




Modélisation optique des cellules solaires organiques

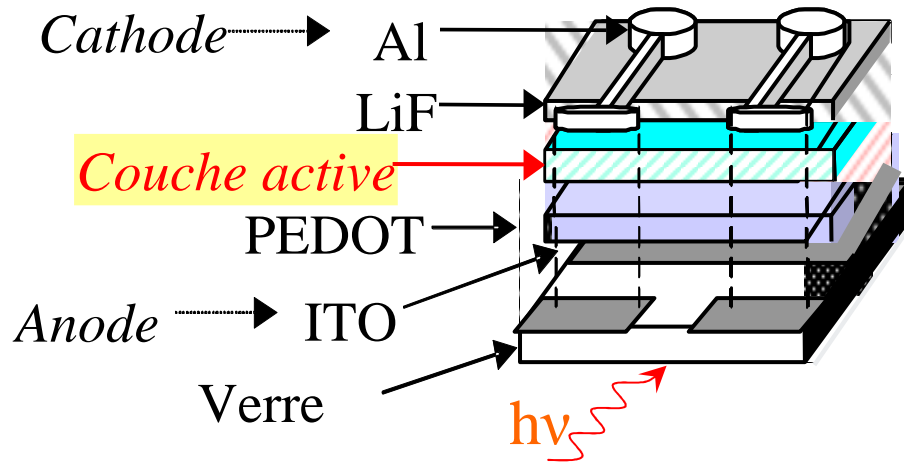
F. Monestier, J.J. Simon, Ph. Torchio, M. Cathelinaud* et L. Escoubas

* Laboratoire TECSEN U.M.R.- C.N.R.S. 6122 Marseille

* Institut Fresnel U.M.R.- C.N.R.S. 6133 Marseille

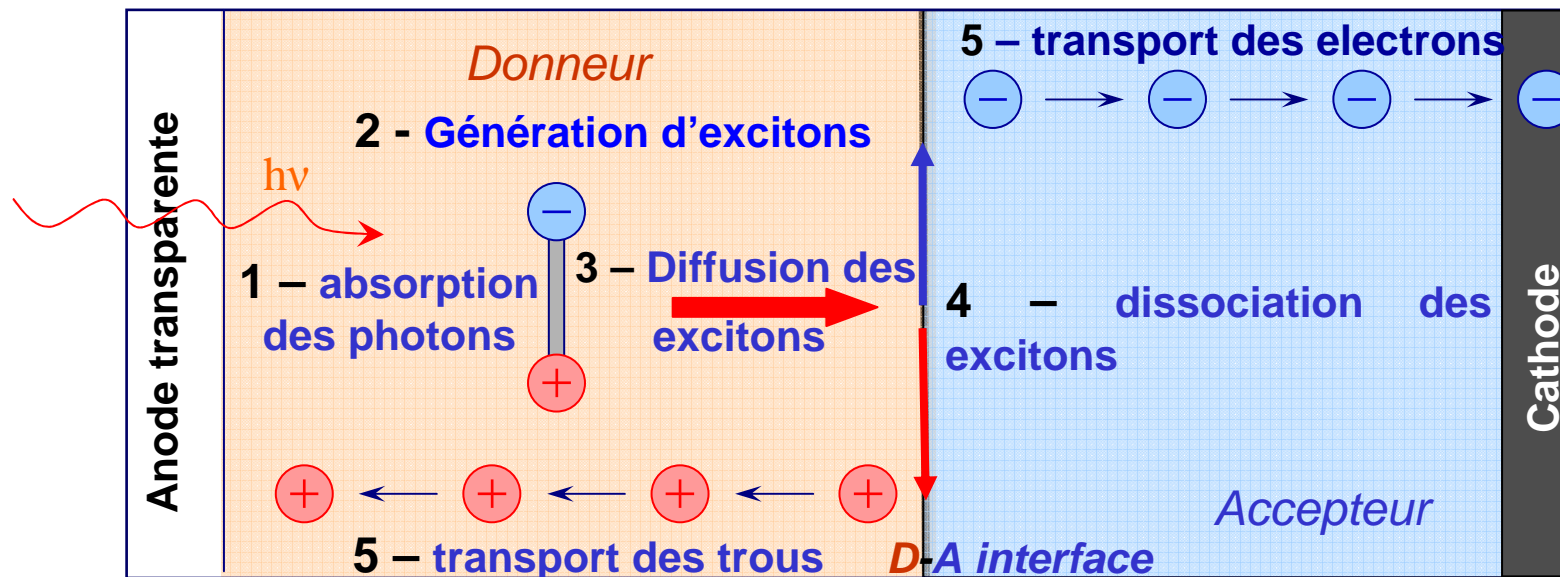
- 
- ❑ **Introduction**
 - ❑ **Modélisation et optimisation optique de cellules organiques**
 - ❑ **Exemples d'optimisation**
 - ❑ **Exemples de modélisation**
 - ❑ **Conclusion**

STRUCTURE ET PRINCIPE D'UNE CELLULE SOLAIRE ORGANIQUE



- + Absorption $\alpha = 10^5 \text{ cm}^{-1}$
- L_{diff} excitonique (qq 10 nm)
- Gap (2-3 eV)
 - Mobilités ($10^{-4} \text{ cm}^2/\text{Vs}$)

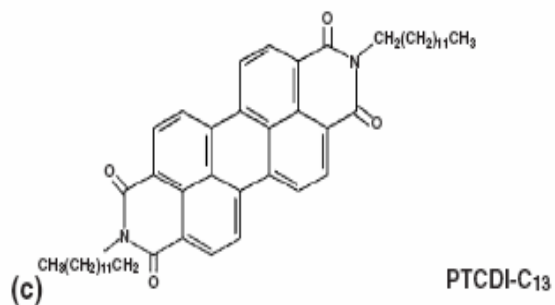
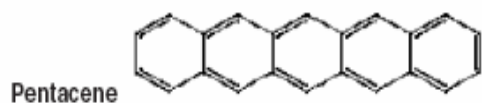
Conversion photovoltaïque dans une cellule solaire organique :



STRUCTURES DES COUCHES ACTIVES

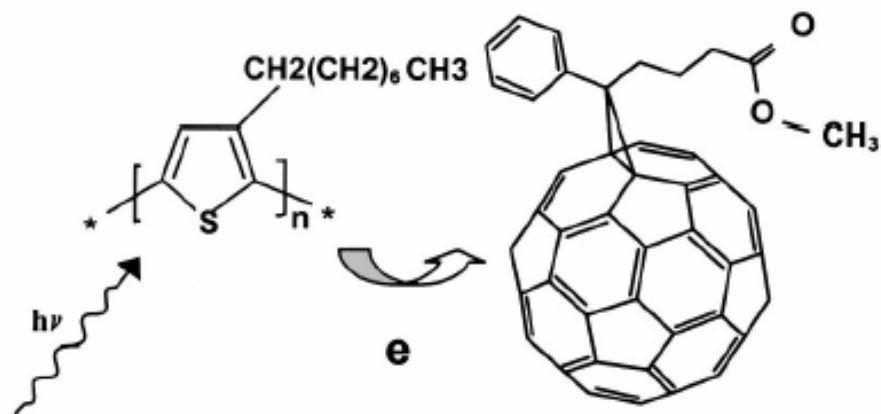
Jonction PN

Pentacene (donneur)



PTCDI (accepteur)

Réseau interpénétré (blend)



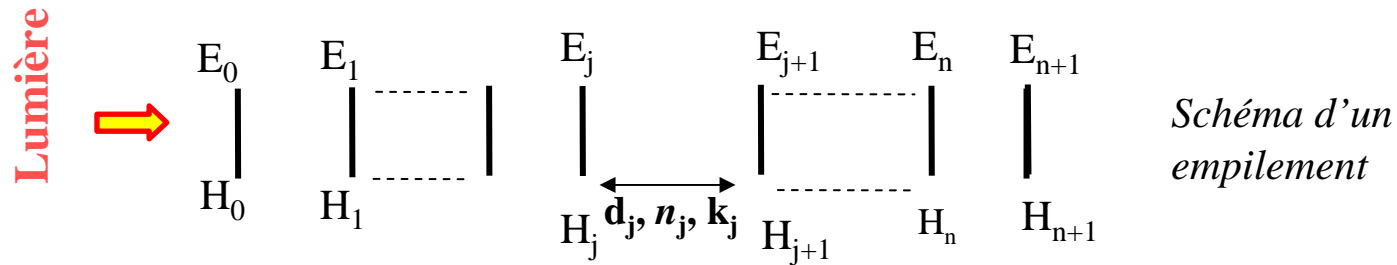
P3HT

PCBM

(donneur)

(accepteur)

MODELISATION DE LA CELLULE



1 Composants en couches minces ($d_j \sim 100 \text{ nm}$) \Rightarrow Effets interférentiels

2 Possibilité d'ajuster les différentes épaisseurs des films afin que le champ électromagnétique soit maximum dans la couche active du composant

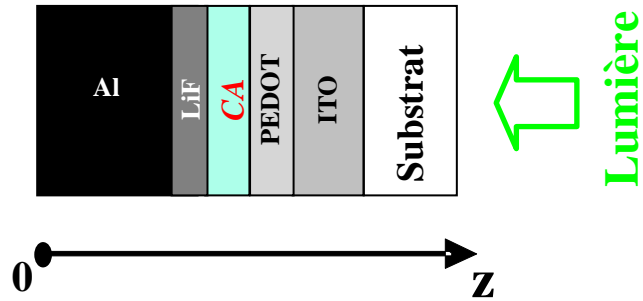
Système matriciel reliant les composantes tangentielles E and H :

$$\begin{bmatrix} E_{j-1} \\ H_{j-1} \end{bmatrix} = \prod_{j=0}^{n+1} \begin{bmatrix} \cos\delta_j & -\frac{j}{Y_j} \sin\delta_j \\ -jY_j \sin\delta_j & \cos\delta_j \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_j \\ H_j \end{bmatrix}$$

$$\delta_j = \frac{2\pi n_j d_j}{\lambda} \quad \text{Déphasage introduit par la couche } j$$

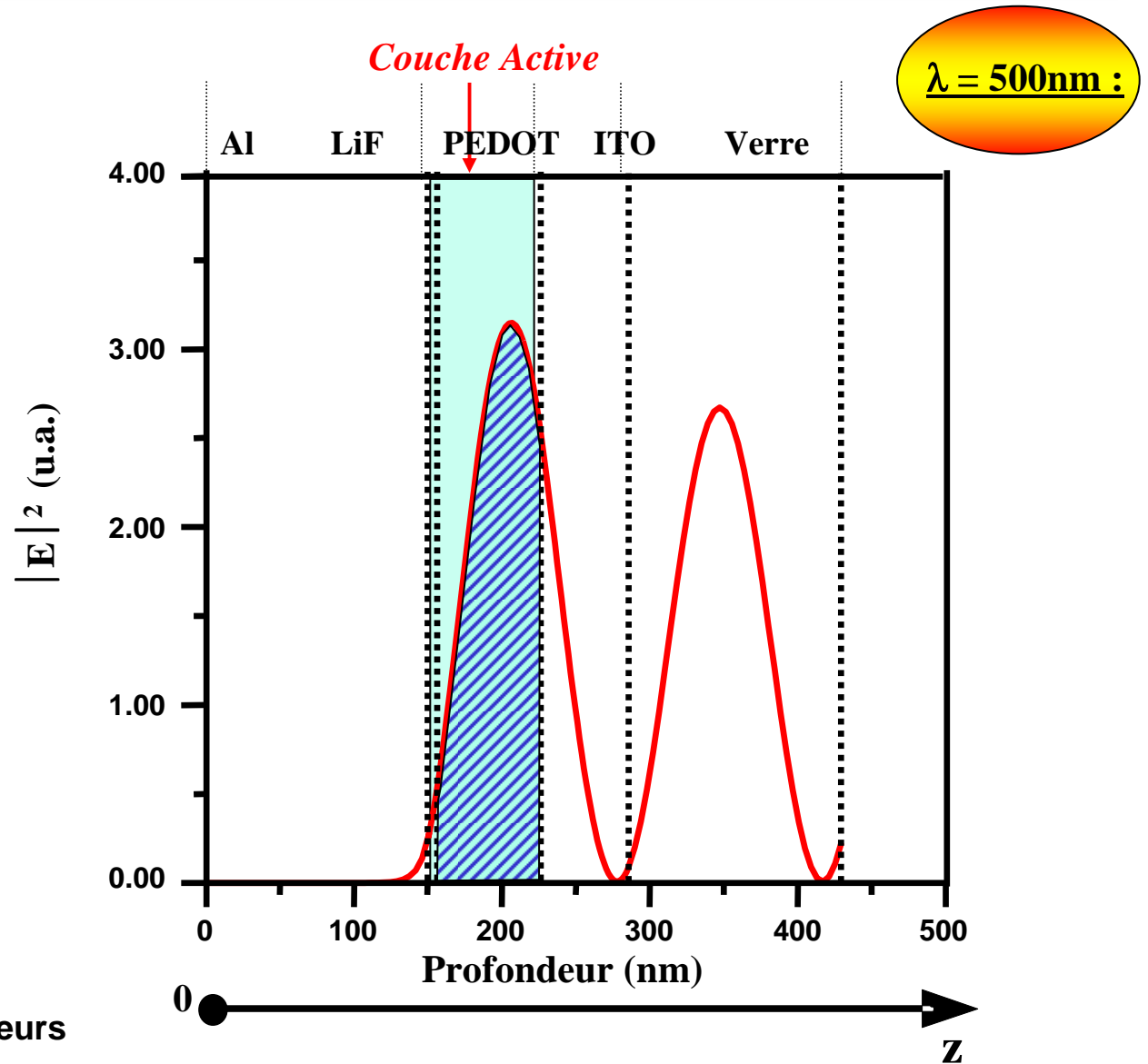
Y : admittance optique

PROFIL DU CHAMP ELECTROMAGNETIQUE



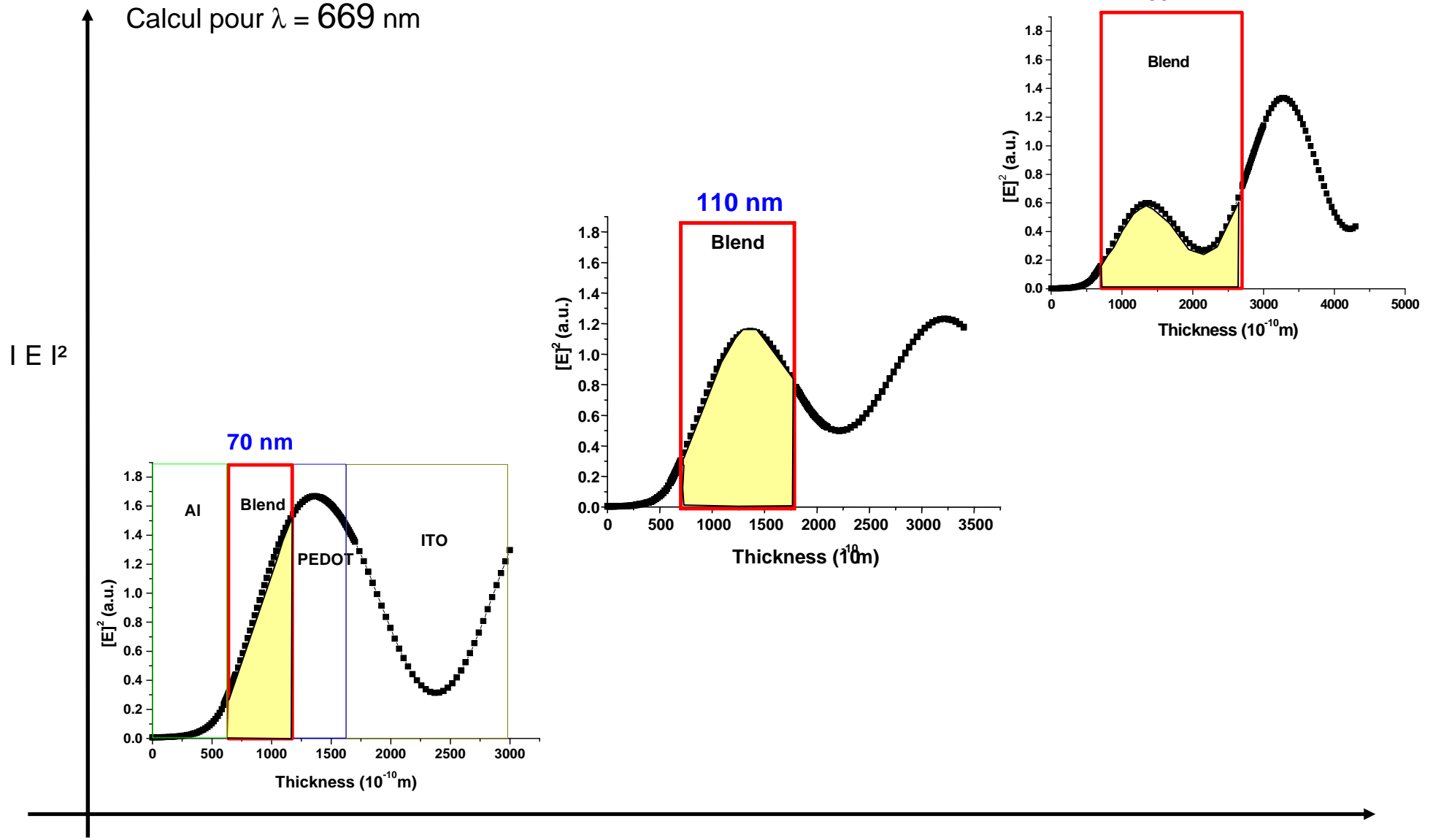
Hypothèses

- Couches homogènes et isotropes
- Interfaces planes
- n et k ne varient pas avec les épaisseurs



INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR DE LA COUCHE ACTIVE

Calcul pour $\lambda = 669$ nm

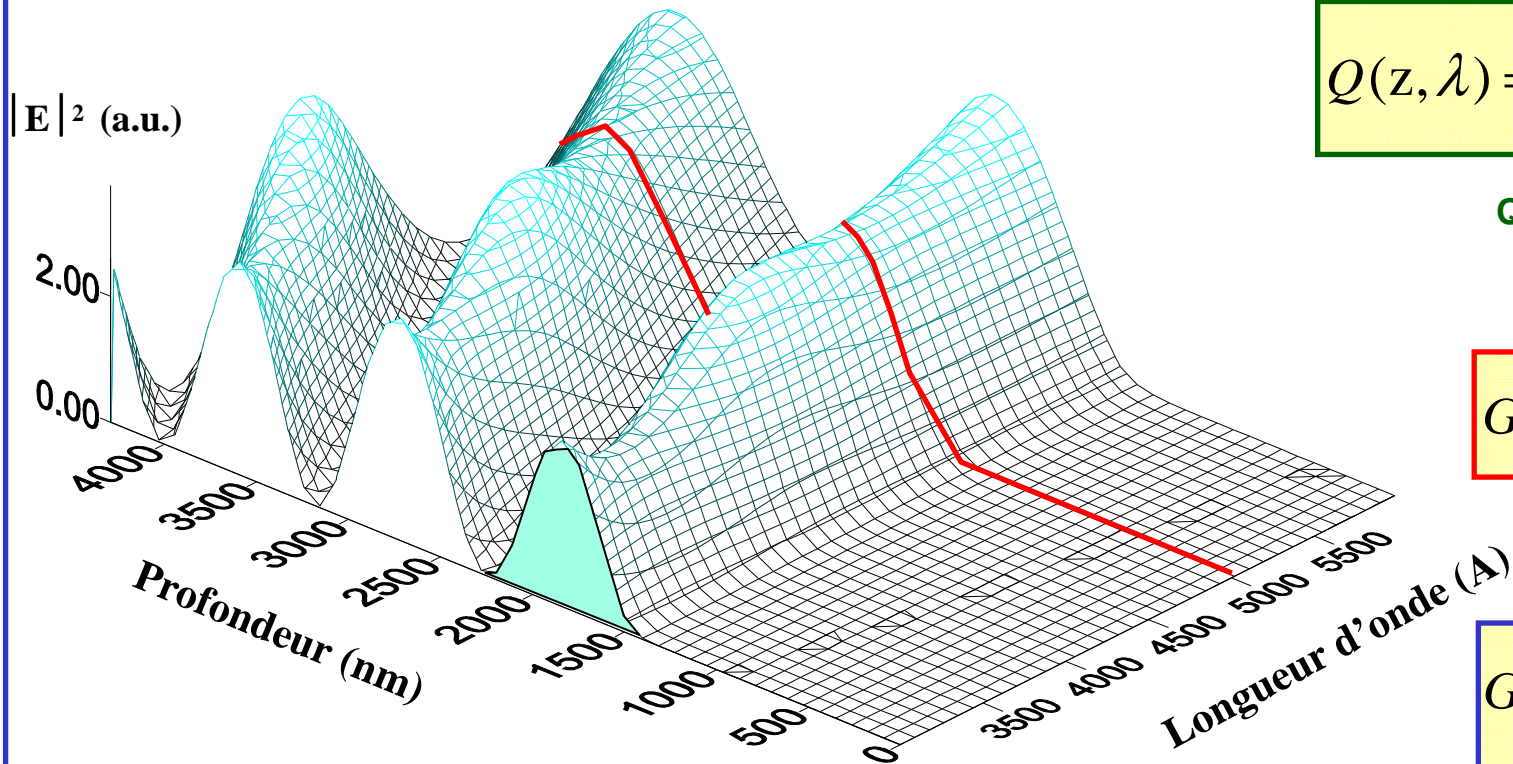


Épaisseur de la couche active

ENERGIE DISSIPEE / NOMBRE D'EXCITONS GENERES

Répartition de l'Energie dissipée (Q en $W.m^{-2}$) et du taux d'excitons générés (G) dans la cellule en tenant compte du spectre solaire

$300 \text{ nm} < \lambda < 600 \text{ nm} :$



$$Q(z, \lambda) = \alpha(\lambda) \frac{n_i}{n_0} I_{\text{solar}} \left| \frac{E(z)}{E_0} \right|^2$$

Q : énergie dissipée



$$G(z, \lambda) = \frac{Q(z, \lambda)}{h\nu}$$



$$G(z) = \sum_{\lambda=300}^{900} G(z, \lambda)$$

G : taux de génération des excitons

PROCEDURE D'OPTIMISATION

Indices optiques $n(\lambda)$ and $k(\lambda)$ de chaque couche

Géométrie de la structure: $\{e_1, e_2, e_3, \dots\}$
+ épaisseurs limites de chaque couche

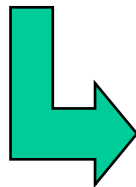
Paramètres de calcul: Nombre d'itérations, valeurs des pas d'intégrations et d'optimisation...

TECSEN
Software

Résultats:

- épaisseurs optimales $\{d_{1opt}, d_{2opt}, d_{3opt}, \dots\}$
- $Q_{zone\ active}$ maximisée

*Simplex
non linéaire*



- Optimisation simultanée des différentes épaisseurs
- Réduction du temps de calcul

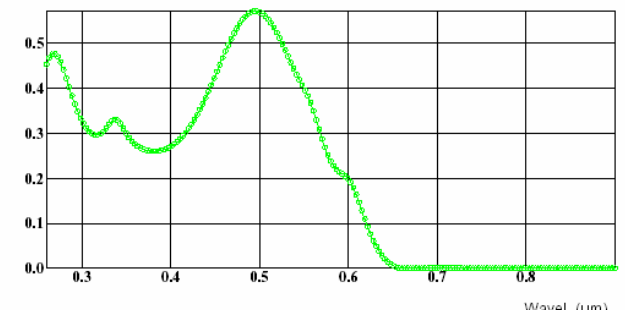
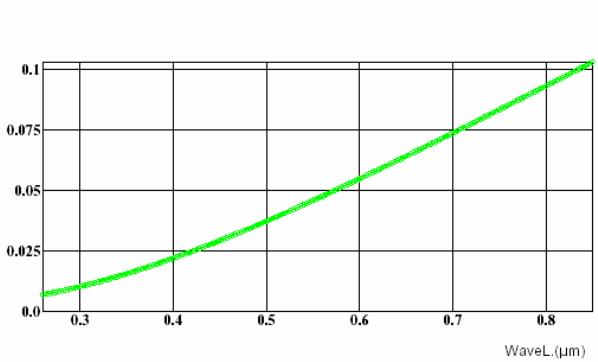
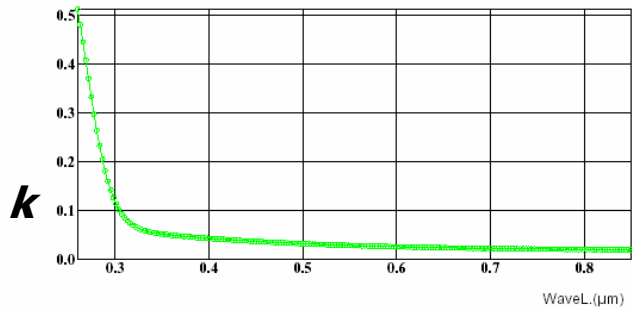
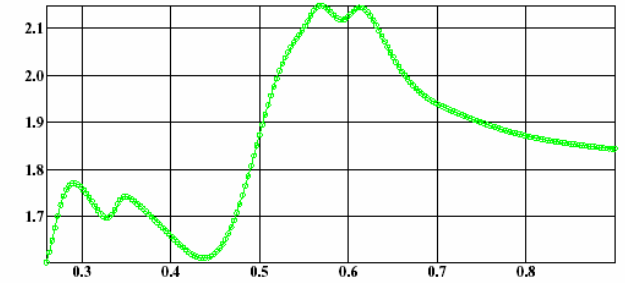
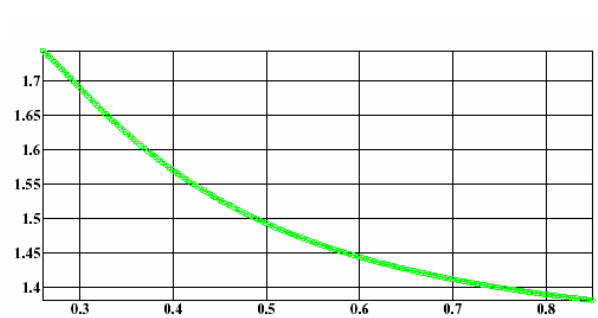
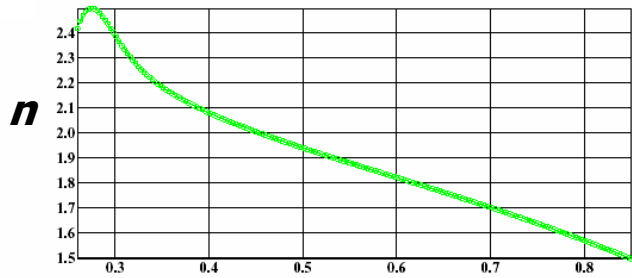
Et pour des géométries de cellules plus complexes....

- Maximisation de l'énergie dans plusieurs couches actives
- Equilibrage de l'énergie entre les différentes couches actives

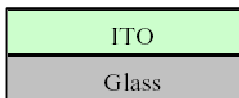
PROPRIETES OPTIQUES DES MATERIAUX



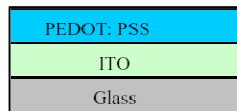
ellipsométrie spectroscopique



ITO



PEDOT



P3HT/PCBM



EXEMPLE D'OPTIMISATION: Cellule Bicouche

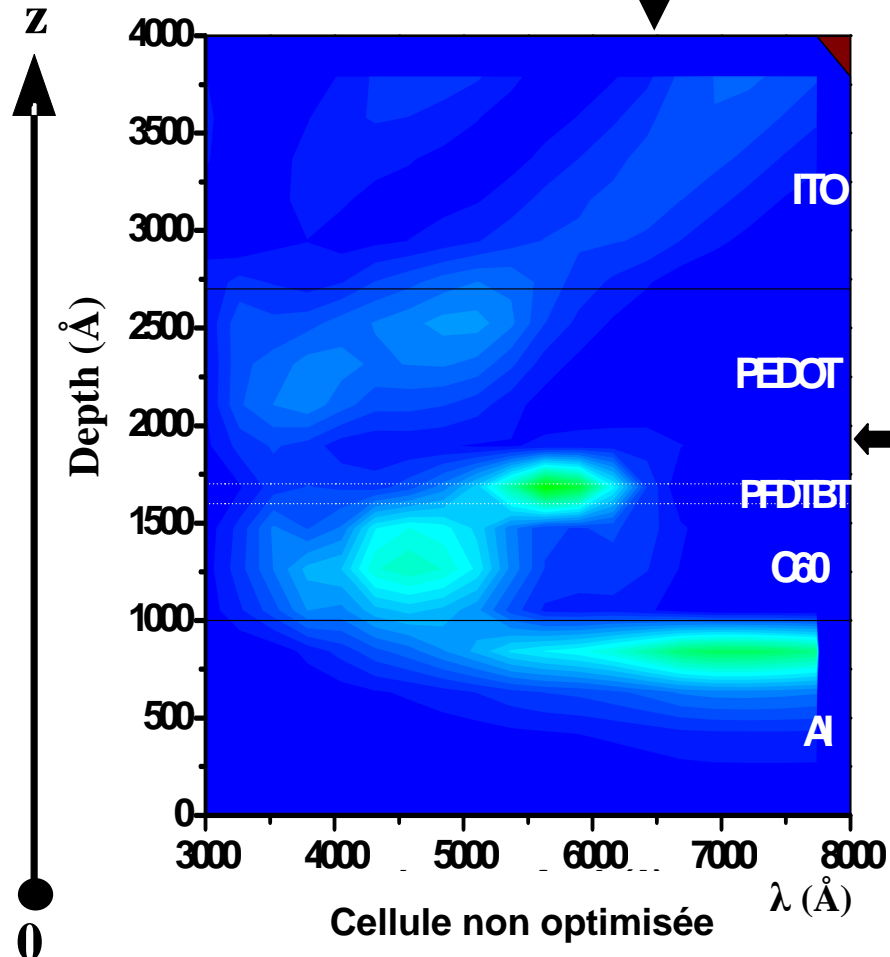
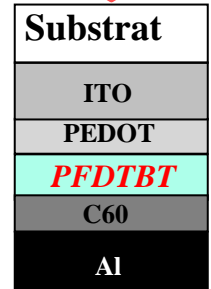
Géométrie de la cellule non optimisée:

Glass / ITO (120 nm) / PEDOT (100 nm) / **PFDTBT** (10 nm) / C60 (60 nm) / Al (100 nm)

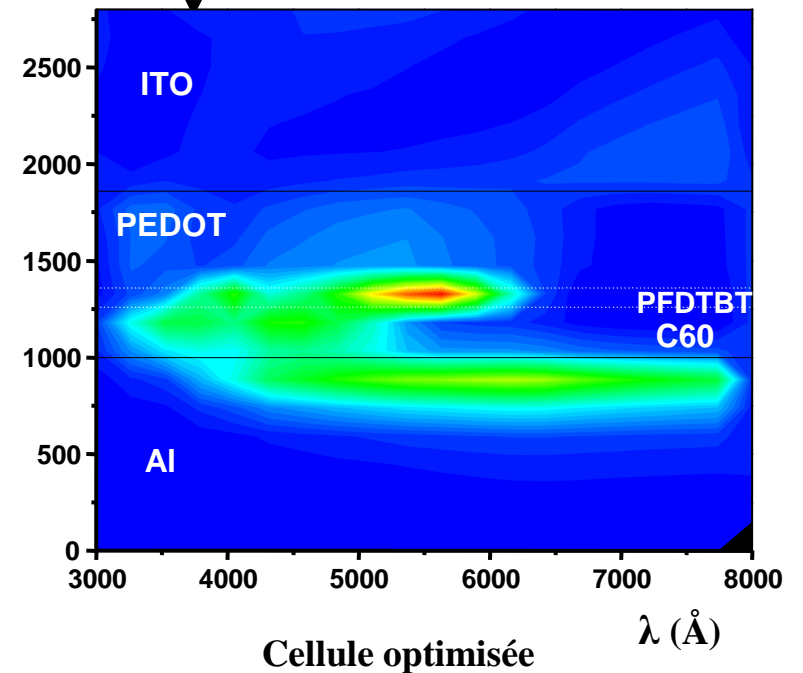
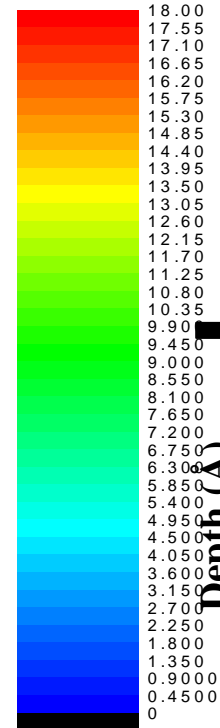
Cellule optimisée :

2 couches optimisées : (ITO and C60)

Lumière



Q (10^{-4} a.u.)

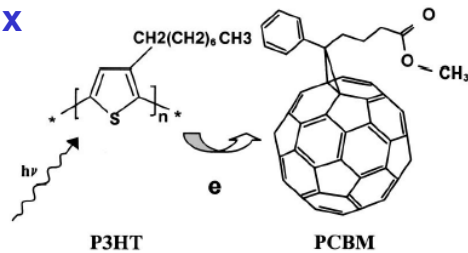


EXEMPLE D'OPTIMISATION: Cellule tandem (1/2)



Objectif: Optimisation et Equilibrage des énergies dans les deux couches actives

Matériaux

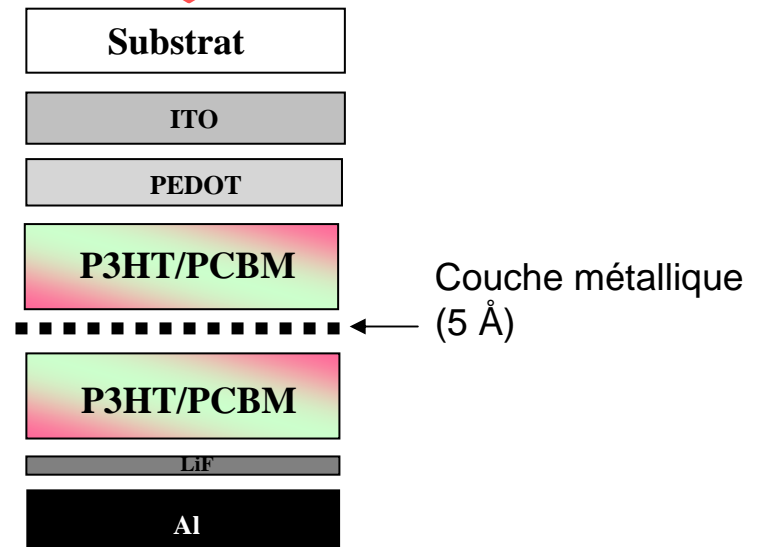


$$\eta_{EQE} = \frac{J_{cc} V_{co} FF}{P_{incidente}}$$

Couche active 1

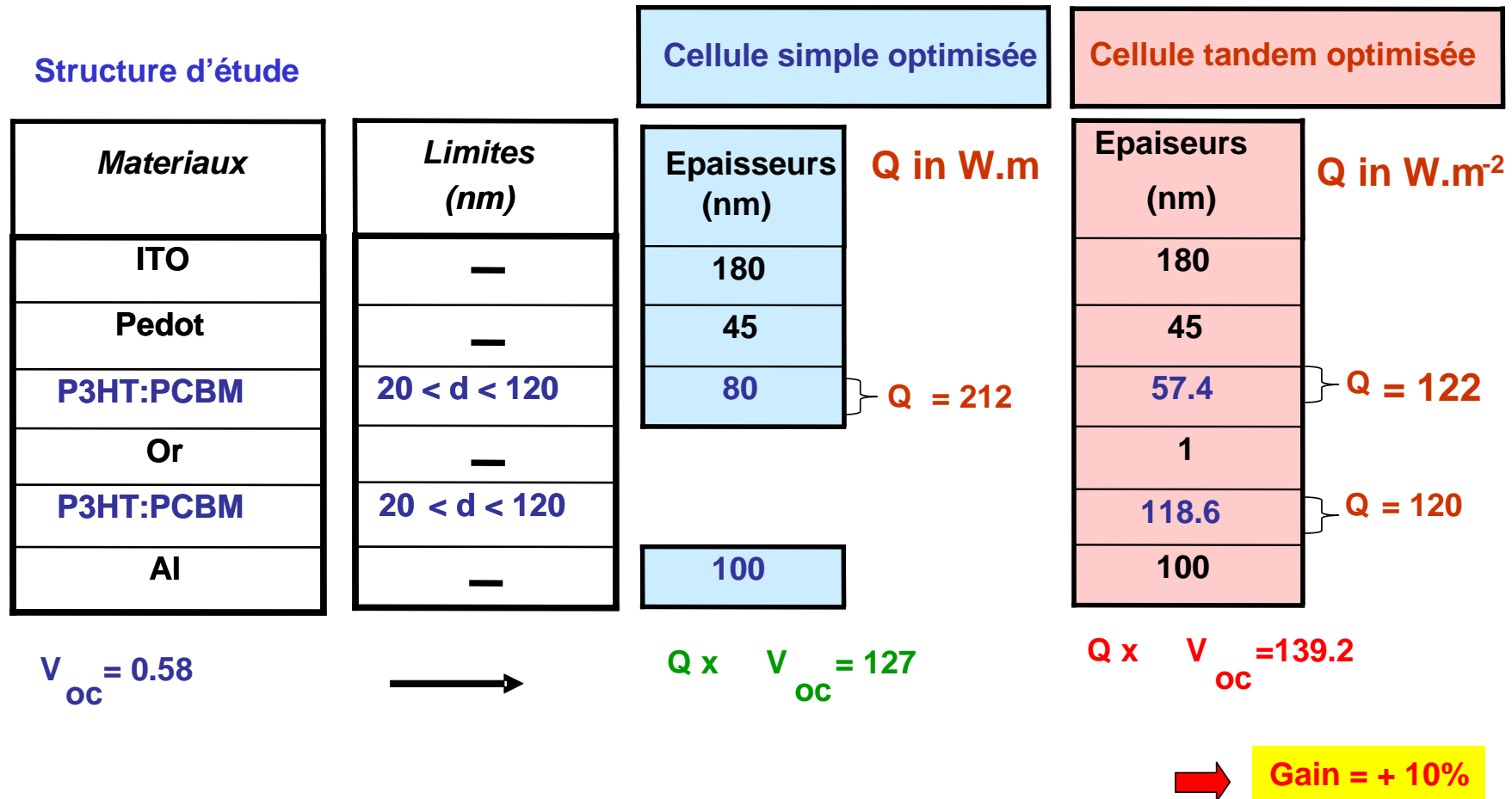
Couche active 2

Lumière



$$J_{cc}^{cellule\ tandem} = \min\left(\sum_{i=1}^2 J_{cc}^i\right) \text{ et } V_{co}^{cellule\ tandem} = \sum_{i=1}^2 V_{co}^i$$

EXEMPLE D'OPTIMISATION: Cellule tandem (2/2)



EXEMPLE DE MODELISATION: Evolution de Jcc avec l'épaisseur des blends P3HT/PCBM (1/2)

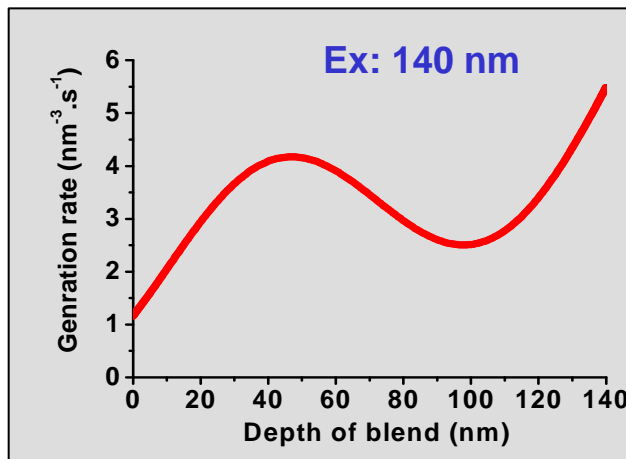
❑ **Objectif:** compréhension des phénomènes de transport de charges

❑ **Méthode:** modélisation optique et électrique + comparaison avec les résultats expérimentaux

Structure d'étude

Couche	Epaisseur
ITO	180 nm
PEDOT	45 nm
P3HT/PCBM	varie w/w: 1 :1
LiF	1 nm
Al	100 nm

Etape 1: Modélisation optique (calculs de E(z), Q(z,l) et de G(z))



fit

$$G(z) = \sum_{i=0}^n a_i \cdot z^i + b_i \cdot e^{-c_i z} + e_i + \dots$$

Etape 2: Modélisation électrique (calcul de la densité de courant Jcc)

$$J_n = \mu_n e E n + \mu_n k_B T \frac{dn}{dx},$$

$$\frac{1}{e} \frac{dJ_n(z)}{dx} + G(z) - R(z) = 0$$

Equation de continuité

$$R_n = \frac{n}{\tau}$$

$$R = K n p$$

Recombinaison mono ou bi-moléculaire?

EXEMPLE DE MODELISATION: Evolution de J_{cc} avec l'épaisseur des blends P3HT/PCBM (2/2)

Etape 3: Réalisation de cellules de 8 épaisseurs différentes



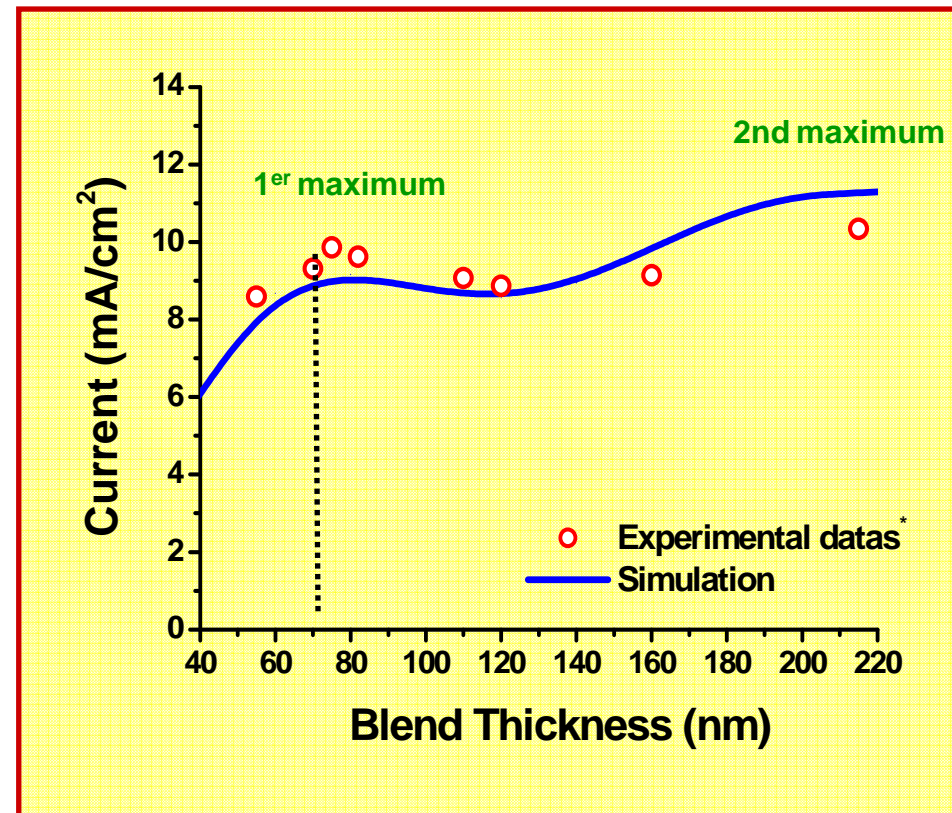
12 cellules de 28 mm²
pour chaque épaisseur

Etape 4: Comparaison et fit modèle-expérience

Mise en évidence:



- Du type de recombinaison
- Du taux de dissociation des excitons

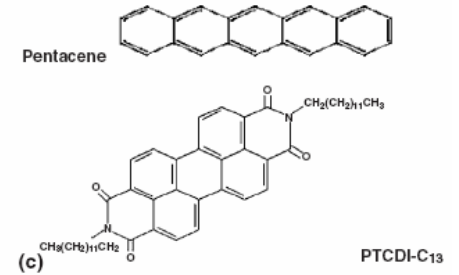


EXEMPLE DE MODELISATION: Blends Pentacène / Perylène (1/2)

❑ **Objectif:** compréhension des phénomènes limitant les rendements des blends Pentacène: PTCDI-C₁₃H₂₇

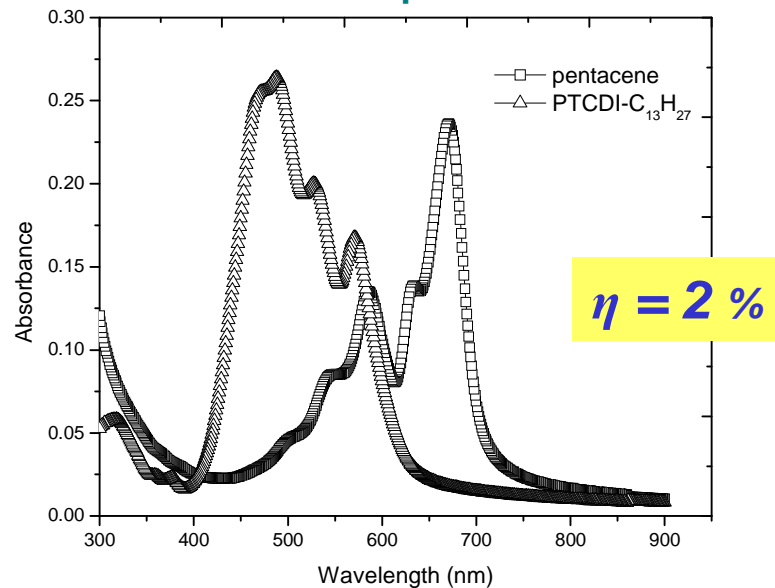
❑ **Méthode:** modélisation optique et électrique + comparaison avec les résultats expérimentaux

Matériaux

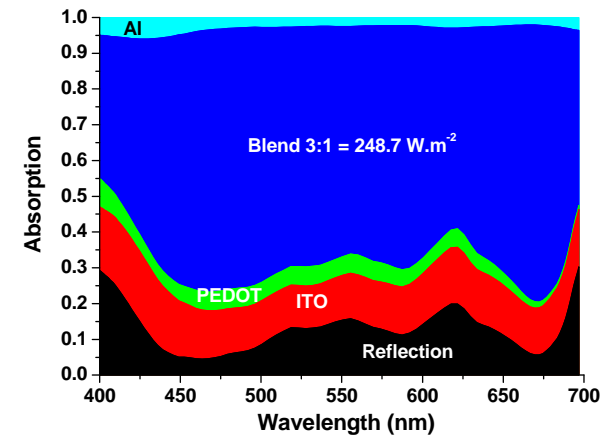
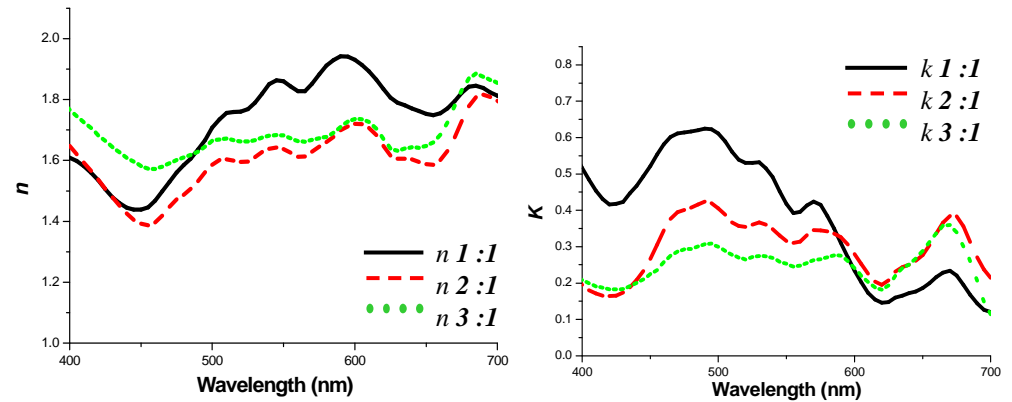


Motivations:

Recouvrement spectral



Etape 1: Modélisation optique



EXEMPLE DE MODELISATION: Blends Pentacène / Perylène (2/2)

Etape 2: Modélisation électrique / comparaison avec résultats expérimentaux

✓ Calcul de J_{sc} / évaluation des pertes

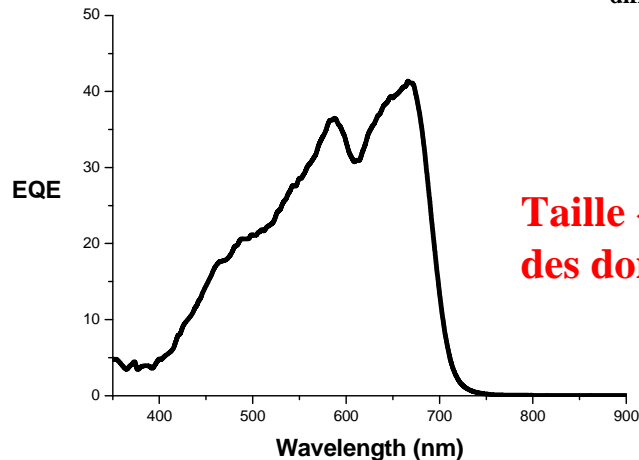
$$\frac{1}{e} \frac{dJ_n(z)}{dx} + G(z) - R(z) = 0$$

✓ Estimation des longueurs de diffusion des excitons à partir de l'EQE de bicouches Pentacène : PTCDI-C13H27

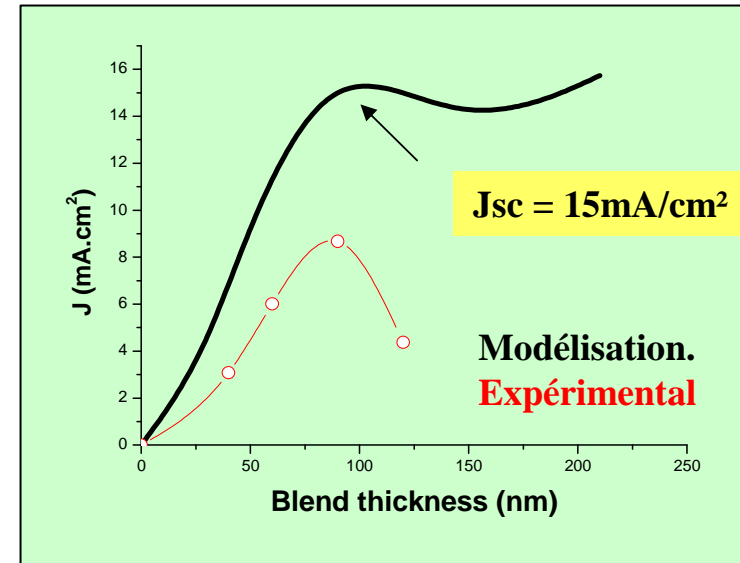
$$D \frac{d^2 p}{dz^2} + G(z) - \frac{p}{\tau} = 0$$



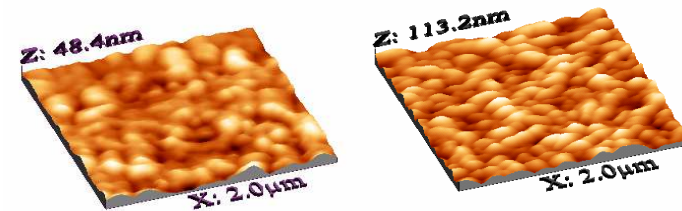
Pentacène:
 $L_{diff} = 50 \text{ nm}$
Perylène
 $L_{diff} = 10 \text{ nm}$



**Taille « optimale »
des domaines ?**



Etape 3: Caractérisations morphologiques (AFM)



□ Conclusions:

- potentiel important $J_{cc} = \pm 15 \text{ mA/cm}^2$
- blend 3:1 optimal
- rendements limités par les L_{diff} des excitons et les recombinaisons

CONCLUSION

La prise en compte des phénomènes interférentiels est indispensable à la modélisation et à la compréhension des phénomènes optiques et électriques décrivant la conversion photovoltaïque des cellules solaires organiques.

Le logiciel que nous avons développé permet:

- de **calculer et de maximiser** l'énergie absorbée par la couche active de la cellule sous éclairage solaire.
- **d'équilibrer** les énergies absorbées par plusieurs couches dans le cas de cellules tandem.
- de **modéliser** l'énergie absorbée et les densités de courant associées dans les cellules constituées de réseaux interpénétrés.