le seuil d'estimation voulue "Test EQM", J_{cc} représente la densité de courant en court-circuit et V_{oc} représente la tension en circuit ouvert [17].

Entrée		Modèle proposé		Résultats expérimentaux		Erreur quadratique moyenne	
Eclairement (E)	AM1.5	V_{oc} (V)	0.39	V_{oc} (V)	0.38	Test EQM	3.910^{-4}
Température (T)	300 K	J_{cc} (mA/cm ²)	3.5	J_{cc} (mA/cm ²)	3.6	Training EQM	10^{-4}

Tableau IV.2 Comparaison entre les résultats expérimentaux et les résultats simulés.

Sur le tableau IV.2 un bon accord est obtenu entre les résultats de simulation et les résultats expérimentaux. Le modèle proposé peut être utilisé pour prédire d'autres combinaisons d'entrées variables (température et l'éclairement). Ainsi, la simulation paramétrique montre que notre modèle peut être utilisé comme un composant dans la bibliothèque du simulateur PSpice afin d'étudier les dispositifs à base de IBSCs à faible coût et à haut rendement.

IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté la modélisation de la caractéristique I-V de la cellule solaire (IBSC) basé sur Zn-Te:O sous un éclairement et une température fixe. Le modèle proposé nous permet de mettre en évidence la contribution des entrées pour mettre en exergue l'activité de cellule solaire. Les résultats de simulations obtenues dans ce chapitre ont montré la validité du modèle ANN obtenu. Son implantation sur PSPICE a été effectuée avec succès. Les résultats du modèle ont été vérifiés et validés par des résultats expérimentaux [9]. Un bon accord a été trouvé avec ces derniers. De plus, notre étude peut être étendue et améliorée en incluant l'effet d'autres paramètres tels que les résistances (parallèle, série). Ainsi, de nouveaux modèles peuvent être trouvés. Notre modèle est considéré comme une base de travail pour développer Zn-Te:O ; d'autres alliages et matériaux pour une meilleure efficacité de conversion des cellules solaires peuvent être explorés.

La méthode utilisée dans ce chapitre peut être étendue à d'autres cellules solaires pour valider les travaux expérimentaux et envisager de réaliser des dispositifs photovoltaïques prometteurs à faible coût et à haut rendement.

Références bibliographiques

- [1] Schokley and Queisser, « Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cell », J. Appl. Phys, Vol 41, 510–519,1961.
- [2] Luque A and Martí, « A increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels », Phys. Rev. Letter, Vol 78, pp 5014–5017,1997.
- [3] Bremner S P and Honsberg C B, « Intermediate band solar cell with non-ideal band structure under AM1.5 spectrum », Photovoltaic Specialists Conference IEEE,pp 21–24, 2012.
- [4] Luque A, Mellor A, Ramiro I, Antolín E, Tobías I and Martí, « A Interband absorption of photons by extended states in intermediate band solar cells », Sol. Energy Mater. Soler. Cells, Vol 115, pp 138–144, 2013.
- [5] Nozik A J, « Quantum structured solar cells », Nano-structured materials for solar energy conversionpp.pp.485–516, 2006.
- [6] Luque A, Martí A and Cuadra L, « Thermodynamic consistency of sub-band gap absorbing solar cell proposals », IEEE Trans. Electron Dev, Vol 48, pp 2118–2124,2001.
- [7] Luque A, Martí A, Stanley C, López N, Cuadra L, Zhou D and Mc-Kee, « A general equivalent circuit for intermediate band devices: Potentials, currents and electroluminescence », J. Appl. Phys, Vol 96, pp 903–909,2004.
- [8] Martí A and Luque A, « Next generation photovoltaic: High efficiency through full spectrum utilization », Institute of Physics Publishing, Bristol, 2004.
- [9] Weiming Wang, Lin Albert S and Phillips J D, « Intermediate-band photovoltaic solar cell based on ZnTe:O », Appl. Phys. Letter, Vol 95, pp 11103-3, 2009.
- [10] Kouda Souhil, Zohir Dibi, Fayçal Meddour, Samir Barra and Abdelghani Dendouga, « Optimization of TiO2 concentration effect for a chemical humidity sensing mechanism », Sensor Review, Vol 31, pp 18 – 25,2011.
- [11] Khelifia S, Verschraegen J, Burgelman M and Belghachia A, « Numerical simulation of the impurity photovoltaic effect in silicon solar cells », Renew Energy, Vol 33, pp 293-298,2008.
- [12] Rahman M T, Mansur A A, Mahmud N A, Islam M and Jamal T, « Development of electrical behavioral model of an arbitrary solar cell to amend the PSpice simulation performance », Power Energy Syst. IEEE,pp 1–5,2011.
- [13] Mekki H, Mellit A, Salhi H and Belhout K, « Modeling and simulation of photovoltaic panel based on artificial neural networks and VHDL-language »,

- 4th International conference on computer integrated manufacturing IEEE,pp 58–61, 2007.
- [14] Moufdi H, Smail B and Hamza A, « Neural network for modeling solar panel », *Int. J. Energy* , Vol 6,pp 09–16, 2012.
- [15] Giordano F, Guidobaldi A, Petrolati E, Mastroianni S, Brown T M, Reale A and Di Carlo A, « PSpice models for dye solar cells and modules. Numerical simulation of optoelectronic devices », (*NUSOD*), Vol 10,pp 43–44, 2011.
- [16] Han L, Koide N, Chiba Y and Mitate T, « Modeling of an equivalent circuit for dye-sensitized solar cells », *Appl. Phys. Letter*,Vol 84,pp. 2433, 2004.
- [17] B.Lakehal, Z. Dibi, N. Lakhdar and A. Dendouga, « Electrical equivalent model of intermediate band solar cell using PSpice », *Sādhana. Springer*Vol, 40, pp 1473–1479, 2015.

Chapitre V

*Détermination de quelques propriétés
de la cellule solaire Organique à base
de phtalocyanine par la DFT.*

Actuellement, les cellules à bases de matériaux organiques apparaissent comme une alternative aux cellules inorganiques. Cela peut permettre la réalisation de composants photovoltaïques, employant des couches minces, de grandes surfaces et flexibles, économisant ainsi la quantité de matière utilisée.

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques organiques est basée sur le transfert de charges entre un polymère donneur d'électrons et une molécule accepteur d'électrons qui permet la dissociation des excitons photo-générées. De plus, l'usage d'une région active formée d'une hétérojonction volumique entre le donneur et l'accepteur assure la dissociation de la majorité des excitons.

Nous visons à travers ce chapitre une étude théorique des cellules organiques et organométalliques, c'est un travail de recherche qui a été effectué en collaboration avec le laboratoire de chimie physique théorique de CNRS de Lyon, France.

L'objectif visé par ce travail de recherche est d'étudier théoriquement les propriétés électroniques et optiques du système donneur-accepteur organométallique formés de phthalocyanine et de différent métaux (Fe, Ni, Co, Cu, Na, Mn) afin de déterminer le gap de ces nouvelles structures qui peuvent servir comme base de cellule solaire.

Les propriétés géométriques et électroniques des différents systèmes dans leur état fondamental sont étudiées à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), alors que leurs propriétés optiques sont obtenues grâce à la théorie de la fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFT). Le logiciel Amsterdam Density Functional (ADF version 2014) a été employé pour cette étude.

V.1 -Théorie des calculs DFT et TDDFT

V.1.1 Équation de Schrödinger

On écrit l'équation de Schrödinger $H\psi = E\psi$, indépendante du temps, cet opérateur prend en compte 5 interactions : l'énergie cinétique des noyaux T_N , l'énergie cinétique des électrons T_e , la répulsion électrostatique internucléaire V_{NN} et inter

électronique V_{ee} et enfin, l'attraction des électrons vers les noyaux V_{Ne} . On peut développer l'Hamiltonien selon cette équation :

$$H = T_N + T_e + V_{NN} + V_{ee} + V_{Ne} \quad V.1$$

Ce qui donne avec son expression analytique :

$$H = -\sum_k \frac{\hbar^2}{2m_k} \nabla_k^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + \sum_{k<l} \frac{e^2 Z_k Z_l}{\|R_k - R_l\|} + \sum_{i<j} \frac{e^2}{\|r_i - r_j\|} + \sum_k \sum_i \frac{e^2 Z_k}{\|R_k - r_i\|} \quad V.2$$

Les indices i et j font référence aux électrons, k et l aux noyaux. Les $Z_{k,l}$ sont les charges nucléaires et e est la charge élémentaire, donc charge électronique.

L'équation de Schrödinger n'a de solution analytique exacte que pour les atomes hydrogénoïdes, c'est-à-dire pour les atomes n'ayant qu'un seul électron. Dans tous les autres cas, il sera nécessaire d'effectuer quelques approximations sur la nature de la fonction d'onde ψ .

Une des spécificités de la fonction d'onde quelconque est qu'elle doit être orthonormée. L'intégration de son produit conjugué vaut l'unité et les produits croisés sont nuls.

$$\int \psi_j^* \psi_i dr = \delta_{ij} \quad V.3$$

Où δ_{ij} symbole de Kronecker, vaut 1 pour $i = j$ et 0 pour $i \neq j$.

V.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer

Il s'agit de la première approximation de la chimie quantique. Elle est basée sur le fait de l'énorme différence de masse entre noyaux et électrons. En effet, les noyaux sont environ 2000 fois plus lourds que les électrons. Par conséquent, on peut considérer qu'ils vont rester immobiles par rapport aux électrons (ce qui nous intéresse car ce sont les électrons qui participent à la liaison chimique). Ainsi, le terme d'énergie cinétique des noyaux T_N peut être négligé, les positions des noyaux deviennent finalement des paramètres de l'équation de Schrödinger dont l'Hamiltonien peut être divisé en deux termes :

$$H = H_e + V_{NN} \quad V.4$$

Où

$$H_e = T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad V.5$$

Est appelé Hamiltonien électronique et où V_{NN} , la répulsion électrostatique internucléaire, est une constante. Par conséquent, résoudre l'équation de Schrödinger revient à chercher les fonctions d'ondes électroniques $\phi(\{r\})$ qui ne dépendront que des positions des électrons et qui seront solutions de l'équation de Schrödinger électronique $H_e\phi(\{r\}) = E_e\phi(\{r\})$. L'énergie totale E du système considéré sera donc la somme de l'énergie électronique E_e et du potentiel d'interaction électrostatique internucléaire V_{NN} .

V.2 La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Une molécule ou un solide n'est rien d'autre qu'un ensemble de N noyaux et de n électrons en interaction, et l'expression formelle de l'Hamiltonien d'un tel système est bien connue. Cependant, le traitement quantique d'un problème à plusieurs corps en interaction est d'une complexité redoutable, de sorte qu'une résolution directe de l'équation de Schrödinger n'est pas envisageable. Un formalisme datant des années 1960 appelé Density Functional Theory (DFT) est à la base de nombreux calculs numériques dont les résultats sont généralement en très bon accord avec l'expérience. Bien que ses fondements soient assez anciens, ce n'est qu'après l'accroissement significatif de la puissance de calcul qu'on s'est rendu compte de la force de cette théorie, ce qui a finalement rapporté un prix Nobel de chimie à Walter Kohn en 1998 [1].

La théorie de la fonctionnelle de la densité est basée sur le postulat proposé par Thomas et Fermi [2,3] selon lequel toute propriété électronique d'un système peut être calculée à partir de sa densité électronique.

Pour faire intervenir la densité électronique, la plus simple approche a été de considérer le système comme étant classique. Dans un tel cas, les composantes potentielles sont directement déterminées, ainsi :

$$V_{ne}[\rho(r)] = \sum_k^{noyaux} \int \frac{Z_k}{|r-r_k|} \rho(r) dr \quad V.6$$

Attraction noyaux-électrons

$$V_{ee}[\rho(r)] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1-r_2|} dr_1 dr_2 \quad V.7$$

Répulsion électronique

En ce qui concerne la partie cinétique, ils ont utilisé la mécanique statistique des fermions afin de déterminer l'énergie :

$$T[\rho(r)] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{2/3} \int \rho^{5/3}(r) dr \quad V.8$$

Ces trois composantes sont dépendantes de la densité qui elle-même est dépendante de la position r (3 coordonnées de l'espace). L'énergie est donc fonction d'une fonction : la densité est donc une fonctionnelle.

Nous avons vu que la densité détermine le potentiel extérieur, qui détermine l'hamiltonien et la fonction d'onde. Avec tous ces éléments, l'énergie est donc calculable. Cependant, nous n'avons pas simplifié le problème de la théorie des orbitales moléculaires car au final, il faut résoudre l'équation de Schrödinger ce qui est assez difficile. Pour cela, Kohn et Sham [4,5] ont imaginé un Hamiltonien correspondant à un système d'électrons indépendants. L'hamiltonien est donc une somme d'opérateurs mono électroniques avec des déterminants de Slater des fonctions propres mono électroniques comme fonctions propres et la somme des valeurs propres mono électroniques comme valeurs propres. L'intérêt de cette reformulation est que l'on va pouvoir écrire les équations de Kohn-Sham mono électroniques qui peuvent être résolues analytiquement, contrairement à l'équation de Schrödinger. Ainsi l'énergie s'écrira

$$E[\rho(r)] = T_e[\rho(r)] + V_{Ne}[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + \Delta T[\rho(r)] + \Delta V_{ee}[\rho(r)] \quad V.9$$

Dans le membre de droite, l'énergie cinétique des électrons indépendants, l'interaction noyau-électrons, l'interaction électron-électron, la correction de l'énergie cinétique suivant la nature de l'interaction des électrons et enfin les autres corrections du potentiel de répulsion électron-électron.

Par la suite, en introduisant les expressions des orbitales pour la densité, on peut réécrire l'énergie ainsi :

$$E[\rho(r)] = \sum_i^N \left(\left\langle \chi_i \left| \frac{1}{2} \nabla^2 \right| \chi_i \right\rangle - \left\langle \chi_i \left| \sum_k^{noyau} \frac{Z_k}{|r_i - r_k|} \right| \chi_i \right\rangle \right) + \sum_i^N \left\langle \chi_i \left| \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r')}{|r_i - r'|} dr' \right| \chi_i \right\rangle + E_{xc}[\rho(r)] \quad V.10$$

avec N le nombre total d'électrons et la densité pour une fonction d'onde de forme de déterminant de Slater est définie par :

$$\rho = \sum_i^N \langle \chi_i | \chi_i \rangle \quad V.11$$

On remarque que les termes correctifs ΔT et ΔV_{ee} ont été regroupés dans un seul terme E_{xc} qui fait référence à l'énergie d'échange-corrélation. C'est un terme très difficile à comprendre et à calculer car dans ce terme sont inclus non seulement les effets d'échange-corrélation de la mécanique quantique mais aussi, les corrections classiques de l'auto-interaction et la différence d'énergie cinétique entre le modèle fictif d'électrons indépendants et le modèle réel.

Le véritable problème dans l'utilisation de la méthode de Kohn-Sham (dans les méthodes DFT en général) consiste à trouver une bonne approximation de la fonctionnelle E_{xc} qui, bien qu'universelle, est inconnue. On sait simplement qu'elle dépend du «trou d'échange-corrélation» $\rho_{xc}(r_1, r_2)$ qui n'est autre que la zone de déplétion créée autour de l'électron par un autre électron du fait du respect du principe de Pauli (pour les électrons de même spin) et de la répulsion de coulomb qui empêche deux électrons de se trouver au même endroit au même moment.

$$E_{xc}[\rho] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1) \rho_{xc}(r_1, r_2)}{r_{12}} d^3 r_1 d^3 r_2 \quad V.12$$

En pratique, il existe plusieurs familles de fonctionnelles utilisées en DFT pour tenter de représenter E_{xc} : signalons les fonctionnelles LDA (Local Density approximation) [6,7] basées sur le modèle du gaz uniforme d'électrons et les fonctionnelles GGA (Generalized Gradient Approximation) faisant intervenir le gradient de la densité électronique. Les résultats DFT présentés dans ce travail ont été effectués en utilisant des fonctionnelles de type GGA[5].

V.3 .Les systèmes étudiés

Les dérivés des métaux phtalocyanine (MPC) sont des macromolécules conjuguées de structure plane. Ces systèmes présentent des propriétés électroniques excellentes d'intérêt très particulier dans les domaines de la conversion de l'énergie solaire [8,9], Semi-conducteurs [10-12] et la catalyse [13-17].

La figure V.1 représente le système étudié à base de phtalocyanine ou ($M = \text{Mn}^{2+}$, Fe^{2+} , Co^{2+} , Ni^{2+} and Cu^{2+}) dans le but d'étudier les propriétés électroniques et optiques.

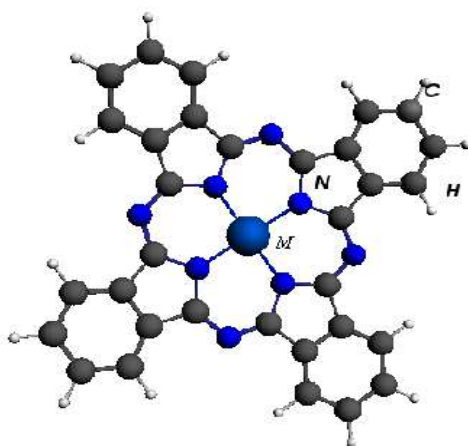


Figure V.1 Structure chimique de MPC

V.4 Résultats préliminaire

Ces systèmes absorbent dans le même domaine de longueurs d'onde. Leur comparaison montre un déplacement hyperchromique en changeant le métal où on note le déplacement le plus important pour la structure CuPc. (Figure V.2). Les transitions observées dans ce domaine mettent en jeu la HOMO de ces systèmes en accord l'écart énergétique calculé pour les différents métaux (0.788eV, 1.868eV, 2.657eV et 2.464eV) respectivement. Le Tableaux V.1 montre les différentes structures des bandes énergétiques

MPc	Energies (ev)	HOMO	LUMO	Gap Eg (ev)
CoPc	-417.879	-5.094	-4.306	0.788
MnPc	-419.890	-6.329	-4.461	1.868
CuPc	-413.612	-6.114	-3.457	2.657
NaPc	-409.517	-5.892	-3.428	2.464

Tableaux V.1 Les bandes énergétiques pour les différentes structures

Pour le CoPc, le spectre enveloppe trois excitations dans la région 530 à 880nm figure V.2 dont deux sont à force d'oscillateur élevé attribuées aux maximales d'absorptions situées à 580 et 660nm respectivement. La première excitation correspond à une transition HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) vers la LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) indiquant un transfert intra charge (ICT). La deuxième excitation correspond à une transition de la $HOMO^{-1}$ vers la LUMO indiquant un transfert de charge ligand métal (LMCT).

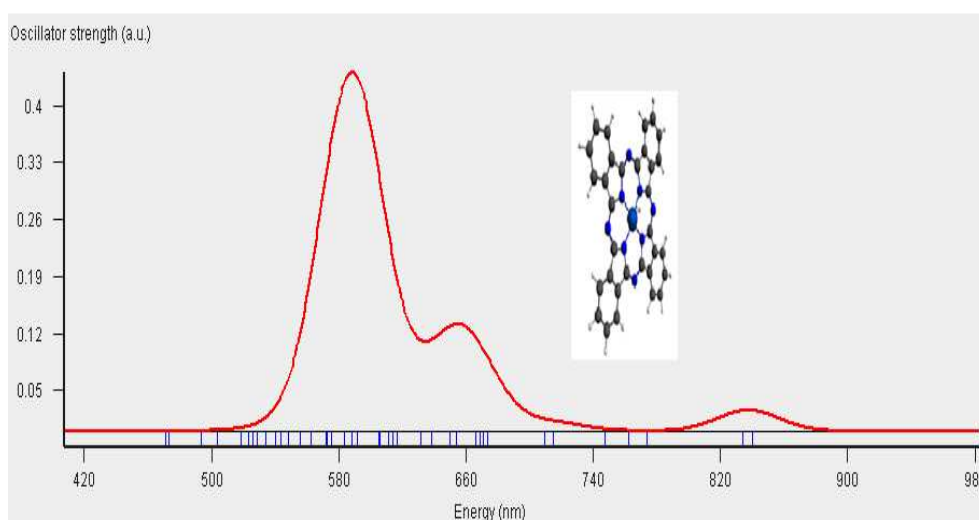


Figure V.2 Spectre d'absorption pour le Co Pc

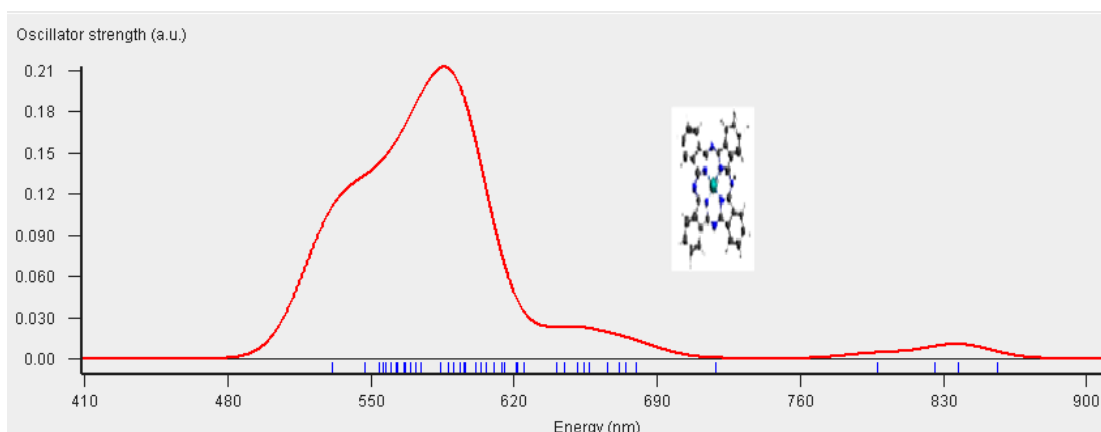


Figure V.3 Spectre d'absorption pour le Mn Pc

Presque les mêmes excitations sont observées pour le spectre du MnPc figure V.3, mais avec des intensités différentes. Le premier pic d'absorption de ce spectre se

situé à 580 nm à force d'oscillateur égal à 0.2. Le deuxième pic à 650 nm. et le troisième pic se situe à 840 nm.

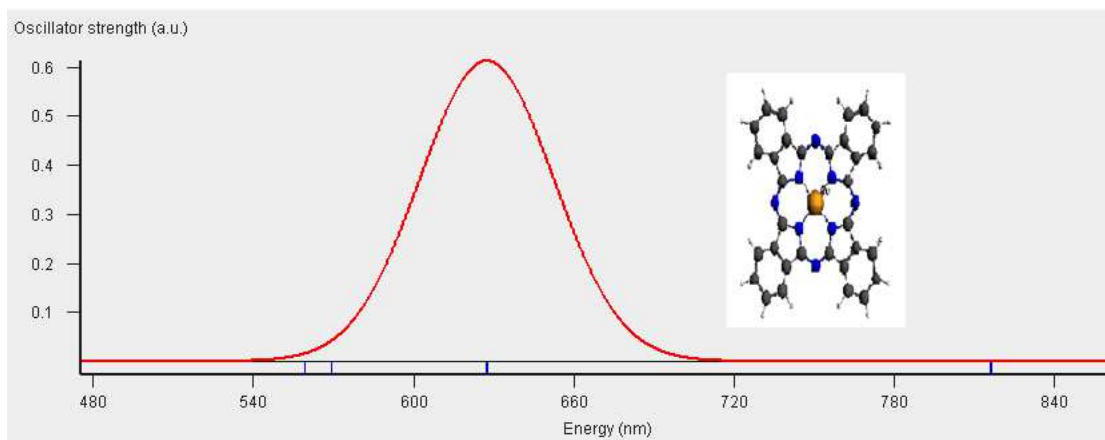


Figure V.4 Spectre d'absorption pour le Cu Pc

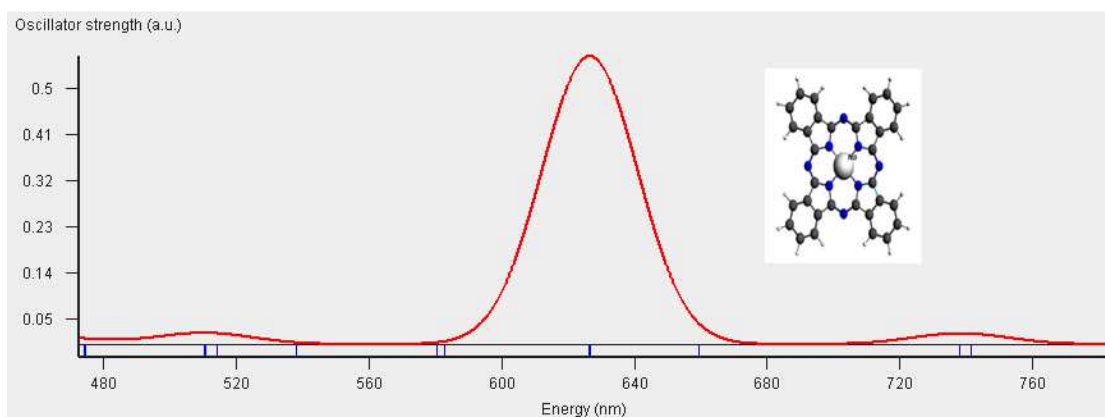


Figure V.5 Spectre d'absorption pour le Na Pc

Presque les mêmes excitations sont observées pour le spectre du Cu Pc et Na Pc figures V.4 et V.5, mais avec des intensités différentes. La première bande d'absorption se situe à 630 nm à force d'oscillateur 0.5 et 0.6 pour Na Pc et Cu Pc respectivement.

On remarque que toutes les transitions qui constituent ces spectres sont associées à un transfert de charge ICT [18].

V.5 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les résultats de la modélisation moléculaire des composés de phtalocyanine utilisés comme des cellules photovoltaïques. Où on a obtenu les spectres d'absorption de chaque structure et les bandes énergétiques (HOMO-LUMO) ce qui va nous servir dans le futur à étudier les caractéristiques électriques telles que (I-V, V_{CO} , I_{CC} , FF et le rendement) de ces cellules.

Références bibliographiques

- [1] Walter Kohn and John A. Pople, « development of the density-functional theory », The Nobel Prize in Chemistry 1998
- [2] Thomas, L. H., Proc, « The calculation of atomic fields », Cambridge Phil. Soc Vol 23, pp.542,1927.
- [3] Fermi, Enrico, « A statistical method for the determination of some priory atoms », dans Rend. Accad. Naz. Lincei, Vol 6, pp. 602,1927.
- [4] Hohenberg, P.; Kohn, W, « Inhomogeneous Electron Gas », Phys. Rev, Vol 136, pp 864, 1964.
- [5] Kohn, W.; Sham, L. J, « Self-consistent equations including exchange and correlation effects », Phys. Rev., Vol 140, pp 1113,1965.
- [6] Vosko, S. H.; Wilk, L.; Nusair, M. Can, « Accurate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis », J. Phys., Vol 58, pp 1200,1980.
- [7] Ziegler, T, « Approximate density functional theory as a practical tool in molecular energetics and dynamics », Chem. Rev., Vol 91, pp 651, 1991.
- [8] E.M.Bauer, M.P.Donzello, C.Ercolani, E.Masetti, S.Panero, G.Ricciardi, A.Rosa, A.Chiesi-villa, C.Rizzoli, « Stapled Bis (phthalocyaninato) niobium(IV), Pc2Nb: X-ray Crystal Structure, Chemical and Electrochemical Behavior, and Theoretical Studies. Perspectives for the Use of Pc2Nb (Thin Films) as an “Optically Passive Electrode” in Electrochromic Devices », Inorg. Chem, Vol 42, 283-293, 2003
- [9] P.Y. Reddy, L. Giribabu, C. Lyness, H.J. Snaith, C. Vijaykumar, M. Chandrasekharam, M. Lakshmikantam, J. Yum, K. Kalyanasundaram, M.Gratzel, M.K.Nazeeruddin, « Efficient Sensitization of Nanocrystalline TiO₂ Films by a Near-IR-Absorbing Unsymmetrical Zinc Phthalocyanine », Angew. Chem. Int, Vol 46, pp 373–376, 2007.
- [10] A. Muranaka, M. Okuda, N. Kobayashi, K. Somers, A. Ceulemans, « Recognition of Chiral Catechols Using Oxo–Titanium Phthalocyanine », J. Am. Chem. Soc, Vol 126, pp 4596–4604, 2004.
- [11] Q.M. Zhang, H.F. Li, M. Poh, F. Xia, Z.Y. Chng, H.S. Xu, C. Huang, « An all-organic composite actuator material with a high dielectric constant », Nature Vol 419, pp 284–287, 2002.
- [12] E. Barrena, X.N. Zhang, B.N. Mbenkum, T. Lohmueller, T.N. Krauss, M. Kelsch, P.A. Aken, J.P. Spatz, H. Dosch, « Self-assembly of phthalocyanine nanotubes by vapor-phase transport », Chem Phys, Vol 9, pp 1114–1116, 2008.

-
- [13] J.F. Ma, Y.N. Liu, P. Zhang, J. Wang, « A simple direct borohydride fuel cell with a cobalt phthalocyanine catalyzed cathode », *Electrochem. Commun.*, Vol 10, pp 100–102, 2008.
- [14] M.R. Nabid, R. Sedghi, P.R. Jamaat, N. Safari, A.A. Entezami, « Catalytic oxidative polymerization of aniline by using transition-metal tetrasulfonated phthalocyanine », *Appl. Catal. A*, Vol 328, pp 52–57, 2007.
- [15] A. Sorokin, J.-L. Seris, B. Meunier, « Efficient oxidative dechlorination and aromatic ring cleavage of chlorinated phenols catalyzed by iron sulfophthalocyanine.», *Science*, Vol 268, pp 1163–1166, 1995.
- [16] F.C. Moraes, M.F. Cabral, S.A.S. Machado, L.H. Mascaro, « Electrocatalytic behavior of glassy carbon electrodes modified with multiwalled carbon nanotubes and cobalt phthalocyanine for selective analysis of dopamine in presence of ascorbic acid.», *Electroanalysis*, Vol 20, pp 851–857, 2008.
- [17] P. Kluson, M. Drobek, T. Strasak, J. Krysa, M. Karaskova, J. Rakusan, « Sulphonated phthalocyanines as effective oxidation photocatalysts for visible and UV light regions.», *J. Mol. Catal. A*, Vol 272, pp 213–219, 2007.
- [18] Brahim.Lakehal, Zohir. Dibi, Nacereddine. Lakhdar, « photovoltaic cells based on phthalocyanine with differents structures.», 19th Tunisia chemistry, pp 155, December 2016

CONCLUSION GENERALE
Et
Perspectives

L'intérêt scientifique motivé par le potentiel commercial a conduit à une recherche accrue dans le domaine du photovoltaïque qui s'est considérablement développé durant ces vingt dernières années. La recherche que nous avons menée avait pour but de développer des nouvelles approches analytiques en utilisant les réseaux de neurones et les algorithmes génétiques permettant d'optimiser les paramètres physiques d'une cellule photovoltaïque et aboutir à créer un nouveau composant électronique permettant une simulation sous Orcad-Pspice.

Ce travail de thèse a porté sur la modélisation des cellules de troisième génération. Tout d'abord nous avons rappelé quelques notions sur le rayonnement solaire et son application dans le domaine photovoltaïque. Nous avons ensuite expliqué le fonctionnement des cellules photovoltaïques et leurs caractéristiques principales ainsi que les paramètres limitant leur rendement et leur coût. Puis nous avons abordé les différentes générations de cellules solaires.

Nous avons exposé les principes de base des techniques de modélisation reposant sur les réseaux de neurone et les Algorithmes génétiques tout en mettant un accent particulier sur les avantages et les inconvénients de ces techniques et l'ensemble des étapes d'optimisation de la cellule photovoltaïque de type bande intermédiaire.

Nous nous sommes particulièrement concentrés sur la proposition d'une nouvelle approche basée sur les Algorithmes Génétiques qui permet d'optimiser les paramètres géométriques et physiques dans le but d'obtenir un rendement max de conversion .

Pour la validation de notre approche, les résultats obtenus sont comparés avec des données expérimentales. Nous avons montré que l'utilisation des AGs a permis de trouver le maximum possible du rendement de conversion.

L'approche proposée sera utile pour renseigner et montrer les effets physiques de la bande intermédiaire et les effets de la densité des états électroniques de la bande intermédiaire sur la performance de la cellule solaire afin de prédire les caractéristiques souhaitables, avant de les élaborer.

Tout au long de ce travail nous avons également cherché à développer des modèles à base des réseaux de neurone pour reproduire fidèlement les caractéristiques des cellules à bande intermédiaire (IBC) et les procédures détaillées pour créer le schéma électronique d'un modèle Spice qui permet l'utilisation d'une cellule solaire à bande intermédiaire sous OrcadPspice. pour une simulation.

Les résultats obtenus nous encouragent à procéder à des réflexions supplémentaires dans ce domaine. Les méthodes et les techniques développées peuvent être étendues à d'autres types de cellules solaires. Pour cela plusieurs voies sont à envisager :

- Le modèle obtenu pour la structure Zn-Te:O avec les réseaux de neurones (MLP) nous encourage à étendre l'étude par d'autres méthodes tel que GP (Gaussian Processes), ce travail est mené en collaboration avec l'université de Trento, Italie
- Les études menées sur les MPc montrent l'intérêt des copolymères de type donneur-accepteur dans le domaine du photovoltaïque organique par l'intermédiaire des composés modèles et ouvre de larges perspectives futures. Une étude comparative a été menée sur l'ensemble des structures étudiées au chapitre 5. Ce travail vise à calculer les caractéristiques électriques et optiques des différentes structures afin de mettre en exergue les cellules photovoltaïques les plus efficaces. Ce travail est en cours en collaboration avec CNRS Lyon, France.