

THESE

En vue de l'obtention du : **DOCTORAT**

Structure de Recherche : Laboratoire de la Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaires (LaMCScI)

Discipline : Sciences de la Matière Physique

Spécialité : Energie renouvelable et modélisation des systèmes

Présenté et soutenu le 15/02/2020

Par :

Mohammed HAJJI

Exploitation maximale de l'énergie solaire via un système hybride intégrant les dispositifs photovoltaïque et thermoélectrique

JURY

Abdelilah BENYOUSSEF	PES, Académie Hassan II des Sciences et Techniques-Rabat	Président
Hamid EZ-ZAHRAOUY	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Directeur de Thèse
Mohammed BENAÏSSA	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur/Examineur
Rachid BENCHRIFA	PES, Faculté des Sciences, Université Mohammed V-Rabat	Rapporteur/Examineur
Bouchaib HARTITI	PES, Faculté des Sciences et technique Mohammedia, Université Hassan II- Casablanca.	Rapporteur/Examineur
Hicham LABRIM	Docteur/Chargé de recherche chez CNESTEN- Rabat	Invité
Samir RACHIDI	Docteur/Chef de département hydrogène, Bioénergies et Stockage d'énergie chez IRESEN-Rabat	Invité

Année Universitaire : **2019/2020**

A MES PARENTS

A MES SCEURS KAOUTAR ET ASMAE

AVANT PROPOS

Le travail présenté dans ce manuscrit de thèse a été effectué au sein du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaire (LaMCSsI, ex : LMPHE), de la Faculté des Sciences de l'Université Mohammed V-Rabat, sous la direction de monsieur le professeur **Hamid EZ-ZAHRAOUY**.

Je tiens tout d'abord à adresser toute ma gratitude à **Mr. Hamid EZ-ZAHRAOUY**, professeur, chef de département de physique et directeur du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaire (LaMCSsI), en sa qualité de directeur de thèse pour son encadrement, son soutien et sa disponibilité tout au long de ce travail de recherche. Le lien qui unit un doctorant à son directeur de thèse est très particulier. Il ne s'agit pas d'un rapport professeur-élève et encore moins chef-employé. Il consiste à transmettre, aider et motiver sans non plus étouffer. C'est délicat et complexe. Le professeur **Mr. Hamid EZ-ZAHRAOUY**, a superbement joué ce rôle.

Je remercie également **Mrs. Abdelilah BENYOUSSEF**, professeur d'enseignement supérieur de la Faculté des Sciences Rabat, au sein du Laboratoire de Matière Condensée et Sciences Interdisciplinaire (LaMCSsI), d'avoir accepté de présider ce jury de thèse. Qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect.

J'adresse mes remerciements aussi au professeur **Mr. Mohammed BENAÏSSA**, professeurs d'enseignement supérieur de la Faculté des Sciences Rabat, au sein du dite Laboratoire (LaMCSsI) tant pour son appui, sa gentillesse, son professionnalisme, que pour le temps qu'il a bien voulu me consacrer, ainsi que pour l'honneur qu'il m'a fait d'avoir accepté de rapporter et d'examiner ce modeste travail, qu'il trouve ici ma profonde gratitude.

Mes remerciements s'adressent autant au professeur **Mr. Rachid BENCHRIFA**, professeurs d'enseignement supérieur de la Faculté des Sciences Rabat pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail et l'honneur qu'il m'a fait d'avoir accepté de rapporter et d'examiner ce modeste travail, qu'il trouve ici ma profonde gratitude.

Mes vifs remerciements s'adressent aussi à Monsieur **Mr. Bouchaib HARTITI**, professeur d'enseignement supérieur de la Faculté des Sciences et Technique Mohammedia, d'avoir accepté d'être parmi les membres de jury, de rapporter et d'examiner ce travail, qu'il trouve ici ma profonde reconnaissance.

Je tiens également à présenter mes sincères remerciements et exprimer ma reconnaissance envers **Mr. Hicham LABRIM**, hors cadre, chercheur au sein du Centre National de l'Energie, des Sciences et des Techniques Nucléaires (CNESTEN) d'avoir accepté de participer à ce jury en tant qu'invité.

Je tiens à remercier également **Mr. Samir RACHIDI** docteur et chef de département Hydrogène, Bioénergies et Stockage d'énergie au sein de l'Institut de Recherche en Energie Solaire et Energies Nouvelles (IRESEN) d'avoir accepté de participer à ce jury en tant qu'invité.

Je remercie également la direction de la Division (DERS/USM) du centre National de l'Energie des sciences et des techniques nucléaires (CNESTEN) de m'avoir accueilli au sein de leur établissement.

Je témoigne ma très grande reconnaissance à tous mes amis sans exceptions, pour leurs précieux aides, encouragements et soutien. En titre majeur **Karim BENALOUCH** (l'EMI), **hanan ABSIK** (FSR), **Wafaa AZOUZI** (FSR), **Anas SIBARI** (FSR), **Zineb KERRAMI** (FSR), **Younes EL FASSI** (AMSSNuR), **Ikram LHAMRI** (FSK), et à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Enfin je remercie et je dédie ce travail à ma famille pour leurs soutiens affectifs, pour tous les sacrifices qu'ils ont consentis pour me permettre de suivre mes études dans les meilleures conditions possibles et pour n'avoir jamais cessé de m'encourager tout au long de ces années d'études.

RESUME

Les avancées scientifiques et technologiques ciblent principalement l'optimisation des systèmes de conversion solaire. Dans ce contexte, cette thèse aborde l'un des sujets suscitant un intérêt au cours de ces dernières années, il s'agit d'une conception capables d'exploiter une large gamme spectrale, d'améliorer la performance et de surmonté les obstacles toujours présentent au niveau des installations photovoltaïques classiques, à savoir les pertes par transmission et thermalisation. La proposition d'un système hybride intégrant deux technologies photovoltaïque et thermoélectrique (PV-TE), a fait l'objet d'une étude approfondie basée sur le transfert thermique et la méthode des éléments finis afin d'étudié sa faisabilité et sa performance, en tenant compte de plusieurs paramètres et plusieurs conceptions.

Nos résultats montrent que le couplage indirect est le plus adapté à cette interconnexion entre les deux systèmes photovoltaïque et thermoélectrique, permettant ainsi d'optimiser l'efficacité effective du système toute en gardant une structure compacte facile à assemblé, avec un rendement globale amélioré de plus de 20% par rapport au photovoltaïque seul. De plus, cette structure hybride PV-TE est associée à un système de refroidissement actif et innovant capable de garder les composantes du système hybride sous des températures de fonctionnement optimal et faisant également l'objet d'une étude détaillé.

Mots-clés : Système hybride PV-TE, Conversion d'énergie, Transfert thermique, Refroidissement, Efficacité, Couplage indirect.

ABSTRACT

The advances in sciences and technologies are focused on optimizing solar conversion systems. In this context, this thesis addresses one of the topics of interest in recent years, it is a design able to exploit a wide spectral range, to improve performance and to overcome the obstacles present at the conventional photovoltaic installations, namely transmission and thermalization losses. The proposal for a hybrid system integrating photovoltaic and thermoelectric (PV-TE) technologies has been the subject of a detailed study based on heat transfer and the finite element method to study its feasibility and its performance, taking into account several parameters and several designs.

Our results show that the indirect coupling is the most adapted to this interconnection between the two photovoltaic and thermoelectric systems, thus making it possible to optimize the effective efficiency of the system while keeping a compact structure easy to assembled, with an overall improved efficiency of moreover 20% compared to photovoltaic alone. In addition, this hybrid PV-TE structure is associated with an active and innovative cooling system able to keep the components of the hybrid system under optimal operating temperatures and subject to a detailed study.

Keywords: Hybrid system, Energy Conversion, Heat Transfer, Cooling, Efficiency, Indirect Coupling

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION GENERALE.....	1
I. Contexte générale.	3
I. Objectif	5
CHAPITRE I. DEVELOPPEMENT PHOTOVOLTAÏQUE ET THERMOELECTRIQUE	8
I.1. Introduction.....	10
I.2. Conversion photovoltaïques.	10
I.2.1. Le rayonnement solaire.....	10
I.2.2. Principe de la conversion photoélectrique.....	12
I.2.2.1 Historique.....	12
I.2.2.2. Processus d'absorption de la lumière par la matière.....	13
I.2.2.3. Caractéristique d'une cellule solaire photovoltaïque sous éclairement.....	17
I.2.3. Les différentes technologies photovoltaïques.....	20
I.2.3.1 La technologie à base de silicium.....	20
I.2.3.2 La technologie des couches minces.....	22
I.2.3.3 La technologie des cellules à haut rendement.....	23
I.2.4. Problématique de la conversion photovoltaïque	27
I.3. Conversion thermoélectrique.	30
I.3.1. Historique.....	30
I.3.2. Principe de la conversion thermoélectrique.	30
I.3.3. Les effets thermoélectriques.	31
I.3.3.1 Effet Seebeck.....	32
I.3.3.2 Effet Peltier.....	32
I.3.3.3 Effet Thomson.....	34
I.3.4. Les propriétés thermoélectriques.....	34
I.3.5. les technologies thermoélectriques.....	36
I.3.5.1 Matériaux conventionnels.....	36
I.3.5.2 Les nouveaux matériaux.....	38
I.4. Conclusion.....	39
CHAPITRE II. ETUDE THERORIQUE DES PROPRIETES DU TELLURURE DE BISMUTH (Bi ₂ Te ₃).....	41
II.1. Introduction.....	43

II.2. Présentation du composé Bi_2Te_3	43
II.2.1 Description.....	43
II.2.2 Propriétés structurale.....	45
II.3. Méthode de calcul : ab-initio.....	46
II.3.1 Historique.....	46
II.3.2 Equation de Schrödinger.....	46
II.3.3 Approximation de Born Oppenheimer.....	47
II.3.3.1 Approximation de Hartree – Fock.....	48
II.3.4 La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	49
II.3.4.1 Principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité.....	49
II.3.4.2 Théorie de Hohenberg- Kohn.....	50
II.3.4.3 Approche de Kohn et Sham.....	51
II.3.4.4 Fonctionnelle d'échange-corrélation.....	52
II.3.4.4.1 Approximation de la densité locale (LDA).....	52
II.3.4.4.2 Approximation du gradient généralisé (GGA).....	53
II.3.4.4.3 Approximation Résolution des équations de Kohn-Sham.....	54
II.3.4.4.3.1 Le concept de la méthode FP-LAPW.....	54
II.3.4.4.3.2 La méthode des pseudo-potentiels (ondes planes).....	55
II.3.5 Code de calcul 'WIEN2k'.....	57
II.4. Théorie de transport.....	59
II.4.1 Fondement de la théorie semi-classique de transport.....	59
II.4.2 Les coefficients de transport.....	60
II.5. Simulation d'effet de contrainte mécanique sur les propriétés de Bi_2Te_3	62
II.5.1 Description et détail du calcul.....	62
II.5.2 Propriétés structurales et électroniques.....	64
II.5.2.1 Propriétés structurales.....	64
II.5.2.2 Propriétés électroniques.....	64
II.5.2.2.1 Structure de bandes.....	64
II.5.2.2.2 Densité d'états (DOS).....	66
II.5.2.3 Propriétés thermoélectrique.....	68
II.5.2.3.1 Coefficient Seebeck.....	68
II.5.2.3.2 Conductivité électrique et thermique.....	69

II.5.2.3.3 Facteur de mérite ZT.....	70
II.6. Conclusion.....	71
CHAPITRE III. ETUDE CONCEPTUELLES DU SYSTEME HYBRIDE PV-TE.....	73
III.1. Introduction.....	75
III.2. Généralités sur les processus de transferts thermique.....	75
II.2.1 Principe de transfert de chaleur.....	75
II.2.2 Notion de flux de chaleur.....	76
III.3. Etude conceptuelle du système hybride PE-TE.....	79
II.3.1 Intérêt et représentation géométrique.....	79
II.3.2 Choix et validation du couplage.....	81
II.3.2.1 Modèle thermique et distribution de température.....	81
II.3.2.2 Procédure de simulation et paramètres d'entrée.....	85
II.3.2.3 Résultats et discussions.....	86
III.4. Conclusion.....	94
CHAPITRE IV. ETUDE D'INTEGRATION D'UN SYSTEME DE REFROIDISSEMENT.....	96
IV.1. Introduction.....	98
IV.2. Intégration d'un système de refroidissement active au sein du CPV-CTE.....	98
IV.2.1 Position du problème et intérêt d'intégration.....	98
IV.2.2 Modèles théorique et comportement thermique des Nano-fluides.....	100
IV.2.2.1 Modèle de Maxwell.....	101
IV.2.2.2 Modèle de Hamilton & Crosser.....	102
IV.2.2.3 Modèle de Chon.....	102
IV.2.2.4 Modèle de Stokes- Einstein.....	103
IV.2.2.5 Modèle de Brinkman.....	104
IV.2.3 Structure géométrique du modèle proposé.....	104
IV.2.4 Equations associées au système hybride CPV-CTE refroidi.....	105
IV.2.4.1 Modèle thermique et distribution de température.....	105
IV.2.4.2 Paramètres de base et méthode de calcul.....	111
IV.3. Résultats et discussions.....	113
IV.4. Conclusion.....	121
CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES.....	123
REFERANCES.....	127

LISTE DES FIGURES

Figure I.1. Spectre du rayonnement électromagnétique en fonction de leur longueur d'onde.....	11
Figure I.2. Spectres Solaires, a) Hors atmosphère (AM0). b) A l'incidence 41.8° (AM1,5).....	12
Figure I.3. Représentation schématique d'interaction rayonnement matière : réflexion et/ou réfraction, diffusion et absorption.....	13
Figure I.4. Diagramme de bandes d'énergie d'un conducteur, isolant et semi-conducteur.....	14
Figure I-5. Transition inter-bandes d'électron dans un semiconducteur correspondant à un gap direct (a), et un gap indirect (b).....	15
Figure I-6. Bandes d'énergies d'une jonction p-n sous éclairage.....	16
Figure I.7. Principes de déplacement des porteurs de charge dans une cellule photovoltaïque.....	17
Figure I.8. Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire photovoltaïque à jonction PN.....	18
Figure I.9. Courbe caractéristique d'une cellule solaire à l'obscurité et sous éclairage.....	19
Figure I.10. Schéma d'une cellule solaire à base de Silicium cristallin.....	20
Figure I.11. Schéma simplifié d'un module a-Si en couche mince.....	21
Figure I.12. Cellule solaire photovoltaïque en silicium : monocristallin (a) et polycristallin (b).....	22
Figure I.13. Cellule Schéma simplifier d'un module a-Si en couche mince.....	23
Figure I.14. Les cellules tandem.....	24
Figure I.15. Principe de la cellule multi-jonction.....	24
Figure I.16. Cellule multi-jonction.....	25
Figure I.17. Principes Schéma représentatif d'une cellule Grätzel.....	26
Figure I.18. Circuit Module à plusieurs cellules photovoltaïques à concentration (CPV).....	27
Figure I.19. Schéma représentatif des différents phénomènes caractérisant le processus de conversion d'une cellule photovoltaïque.....	28
Figure I.20. Schéma descriptif d'un : module thermoélectrique (a) et d'un couple PN conçu pour la génération d'électricité.....	31
Figure I.21. Schéma descriptif de l'effet Seebeck.....	32
Figure I.22. Schéma descriptif de l'effet Peltier.....	33
Figure I.23. Variation schématique des propriétés thermoélectrique des solides en fonction de la concentration en porteurs de charge à la température ambiante.....	36
Figure I.24. Circuit Performance des matériaux conventionnels en fonction de la température de type n et type p.....	37
Figure II.1. Diagramme de phase de tellure de bismuth Bi_2Te_3	44
Figure II.2. Représentation de la structure hexagonale (a) et rhomboédrique (b) de Bi_2Te_3	45
Figure II.3. Partition de la maille unitaire en sphères atomiques I et en région interstitielle II.....	55
Figure II.4. Représentation schématique de différentes méthodes basées sur la DFT.....	58
Figure II.5. Géométrie représentant l'unité de cellule hexagonale de Bi_2Te_3 sous effet des contraintes mécanique : les flèches vertes représentent une contrainte de compression, tandis que les flèches bleues indiquent la contrainte de dilatation. Les flèches en pointillés indiquent le mouvement du réseau sous ces contraintes.....	63
Figure II.6. Structure de bande électronique de Bi_2Te_3 pure (a), sous compression (b) et sous dilatation (c) le long de la direction de symétrie élevée.....	65
Figure II.7. Densité d'état totale et partielle de Bi_2Te_3 pure (a), sous compression (b) et sous dilatation (c).....	66
Figure II.8. L'évolution du coefficient Seebeck en pourcentage ($\mu\text{V}/\text{K}$), en fonction de la température pour Bi_2Te_3 pur, sous compression et dilatation.....	68

Figure II.9. L'évolution de la conductivité électrique σ (a) et thermique k (b) par rapport au temps de relaxation τ supposé constant, en fonction de la température pour Bi_2Te_3 pur, sous compression et dilatation.....	69
Figure II.10. L'évolution du facteur de mérite de Bi_2Te_3 sous l'effet des Contraintes mécanique en fonction de la température.....	71
Figure III-1. Représentation schématique de principe de transfert thermique.....	75
Figure III.2. Représentation schématique des différentes modes de transferts thermique dans un milieu.....	77
Figure III-3. Représentation schématique des deux conceptions du system hybride PV-TE : avec couplage direct (a), et avec couplage indirect (b).....	80
Figure III.4. Courbe Modèle mathématique représentant les flux de chaleur et la distribution des températures au niveau du system hybride PV-TE : avec couplage direct (a), et avec couplage indirect (b)	82
Figure III-5. Développement de la température (a) et de la puissance de sortie (b) d'un système photovoltaïque en fonction de l'irradiation solaire.....	88
Figure III.6. Effet de la concentration optique sur la température du côté chaud (a) et le rendement du générateur thermoélectrique (b).	90
Figure III-7. Effet de l'épaisseur du module thermoélectrique sur la différence de température (ΔT).....	91
Figure III.8. Comparaison entre l'efficacité du dispositif PV et le système hybride PV-TE a couplage direct.....	92
Figure III-9. Comparaison entre l'efficacité du dispositif PV et le système hybride PV-TE à couplage indirect avec et sans refroidissement.....	93
Figure IV.1. Influence de la fraction volumique ϕ sur la conductivité thermique du Nano-fluide à base d'eau selon les différentes modèles théorique.....	103
Figure IV-2. Illustration en 3D de système hybride à concentration (CPV-CTE) intégrant le système de refroidissement et de réchauffement.....	105
Figure IV.3. Comparaison Représentation schématique du modèle mathématique du CPV sous refroidissement : (a) transfert de chaleur et distribution de la température, (b) circuit thermique pour partie symétrique en couleur vert.....	106
Figure IV-4. Représentation schématique du modèle mathématique du système CTE sous réchauffement et refroidissement : (a) transfert de chaleur et distribution de la température, (b) circuit thermique.....	108
Figure IV.5. Effet de la concentration optique sur la température et l'efficacité du CPV sans refroidissement.....	113
Figure IV-6. Comportement de la température du CPV à différentes concentrations : sous l'effet des fluides caloporteur statique (a), et en fonction du débit volumique (b) à $T_{fin} = 27^\circ\text{C}$	114
Figure IV.7. Températures de sortie des fluides caloporteurs (eau et Nano-fluide) en fonction du débit d'écoulement à différentes concentrations.....	115
Figure IV-8. Effet de concentration optique sur l'efficacité du CPV, avec et sans refroidissement : (a) sous fluide statique et Nano-fluide, (b) sous fluide dynamique et Nano-fluide à $D = 0,5 \text{ m}^3 / \text{h}$ et $T_{fin} = 27^\circ \text{C}$	116
Figure IV.9. Comportement des températures du côté chaud (T_h) et du côté froid (T_c) du générateur CTE sous réchauffement statique.....	117

Figure IV-10. Comportement de : (a) la température du coté froid (T_c), (b) du gradient de température au niveau du générateur CTE, sous réchauffement et refroidissement statique à $D=0,5 \text{ m}^3 / \text{h}$ et $T_{f_{in}}=27^\circ \text{C}$118

Figure IV.11. Effet du réchauffement et refroidissement dynamique sur : (a) les températures T_c et T_h , (b) les températures de sortie du fluide $T_{f_{h-out}}$ et $T_{f_{c-out}}$ au sein du générateur CTE....119

Figure IV.12. Effet de la concentration optique sur l'efficacité globale du système hybride CPV-CTE, (a) sous fluide caloporteur statique, (b) sous fluide caloporteur dynamique à $D = 0,5 \text{ m}^3 / \text{h}$ et $T_{f_{c-in}} = 27^\circ \text{C}$ pour le refroidissement et $D = 0,1 \text{ m}^3 / \text{h}$ pour le réchauffement.....120

LISTE DES TABLEAUX

Tableau II.1. Distances intercouches et interatomiques et paramètres de maille de Bi_2Te_3	45
Tableau II.2. Comparaison entre les paramètres de réseau relaxé et ceux de l'expérimental.....	64
Tableau II.3. Intervalle d'énergie des différentes régions illustrées dans le DOS pour Bi_2Te_3 pure et sous contraintes.....	67
Tableau III.1. Conditions aux limites respectées pour le couplage direct et indirect entre les dispositifs photovoltaïques et thermoélectriques.....	83
Tableau III.2. Matrice général rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire reliant les deux types de couplage direct et indirect du système hybride PV-TE.	85
Tableau III.3. Matrice rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire régissant de la partie PV du système hybride PV-TE.....	87
Tableau III.4. Matrice rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire régissant de la partie TE du système hybride PV-TE.....	89
Tableau IV.1. Avantages et Inconvénients de chaque proposition de fluide de refroidissement.	100
Tableau IV.2. Paramètres physiques utilisés dans le calcul de la puissance du pompage.....	112

LISTE DES ABRÉVIATIONS

A, A ₁ , A ₂	Surface du : système photovoltaïque, canaux de refroidissement associer au photovoltaïque et thermoélectrique respectivement (m ²)
C	Coefficient de concentration
C _p	Chaleur spécifique de l'eau (J Kg ⁻¹ K ⁻¹)
CPV	Système photovoltaïque a concentration
CTE	Système thermoélectrique a concentration
D	Débit volumique (m ³ /h)
h ₃ , h ₄	Coefficient de transfert de chaleur pour la surface supérieure et inférieure du CTE (W/m ² K)
h ₁ , h ₂	Coefficient de transfert de chaleur pour la surface supérieure et inférieure du CPV (W/m ² K)
h _f	Coefficient de transfert de chaleur du fluide froid dans le CPV (W/m ² K)
hf _h , hf _c	Coefficient de transfert de chaleur du fluide chaud et froid respectivement dans le CTE (W/m ² K)
k	Constante de Boltzmann (J K ⁻¹)
k _{TE}	Conductivité thermique du matériau utilisé dans le module thermoélectrique (W/m K)
k _{PV}	Conductivité thermique du matériau utilisé dans les cellules photovoltaïque (W/m K)
k _{bf}	Conductivité thermique du fluide de base (W/m K)
k _{nano-f}	Conductivité thermique de Nano-fluide (W/m K)
k _p	Conductivité thermique de particule (W/m K)
Q	Flux de chaleur (W)
P _{CPV}	Puissance du module photovoltaïque à concentration (W)
P _{CTE}	Puissance du module thermoélectrique à concentration (W)
P _{pump}	Puissance de pompe (W)
R	Resistance thermique (K W ⁻¹)
S	Coefficient Seebeck (μV/K)
S _c	Irradiation solaire (W/m ²)
S _c '	Irradiation solaire transmise (W/m ²)
T ₁ , . , T ₃	Température des couches du CPV (°K)
T _a	Température ambiante (°K)
T _{CPV}	Température du système photovoltaïque à concentration (°K)
T _c	Température de la plaque inférieure du CTE (°K)
T _g	Température du verre de protection (°K)
T _h	Température de la plaque supérieure du CTE (°K)
Tf ₁ , . , Tf ₃	Température du fluide entrant et sortant dans le système de refroidissement du CPV (°K)
Tf _{c-in} , Tf _{c-out}	Température du fluide entrant et sortant dans le système de refroidissement du CTE (°K)
Tf _{h-in} , Tf _{h-out}	Température du fluide entrant et sortant dans le système de réchauffement du CTE (°K)
ΔZ _{CTE}	Epaisseur du module CTE (m)
ΔZ _{CPV}	Epaisseur de la cellule photovoltaïque (m)
ΔZ _g	Epaisseur du verre de protection (m)
ε	Emissivité du verre de protection
ρ	Réfectivité du verre de protection
β	Coefficient de température (% K ⁻¹)
σ	Constante de Stefan–Boltzmann (5.67 *10 ⁻⁸ W/ (m ² K ⁴))

μ_{Nano-f}, μ_{bf}	Viscosité de Nano-fluide and du fluide de base respectivement (Pa.s)
η_{CPV}	Rendement du CPV
η_{CTE}	Rendement du CTE
η_{hyb}	Rendement du système hybride CPV-CTE



INTRODUCTION GENERALE.

I. Contexte générale

Nous vivons à une époque où la sécurité énergétique face à de multiples menaces, la consommation énergétique est en très forte croissance dans toutes les régions du monde, la flambée du pétrole causé par les chocs pétroliers de 1973, 1979, 1983, 1990, l'exploitation abusive de tous les énergies fossiles, et plus encore. Tout cela signale une fin à la sécurité énergétique, sans oublier que toutes instabilités géopolitiques poussent même les nations les plus puissants à rechercher des solutions énergétiques locales. Et en raison de l'effort mondial pour réduire les émissions de gaz à effet de serre et de traiter la question de la pollution de l'environnement (première conférence mondiale sur le climat à Genève (PNUE 1979), protocole de Montréal pour la protection de la couche d'ozone (1985), conférence de Kyoto (1997), pour la réduction des émissions des gaz à effet de serre, conférence de Copenhague et de Lima pour limiter le réchauffement climatique à 2°C (COP 20). Récemment l'accord de Paris qui y a été adopté et qui engage tous les pays du monde à réduire leurs émissions de gaz à effet de serre et à maintenir le réchauffement sous la barre des 2°C d'ici 2100 (COP 21 et 22)). Une évidente conséquence de ce changement est le mouvement mondial vers les options énergétiques renouvelables.

A l'exception de la géothermie, de l'énergie nucléaire et de l'énergie marémotrice, l'activité solaire est à l'origine de toutes les énergies existantes sur Terre, le rayonnement solaire, la force de l'eau, du vent et même de la photosynthèse des plantes. Il y a donc de nombreux dérivés du solaire. Toute cette énergie contenue dans le Soleil est si abondante qu'elle est considérée comme inépuisable. Il y a cinq milliards d'années que le Soleil est en train d'émettre de radiation solaire et on estime qu'il n'a pas encore atteint 50% de son existence. En plus d'être inépuisable, elle est abondante, surtout que la quantité d'énergie que le Soleil verse tous les jours sur la Terre est dix mille fois supérieure à celle consommée par jour sur la planète entière. Le rayonnement solaire reçu est distribué de manière plus ou moins uniforme sur toute la surface de la Terre, ce qui rend son utilisation plus difficile. Malgré cela, la révolution des énergies renouvelables est avancée comme un dénouement à tous nos problèmes de production d'énergie électrique sans que cela n'aggrave nos émissions de gaz à effet de serre. C'est pour cette raison que l'intégration des centrales d'énergies renouvelables dans l'infrastructure énergétique mondiale a connu une croissance importante. A titre d'exemple, l'Union européenne et la Chine qui sont considérées comme les premiers consommateurs énergétique au monde, prévoient de récolter 20% et 15%, respectivement de leur production totale d'électricité à partir de sources d'énergie renouvelables d'ici 2020. Cela n'engage pas seulement les leaders économiques mondiaux, mais aussi les pays en cours de développement comme le Maroc. Ce dernier est jusqu'à présent non producteur de ressources énergétiques et dépendant de l'extérieur pour la quasi-totalité de son approvisionnement. La dépendance de l'extérieur reste de 95 % et la facture énergétique pèse sur les équilibres économiques et financiers : 26 Milliards de DH. Tout de même, cette consommation reste relativement faible (480kwh/habitant). Pour dépasser ceci, le Maroc, semblablement a ces voisins européens a lancé à son tour une nouvelle politique énergétique qui vise les différentes formes d'énergies.

La manifestation la plus éloquente de ce choix stratégique, le lancement en novembre 2009 du projet marocain de l'énergie renouvelable, qui vise la mise en place en 2020, d'une capacité de 6.000 mégawatts, soit 42% des besoins énergétiques prévisionnels du Royaume à l'horizon de 2020 et envisage d'atteindre 52% à l'horizon de 2030, dont une tierce (environ 14% et 17.3% respectivement) est issue de l'énergie solaire. Le reste est répartie sur les autres formes d'énergie éolienne et hydraulique, sans oublier le programme de code d'efficacité énergétique dans le bâtiment, les hôpitaux, les administrations, les bâtiments publique, et au milieu industrielle.

Tenant compte de l'énorme quantité d'énergies que reçoit la surface de la Terre par le soleil, Il est donc légitime d'essayer d'en tirer profit. L'énergie photovoltaïque, basée sur la conversion des ondes électromagnétique émises par le Soleil en électricité, représente l'une des ressources énergétiques renouvelables à part entière, bien qu'elle est actuellement reconnue en tant que source potentielle d'énergie, elle n'échappait tout de même pas à certaine reproche au paravent, comme par exemple d'être intermittente (jour, nuit, saison), de ne pas être fiable, et de dépenser plus d'énergie pour la conception d'un panneau solaire pour un rendement insignifiant comparer au énergies fossiles. Ce qui rend le rapport qualité/prix inéquitable. A présent, ces préjugés sont surpassés non seulement par les progrès techniques accomplis sur les matériaux des cellules photoélectriques, mais également sur le traitement de l'énergie et l'innovation dans les conceptions des systèmes de conversion photovoltaïque.

La puissance solaire est non seulement artificiellement extraite à partir de la conversion photovoltaïque mais aussi par la conversion thermoélectrique, résumé par la transformation d'énergie thermique en énergie électrique. Malgré qu'elle soit moins compétitif comparé au photovoltaïque, elle reste l'un des piliers des temps modernes. Des millions de tonnes d'énergie fossile sont chaque jour sacrifiés à la fée électricité pour notre confort. Pourtant, une large part de cette énergie se perd dans l'atmosphère sous forme de chaleur dans les centrales électriques, ne pouvant pas être efficacement exploitée. C'est à ce titre que la thermoélectricité devrait émerger et jouer un rôle dans les années futures en valorisant les énormes quantités d'énergie perdue (automobile, chaudières, incinérateurs, rayonnement solaire infrarouge...) et contribuer au développement durable ou s'intégrer à d'autres technologies émergentes telles que le photovoltaïque ou même la géothermie grâce à des systèmes hybride.

Ainsi, en ce qui concerne l'énergie photovoltaïque traitée dans ce mémoire de thèse, nous pouvons considérer cette source d'énergie comme une des énergies renouvelables capable de produire de l'électricité en grande quantité sur du long terme sans trop émettre de gaz à effet de serre. Il reste tout de même quelques problèmes à résoudre dans les volets techniques et économiques pour rendre cette énergie compétitive par rapport aux autres solutions, et en premier lieu, le fait d'être une source intermittente d'électricité difficile à anticiper et à contrôler la rend difficile à exploiter au moment où on en a besoin, et la volonté mondiale de la rendre accessible à toute troncne sociale rend le rapport qualité/prix très important. De ce fait, d'énorme progrès ont t'était réalisé dans l'aspect structural des matériaux photovoltaïque de sorte à rendre cette technologie plus performante. Par exemple, l'efficacité des cellules photovoltaïques à l'état solide a commencé avec des valeurs de 5% ¹, mais il existe maintenant

des valeurs atteignables de 20% dans les systèmes à base de Si et d'environ 30% dans les systèmes à base de GaAs ².

Malgré cela la communauté s'est trouvée contrainte à consacrer de nombreux travaux à la conception de ce système, des conceptions capables d'exploiter une large gamme spectrale, d'améliorer la performance et de surmonter les points de faiblesse toujours présents au niveau de ce dispositif, à savoir les pertes par transmission et thermalisation. C'est pour cela que la mise en œuvre d'un système qui combine entre la technologie photovoltaïque et thermoélectrique (PV-TE) peut être une bonne manière d'utiliser la chaleur résiduelle causée par cette thermalisation et augmenter l'efficacité en exploitant les rayonnements transmis par le photovoltaïque.

II. Objectif

En effet, l'intérêt de ce mémoire est de proposer un nouveau système hybride couplant les technologies thermoélectrique et photovoltaïque, et d'étudier sa faisabilité et sa performance, en tenant compte de plusieurs paramètres et plusieurs conceptions. Le manuscrit est divisé ainsi en quatre chapitres qui visent en premier lieu à présenter une vision générale sur le principe de fonctionnement de chaque système, ainsi que sur les avancées et les perspectives à venir au niveau des différents matériaux photovoltaïque et thermoélectrique. Nous précisons également dans le premier chapitre les différents contextes de nos travaux de recherche en mettant le point sur la problématique encadrée dans ce travail.

Dans le chapitre II nous abordons la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) qui demeure la méthode la plus utilisée dans les calculs de la structure électronique en développant les différents principes d'approximations permettant l'application de cette théorie, tel que l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA), l'approximation de la densité locale (LSDA), puis le potentiel de Becke-Johnson modifié (mBJ). Nous rappellerons également le principe de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW). La fin de ce chapitre est consacrée à la description de l'ensemble des travaux de développement des paramètres thermoélectrique du tellure de bismuth (Bi_2Te_3) ou nous présentons dans un premier temps ces caractéristiques fondamentales, et ensuite les résultats de l'application des contraintes mécaniques sur ces paramètres.

Par la suite, nous développerons en chapitre III, la conception du système hybride PV-TE à travers l'analyse du couplage adapté à la combinaison entre les deux systèmes photovoltaïque et thermoélectrique et ainsi évaluer la faisabilité et la fiabilité du couplage choisi grâce à une étude thermique afin de trouver celui capable de valoriser la production électrique.

¹ Chapin D M, Fuller C S and Pearson G L. A new silicon p-n junction photocell for converting solar radiation into electrical power J. Appl. Phys. 1954; 25: 676-7

² Conibeer G. Third-generation photovoltaics Mater. Today 2007 ; 10 : 42-50

Le chapitre IV, quant à lui, est consacré à l'étude comparative entre les différents fluides utilisés dans le système de refroidissement intégré au sein de ce dispositif hybride PV-TE, dont le rôle est de surmonter le problème de surchauffe des cellules photovoltaïques en premier lieu, surtout sous concentration, et de contribuer dans le développement de la production d'énergie électrique de ce système hybride.

Au niveau conclusion, nous résumerons le travail effectué dans ce mémoire d'où quelques perspectives seront dégagées.

CHAPITRE I

DEVELOPPEMENT PHOTOVOLTAÏQUE
ET THERMOELECTRIQUE.

I.1. Introduction

Dans le contexte global d'améliorations des performances des systèmes photovoltaïque (PV) et thermoélectrique (TE), il nous a semblé intéressant de commencer cette mémoire par un bilan des principaux axes de développement photovoltaïques et thermoélectrique afin de mieux appréhender les potentialités de chacun. Ainsi, en comprenant mieux les fondamentaux, cela nous a permis de comprendre non seulement les propriétés de conversion de chaque système mais aussi ses limites et ses points de faiblesse. Nous proposons de partager une vision globale des avancées technologiques avec le lecteur afin de pouvoir anticiper les besoins futurs et ainsi que chacun puisse se forger son propre avis sur le développement photovoltaïque et thermoélectrique, et par suite sa propre opinion sur l'utilité potentiel du système hybride PV-TE.

De ce fait, nous rappelons dans un premier temps le principe de la conversion par effet photoélectrique, l'état de l'art de la cellule photovoltaïque, ces paramètres et équations caractéristique ainsi que les différents facteurs limitant le rendement de conversion. Tout en mettant le point sur les nouvelles générations de cellules solaires, qui utilise par exemple de nouveaux matériaux de type organique, en passant bien sûr par la technologie photovoltaïque la plus utilisée depuis la création des premières cellules correspond à la filière silicium de type cristallin représentant actuellement 90% de la production mondiale pour les applications terrestres.

Dans un second temps le chapitre dresse par la suite la thermoélectricité avec les différents effets thermoélectriques dont les principes de base y sont étudiés. Nous présenterons également les matériaux thermoélectriques conventionnels ainsi que la nouvelle génération. Enfin, nous évoquerons l'intérêt de l'intégration du générateur thermoélectrique dans ce système hybride étudier toute en montrons sa valeur ajoutée à la performance globale.

Pour conclure cet état de l'art, nous introduirons le contexte des travaux de recherches engagés par cette étude de système hybride et qui sont développé par la suite.

I.2. Conversion photovoltaïque

I.2.1. Le rayonnement solaire

Le développement de la conversion photovoltaïque implique certaine connaissance de la source d'énergie utilisé : le soleil. Ce qui nous mène d'abord a analysé le spectre solaire. Le rayonnement solaire est constitué de photons dont la longueur d'onde s'étend de l'ultraviolet (0.2 μm) à l'infrarouge lointain (10 μm) (**Fig. I.1**) dont la répartition spectrale est déterminée par la température de sa surface, à savoir 5900 K. La figure (**I.2**) donne l'allure de cette répartition spectrale du rayonnement solaire réel hors atmosphère, dont l'éclairement est défini comme une puissance reçue par une surface pour une longueur d'onde donnée ; il s'exprime en $\text{W}/\text{m}^2.\text{nm}$ [**1**] comparé à celle du corps noir³ ce qui nous indique que le soleil se comporte approximativement comme un corps noir.

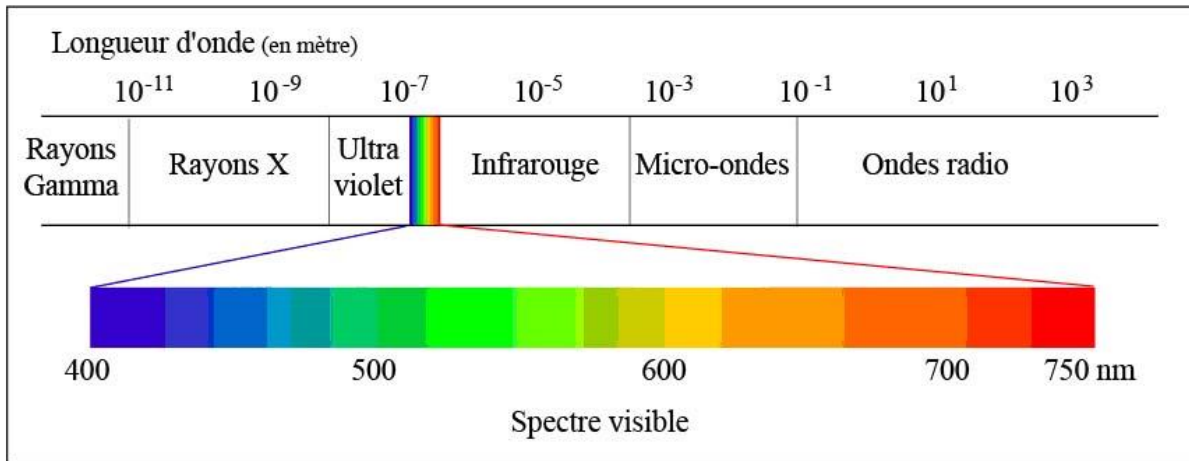


Figure I.1. Spectre du rayonnement électromagnétique en fonction de leur longueur d’onde.

On utilise la notion AM pour Air Mass afin de caractériser ce spectre solaire en termes d’énergie émise [3.4]. Le rayonnement reçu par l’atmosphère terrestre en incidence normal est constant et voisin de 1353 W/m^2 [5]. Cependant, il subit une atténuation et une modification de son spectre après son passage à travers l’atmosphère à cause de trois mécanismes : l’absorption par les différentes molécules gazeuses entrant dans sa composition [2], la diffusion moléculaire de Rayleigh qui est une diffusion due aux molécules de gaz constituant l’atmosphère et dont la taille est très inférieure à la longueur d’onde de la lumière, et la diffusion due aux particules qu’elle contient : aérosols⁴, poussière et les nuages. D’où le flux énergétique solaire optimal reçu au sol se réduit alors à 1000 W/m^2 . Cette valeur change en fonction de l’inclinaison des rayons lumineux par rapport au sol. Plus l’angle de pénétration est faible, plus l’épaisseur atmosphérique que les rayons auront à traverser sera grande, d’où une perte d’énergie conséquente.

Par exemple, AM0 (hors atmosphère) est utilisé pour les applications spatiales, AM1, ou AM1,5 pour les applications terrestres pour lesquelles la cellule photovoltaïque est placée au niveau de la mer dans des conditions d’éclairement qui correspondent à un ciel parfaitement clair et dégagé, sous un soleil de midi au zénith (90°) pour AM1 ou d’inclinaison ($\sim 42^\circ$) pour AM1,5 (c’est-à-dire pour un rayonnement traversant 1 ou 1,5 fois l’épaisseur de la couche atmosphérique). Plus le nombre d’unités de masse atmosphérique sera élevé, plus le spectre solaire se décalera vers le proche.

³ Un corps noir est par définition un corps idéal parfaitement absorbant pour la lumière et parfaitement émissif pour le rayonnement thermique [2].

⁴ Particules en suspension dans l’atmosphère, ont en général des dimensions semblables à la longueur d’onde de la lumière ; ce peuvent être des poussières, des cendres, des microcristaux, des microgouttelettes, des fumées de pollution industrielle dont la taille varie de $0,5$ à $10 \mu\text{m}$ [6].

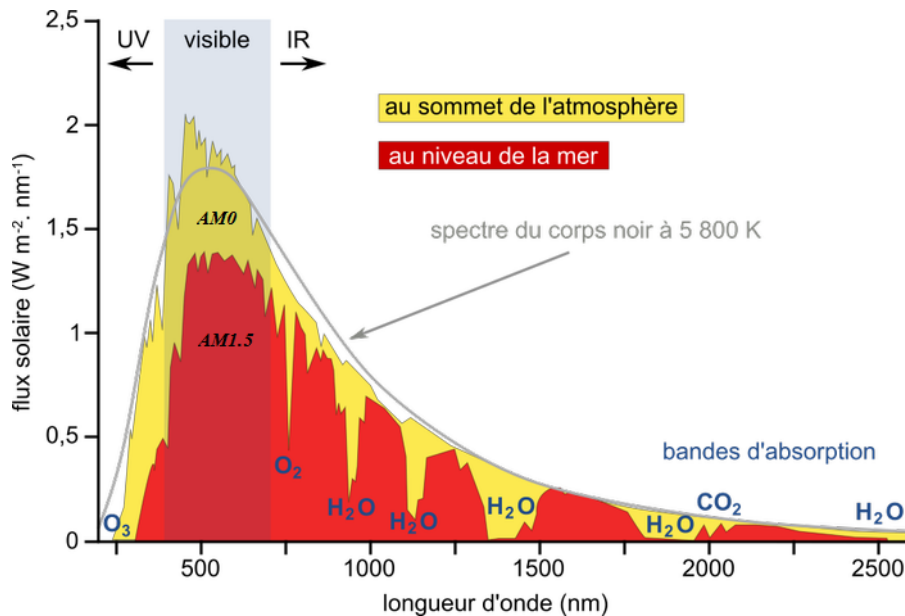


Figure I.2. Spectres Solaires, a) Hors atmosphère (AM0). b) A l'incidence 41.8° (AM1,5)

I.2.2.Principe de la conversion photoélectrique.

I.2.2.1. Historique.

En 1839, Antoine Becquerel publie un Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires relatif à une expérience menée par son fils Edmond avec une pile constituée par des électrodes de platine et de cuivre oxydé plongeant dans une solution électrolytique acide [6]. Cette pile est capable de fournir un courant dès l'instant où elle est éclairée. Cela a montré que certains matériaux pouvaient produire une petite quantité de courant sous l'effet de la lumière. À cette époque, le niveau des connaissances scientifiques ne permettait pas d'expliquer le fonctionnement de ces dispositifs, et ce n'est qu'en 1905 qu'Albert Einstein publie un article convaincant sur l'effet photoélectrique où il déclare que la lumière n'avait pas qu'un caractère ondulatoire mais que son énergie était portée par des particules, précisément les photons. Cela lui a valu le prix Nobel en 1921.

On associe à chaque photon une énergie :

$$E_{ph} = h \cdot c / \lambda \quad (I.1)$$

Où h est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière et λ sa longueur d'onde. Cette énergie peut être exprimée aussi en fonction de la longueur d'onde par la relation :

$$E_{ph} = 1.24 / \lambda (\mu m) \quad (I.2)$$

Dans ce qui suit nous présentant le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, et nous identifierons ainsi les principaux facteurs limitant son rendement.

I.2.2.2. Processus d'absorption de la lumière par la matière

La conversion solaire photovoltaïque consiste à convertir directement le rayonnement électromagnétique (photons) en énergie électrique à travers des cellules photovoltaïques, grâce au processus d'absorption de la lumière par la matière. Cependant ces photons incident seront soit transmis, soit réfléchi, soit absorbé par le matériau selon leur longueur d'onde (**Fig. I.3**).

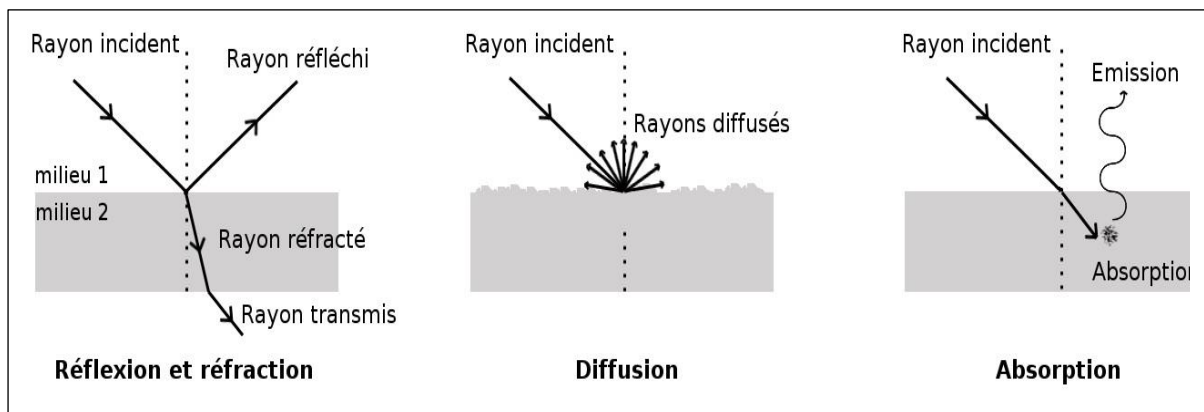


Figure I.3. Représentation schématique d'interaction rayonnement matière : réflexion et/ou réfraction, diffusion et absorption.

De ce fait la conversion photovoltaïque est déterminé par le phénomène d'absorption et se déroule en deux phases : génération de pair électron –trou et collecte des charges.

Lorsqu'un photon est absorbé par le matériau, il passe une partie de son énergie par collision à un électron l'arrachant littéralement de la matière. Ce dernier étant précédemment à un niveau d'énergie inférieur (bande de valence) où il était dans un état stable passe alors vers un niveau d'énergie supérieur (bande de conduction), créant un déséquilibre électrique au sein de la matière se traduisant par une paire électron-trou, de même énergie électrique. Cependant, toute l'énergie des photons n'arrivant pas à se transformer en électricité, car généralement la paire électron-trou revient rapidement à l'équilibre en transformant son énergie électrique en énergie thermique par des chocs inélastique entre électrons, qui se traduit par une évacuation de chaleur. C'est ce qu'on surnomme le phénomène de thermalisation. Cela ne dépend pas seulement de l'énergie du photon incident mais aussi de l'énergie du gap qui représente l'écart

entre les bandes de valence et de conduction du matériau constituant les capteurs photovoltaïque.

Ce gap énergétique diffère selon le type de matériau. En effet, dans un métal, tous les niveaux supérieurs au niveau de fermi sont autorisés et toutes les longueurs d'onde sont donc susceptibles d'être absorbé. Cependant, les paires électron-trou généré se recombinent quasi-instantanément, ce qui ne laisse pas la possibilité de les exploiter. D'autre part, un matériau isolant possède un gap d'au moins 8 eV. Ce qui implique que le photon incident devra fournir une énergie supérieur à 8 eV pour interagir avec l'électron, ce qui correspond à des longueurs d'onde inférieur à 0,15 μm (UV), domaine qui ne couvre pas le rayonnement solaire (voir **Fig.I.4**).

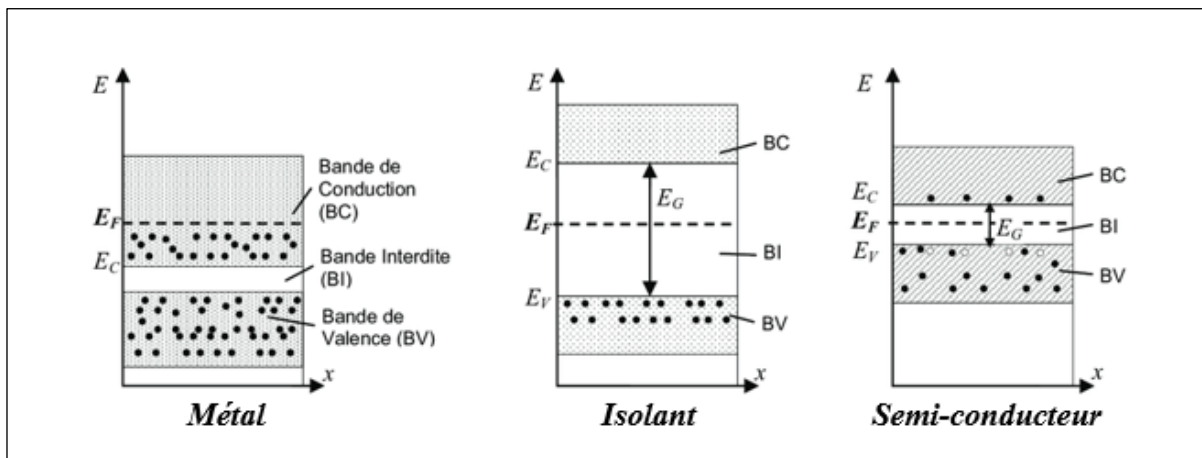


Figure I.4. Diagramme de bandes d'énergie d'un conducteur, isolant et semi-conducteur.

Cependant, dans un semi-conducteur, la structure des bandes de conduction et de valence définissent un gap plus faible, Il suffit donc de donner de l'énergie aux électrons, en les excitant pour qu'ils se déplacent de la bande de valence vers la bande de conduction facilement, raison pour laquelle il est utilisé dans la plupart des cellules photovoltaïques. Au niveau d'un semi-conducteur, il existe différentes transitions possibles selon la nature du gap. Quand le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence correspondent à la même valeur du vecteur d'onde (k), il s'agit d'un gap direct, dont les transitions inter bandes s'effectuent verticalement, et sont donc radiatives. (**Fig. I.5.a**). Ceci illustre le fonctionnement des semi-conducteurs binaires III-V, tels que le GaAs.

Tandis que pour un gap indirect, la figure (**I.5.b**) montre que les transitions électroniques entre les extrema des bandes sont obliques, donc non radiatives puisqu'elles impliquent un changement du vecteur d'onde de l'électron. Toutefois, la transition peut être effectuée dans le gap indirect à condition qu'un phonon soit au préalable absorbé (ou émis) par l'électron, afin que le vecteur d'onde de ce dernier corresponde au maximum de la bande de valence. C'est le cas du silicium fortement utilisé dans le domaine de conversion photovoltaïque dont la valeur du gap est de 1.12 eV à 300K.

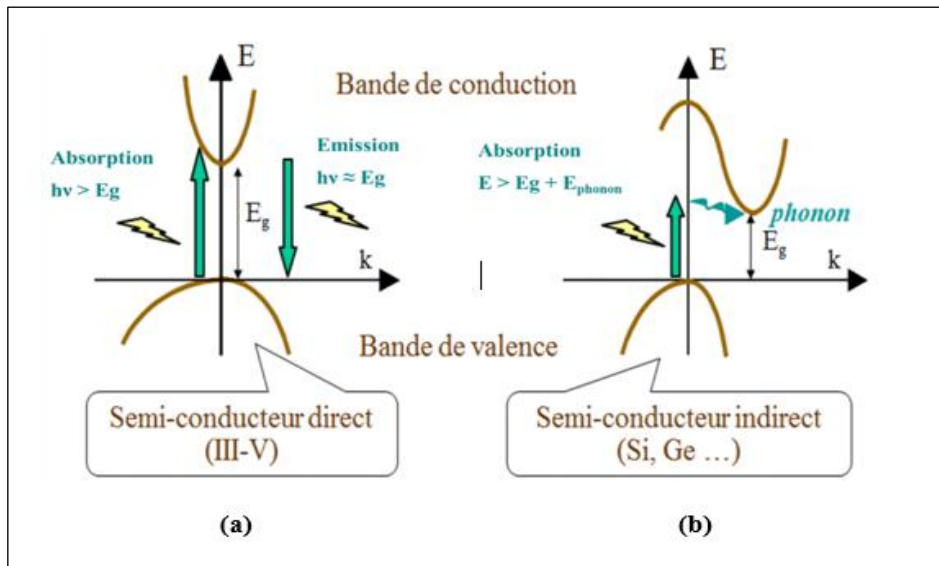


Figure I.5. Transition inter-bandes d'électron dans un semiconducteur correspondant à un gap direct (a), et un gap indirect (b).

La deuxième phase du processus de conversion photovoltaïque consiste à collecter les charges libérées (électrons) par la collision des photons dans le matériau. Afin que ces charges soient génératrices d'énergie, il faut qu'elles circulent, et donc il faut les attirer hors du semi-conducteur dans un circuit électrique pour que les électrons ne retrouvent pas leurs états initiaux. Autrement dit, éviter la recombinaison des électrons et les trous. Sinon cela libérera de l'énergie thermique au lieu d'électrique. On doit donc engendrer un champ électrique à l'intérieur du semi-conducteur, cela nécessite la création d'une jonction PN, qui n'est en fait qu'une juxtaposition de deux semi-conducteur l'un dopé type P⁵ et l'autre dopé de type N⁶.

Lors de la formation de la jonction sous obscurité, de forts gradients de concentrations des porteurs sont générés thermiquement, causant un déplacement de trous de la région P vers la région N et inversement pour les charges négative qui se déplace de la région N vers la région P. Donc, au voisinage de la jonction connu par l'intitulé : zone de charge d'espace (ZCE), la zone P s'appauvrit en porteurs majoritaires, et de même pour la zone N, mais il va rester des atomes accepteurs et donneurs ionisés et par suite l'apparition d'un champ électrique interne dont la direction est telle qu'il tend à diminuer le courant de diffusion des majoritaires et dont l'intensité est telle qu'elle permet d'atteindre l'équilibre.

Toutefois, Sous éclaircissement, les photons incidents peuvent être absorbés dans la zone N, P et dans la zone ZCE produisant ainsi des charges électriques libres dans la zone N ou P. les porteurs minoritaires qui atteignent la zone ZCE sont diffusés par le champ interne vers la zone où ils sont majoritaires : c'est le photo-courant de diffusion (**Fig. I.6**).

⁵ Le dopage de type N consiste à avoir un excès d'électrons dans le matériau.

⁶ Le dopage de type P consiste à avoir un excès de trous dans le matériau.

Dans la ZCE les paires électron-trou créées sont dissociée par le champ électrique, les électrons se voient ainsi accélères vers la zone N et les trous vers la zone P, c'est le photo-courant de génération. Ces deux contributions s'ajoutent pour donner un photo-courant résultant I_{ph} .

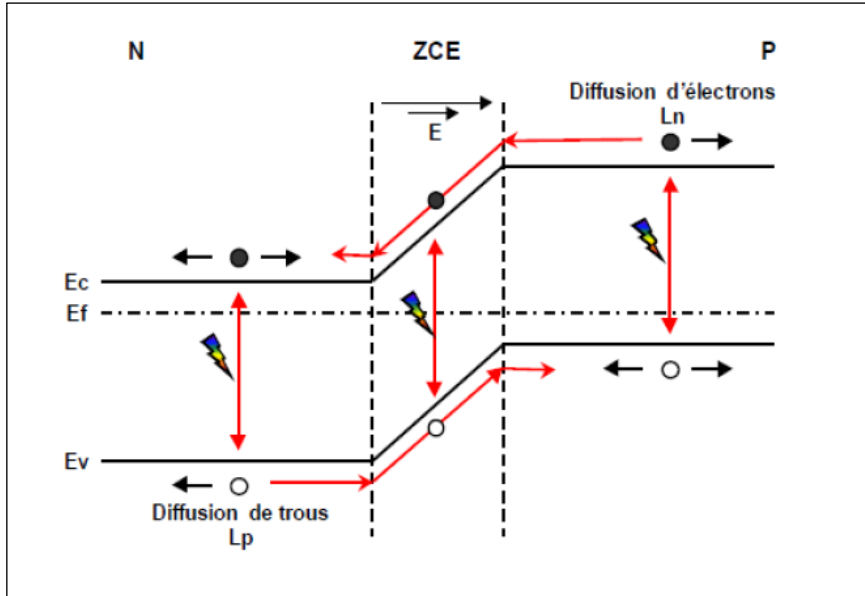


Figure I.6. Bandes d'énergies d'une jonction p-n sous éclairement. [7]

La densité des porteurs de charges évolue selon une décroissance exponentielle entre sa valeur initiale et sa valeur à l'équilibre et cette décroissance est caractérisée par la longueur de diffusion (L_n ou L_p) des porteurs considérés (Eq. I.3) :

$$L_n = \sqrt{D_{n,p} \theta_{n,p}} = \sqrt{\mu_{n,p} \theta_{n,p} \frac{KT}{q}} \quad (I.3)$$

Avec : $D_{n,p}$, $\theta_{n,p}$, $\mu_{n,p}$, K , q , T sont respectivement, le coefficient de diffusion des porteurs électrons ou trous (cm^2s^{-1}), la durée de vie des porteurs de charge (électrons/trous) dans le matériau (s), mobilité des porteurs de charge ($\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$), constante de Boltzmann (JK^{-1}), charge électronique (C), température (K). Le rôle de cette longueur de diffusion est d'assurer la contribution à l'effet photovoltaïque en évitant la recombinaison des charges. C'est-à-dire que seul les paires électron-trou photo-généré dans la région de longueur de diffusion L_e et la zone de charge d'espace (ZCE) peuvent contribuer à l'effet photovoltaïque, car dans ces régions seulement que les paires électron-trou peuvent se déplacé sans se recombiner (**Fig. I.7**).

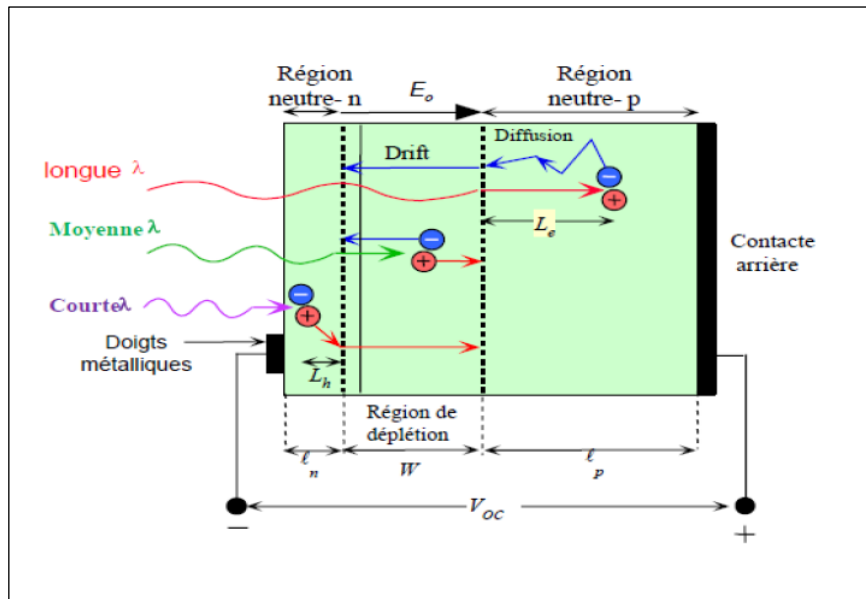


Figure I.7. Principes de déplacement des porteurs de charge dans une cellule photovoltaïque.

[7]

De ce fait, élargir cette région de longueur de diffusion L_e est toléré de sorte que la longueur de diffusion des porteurs minoritaire soit la plus longue possible et ça en choisissent la jonction PN de silicium type p qui fait des électrons des porteurs minoritaire sachant que la longueur de diffusion dans le silicium est supérieur à celle des trous. Donc en gros les paires électron-trou photo-généré qui contribuent à l'effet photovoltaïque se produit dans un volume de : L_e+W+L_h .

I.2.2.3. Caractéristique d'une cellule solaire photovoltaïque sous éclairement.

Avant de discuter des grandeurs caractéristique d'une cellule solaire photovoltaïque, il faut évoquer son circuit équivalent qui décrit son comportement électrique à l'aide de plusieurs composants élémentaires (source, résistance, diode, bobine, condensateur, etc.). Ce circuit est représenté sur la figure (I.8) par un générateur de courant (I_{cc}), une diode et deux résistances parasites. R_s et R_p .

Le rôle de ses composants électriques est réparti comme suit : le générateur de courant (I_{cc}), délivre le courant correspondant au courant photo-généré, la modélisation de la jonction PN est assuré par le diode, la résistance R_s modélise [8] les pertes résistives au sein de la photopile (les métallisations). Elle est liée à l'impédance des électrodes et du matériau ; il en résulte que la tension V_{PV} aux bornes de la cellule est différente de la tension V_j aux bornes de la jonction PN. Ce terme doit idéalement être le plus faible possible pour limiter son influence

sur le courant de la cellule. Finalement, La résistance parallèle R_p : correspond [4] à une résistance de fuite entre les deux zones n et p de la jonction ; il en résulte qu'une partie du courant I_{CC} sera dérivée par cette résistance et ne pourra être délivrée à la charge. Cette résistance devra être la plus élevée possible.

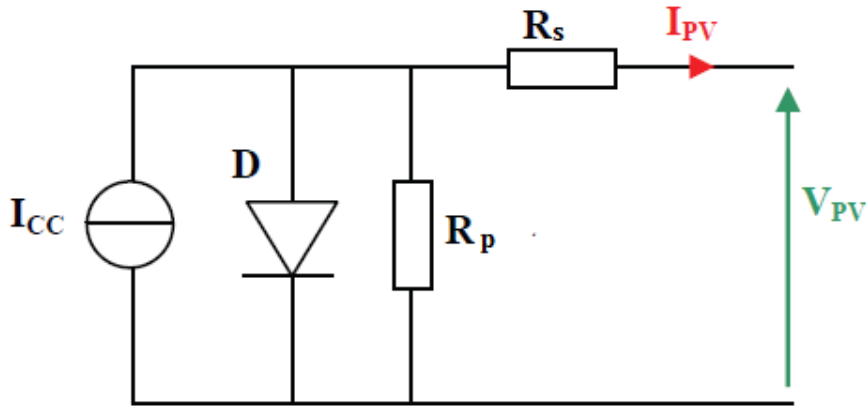


Figure I.8. Circuit électrique équivalent d'une cellule solaire photovoltaïque à jonction PN [9].

Lorsqu'une jonction PN réalisée à partir de matériaux sensibles à la lumière est éclairée, elle présente la particularité de pouvoir fonctionner en générateur d'énergie. Ce comportement en statique peut être décrit par l'équation électrique définissant le comportement d'une diode classique. Ainsi, le régime électrique statique d'une cellule photovoltaïque constituée d'une jonction PN en silicium peut être décrit via l'équation suivante :

$$I_{cell} = I_{ph}I_s \left(\exp \left(\frac{V_{cell} + I_{cell}R_s}{nV_{th}} \right) - 1 \right) - \frac{V_{cell} + I_{cell}R_s}{R_p} \quad (I.4)$$

Où $V_{th} = \frac{K \times T}{e}$ représente le potentiel thermodynamique, I_s , le courant de saturation de la jonction, K , la constante de Boltzman ($1.381 \cdot 10^{-23}$ Joules/Kelvin), T , la température de la cellule en Kelvin, e , la charge d'un électron, n , le facteur de non idéalité de la jonction, I_{CELL} , le courant fourni par la cellule, et V_{CELL} , la tension aux bornes de la cellule. La différence de potentiel présente aux bornes d'une jonction PN soumise à un éclairage est également mesurable entre les bornes de la cellule PV. Typiquement, la tension maximale d'une cellule (PN) est d'environ 0.5 à 0.8V. Elle peut être directement mesurée à ses bornes sans charge (circuit ouvert : le courant débité par la cellule solaire est nul). Cette tension nommée tension de circuit ouvert (V_{oc}) est donnée par la relation (I.5). Lorsque les bornes d'une cellule sont court-circuitées (la tension aux bornes de cellule est nulle ($V_{cell}=0$)), on peut mesurer le courant maximal produit par la cellule PV et on le nomme communément courant de court-circuit (I_{cc}) (Eq. I.6).

$$V_{co} = nV_{th} \text{Log}\left(1 + \frac{I_{ph}}{I_s}\right) \quad (\text{I.5})$$

$$I_{cell} = I_{ph} I_s \left(\exp\left(\frac{I_{cell} R_s}{nV_{th}}\right) - 1 \right) - \frac{I_{cell} R_s}{R_p} \quad (\text{I.6})$$

Ces valeurs peuvent changer fortement en fonction du matériau utilisé, de la température et de l'ensoleillement. La Figure I.9 représente les caractéristiques typiques mesurables $I_{cell} = f(V_{cell})$ d'une jonction PN sous éclaircissement et dans l'obscurité [10].

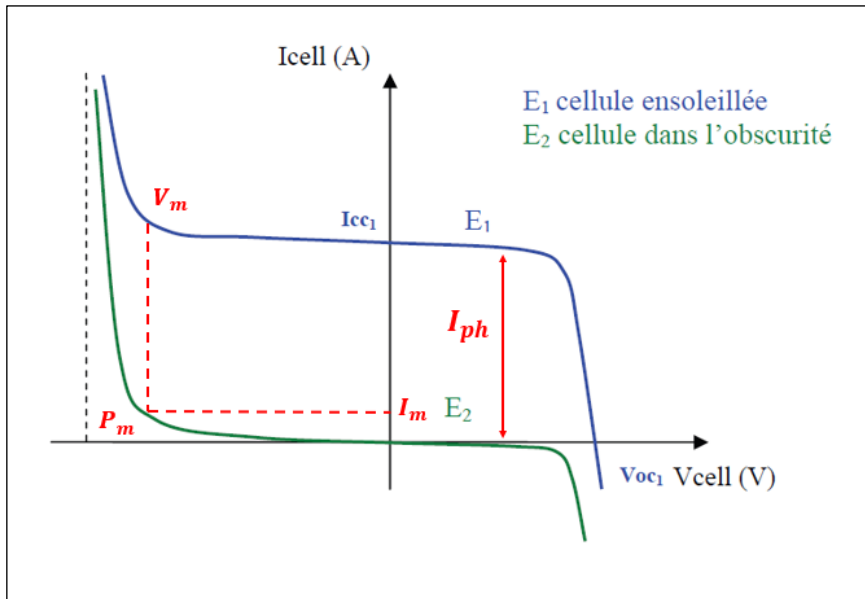


Figure I.9. Courbe caractéristique d'une cellule solaire à l'obscurité et sous éclaircissement

Elle interprète le point de fonctionnement P_m situé au coude de la caractéristique I-9 et dit point de puissance maximale où la tension et le courant sont au maximum de leurs valeurs (V_m, I_m). Cette grandeur essentielle pour évaluer la performance d'une cellule photovoltaïque éclairée est donnée par la relation (I.7) et le rapport entre cette puissance, la tension de circuit ouvert (V_{oc}) et le courant de court-circuit (I_{cc}) est traduit par un paramètre important est souvent utilisé pour qualifier la qualité d'une cellule nommé le facteur de forme (FF) (I.8)

$$P_m = V_m \times I_m \quad (\text{I.7})$$

$$FF = \frac{P_m}{I_{cc} \times V_{oc}} = \frac{I_m \times V_m}{I_{cc} \times V_{co}} \quad (\text{I.8})$$

Ces quatre grandeurs caractéristiques sont sommables dans un seul paramètre, s'appelle le rendement η qui définit le rapport entre la puissance maximale produite par la cellule et la puissance du rayonnement solaire qui arrive sur la cellule.

Si A est la surface de la cellule (en m^2) et S_c est l'irradiation (en W/m^2) le rendement énergétique s'écrit ainsi comme suite :

$$\eta = \frac{P_m}{A \times S_c} \quad (I.9)$$

On rappelle que La conversion photovoltaïque est une application énergétique fortement dépendante de la température. Dans les applications terrestres, les cellules solaires sont généralement exposées aux températures du fonctionnement variant de 10 à 50 °C.

I.2.3. Les différentes technologies photovoltaïques.

Ces dernières années, les technologies des cellules solaires ont énormément progressé et leur coût a considérablement diminué. Le meilleur moyen de suivre cette évolution technologique consiste à examiner les trois générations des systèmes photovoltaïques, définies par l'augmentation de l'efficacité par rapport à la réduction des coûts [11].

I.2.3.1. La technologie à base de silicium.

La première génération des systèmes photovoltaïques basés sur le silicium cristallin (c-Si) dominant depuis toujours le marché avec plus de 88% des ventes (**Fig.I.10**), en fait ces cellules se divisent en deux catégories distinctes : celles à partir de silicium monocristallin (mc-Si) et celles à partir de silicium poly-cristallin (pc-Si).

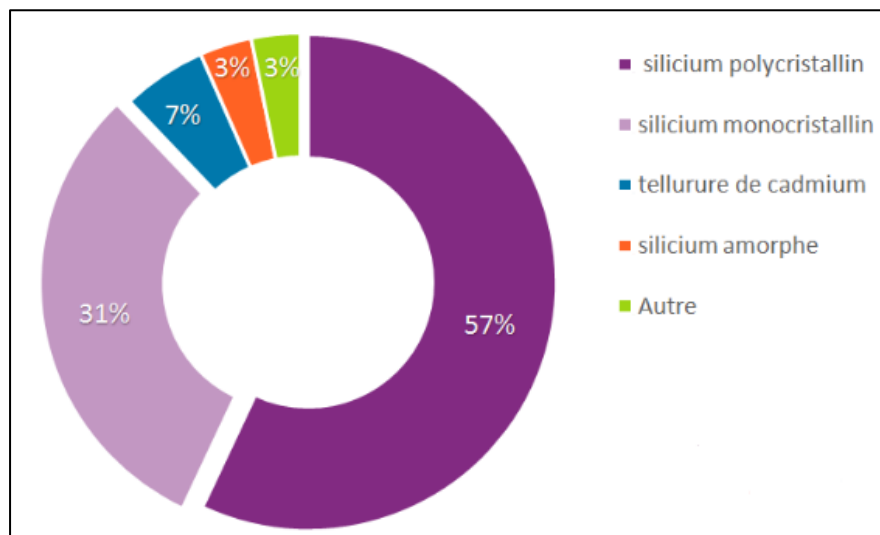


Figure I.10. Répartition des technologies de cellule sur le marché mondial en 2007 [12]

Celons la figure (I.11), une cellule solaire typique à base de silicium de première génération se compose d'une couche active ou l'absorbeur constituée d'un premier matériau accepteur d'électrons et d'un second matériau donneur d'électrons, formant une jonction donneur-accepteur. Des contacts métalliques avant et arrière constituant les électrodes négative (-) et positive (+) respectivement, chargées de collecter le courant généré. Sans oublier la couche antireflet. Ainsi, ce qui différencie une cellule solaire photovoltaïque d'une autre, c'est notamment la nature de l'absorbeur et de ses propriétés physico-chimiques. Toutefois, cela ne néglige pas l'importance de la nature et les caractéristiques des autres composants de la cellule (anti-reflet, électrodes...) ainsi que son architecture globale : type de substrat, épaisseur, positionnement des électrodes etc.

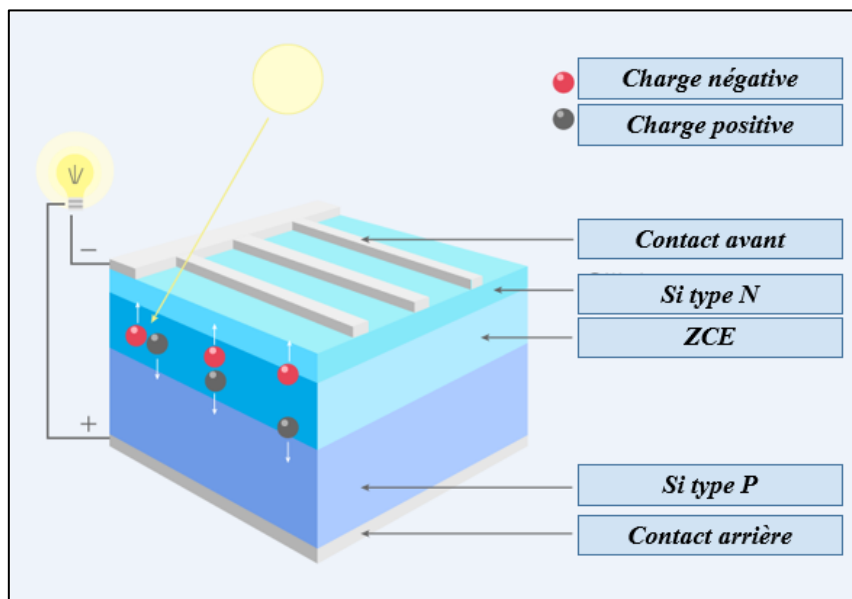


Figure I.11. Schéma d'une cellule solaire à base de Silicium cristallin.

Les modules en silicium cristallin sont fabriqués industriellement. Le monocristallin (**Fig. I.12.a**) qui est connu par ça très haute pureté est typiquement produit par la méthode de Czochralski. Ce procédé industriel consiste à introduire un germe préformé monocristallin dans le lingot de silicium en fusion [13]. Le silicium se solidifie sur ce germe et garde la même organisation cristalline que celui-ci, ensuite il faut le découper en plaquette de 300 μm . Cette étape entraîne malheureusement une perte importante de matériau qui peut aller jusqu'à 50%. Bien que cette catégorie de matériau présente d'excellentes qualités électroniques et permet la fabrication de cellule solaire à haute rendement ($\sim 20\%$ [14]), elle reste tout de même très coûteuse. Du côté structurale, les atomes au sein du silicium monocristallin sont arrangés selon la structure diamant avec une distance interatomique $d = 2,35 \text{ \AA}$ et un paramètre de maille de $a=5,43\text{\AA}$. En générale le largeur de la bande interdite (gap) des semi-conducteurs dépend de la température. Pour cette catégorie de silicium à $T=0\text{K}$ elle est de 1,17eV [15], et elle vaut 1,12 eV à température ambiante [16]. Comme le minimum de la bande de conduction est repéré à un autre point dans la zone de brouillon (dans l'espace des vecteurs d'ondes k) que le maximum de la bande de valence, on parle d'un gap indirect. Ce processus d'absorption aussi indirect est

accompagné d'une émission d'un phonon ce qui engendre des pertes par thermalisation. Le matériau inférieur est le silicium poly-cristallin (**Fig. I.12.b**), ce dernier qui est fabriqué à partir de source de matériaux moins raffiné et dont la majeure partie est produite par des procédés de solidification unidirectionnelle, tels que le Polix (Photowatt) ou le Baysix (Bayer), se présente également sous forme de lingot qu'il faut découper. Bien que ce soit le matériau qui conduit au cout le moins chère, le rendement des cellules obtenu sont légèrement inférieur (~15%).

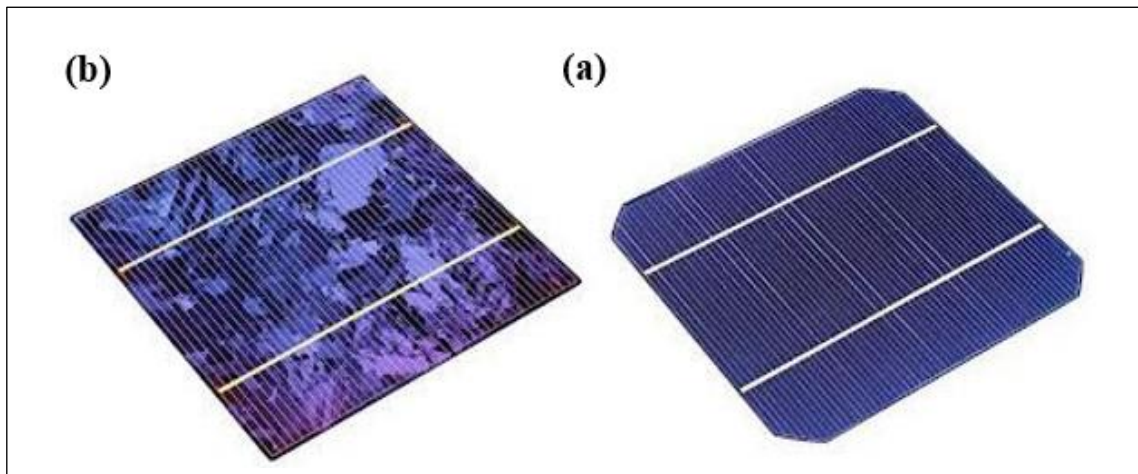


Figure I.12. Cellule solaire photovoltaïque en silicium : monocristallin (a) et polycristallin (b).

Au fur et à mesure, les dimensions des lingots ont évolué avec la technologie passant de 30kg à 100kg pour le monocristallin et de 150 kg à 250 kg pour le multi-cristallin. Cependant, la perte importante de matière lors de la découpe des lingots en lamelles (wafers en anglais) restent constante malgré les récentes techniques mis en œuvre afin de surmonté cet obstacle, tel que le silicium en ruban consistant à produire directement des plaques mince de 200 μm et 100 μm , grâce au tirage direct de rubans à partir de bains fondus [17].

[I.2.3.2. La technologie des couches minces.](#)

Les couches minces constituent la seconde génération de technologie photovoltaïque, ou la couche de semi-conducteur est directement déposée sur un substrat (ex : verre, plastique,...). La production de ce type de cellules est moins coûteuse que celle de 1ère génération puisqu'elles consomment moins de matériaux semi-conducteur et ne nécessite pas de passer par l'étape de transformation en «wafers». En peut citer par exemple le microcristallin, le silicium amorphe (a-Si), le sélénium de cuivre indium (CIS), le tellure de cadmium (CdTe), Cuivre zinc étain sulfure (CZTS) et l'arséniure de gallium (AsGa). Ces technologies de couches minces commercialisées s'emble s'imposer, même si cela ne représente actuellement pas plus de 20% du marché des cellules photovoltaïque, mais il présente tout de même des avantages considérable avec un fort potentiel de réduction des coûts liés à des processus de fabrications peu onéreux utilisant de verre de faible qualité ou de polymères comme substrat, sur lesquels on dépose une mince couche active.

De plus, le cycle de production ne nécessite que très peu d'énergie et le processus peut générer de grandes surfaces unitaires, de l'ordre du mètre carré, en un seul tenant. Pour fabriquer un module, il suffit d'ajouter au processus une déposition de matériau conducteur entre les cellules servant d'interconnexion entre elles (**Fig. I-13**). Ainsi, grâce à cette souplesse de fabrication, il est possible de fabriquer simplement des panneaux de n'importe quelle puissance et tension en fonction de la demande et de l'application.

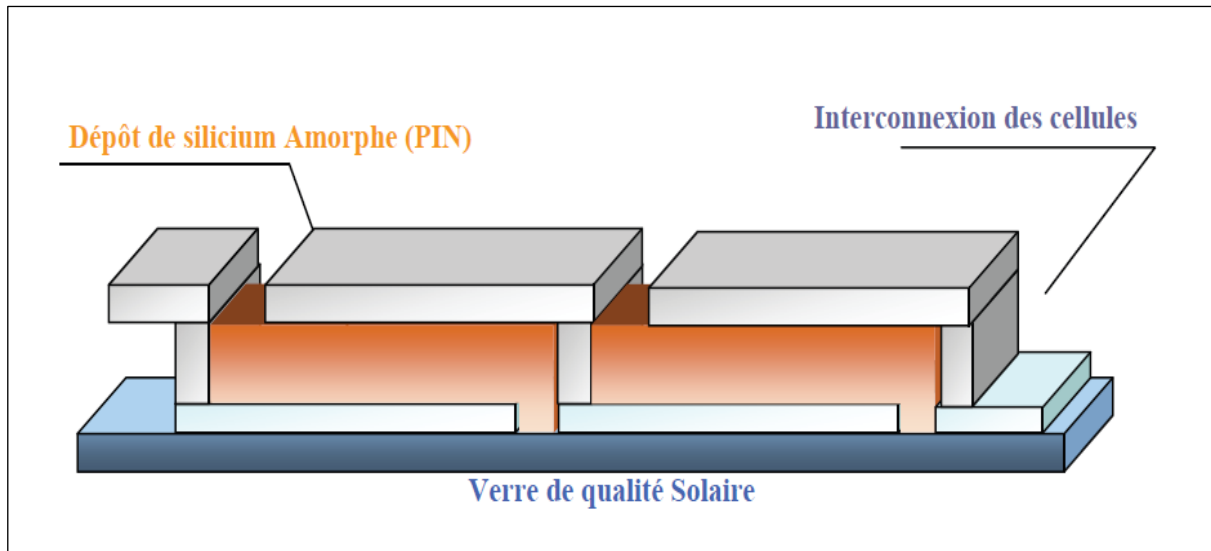


Figure I.13. Schéma simplifié d'un module a-Si en couche mince.

I.2.3.3. La technologie des cellules à haut rendement.

La troisième génération des cellules photovoltaïques vise à dépasser la limite maximale de rendement des cellules actuelles, qui est d'environ 20%. Ces dernières se divisent schématiquement en 5 catégories : les cellules tandem pour lesquelles plusieurs énergies d'excitation sont permises dans un empilement de différentes cellules, les cellules à n niveaux ou multi-jonctions pour lesquelles plusieurs énergies d'excitation sont permises dans une même cellule, les cellules organiques, les cellules de Grätzel et les cellules à concentration.

Pour les cellules tandem (**Fig. I-14**), c'est un empilement de deux cellules simples. En combinant deux cellules (couche mince de silicium amorphe sur silicium cristallin par exemple) absorbant dans des domaines spectraux connexes, on améliore le rendement théorique par rapport à des cellules simples distinctes. Leur sensibilité élevée sur une large plage de longueur d'onde, avec un excellent rendement reste leur avantage, mais la superposition de deux cellules rend leur coût assez élevé.

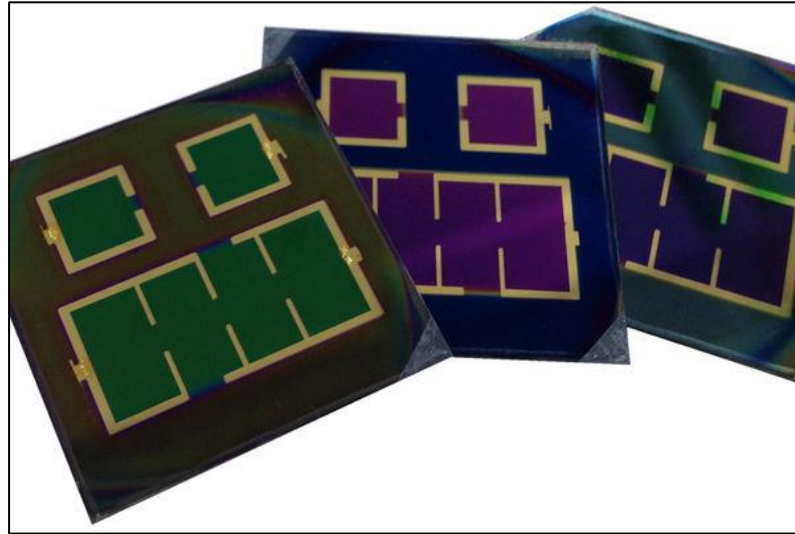


Figure I.14. Les cellules tandem.

La réponse photovoltaïque d'une cellule à simple jonction est limitée, il est parfois difficile de trouver un matériau absorbant l'ensemble du spectre solaire avec un fort coefficient d'absorption. Les cellules multi-jonctions III-V répondent à cette problématique. En effet, il s'agit de l'empilement de divers composants III-V, chacun est optimisé pour absorber une partie du spectre solaire avec efficacité. L'empilement, obtenu par croissance épitaxiale, permet donc de capter une grande partie du spectre solaire, et mène à une cellule unique composée en réalité de plusieurs cellules en série (**Fig. I-15**). Bien que ces cellules présentent des rendements très élevés supérieurs parfois à 40% [18], elles ne sont pas connues du grand public à cause de leur coût de fabrication, de loin, les plus élevés actuellement (fabrication sous ultra vide, croissance très lente, problème de casses et de défauts aux interfaces).

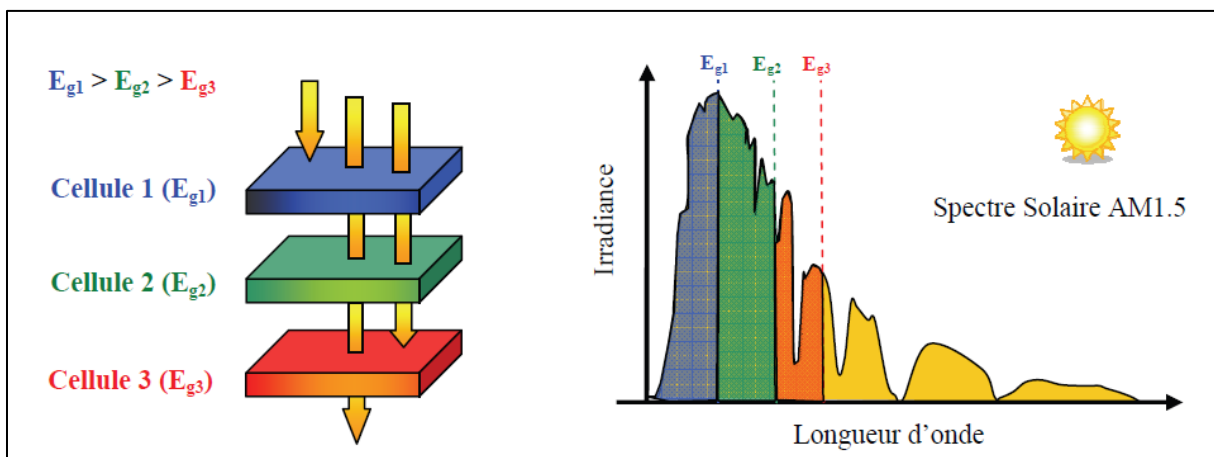


Figure I.15. Principe de la cellule multi-jonctions.

À signaler aussi que ces cellules présentent une qualité de robustesse vis-à-vis des radiations et des impacts (**Fig. I.16**). Au cours du temps, elles ont démontré qu'il était possible d'avoir des générateurs d'énergie qui vieillissent très bien et qui peuvent produire de l'énergie même en ayant subi quelques détériorations. Le rendement des modules commercialisés contenant des cellules multi-jonction actuellement avoisine les 30% pour un spectre AM0.

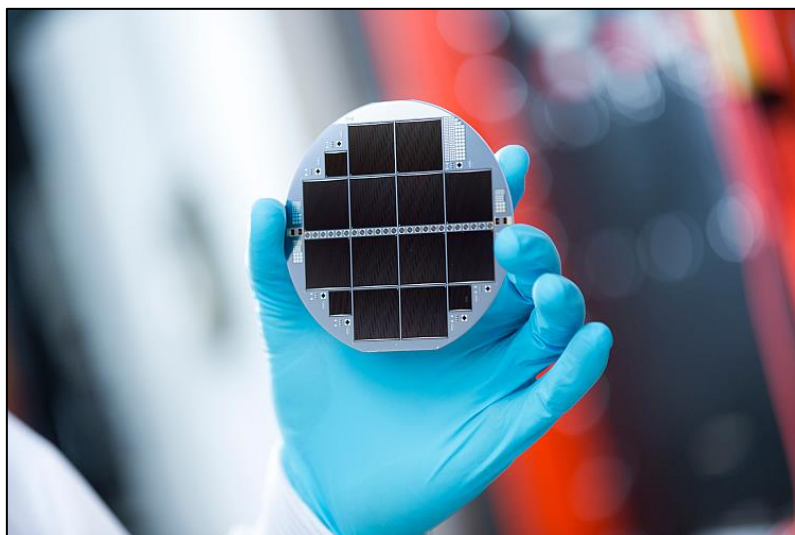


Figure I.16. Cellule multi-jonctions.

Le domaine du photovoltaïque bénéficie depuis quelques années des avancées technologiques de l'optoélectronique connu par l'utilisation de matériaux organiques, bien que cette filière soit vraiment récente, les progrès annuels sont spectaculaires. Les matériaux organiques, moléculaires ou polymériques, à base de carbone, d'hydrogène et d'azote, sont particulièrement intéressants en termes d'abondance, de coût, de poids et de mise en œuvre. En fait, ces cellules photovoltaïques sont caractérisées par une couche active constituée de molécules organiques.

Encore au stade de la recherche expérimentale, le record de rendement avec des cellules solaires en polymère était en 2008 compris entre 4 et 5 %. En laboratoire, un record mondial de 5,9 % a été atteint en juillet 2008 à l'Institut de photovoltaïque appliquée de l'Université technique de Dresde. À noter cependant que ces rendements sont obtenus sur de relativement petites surfaces (1 cm²), le record pour des surfaces plus proches de l'application n'étant en mai 2013 que de 6,8 % [19]. Ce qui montre que la stabilité de ces composés organiques en conditions réelles (c'est-à-dire soumis à l'humidité, l'oxygène et le rayonnement ultraviolet) nécessite encore de profondes améliorations. Comme toute nouvelle technologie, les cellules organique rencontre aussi quelque difficulté, à titre d'exemple, l'effet électronégatif de l'oxygène, réagit avec les électrons en excès et modifie les propriétés physico-chimiques du polymère, ce qui implique que des avancées concernant l'efficacité et l'encapsulation doivent encore être réalisées avant une possible commercialisation [20]. .

Pareille que les cellules organiques, les cellules de Grätzel se caractérisent aussi par leur fabrication moins coûteuse et plus propre pour l'environnement. Selon la figure I.17, elles sont constituées d'une cathode et d'une anode, en verre conducteur, sur laquelle se trouve une couche de semi-conducteur, généralement le dioxyde de titane TiO_2 , où est adsorbée à sa surface un sensibilisateur ou colorant, entre les deux plaques se trouve une solution aqueuse : l'électrolyte. Comme principe de fonctionnement : Un photon incident traverse le verre et la couche de semi-conducteur jusqu'au colorant où il sera absorbé. Le colorant perd un électron, et devient S^+ . Cet électron sera ensuite injecté dans la bande de conduction du semi-conducteur. Cette injection n'est possible que si l'énergie de l'électron produit par le colorant est élevée et correspond à celle de la bande de conduction du semi-conducteur. L'électron injecté traverse alors la couche de semi-conducteur jusqu'à l'anode et passe dans le circuit extérieur jusqu'à la cathode. A la cathode, cet électron qui a perdu de l'énergie durant son parcours se recombine au réducteur de l'électrolyte, l'ion triiodure, pour former l'ion iodure. Finalement, ce dernier réagira avec le colorant oxydé et lui fournira un électron, ce qui fait revenir le système à son état initial. Tout ceci forme une boucle, ce qui permet d'avoir un circuit électrique. C'est la position des énergies dans le système qui permet d'avoir une tension entre les électrodes. La présence de l'électrolyte liquide constitue l'inconvénient majeur de cette technologie avec une faible stabilité en temps (évaporation) et une plage de température de fonctionnement limitée [21].

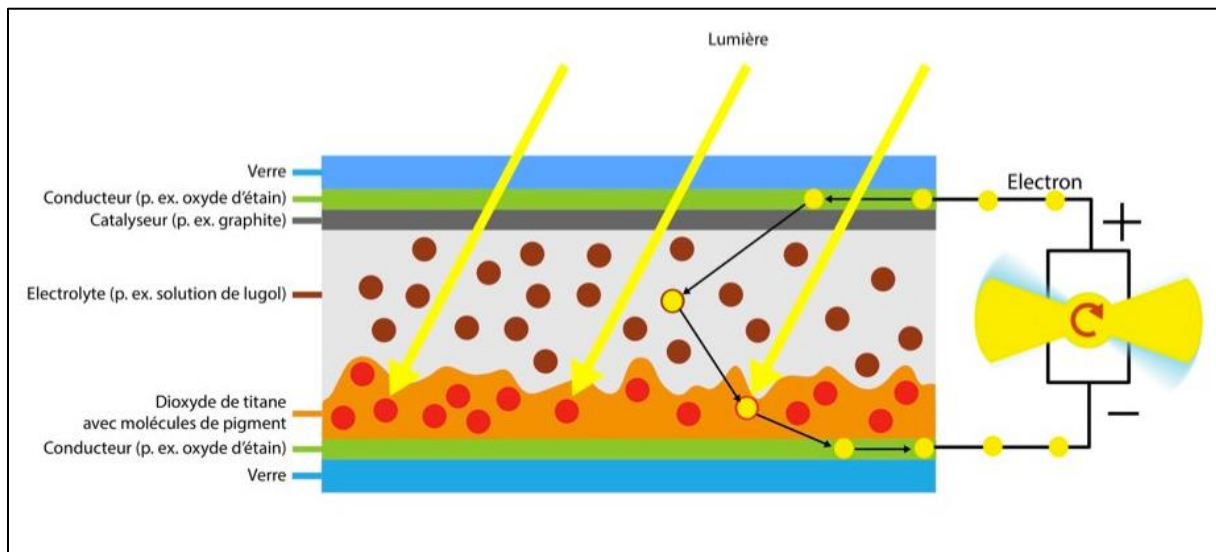


Figure I.17. Schéma représentatif d'une cellule Grätzel.

Une nouvelle approche intéressante accompagne cette avancée technologique des cellules photovoltaïques, est celle des cellules à concentration (**Fig. I.18**). Ces cellules sont constituées de deux éléments : une cellule solaire et un concentrateur. La cellule solaire peut être de n'importe quel type, son rôle est bien entendu de produire de l'énergie. Le concentrateur quant à lui sert à capter les rayons du soleil sur la surface supérieure à la surface de la cellule. Ainsi, l'énergie reçue est plus importante, et systématiquement la production aussi. Les records de rendement sont battus grâce à ce type de cellules : on atteint 46% en laboratoire

avec une concentration pour les cellules à base de multi-jonction GaInP/GaAs ou GaInAsP/GaInAs [18]. Des fabricant commencent à vendre des solutions comprenant de petits concentrateurs. Cette solution a un défaut principal : la chaleur. En effet, l'augmentation de la température diminue le rendement des panneaux. Aussi les cellules doivent être refroidies soit activement soit passivement. D'ailleurs c'est ce qu'on va mettre le point dessus dans la suite de ce manuscrit.



Figure I.18. Module à plusieurs cellules photovoltaïques à concentration (CPV).

I.2.4. Problématique de la conversion photovoltaïque.

Le dispositif photovoltaïque est capable de convertir l'irradiation solaire de faible longueur d'onde, il est formés généralement par un ensemble de cellules solaires connectées électriquement entre elle en série et en parallèle. Ces cellules sont constituée de plaquette de matériau semi-conducteur où la jonction *PN* représente le cœur de la cellule photovoltaïque, et représente le vrai générateur dans ce dispositif pour obtenir un voltage adéquat pour son utilisation. Ces cellules sont entourées par des éléments que lui confèrent une protection par rapport aux agents externes et une rigidité pour s'accoupler aux structures qui les supportent. A titre d'exemple, une encapsulation constituée d'un matériau qui présente une bonne transmission et une dégradabilité basse, de couverture extérieure et postérieure en verre trompé résistant aux conditions climatiques et avec de faible réflexion, encadrement en métal, normalement en aluminium, qui assure rigidité et étanchéité à l'ensemble.

De nombreux scientifiques travaillent sur l'augmentation de rendement de conversion de ces cellules photovoltaïques, car cette technologie est encore loin d'être en mesure de rivaliser avec les technologies de conversion d'énergie à base de combustibles fossiles, en raison de l'influence des différentes pertes limitant le rendement. Elles sont dans la plupart des cas

dues à la nature du matériau et à la technologie utilisée. Cette problématique commence en premier lieu avec l'effet de réflexion (**Fig.I.19**), étant donné que le rendement d'une cellule dépend à la base de nombre de photon y pénétrant. Cette quantité est limitée par la réflexion de sa surface, dont la partie réfléchi dépend de l'indice de réfraction (n) des matériaux traversés. Cet indice dépend non seulement de la longueur d'onde du rayonnement, mais aussi des caractéristiques du milieu. Afin de diminuer cette réflexion, la cellule est recouverte d'une couche antireflet obtenue par dépôt d'une couche d'oxyde sur le semi-conducteur. L'effet d'interférence obtenu au sein de couche d'oxyde permet de piéger le rayonnement incident [22]. Pour optimiser les pertes dues à la réflexion, il existe une autre préparation de la surface réceptrice du semi-conducteur : la texturation ; opération consiste à créer des pyramides de quelques microns de hauteur modifiant la planéité de la surface en introduisant un relief.

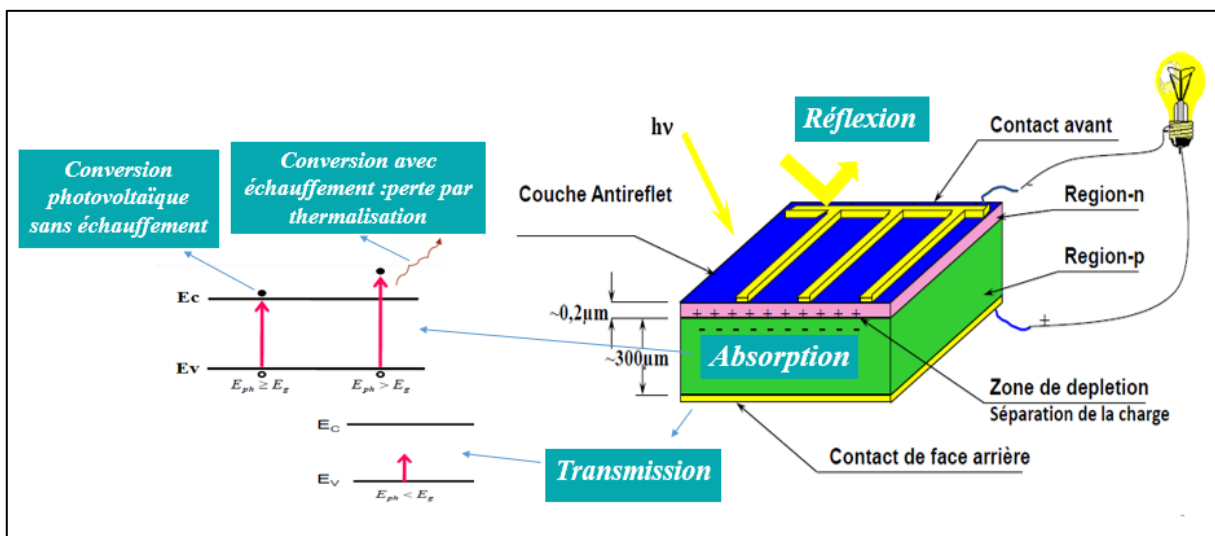


Figure I.19. Schéma représentatif des différents phénomènes caractérisant le processus de conversion d'une cellule photovoltaïque.

Ce dernier, tout en augmentant la surface, induit des réflexions multiples sur les facettes le constituant, piégeant ainsi un maximum du rayonnement incident et limitant la réflectivité de la surface [8]. La texturation de surface [23] peut se faire par voie chimique ou mécanique, par gravure plasma ou par utilisation de silicium poreux.

D'après la figure I.19, Le second facteur limitant le rendement correspond à la perte par transmission. Les photons dont l'énergie est inférieure à l'énergie du gap (E_g) du matériau ne peuvent générer de paire électron/trou puisqu'ils ne sont pas absorbés par la cellule photovoltaïque : dans le cas du silicium, tous les photons possédant une longueur d'onde supérieure à 1250 nm sont perdus. En plus de la transmission, la thermalisation fait partie des pertes énergétiques qui influencent clairement l'efficacité des cellules photovoltaïques, est qui correspond à la chaleur dissipé par les phonons du réseau, suite à un excès d'énergie résultant d'une éventuelle absorption des photons dont l'énergie est supérieur à E_g . Par conséquent, Le matériau constituant les capteurs PV a alors sa température interne qui augmente proportionnellement à l'énergie solaire reçue [24]. Le taux de conversion photon-électron est faible car un certain nombre de conditions doivent être réunies pour que ce phénomène se

produise. L'effet thermique est donc majoritaire sur la plupart des capteurs détériorant d'autant plus les performances de ces derniers [25]. Sous éclairement d'A.M 1.5, cette perte est évaluée à plus de 33% dans le cas du silicium [2].

D'autres phénomènes peuvent s'ajouter à la liste des pertes limitant le rendement et qui ne dépendent que de la qualité du matériau utilisé : à savoir la recombinaison des porteurs photogénérés d'où on peut distinguer deux types :

- Les recombinaisons de surface des porteurs minoritaires : qui sont dues aux défauts cristallographiques présents à la surface, aux liaisons pendantes, ... Différents traitements permettent de passiver efficacement la surface et de diminuer cette recombinaison, tels l'oxydation et le dépôt de nitrure (SiN).
- Les recombinaisons en volume (Auger et Shockley-Reed-hall) qui sont dues aux défauts présents dans le volume du substrat (impureté, dislocation, joint de grain) elles sont caractérisées par la longueur de diffusion des porteurs minoritaires (L_D) et par leurs durées de vie (τ_D), ces deux grandeurs sont reliées par la relation $L_D = \sqrt{D \cdot \tau_D}$ avec D : coefficient de diffusion des porteurs minoritaires. L'utilisation d'un substrat de très bonne qualité et très bien passiver en surface et en volume permet d'obtenir une longueur de diffusion des porteurs minoritaires très élevée.

À part les pertes énergétiques mentionnées précédemment, les facteurs limitatifs du rendement des cellules photovoltaïques sont liés aussi au procédé de fabrication (piégeage des photons incidents, réduction des résistances parasites, ...) et la qualité du matériau utilisé (notamment à la présence de défauts à la surface ou dans le volume du substrat). L'utilisation de substrat de silicium de très bonne qualité, couplée à un procédé de fabrication optimisé permet d'atteindre des rendements supérieurs à 20%.

De ce fait, et dans l'objectif d'améliorer la performance du dispositif photovoltaïque et de remédier aux inconvénients précisés précédemment, en particulier les pertes par transmission et thermalisation. Ce manuscrit de thèse propose certaines solutions qui sont détaillées et validées par une étude thermique (chapitre III). Concernant la transmission des rayonnements correspondant aux grandes longueurs d'onde, une combinaison entre le système photovoltaïque et le thermoélectrique sous l'aspect d'un système hybride PV-TE est proposée, nous permettant ainsi d'exploiter une large gamme spectrale. Le problème de thermalisation quant à lui, nécessite un refroidissement permanent des cellules photovoltaïques. Or, la solution principale apportée à ce problème, était l'utilisation d'un système de refroidissement passif basé sur la ventilation [26], dont la consommation d'énergie est relativement importante, et non productive, réduisant ainsi la performance de tout le dispositif. Sans oublier que la production électrique de ce dernier a une marge très réduite, encadré par le rayonnement journalier qui ne dépasse généralement pas les dix heures [27]. Cela nous a amené à proposer et à tester un système de refroidissement actif basé sur le fluide caloporteur. Dans l'intérêt de valoriser la production électrique, plusieurs conceptions correspondant au système hybride PV-TE sont étudiées et évaluées dans la suite de ce manuscrit, selon plusieurs paramètres à savoir par exemple le type de couplage, les matériaux utilisés, ...

Etant donné l'importance du système thermoélectrique dans la solution proposée pour surmonter les obstacles des pertes subis par le système photovoltaïque, et qu'il fait partie des pièces maîtresses du système hybride PV-TE étudié. En ce qui suit, une partie est réservée au principe de fonctionnement de ce système, avec une présentation de tous les différents effets thermoélectriques, ainsi qu'aux avancées et aux perspectives à venir au niveau des différents matériaux thermoélectriques.

I.3. Conversion thermoélectrique

I.3.1. Historique

Après une suite de découvertes dans le domaine thermoélectrique, a commencé par la découverte d'un premier effet par Thomas Johan Seebeck en 1821, qui a mis en évidence le fait qu'un circuit fermé formé de deux matériaux de nature différente faisait dévier l'aiguille d'une boussole quand l'une des jonctions est placée à une température différente, suivi en 1834 de la découverte de la réfrigération par Jean Charles Athanase Peltier. Un effort important pour développer techniquement la conversion énergétique utilisant des matériaux solides a été engagé à partir des années 1950. Par exemple, en 1954 Julien Goldsmid a été le premier à identifier le Tellure de Bismuth comme matériau pour la réfrigération thermoélectrique et a montré que des refroidisseurs thermoélectriques pouvaient atteindre zéro degré Celsius, et ce n'est qu'en 1960 qu'ont été développés les programmes de recherche les plus importants dans ce domaine à partir des matériaux semi-conducteurs. Les propriétés désirées pour les matériaux sont déterminées par le biais du facteur de mérite Z qui dépend des propriétés de transport comme la résistivité électrique, le coefficient Seebeck et la conductivité thermique. La recherche de nouvelles sources d'énergies non polluantes est devenue un enjeu majeur pour nos sociétés et même pour nos gouvernements. C'est pourquoi la production d'électricité à partir de chaleur perdue aux moyens de modules thermoélectriques (application de l'effet Seebeck) apparaît à ce jour comme une voie très prometteuse. Ainsi, la thermoélectricité, ou conversion d'énergie à partir de la chaleur, fait partie de ces nouvelles sources d'énergies renouvelables.

I.3.2. Principe de la conversion thermoélectrique

L'effet thermoélectrique est un phénomène physique caractéristique de certains matériaux contribuant à la conversion de l'énergie. Un matériau thermoélectrique permet de transformer directement de la chaleur en électricité (génération d'électricité) ou de déplacer des calories par l'application d'un courant électrique (application de réfrigération) ; Ainsi l'énergie thermique peut être transformée en énergie électrique et réciproquement. Le module thermoélectrique (**Fig.I.20.a**) est composé de couples thermoélectriques, ces derniers sont constitués de deux matériaux semi-conducteurs (**Fig.I.20 b**), l'un de type p et l'autre de type n, joints par un matériau conducteur dont le pouvoir thermoélectrique (effet Seebeck) est supposé nul. Afin d'optimiser le flux thermique et la résistance électrique du module, les couples sont connectés en série électriquement et en parallèle thermiquement. Sous l'effet d'un courant

électrique imposé, les porteurs de charges (électron et trous) se déplacent de la source froide à la source chaude. Le flux thermique (transfert d'entropie) se fait donc de la source froide vers la source chaude, s'opposant à celui de la conduction thermique. Si le premier effet est plus important que le second, la chaleur sera transférée de la source froide à la source chaude faisant ainsi un matériau réfrigérant. Dans le cas de la génération d'électricité, c'est le flux de chaleur qui entraîne un déplacement des porteurs de charge de la source chaude à la source froide et donc l'apparition d'un courant électrique. C'est deux phénomènes correspond à deux effets opposés, l'effet Seebeck et l'effet Peltier.

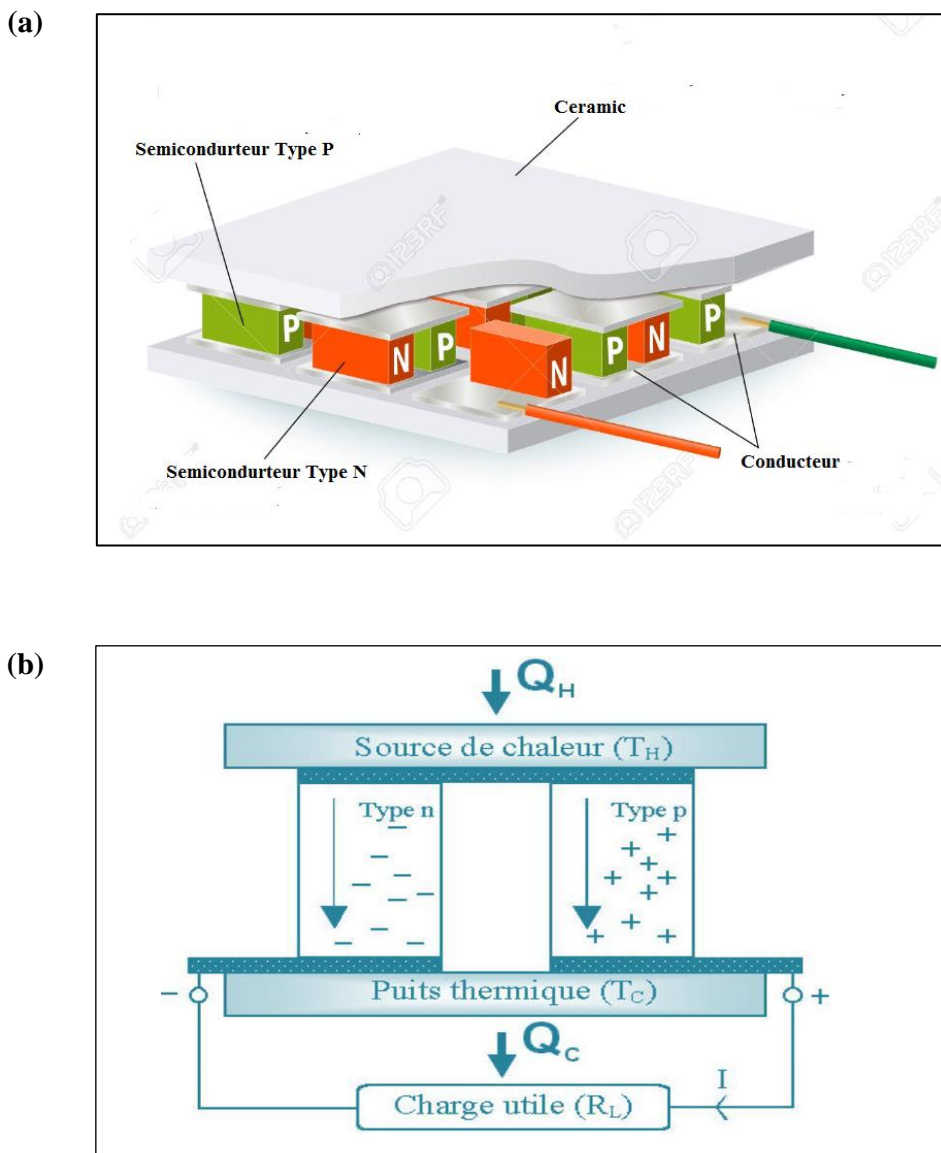


Figure I.20. Schéma descriptif d'un : module thermoélectrique (a) et d'un couple PN conçu pour la génération d'électricité [28]

I.3.3. Les effets thermoélectriques

I.3.3.1. Effet Seebeck

En 1821, le physicien allemand Thomas Seebeck remarqua qu’une aiguille métallique est déviée lorsqu’elle est placée entre deux conducteurs de natures différentes et soumis à un gradient de Température [29], Plus tard on expliquera le phénomène par l’apparition d’une différence de potentiel à la jonction de deux matériaux soumis à une différence de température. Son principe est simple, on a deux matériaux conducteurs de natures différentes a et b sont reliés par deux jonctions situées aux points X et W. Dans le cas de l’effet Seebeck, une différence de température dT est appliquée entre W et X, ce qui entraîne l’apparition d’une différence de potentiel dV entre Y et Z (**Fig. I.21**).

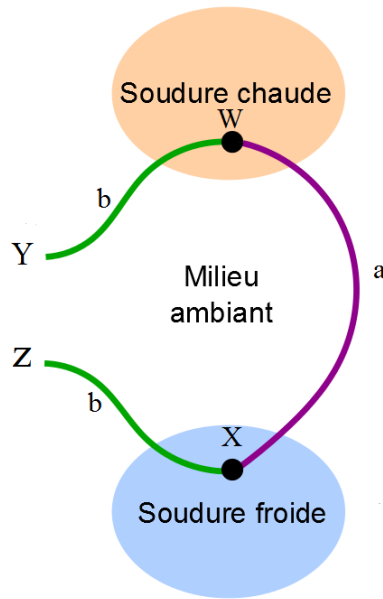


Figure I.21 : Schéma descriptif de l’effet Seebeck

En d’autre terme ce phénomène se produit lorsqu’un métal est soumis à un gradient de température ΔT , l’énergie moyenne des électrons étant plus élevée du côté chaud que du côté froid, il en résulte un gradient énergétique. Celui-ci va donner naissance à une force qui va entraîner la diffusion des électrons du côté chaud vers le côté froid. Cette diffusion entraîne la polarisation du matériau (accumulation des porteurs majoritaires négatifs du côté froid et les porteurs majoritaires positifs du côté chaud) qui induit un champ électrique \vec{E} dont l’effet est d’aider les électrons froids à diffuser vers le coté chaud [30,31].

La constante de proportionnalité S en (V.K-1) constitue le coefficient Seebeck (Eq.I.10) :

$$S_{ab}=S_b - S_a = \frac{dV}{dT} = \frac{V_Y-V_Z}{T_W-T_X} \tag{I.10}$$

I.3.3.2. Effet Peltier

L'effet Peltier a été découvert en 1834 par le physicien français Jean-Charles Peltier, c'est un phénomène physique de déplacement de chaleur en présence d'un courant électrique. Cet effet se produit dans des matériaux conducteurs de natures différentes liés par des jonctions (contacts). L'une des jonctions se refroidit alors légèrement, pendant que l'autre se réchauffe, un matériau thermoélectrique permettra donc de générer du froid ou de la chaleur par l'application d'un courant électrique, c'est-à-dire que qu'en plaçant par exemple une source de courant électrique entre deux matériaux a et b va entraîner une libération de chaleur à une jonction et une absorption de chaleur à l'autre jonction (**Fig.I.22**)

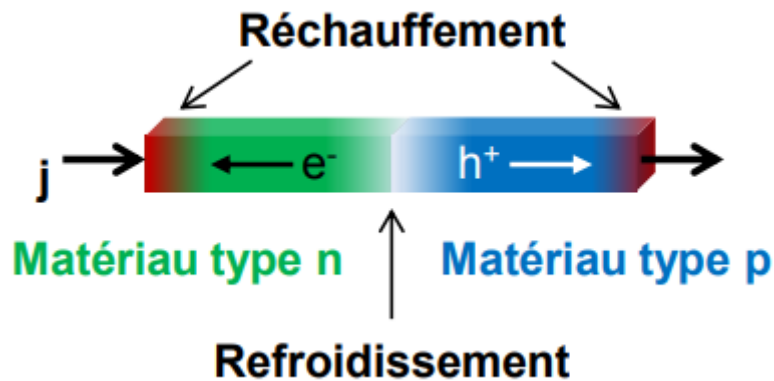


Figure I.22 : Schéma descriptif de l'effet Peltier

En d'autre terme, lorsque les porteurs de charge passent d'un niveau de basse énergie à un niveau d'énergie plus élevé (par exemple lors du passage d'un matériau de type p à un matériau de type n), ils reçoivent de l'énergie de la part du système avec lequel ils interagissent. Or ce système ne peut être que le réseau cristallin sur lequel ils effectuent des collisions. Ainsi, le réseau cristallin cède de l'énergie aux porteurs de charge et par conséquent l'effet Peltier se traduit par un refroidissement de la jonction. Si au contraire, les porteurs de charge passent d'un niveau de haute énergie à un niveau de basse énergie quand ils traversent une jonction, l'énergie perdue est cédée au réseau et l'effet Peltier se traduit par un échauffement de la jonction. C'est donc la différence de nature entre les matériaux a et b et le sens du courant qui les traverse qui sont les causes d'un gradient de température dans l'échantillon [32].

Dans le cas de l'effet Peltier, la quantité de chaleur absorbée (Q) ou générée est proportionnelle au courant électrique (I). La constante de proportionnalité Π est le coefficient Peltier (Eq. I.11)

$$\Pi = \frac{Q}{I} \quad (I.11)$$

Le couplage entre les phénomènes électriques et thermiques ouvre la voie à deux applications possibles, à savoir la réfrigération et la génération électrique. La réfrigération est rendue possible par le flux de chaleur qui s'établit suite à l'imposition de courant électrique J

aux bornes d'un matériau. Ce flux permet d'évacuer la chaleur d'un Corps à réfrigérer vers une zone où la chaleur est dissipée vers le milieu ambiant. La génération de courant peut se produire quand une chaleur extérieure impose une différence de température aux extrémités du matériau. Une tension électrique s'établit et elle peut être exploitée pour générer un courant dans une résistance de charge.

I.3.3.3. Effet Thomson

L'effet Thomson montre que les effets Seebeck et Peltier sont liés. Il consiste en un dégagement ou une absorption de chaleur (Q) lorsqu'un courant électrique traverse un conducteur homogène soumis à un gradient de température. La différence fondamentale avec les deux premiers effets est que ce dernier ne concerne qu'un seul matériau et ne nécessite pas la présence d'une jonction ; en d'autre terme, l'effet Thomson définit une chaleur absorbée ou dégagée par unité de temps lorsqu'un courant électrique I traverse une région d'un matériau ayant un gradient de température. Dans chaque segment dX du matériau, le gradient du flux thermique est donné par la relation (I.12) :

$$\frac{dQ}{dX} = \tau I \frac{dT}{dX} \quad (I.12)$$

Où $\frac{dQ}{dX}$, $\frac{dT}{dX}$, τ , I correspondent à la puissance thermique échangée avec le milieu, le gradient de température extérieur, le coefficient Thomson, et la coordonnée spatiale respectivement. Ainsi la relation qui lie les trois coefficients absolus des effets thermoélectrique (Seebeck, Peltier, Thomson) et comme suite :

$$\Pi = \tau S T \quad (I.13)$$

I.3.4. Les propriétés thermoélectriques

Les matériaux thermoélectriques sont caractérisés par trois paramètres principaux : Le coefficient Seebeck S (V/K), La conductivité électrique σ ($\Omega^{-1} \cdot m^{-1}$) et La conductivité thermique K (W/mK). Ces propriétés de transport sont regroupés dans une relation représentant une grandeur utilisée pour caractériser la performance d'un dispositif thermoélectrique, appelé le facteur de mérite ZT. Ce nombre sans dimension est donné ainsi par la relation (I.14) :

$$ZT = TS^2 \frac{\sigma}{K} \quad (I.14)$$

D'un point de vue qualitatif, on comprend aisément qu'un bon matériau thermoélectrique doit posséder un bon coefficient Peltier ou Seebeck pour générer les effets

attendus. Sa résistivité électrique $\rho = \frac{1}{\sigma}$ doit être faible pour minimiser les pertes de chaleur par effet joule, et il doit présenter une faible conductivité thermique K pour maintenir une différence de température appréciable aux bornes du matériau. Les récentes études qui ont été faites sur les matériaux massifs, ont conduit à conclure qu'il existe un coefficient Seebeck optimal qui varie de 130 à 187 $\mu\text{V/K}$, et que les recherches doivent s'orienter vers les conductivité électrique et thermique afin d'augmenter la valeur du facteur de mérite ZT [33].

Ce facteur ZT est lié à la fois au rendement de la thermo-génération (η), et au coefficient de performance en mode réfrigération (Φ). Le rendement η est défini comme le rapport entre la puissance électrique (W) générée par le module thermoélectrique, qui doit être la plus élevée possible, et la puissance thermique (Q_h), absorbée du côté chaud que l'on souhaite minimiser (Eq.I.15) :

$$\eta = \frac{W}{Q_h} = \left(1 - \frac{T_c}{T_h}\right) \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + \frac{T_c}{T_h}} \quad (\text{I.15})$$

Cependant, Φ donné pas la relation (I.16) est caractérisé par le rapport de la puissance thermique émise du coté froid (Q_c), que l'on essaye de maximiser et la puissance électrique (W) fournie au module que l'on souhaite minimiser.

$$\Phi = \frac{Q_c}{W} = \left(1 - \frac{T_h}{T_c}\right) \frac{\sqrt{1+ZT} - \frac{T_h}{T_c}}{\sqrt{1+ZT} + 1} \quad (\text{I.16})$$

Avec : T la température absolue (en Kelvin) qui vaut : $T = \frac{T_h + T_c}{2}$

Z : Facteur de mérite.

T_h : Température du coté chaud.

T_c : Température du coté froid.

De ce fait, pour une meilleure compétitivité des systèmes thermoélectriques face aux systèmes plus conventionnels dans la génération d'électricité et le contrôle de la température, des ZT d'au moins 1,5 et 2 sont respectivement nécessaires [34,35]. Alors, comme mentionné précédemment, l'évaluation d'un matériau thermoélectrique passe donc par la recherche d'un matériau possédant un pouvoir thermoélectrique élevé (coefficient Seebeck), une faible résistivité électrique et une faible conductivité thermique. Il est important de noter que ses caractéristiques dépendent de la concentration et la mobilité des porteurs de charge, et sont influencés par les impuretés et les défauts. Une augmentation de la conductivité électrique des semi-conducteurs peut être atteinte en augmentant le nombre de porteurs de charge libres par introduction d'agent dopant. La variation de ces paramètres à température ambiante peut être représentée sous cette figure **I.23**. Les meilleures valeurs du facteur de puissance sont observées dans la gamme de concentration de porteurs de charges 10^{18} cm^{-3} à 10^{21} cm^{-3} , et L'ensemble de ces considérations faites que les matériaux les plus intéressants sont les semi-conducteurs [36].

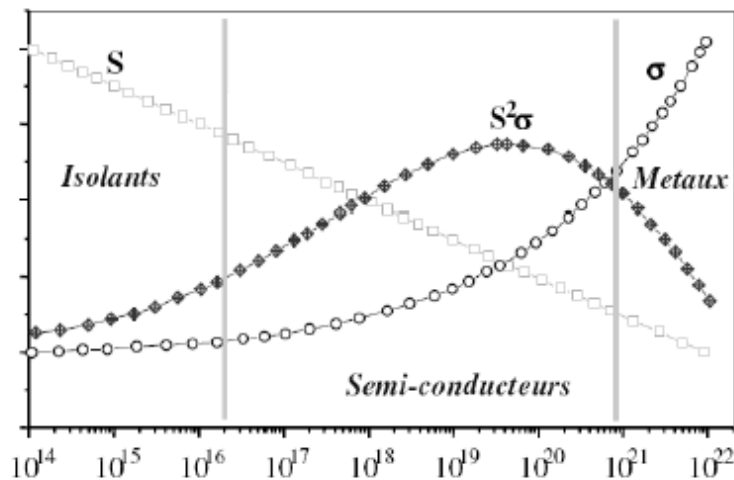


Figure I.23 : Variation schématique des propriétés thermoélectriques des solides en fonction de la concentration en porteurs de charge à la température ambiante [36]

I.3.5. Les technologies thermoélectriques

I.3.5.1. Matériaux conventionnels

Il existe de nombreux matériaux capables d'être utilisés pour la thermoélectricité. D'une part, nous pouvons distinguer les matériaux dits conventionnels, ceux qui sont étudiés depuis les débuts de la thermoélectricité. D'autres parts, nous avons les nouveaux matériaux apparus au fil des années suite à la découverte de nouvelles approches pour améliorer les performances et récemment suite à des restrictions d'utilisation de certains éléments comme le plomb [37]. Les alliages bismuth-antimoine, la famille des tellures de bismuth et de plomb ainsi que les alliages silicium-germanium constituent l'essentiel des matériaux de référence. Ces matériaux sont classés par catégories en fonction de leur gamme de température optimale, et chacune d'entre eux n'est efficace que sur une plage de température restreinte. La figure I.24 donne les performances atteintes en fonction de la température pour les matériaux conventionnels.

Selon cette figure (I.24), trois gammes de température peuvent être distinguées : basse température et température ambiante (< 450 K), température intermédiaire (450/500 – 800/900 K) et haute température (> 850 K).

Les matériaux conventionnels selon ces gammes de température sont abordés dans les sous-parties suivantes.

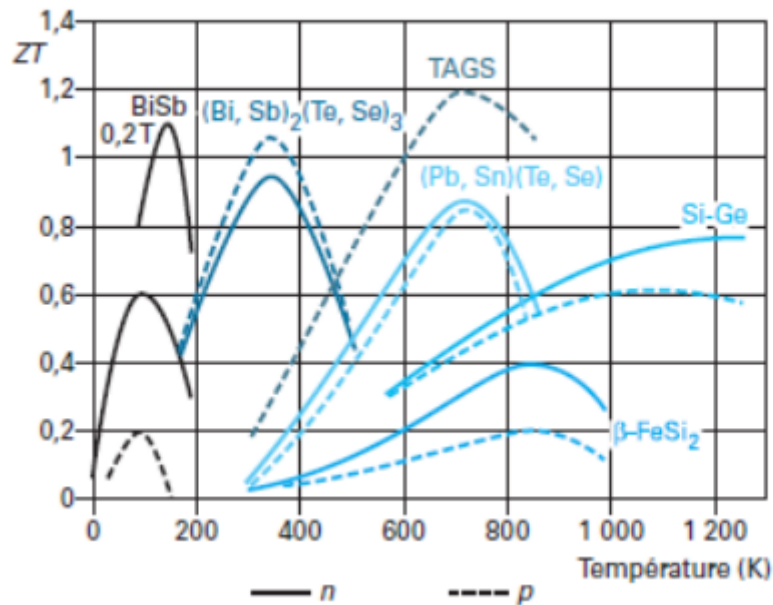


Figure I.24 : Performances des matériaux conventionnels en fonction de la température de type n et type p [38]

Pour les basses températures, le matériau le plus utilisé actuellement est à base d'alliages de bismuth et d'antimoine, $Bi_{1-x}Sb_x$, ils sont considérés comme les matériaux de type n ayant les meilleures performances autour de 80 °K. Cependant l'usage de ces matériaux dans le développement de modules a été limité par la faiblesse des performances pour les matériaux de type p et la fragilité du type n, ces derniers étant principalement des monocristaux. Sur cette gamme de température les matériaux de type n sont plus performants que ceux de type p. Le maximum de facteur de mérite atteint pour ces derniers est autour de 0,2 à 85 K [39], tandis pour les matériaux de type n il est de ~0,4 à 60 K [40] et ~0,6 à 100 K [41].

Autour de la température ambiante, les matériaux le plus utilisé actuellement est à base de bismuth et de tellure Bi_2Te_3 . Ces matériaux et leurs dérivés qui sont connus depuis les années 1950, offrent les meilleures performances et se sont ceux également utilisés dans la réalisation de modules commerciaux principalement pour des usages en refroidissement. Les matériaux de type n sont réalisés à partir de tellure de bismuth Bi_2Te_3 en substituant une partie du tellure par du sélénium pour un obtenir un composé du type $Bi_2Te_{3-x}Se_x$. Les matériaux de type p sont quant à eux obtenus sur la base du tellure d'antimoine en substituant une partie de l'antimoine par du bismuth, $Bi_{2-y}Sb_yTe_3$, et comme indiqué sur la figure I-24, les matériaux de type p sont plus performants que ceux de type n pour cette famille. Cette catégorie de matériaux possède généralement un coefficient Seebeck élevé, une bonne conduction électronique et une conductivité thermique relativement basse qui procurent ainsi de bonnes performances ($ZT \sim 0,9$). De plus, la température de fusion élevée de ces matériaux par rapport à la gamme d'utilisation en température limite les problèmes de stabilité. Dans le domaine de température 550-750 °K, le matériau le plus utilisé est le tellure de plomb et ses dérivés (Pb, Sn)

A haute températures, les alliages à base de silicium et germanium possèdent de bonnes propriétés thermoélectriques au-dessus de 1000 K, Ces matériaux de composition $Si_{1-x}Ge_x$ sont conçus pour des applications de génération d'électricité dans le domaine spatial. Leurs

performances les plus élevées sont obtenues à partir de matériaux de type n sur la base de matériaux SiGe nano-structurés avec un ZT de 1,3 à 1173 °K [42]. Un ZT de 0,95 à 1173 °K a été obtenu pour Si₈₀Ge₂₀ nano-structuré de type p [43]. Cependant ces matériaux coûtent très cher.

I.3.5.2. Les nouveaux matériaux

De très nombreux matériaux binaires, ternaires et quaternaires ont été étudiés ces dernières années. La recherche de nouveaux matériaux a visé les différentes gammes de température mais c'est la gamme de températures intermédiaires qui a vu le développement du plus grand nombre de matériaux. Un rapide tour d'horizon est effectué de ces nouveautés avec dans un second temps, une attention plus grande pour les matériaux autour de la température ambiante.

Parmi les nouveaux matériaux pour la température ambiante, on trouve sans être exhaustif les familles de matériaux nommées 'skutterudites', 'clathrates' ou encore 'LAST' pour *Lead-Antimony-Silver-Tellurium* (composés à base de plomb-antimoine-argent-tellure). Les Skutterudites, révélés prometteurs pour la thermoélectricité ont été identifiés en 1928. Leur nom tire son origine de la région de 'Skutterud' en Norvège où le composé CoAs₃ utilisé comme source de cobalt est abondant. Le terme 'skutterudites' regroupe des composés binaires **MX₃**, où **M** est un atome de métal comme le cobalt (**Co**), le rhodium (**Rh**) ou l'iridium (**Ir**), et **X** un atome qui peut être le phosphore (**P**), l'arsenic (**As**) et l'antimoine (**Sb**).

Les deux premières familles 'skutterudites', 'clathrates' sont apparentées au concept du PGEC qui correspond à des structures complexes contenant des éléments lourds afin de mieux diffuser les phonons. Selon la composition, les 'skutterudites' peuvent être de type p ou de type n mais ce sont ces derniers qui présentent les facteurs de mérite les plus élevés. Ainsi, un ZT de 1,7 à 850 °K a été obtenu pour Ba_{0,08}La_{0,05}Yb_{0,04}Co₄Sb₁₂ (type n) [44] et un ZT de 1,16 à 800 °K pour Ba_{0,15}Yb_{0,2}In_{0,2}Co₄Sb₁₂ (type p) [45]. Les clathrates pour leur part sont surtout des matériaux de type n pouvant donner un ZT valant 1,35 à 900 °K pour Ba₈Ga₁₆Ge₃₀ [46]. Quand aux matériaux LAST issus de la réaction de AgSbTe₂ et PbTe, ce sont des matériaux de type n avec un ZT de 2,2 à 800 °K obtenu pour AgPb₁₈SbTe₂₀ [47].

A haute température, ce sont des matériaux comme les 'Semi-Heusler', ceux à phase 'Zintl' et 'les oxydes métalliques' qui sont apparus récemment. Les composés 'Semi-Heusler' sont issus des phases d'Heusler, leur formule générale est **MM'X** où **M** est un métal de transition, un métal noble ou une terre rare, **M'** un métal de transition ou un métal noble et **X** un métal qui peut être l'Arsenic (As) ou l'Etain (Sn). Ils sont des candidats potentiels pour la thermoélectricité du fait de leur faible résistivité électrique et de leur fort pouvoir thermoélectrique, mais leur conductivité thermique est élevée. Ces alliages sont des matériaux de type n de la classe des intermétalliques pouvant avoir un ZT autour de 1 à 1073 °K pour Hf_{0,8}Ti_{0,2}CoSb_{0,8}Sn_{0,2} [48]. Les matériaux de phase Zintl sont des matériaux de type p pour lesquels, à leur concentration optimale en porteurs de charge, un composé de type Yb₁₄Mn_{1-x}Al_xSb₁₁ atteint une valeur de ZT de 1,3 à 1223 °K [49]. Les matériaux à base d'oxyde

métalliques de type p permettent eux d'obtenir un ZT de 1,4 à 923 °K pour $\text{Bi}_{0,875}\text{Ba}_{0,125}\text{CuSeO}$ après optimisation de la texturation [50].

Les matériaux autour de la température ambiante sont restés principalement centrés autour des matériaux conventionnels à base de Bi_2Te_3 . Ce matériau qui suscite l'intérêt de notre travail, et pour qu'il réponde à nos intérêts de développement du système hybride PV-TE, une partie significative de cette thèse a été consacrée à l'amélioration des caractéristiques de ce matériau, cette partie vice a développé ces propriétés de transport à savoir le pouvoir thermoélectrique (coefficient Seebeck), la résistivité électrique et la conductivité thermique afin d'augmenté le facteur ZT qui caractérise la performance d'un dispositif thermoélectrique.

I.4. Conclusion

Le monde de la conversion photoélectrique, aussi bien au niveau de la recherche qu'au niveau industriel, connaît depuis quelques années une mutation profonde associé à l'intérêt croissant pour l'énergie photovoltaïque et thermoélectrique. Ce chapitre nous a permis d'explorer le principe de la conversion photovoltaïque et thermoélectrique ainsi que les différentes technologies utilisées pour y parvenir. Des aspects aussi bien technologiques qu'électriques ont été abordés afin de mieux comprendre l'ensemble du mécanisme de conversion solaire-électricité sous ces deux formes. Les possibilités d'innovation sont très grandes et sont portées par le bouillonnement des recherches en vue d'améliorer les filières existantes mais surtout d'en trouver des nouvelles et de préparer les prochaines ruptures, autant technologiques notamment dans les matériaux et les rendements que conceptuelles par des approches conjointes matériaux-système ou système-système comme la combinaison hybride PV-TE qui fait l'objet de cette mémoire.

Dans chacune de ces formes de conversion, nous avons montré les problèmes de chaque filière et les voies de développement actuellement suivies, et ceux prévu dans l'avenir. Par exemple, pour la filière silicium cristallin, qui représente 90% du marché du photovoltaïque, la diminution des pertes liée à la découpe des cellules est un grand challenge en soi qui est en plus assortie d'un souhait en même temps de réduire l'épaisseur de chaque cellule pour économiser la matière première. Cependant, le rendement de cette filière simple jonction est théoriquement limité à 29%. Pour trouver des cellules à haut rendement, on doit maintenant se tourner vers les cellules multi-jonctions dont le développement a été motivé en priorité par les applications spatiales. Toutefois, ces cellules sont encore trop chères pour concurrencer le marché photovoltaïque terrestre mais certains pensent pouvoir réduire ce prix en utilisant des concentrateurs solaires. A côtés de ces difficultés, on trouve les problèmes de transmission et thermalisation du système photovoltaïque, ce qui nous a attachés à développer un modèle nous permettant de surmonté ces obstacles de conversion à savoir une association entre les systèmes photovoltaïque et thermoélectrique. Ce dernier n'échappe tout de même pas à de certains reproches résumés en sa faible conversion électrique. C'est donc dans ce contexte que nous abordons dans le chapitre suivant les manœuvres effectuer pour l'amélioration de la conversion thermoélectrique.

CHAPITRE II

**ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES
DU TELLURE DE BISMUTH (Bi_2Te_3).**

II.1. Introduction

Actuellement, les progrès technologique et industriel dépendent fortement de l'avancement des matériaux. La conception des matériaux et l'étude de leur propriétés par ordinateur est devenue actuellement le moyen le plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Ceci reflète les développements récents dans la théorie électronique pour l'explication de plusieurs résultats expérimentaux et la prédiction des propriétés physiques des matériaux qui n'ont pas encore été conçus ou en cour de conception. En plus, la technologie des semi-conducteurs a donné la possibilité de mettre en œuvre des matériaux artificiels, tels que les super-réseaux, puits quantiques, couches minces fabriquées par plusieurs techniques de croissance des couches cristallines. A présent on peut fabriquer des matériaux avec de nouvelles propriétés qui ne se trouvent pas dans la nature. Il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théoriques qui peuvent expliquer les observations expérimentales, et surtout d'effectuer des modélisations ou des expériences virtuelles qui peuvent prédire le comportement des matériaux sous plusieurs effets appliqués comme le dopage, les contraintes mécaniques etc., là où l'expérience réelle fait défaut, ou qu'elle soit très coûteuse et parfois difficilement réalisable.

Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie vers les meilleurs choix avec un coût minimum. C'est dans ce contexte que s'inscrit cette partie de ce manuscrit, elle permettra d'étudier les propriétés structurales, électroniques et thermoélectriques du Tellurure de Bismuth (Bi_2Te_3). Ce chapitre est consacré en premier lieu à définir le matériau Bi_2Te_3 et ses propriétés générales, nous avons parlé de sa structure cristallographique, sa structure électronique des bandes, et ses propriétés électriques, ensuite, nous avons présenté les méthodes ab-initio qui permettent de modéliser les matériaux de manière fiable et quantitative et de traiter des systèmes de taille importante. Nous rappellerons les théorèmes d'Hohenberg et Kohn, le principe de la méthode de Kohn et Sham, et nous parlerons des différentes méthodes d'approximation de la fonctionnelle d'échange-corrélation. Le code Wien2k utilisé pour le calcul des propriétés structurales, électroniques et thermoélectriques est décrit, ainsi que la théorie semi classique de Boltzmann moyennant le code Boltztrap pour le calcul des propriétés de transport. Le chapitre s'achève avec la présentation des principaux résultats obtenus telles que les propriétés structurales, les propriétés électroniques (structure de bandes et densité d'états électronique) et les propriétés thermoélectriques selon l'effet appliqué (contrainte, dopage.....).

II.2. Présentation du composé Bi_2Te_3

II.2.1. Description

La combinaison du bismuth et du tellure, éléments proches dans la classification périodique, peut être considérée comme une formation d'alliage dans un aspect métallurgique. Mais, au regard des électronégativités ayant des valeurs selon Pauling de 1.9 pour le bismuth et de 2.1 pour le tellure, le minéraliste la considère comme un solide iono-covalent sous la

formulation de tellure de bismuth lorsque la combinaison repose sur les proportions correspondant à la stœchiométrie Bi_2Te_3 .

Liées au développement de la chimie du tellure, les premières synthèses du tellure de bismuth sont relativement anciennes, et date de la fin du vingtième siècle [51-66]. Elles ont été réalisées par Donges [58] en 1951 en chauffant à 479°C en tube de quartz scellé sous vide, des proportions adaptées de ces deux éléments. Le produit obtenu est pulvérulent. La réalisation de monocristaux par réaction de transport a été effectuée dès 1956 par Ainsworth [59] ce qui a permis une meilleure connaissance de ce matériau. Harmon [60], en mettant en œuvre, en 1957, la technique de zone fondue a également obtenu des échantillons monocristallins. L'étude générale des combinaisons entre le bismuth et le tellure a abouti à la définition d'un diagramme de phase (Fig. II.1) dont une présentation précise a été donnée par Fleurial [61]. Le composé Bi_2Te_3 existe dans une gamme de composition étroite avec un écart à la composition Stœchiométrique due à l'apparition de défauts ponctuels. Si trois types de défauts ont été proposés par Kroger [62], c'est à dire soit sur des sites interstitiels, soit sur des sites du réseau par formation de lacunes ou en voisins liés par défauts d'anti-structure sur les sites du réseau ; seuls les deux derniers types sont retenus par différents auteurs. En effet, la forte concentration en trous ($2.0 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^{-3}$) est attribuée à la présence de lacunes sur les sites de tellure par H. Goldsmid [53-63], C. Satterthwaite [57] alors que T. Harman [64], J. Horak [65] et V. Kutasov [66] fondent cette constatation sur des défauts d'anti-structure d'atomes de bismuth sur les sites de tellure. Ces défauts liés aux écarts de stœchiométries sont électriquement actifs et imposent donc des fluctuations importantes des propriétés semi-conductrices du matériau correspondant.

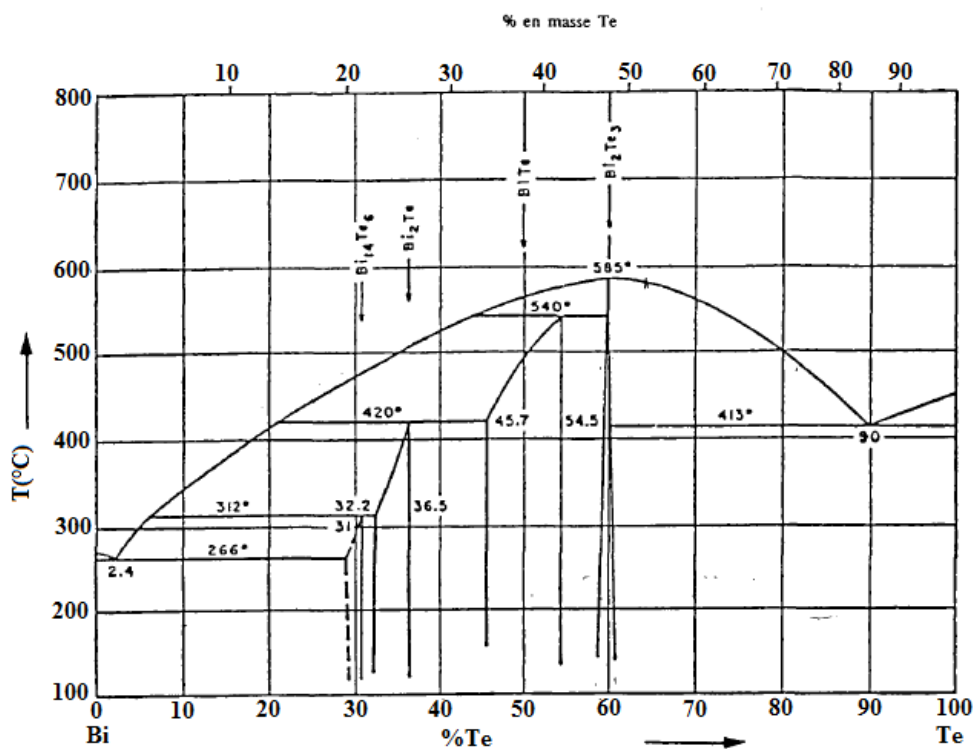
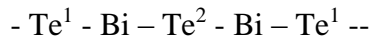


Figure II.1 : Diagramme de phase de tellure de bismuth Bi_2Te_3 [61].

II.2.2. Propriétés structurale

Le tellurure de Bismuth Bi_2Te_3 possède une structure cristallographique rhomboédrique, correspondant au groupe d'espace-group 166 : R-3m, et la cellule unitaire contient cinq atomes (deux bismuth, trois chalcogènes). Cependant on préfère généralement le décrire dans une maille hexagonale puisque l'on met ainsi en évidence un empilement de couches d'atomes de la même espèce (**Fig. II.2**).

Les couches atomiques suivent des séquences d'empilement, parallèles au plan basal :



Cette séquence est appelée quintet hexagonal et la maille cristalline est formée par trois quintets successifs. La structure lamellaire de Bi_2Te_3 est due à l'existence de liaisons de Van der Walls entre les couches de tellure $\text{Te}^1 - \text{Te}^1$, responsables de la facilité de clivage selon le plan basal (001). Par ailleurs les liaisons $\text{Bi} - \text{Te}^2$ sont iono-covalentes, et on comprend mieux ainsi l'anisotropie du matériau. En raison de la structure bidimensionnelle, les propriétés de Bi_2Te_3 sont très anisotropes. Les distances intercouches et interatomiques calculées par W. Kullmann [67] sont données en fonction des différents types de liaisons, et représenté ci-dessous (**Tab. II.1**) ainsi que les paramètres de la maille hexagonale :

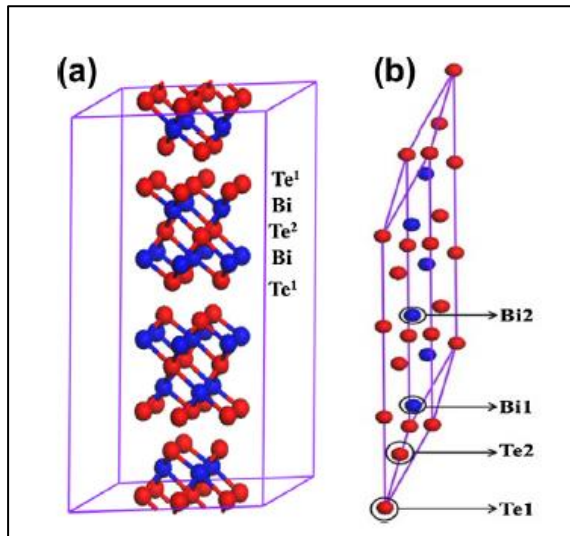


Figure II.2 : Représentation de la structure hexagonale (a) et rhomboédrique (b) de Bi_2Te_3 .

liaisons	distances interatomiques (Å)	distances intercouches (Å)	paramètres de maille
$\text{Te}^1 - \text{Te}^1$	3,627	2,598	$a=4,3835 \text{ \AA}$ $c=30,360 \text{ \AA}$ $\alpha = \beta \neq \gamma$
$\text{Te}^1 - \text{Bi}$	3,065	1,729	
$\text{Bi} - \text{Te}^2$	3,246	2,032	

Tableau II.1 : Distances intercouches et interatomiques et paramètres de maille de Bi_2Te_3 .

II.3. Méthode de calcul : ab-initio

II.3.1. Historique

La description du comportement d'un matériau a connu plusieurs tentatives d'explication. Les premières tentatives ont commencé avec le modèle de Drude [68]. Ce dernier proposa une vision classique de l'électron dont le point de départ est la théorie cinétique des gaz appliquée à l'électron [69]. Cette approche est très instructive et importante. Pauli a apporté une amélioration au modèle de Drude en introduisant la notion de fermions dans son modèle. Puis, Fermi a développé les conséquences du principe d'exclusion de Pauli vers une formule générale de la statistique de particules indépendantes [70]. Partant d'un système mono-électronique à un système multiélectronique, les équations d'états deviennent plus en plus compliqués et difficile à résoudre basant sur des théories cités, et par conséquent il fallait chercher d'autres formalismes qui essaient de décrire mieux les propriétés d'un système, d'où la naissance de la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) (density fonctionnel theory) vers les années 1967 [71].

La théorie de la densité fonctionnelle « DFT » et les méthodes « ab-initio » qui en découlent sont maintenant devenues les méthodes quantiques les plus couramment employées dans les domaines de la physique du solide et de la chimie quantique pour la détermination des grandeurs physiques et quantiques d'un matériau (et particulièrement les matériaux contenant un grand nombre d'électrons), telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation et ses différentes propriétés. Les progrès considérables dans les dix dernières années, à la fois dans le domaine de la théorie, des implémentations de cette théorie et des outils et méthodes informatiques, font que la modélisation de composés réels (à structures éventuellement complexes) devient parfaitement envisageable avec des moyens et un temps de calcul plus ou moins rapide.

Les contributions de Pierre Hohenberg, Walter Kohn et Lu Sham ont permis d'établir le formalisme théorique sur lequel repose la méthode actuelle [72]. C'est une méthode dite de premier principe. En fait, elle repose sur les fondements de la mécanique quantique et ne fait intervenir qu'un nombre limité de données d'entrées. Pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger sans l'introduction de paramètres ajustés par l'expérience. La DFT est une reformulation du problème quantique à N corps en un problème portant uniquement sur la densité électronique.

II.3.2. Equation de Schrödinger

Un corps cristallin est un ensemble des atomes contenant des noyaux et des électrons en interaction entre eux et avec les noyaux. Pour étudier toutes ces interactions, Schrödinger a proposé une équation :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{II.1})$$

Où H est l'hamiltonien de ce système, Ψ sa fonction d'onde propre, E l'énergie du cristal. L'hamiltonien H exact du cristal résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction en unités atomiques est donné par l'équation suivante :

$$H = T_e + V_{ee} + V_{Ne} + T_N + V_{NN} \quad (\text{II.2})$$

Avec : T_N , V_{NN} , V_{Ne} , V_{ee} , T_e , représentent respectivement ; l'énergie cinétique des noyaux, l'énergie potentielle d'interaction électrostatique entre les noyaux, l'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons, l'énergie potentielle de répulsion entre les électrons, l'énergie cinétique des électrons, dont les équations sont :

$$T_N = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_k \frac{1}{M_k} \nabla_k^2 \quad (\text{II.3})$$

$$V_{NN} = \frac{1}{2} \sum_k \sum_l \frac{Z_k Z_l e^2}{4\pi\epsilon_0 R_{kl}} \quad (\text{II.4})$$

$$V_{Ne} = \sum_i \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (\text{II.5})$$

$$V_{Ne} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (\text{II.6})$$

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i \nabla_i^2 \quad (\text{II.7})$$

Avec : e , m , M , r_{ij} , M_k , R_{kl} , Z_k et Z_l sont respectivement, la charge de l'électron, la masse de l'électron, masse de noyau, la distance entre l'électron i et l'électron j , la masse du noyau, la distance entre les centres des noyaux k et l , les nombres atomiques des noyaux k et l .

Pour un système possédant M atomes et N électrons, la résolution exacte de l'équation de Schrödinger serait celle d'un système de $(M+N)$ corps en interaction. Cette résolution n'est possible que pour l'atome d'hydrogène. Dans tous les autres cas, il sera donc nécessaire d'effectuer un certain nombre d'approximations sur la nature de la fonction d'onde car la mécanique quantique moderne ne dispose d'aucune méthode pour résoudre des problèmes concernant un grand nombre de particules. Les diverses méthodes de calcul de la structure de bandes électroniques des matériaux à l'état solide mises au point au cours des dernières décennies reposent sur un certain nombre d'approximations.

II.3.3. Approximation de Born Oppenheimer

L'étude à l'échelle atomique des propriétés structurales, électroniques et optiques d'un cristal périodique est un des sujets traditionnels de la physique du solide [73]. Leurs objectifs étaient l'interprétation des mesures expérimentales, prévoir des effets nouveaux ou de concevoir de nouveaux matériaux. Plusieurs modèles théoriques ont été proposés, du côté microscopique le problème peut être établi d'une manière simple. Ceci consiste à résoudre l'équation de Schrödinger décrivant un système cristallin périodique, composé de noyaux atomiques (n) et d'électrons de spin σ_i . Vu la complexité de l'équation stationnaire, sa résolution reste une tâche très difficile lors de son application à des systèmes réels incluant

plusieurs atomes et électrons. La recherche des solutions de ce système macroscopique (énergie et fonctions d'onde) est appelée problème à plusieurs corps (ou à N-corps).

De ce fait et d'après Born et Oppenheimer [74], les noyaux sont très lourds par rapport aux électrons, le mouvement des noyaux (particules lourdes) et négliger par rapport à celui des électrons (particules légères). On ne prend donc en compte que celui des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires. On néglige ainsi l'énergie cinétique T_N des noyaux. Les noyaux étant supposés fixes à leur position d'équilibre, cela simplifie notablement l'équation de Schrödinger. On peut alors diviser l'hamiltonien en deux termes H_e et V_{NN} (H_e appelé hamiltonien électronique et le terme V_{NN} est appelé l'interaction électrostatique des noyaux). Etant donné que cette interaction est une constante, on peut la rendre nulle par un choix convenable de l'origine. Compte tenu de cette hypothèse, l'hamiltonien total s'écrit :

$$H_e \cong T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (\text{II.8})$$

L'approximation de Born-Oppenheimer est qualifiée d'adiabatique car elle consiste à séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau. On pourra toujours introduire ultérieurement T_N et V_{NN} pour aborder le problème des vibrations du réseau (phonons) tout en supposant qu'il n'y a pas d'échange d'énergie entre le système électronique d'une part et les modes de vibration d'autre part. L'approximation de Born-Oppenheimer réduit la complexité du problème. Toutefois la solution de l'équation de Schrödinger reste toujours difficile, il faut donc se baser sur d'autres approximations pour résoudre ce problème.

II.3.3.1. Approximation de Hartree – Fock

Le résultat de l'approximation de Born-Oppenheimer est un système composé de plusieurs électrons interdépendants, c'est-à-dire d'électrons en interaction qui mène à un problème à plusieurs corps ; un problème qui est impossible à résoudre. Donc on a besoin d'une autre approximation. L'approximation des électrons indépendants consiste à remplacer un système réel composé d'électrons en interaction par un système fictif composé d'électrons indépendants plongés dans un potentiel effectif l'Hamiltonien peut être écrit comme une somme des Hamiltoniens chacune décrit le comportement d'un électron indépendant :

$$H = \sum_i H_i \quad (\text{II.9})$$

Avec
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad (\text{II.10})$$

Et
$$U_i(r_i) = -\frac{1}{2} \sum_k \frac{Z_k e^2}{4\pi\epsilon(r_i - R_k)} \quad (\text{II.11})$$

U_i : étant l'énergie potentielle de l'électron (i) dans le champ de tous les noyaux (k).

R_k : est la position fixe des noyaux (k).

Le champ effectif de Hartree
$$V_i(r_i) = \frac{1}{2} \sum_k \frac{e^2}{4\pi\epsilon(r_i - r_k)} \quad (\text{II.12})$$

La fonction d'onde du système électronique entier, quant à elle à la forme d'un produit de fonctions d'ondes de chacun des électrons, et l'énergie de ce système est égale à la somme des énergies de tous les électrons, soit :

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_i \Psi(r_i) \quad (\text{II.13})$$

$$E_e = \sum_i E_i \quad (\text{II.14})$$

$$H_i \Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i \quad (\text{II.15})$$

Le champ de Hartree permet de ramener l'équation multiple à un système d'équation d'un seul électron. Mais tant que l'électron est un fermion donc la fonction d'onde totale doit être antisymétrique par rapport à l'échange de deux particules quelconques qui est négligé par Hartree. Pour corriger ce défaut, Fock [75] a proposé d'appliquer le principe d'exclusion de Pauli, donc la fonction d'onde électronique s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater [76].

$$\Psi_e = \Psi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \Psi_1(r_1) & \dots & \Psi_1(r_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Psi_n(r_1) & \dots & \Psi_n(r_n) \end{bmatrix} \quad (\text{II.16})$$

Où $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ est la constante de normalisation

Cette approximation conduit à de bons résultats, notamment en physique moléculaire, elle ne peut donc traiter que des systèmes avec peu d'électrons comme des petites molécules. Elle ne tient pas compte des effets de corrélations électroniques, et pour le traitement des systèmes étendus comme les solides restent difficiles à appliquer [77]. Cette approche constitue de même une étape plus très importante par la DFT qui capable de fournir une description plus réaliste des interactions électron-électron, notamment l'énergie d'échange et de corrélation.

II.3.4. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

II.3.4.1. Principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité

La résolution de l'équation de Schrödinger avec **N** électrons doit utiliser des méthodes approximatives qui permettent de reproduire le plus exactement les quantités physiques contenant le plus d'informations. Cependant, il est possible de reformuler le problème en employant les théorèmes et les approximations adaptés. La théorie de la densité fonctionnelle aurait suscité peu de curiosité de nos jours, si ce n'est dans le cadre du théorème établi par Kohn et Sham [78], ce qui l'a rendue utile à travers des approximations sur les fonctionnelles de l'état fondamental, et ce, afin de décrire les systèmes réels à plusieurs électrons. L'idée originale de cette théorie a vu le jour dans les travaux de Thomas [79] et Fermi [80] en 1927. Bien que leurs approximations ne soient pas suffisamment appropriées pour des calculs de structure

électronique, cette approche élucide la manière de fonctionnement de la DFT. Dans leur premiers travaux, Thomas et Fermi ont écarté les interactions entre les électrons, considérant ainsi le système comme un gaz homogène et son énergie cinétique comme fonctionnelle de la densité (locale). Les deux auteurs ont négligé les effets d'échange-corrélation qui surgissent entre les électrons, cependant ce défaut fut corrigé par Dirac [81] en 1930, qui a introduit l'approximation d'échange locale. La DFT s'est donnée pour le but de déterminer, à l'aide de la seule connaissance de la densité électronique $\rho(r)$ les propriétés de l'état fondamental d'un système composé d'un nombre fixé d'électrons, en interaction avec les noyaux ponctuels.

II.3.4.2. Théorie de Hohenberg- Kohn

Contrairement à la méthode de Hartree-Fock [75] où l'énergie du système est une fonctionnelle de la fonction d'onde Ψ , la DFT exprime l'énergie comme une fonctionnelle de la densité électronique ρ . Cette méthode permet une grande simplification de la résolution de l'équation de Schrödinger (Eq. II.1). Ici, les N électrons sont remplacés par la densité électronique totale qui ne dépend que de 3 variables spatiales. Le principe de la DFT consiste à reformuler un problème quantique à N corps, en un problème mono corps (fonction du spin) avec la densité électronique comme variable. Le développement de la théorie de la fonctionnelle de densité a commencé dans les années 1964 et 1965 avec les publications de Hohenberg et Kohn (1964) [82]. Les deux théorèmes sont comme suit [83] :

- **Théorème 1** : L'énergie total de l'état fondamental d'un système de N électrons en interaction en présence d'un potentiel extérieur est une fonctionnelle unique de la densité électronique.
- **Théorème 2** : La fonctionnelle de l'énergie est minimale quand la densité électronique coïncide avec la vraie densité de l'état fondamental.

Le premier théorème met en évidence une correspondance unique entre le potentiel extérieur et la densité électronique. Puisque celle-ci fixe le nombre d'électrons, alors elle détermine aussi de manière unique la fonction d'onde et par là les propriétés électroniques du système. Ainsi, pour un système donné, l'énergie s'écrit comme il suit :

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + V_{ext}[\rho(r)] \quad (\text{II.17})$$

$$E[\rho(r)] = F_{HK}[\rho(r)] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(r) dr \quad (\text{II.18})$$

Avec $F_{HK} = T_e[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] \quad (\text{II.19})$

Est la fonctionnelle de Hohenberg-Kohn contenant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle dues à l'interaction répulsive électron-électron.

Le second théorème découle du fait que, La fonctionnelle de l'énergie totale de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental. La densité de particules de l'état fondamental vérifie :

$$E(\rho_0) = \text{Min } E(\rho) \quad (\text{II.20})$$

Hohenberg et Kohn ont montré que la vraie densité de l'état fondamental c'est celle qui minimise l'énergie $E(\rho)$, et toutes les autres propriétés sont aussi une fonctionnelle de cette densité. L'énergie de l'état fondamental d'un système électronique dans un potentiel extérieur est déterminée par la méthode variationnelle.

II.3.4.3. Approche de Kohn et Sham

Compte tenu du fait qu'à l'état fondamental il n'existe qu'une solution unique de la densité, il suffit alors de se donner une méthode pratique pour la calculer. L'idée de base de Kohn-Sham : Le système d'électrons en interaction est remplacé par un système d'électrons sans interaction (ou système référence de kohn-sham) se déplaçant dans un potentiel effectif, tel que dans l'état fondamental, ces deux systèmes aient la même densité d'état. La fonctionnelle de Kohn-Sham [82] s'écrit :

$$E[\rho(\vec{r})] = T_{KS}[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} + E_{XC}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{II.21})$$

Où T_{KS} L'énergie cinétique de kohn-Sham du système d'électron sans interaction :

$$T_{KS}[\rho(\vec{r})] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\vec{\nabla} \Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (\text{II.22})$$

$\Psi_i(\vec{r})$ Représente la fonction d'onde associée aux particules sans interaction

$E_H[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie classique de Hartree d'interaction électrons-électrons donnée par :

$$E_H[\rho(\vec{r})] = \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} dr dr' \quad (\text{II.23})$$

$E_{XC}[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie d'échange-corrélation. Toute la complexité du problème à N corps réside dans la connaissance de cette fonctionnelle. On obtient le système d'équations de Kohn-Sham :

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_{eff}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = \Psi_i(\vec{r}) \varepsilon_i \quad (\text{II.24})$$

Ou :

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \quad (\text{II.25})$$

Avec $\Psi_i(\vec{r})$ ε_i étant respectivement les valeurs propres et les vecteurs propres de Kohn Sham à partir desquelles on détermine la densité $\rho(r)$:

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (\text{II.26})$$

Et : $V_H(\vec{r})$, $V_{XC}(\vec{r})$ représentent respectivement le potentiel de Hartree et le potentiel d'échange-corrélation :

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (\text{II.27})$$

On remarque que l'équation (II.24) est similaire à une équation de Schrödinger mais il s'agit seulement d'une équivalence, car en particulier les valeurs propres des équations de Kohn Sham sont des purs paramètres vibrationnels et ne représentent donc pas fortement les énergies propres du système et les vecteurs propres ne sont pas les fonctions d'ondes électroniques réelles.

II.3.4.4. Fonctionnelle d'échange-corrélation

Comme il est décrit au-dessus, la DFT est au stade des équations de Kohn-Sham, une théorie parfaitement exacte dans la mesure où la densité électronique qui minimise l'énergie totale est exactement la densité du système de N électrons en interaction. La seule ambiguïté dans l'approche de *Kohn et Sham (KS)* est le terme d'échange-corrélation qui est inconnu. La complexité formelle de ce dernier rend la résolution des équations de *KS* difficile, néanmoins cette fonctionnelle peut être soumise à des approximations de l'ordre local ou proche local de la densité. Ces approximations ont suscité l'intérêt de plusieurs scientifiques et enregistré d'énormes progrès en la matière. Nous allons apporter quelques définitions des plus populaires d'entre elles à savoir qu'il s'agit de deux types d'approximations [83] :

- l'approximation de la densité locale (LDA)
- l'approximation du gradient généralisé (GGA) ainsi que les méthodes dérivées qui se fondent sur une approche non locale.

II.3.4.4.1. Approximation de la densité locale (LDA)

Dans leur article original, Kohn et Sham ont souligné le fait que l'on peut considérer les solides très proches d'un gaz d'électrons homogènes. Dans cette limite, il est soutenu que les effets d'échange-corrélation ont un caractère local. Les deux auteurs ont proposé l'utilisation de l'approximation de la densité locale (LDA) [84]. Cette approximation n'est autre qu'une intégrale sur tout l'espace, en supposant que $\epsilon_{xc}[n(r)]$, est l'énergie d'échange-corrélation par particule d'un gaz d'électrons homogènes de densité n :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \epsilon_{XC}[\rho(\vec{r})] dr \quad (II.28)$$

Avec $\epsilon_{XC}[\rho(\vec{r})]$ représente l'énergie d'échange-corrélation pour un gaz uniforme d'électrons de densité $\rho(\vec{r})$ que l'on connaît sa forme :

$$V_{XC}(\vec{r}) = \frac{\partial E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (II.29)$$

$$V_{XC}(\vec{r}) = \epsilon_{XC}[\rho(\vec{r})] + \rho(\vec{r}) \frac{\partial \epsilon_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (II.30)$$

L'approximation LDA peut être formulée de manière plus générale prenant en compte le spin de l'électron dans l'expression de la fonctionnelle, on parle alors d'approximation LSDA (pour *local spin density approximation*). Cette approche fut initialement proposée par John C. Slater (1900-1976) [85] et permet de résoudre certains problèmes liés à une approche LDA, notamment le traitement de systèmes soumis à des champs magnétiques et les systèmes où les effets relativistes deviennent importants. En prenant en compte l'approximation LSDA, la fonctionnelle d'échange est exprimée comme :

$$-2^{\frac{1}{3}} \frac{-3}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int n_{\alpha}(\vec{r})^{4/3} n_{\beta}(\vec{r})^{4/3} d\vec{r}^3 = \quad (\text{II.31})$$

Avec α et β expriment les spins up et down.

La réussite de cette approximation dans le traitement des systèmes différents, l'a rendue très réputée et a donné naissance à de nouvelles idées pour l'améliorer. Bien que la détermination de la structure électronique des solides soit possible, notons qu'avec cette méthode, les énergies de cohésion sont systématiquement surestimées, et l'erreur augmente au fur et à mesure que la taille ou la dimensionnalité du système diminue. Cette méthode sous-estime également les gaps dans un matériau isolant, les longueurs de liaison à l'équilibre, tandis que les fréquences de vibration des petits systèmes sont généralement surestimées. Ces erreurs proviennent du modèle de gaz d'électrons homogènes, car l'approximation n'est correcte que dans la limite d'une distribution de densité variant infiniment lentement. Une amélioration a ensuite été apportée à la LDA et cette nouvelle approximation prend en compte non seulement la densité électronique locale mais également un gradient local dans cette densité (qui rend ainsi compte de l'hétérogénéité de la densité). Il s'agit de l'approximation du gradient généralisé (GGA, Generalized Gradient Approximation). En particulier, les formalismes PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof), [86] WC (Wu-Cohen) [87] et EV (Engel Vosko) [88]. Ces méthodes non empiriques sont simples et précises. Elles permettent de garder le meilleur de la méthode LDA tout en l'améliorant.

II.3.4.4.2. Approximation du gradient généralisé (GGA)

L'approximation du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximations) [89] apporte une amélioration par rapport à la LDA. Dans l'approximation locale, le potentiel d'échange et de corrélation ne dépend que de la densité $\rho(\vec{r})$ alors que dans l'approximation GGA, le potentiel s'exprime en fonction de la densité électronique locale $\rho(\vec{r})$ et de son gradient $\nabla\rho(\vec{r})$:

$$E_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) f[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})] d\rho(\vec{r}) \quad (\text{II.32})$$

$f[\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})]$ étant la fonction d'échange et de corrélation dépendante de la densité électronique et de son gradient. Dans de nombreux cas, l'approximation GGA permet d'obtenir de meilleurs résultats que la LDA pour les énergies totales, les énergies de cohésion, les

volumes à l'équilibre donc GGA apporte une amélioration par rapport à LDA. Il existe plusieurs versions de la GGA et on va citer les plus connues :

- PW-GGA introduite par Perdew et Wang en 1992,
- PBE-GGA introduite par Perdew, Burke et Ernzerhof en 1996,
- Meta-GGA introduite par Tao et al en 2003,
- WC-GGA introduite par Wu-Cohen en 2006,
- EV-GGA introduite par Engel et Vosko.

II.3.4.4.3. Résolution des équations de Kohn-Sham

Diverses méthodes peuvent être utilisées pour résoudre les équations de *Kohn-Sham*. On différencie ces méthodes selon :

- Le potentiel d'interaction électron-noyau (V_{ext}).
- Le potentiel d'échange-corrélation.
- La base d'onde sur laquelle sont développées les fonctions d'onde.

Considérant l'équation (II.33) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{Ne}(\vec{r}) + V_{Hartree}(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \right] \varphi_i(\vec{r}) = \varphi_i(\vec{r}) \varepsilon_i \quad (\text{II.33})$$

Avec : $-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$ énergie cinétique déterminée par un calcul relativiste ou non et $V_{Ne}(\vec{r})$ le potentiel d'interaction électron-noyau.

Il existe deux grandes classes de potentiels :

- Les pseudo-potentiels
- Les potentiels tous électrons : type Muffin-tin ou Full Potentiels.

$V_{XC}(\vec{r})$ Potentiel d'échange-corrélation :

- LDA
- GGA

Base sur laquelle est développée la fonction d'onde :

- Base numérique de type ondes planes.
- Base optimisée : Orbitales linéarisées Muffin Tin (LMTO),
- Ondes planes augmentées (LAPW).

Quelle que soit l'approche, les états de cœur et de valence sont traités séparément. L'équation de Schrödinger est appliquée aux électrons de valence, les électrons de cœur sont soit traité par un calcul atomique séparé, soit leur contribution est introduite dans un potentiel effectif. La résolution des équations de Kohn-Sham se fait par plusieurs méthodes numériques parmi ces méthodes : la méthode des ondes planes augmentées (APW) et la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).

II.3.4.4.3.1 Le concept de la méthode FP-LAPW

La méthode '*Full Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW)*' développée par l'équipe de Schwarz, [90.91] est basée sur la résolution auto cohérente des équations de Kohn-Sham dans deux régions arbitrairement définies de la maille élémentaire.

- **La région 1** correspond à des sphères atomiques ne se recouvrant pas, de rayon R_{mt} ($mt = \text{muffin tin}$), ou on utilise une série de combinaisons linéaires de fonctions radiales et angulaires.
- **La région 2** est la région interstitielle entre les sphères. Elle est décrite par une expansion d'ondes planes. Les deux types de région, représentées schématiquement sur la Figure (II-3). La convergence de cette base est contrôlée par un paramètre de « cut-off » $R_{mt} * K_{max}$ qui est le produit du rayon de la plus petite sphère de muffin-tin (R_{mt}) par l'énergie de coupure de la base d'ondes planes. Cette méthode permet la considération d'un potentiel réaliste ($FP = Full Potential$) qui ne se restreint pas à la composante sphérique. Contrairement aux méthodes utilisant des pseudo-potentiels, les électrons de cœur sont intégrés dans le calcul. On obtient ainsi une description correcte des fonctions d'onde près du noyau. C'est la méthode la plus précise, mais elle est lourde en temps de calcul.

Cette méthode est implémentée dans le code **WIEN2k**, développé par Blaha et Schwarz depuis 1990 à l'Institut de Chimie des Matériaux de Vienne.

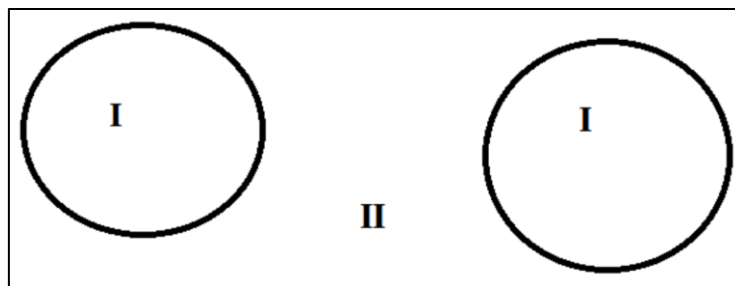


Figure II.3 : Partition de la maille unitaire en sphères atomiques I et en région interstitielle II [91].

II.3.4.4.3.2 La méthode des pseudo-potentiels (ondes planes)

En théorie de pseudo-potentiel, on part du principe que la liaison chimique dans les molécules et les solides est dominée par les électrons de valence de chacun des atomes. Un pseudo-potentiel est une approximation du potentiel réel. En effet, cette approximation vise à substituer le potentiel d'interaction coulombienne du noyau et les effets des électrons dits de cœur, considérés comme fortement liés, par un potentiel effectif interagissant uniquement avec les électrons de valence. Ainsi, on ne traite le problème des potentiels qu'avec les électrons qui jouent un rôle dans les liaisons chimiques. Cette approximation apporte un gain en ressources informatiques. L'approche du pseudo-potentiel est basée sur le fait qu'une grande majorité des propriétés physiques et chimiques des matériaux ne dépend que du comportement des électrons de valence. En effet, dans un atome, seuls les électrons périphériques (minoritaires) contribuent à la formation des liaisons chimiques alors que les électrons de cœur (majoritaire) sont ceux

fortement liés au noyau atomique et donc peu sensibles à l'environnement proche des électrons de valence. On considère que les orbitales de cœur sont gelées d'où l'expression en anglais « frozen-core approximation ». Ce se consiste à résoudre des équations plus réduites puisque seuls les électrons de valence sont pris en compte [92].

Le calcul “tout électron” est effectué dans le formalisme DFT, en utilisant une fonctionnelle d'échange-corrélation (LDA ou GGA), et de manière relativiste [93] ou non. Le calcul étant à symétrie centrale, la résolution se fait sur une grille radiale. Il faut donc spécifier pour cette partie plusieurs paramètres :

- Le numéro atomique de l'atome.
- La fonctionnelle d'échange-corrélation, doit être en accord avec le calcul effectué par la suite.
- Les effets relativistes sur les électrons de coeur peuvent être pris en compte, et c'est fait lors de la génération du pseudo-potentiel.
- La précision de la grille radiale, donne la précision du calcul, mais a peu d'impact sur la rapidité du pseudo-potentiel.
- La configuration électronique de référence, est en général l'état fondamental non polarisé.

En résumé, cette méthode introduit du fait que les électrons de cœur ne sont pas influencés par l'environnement des atomes. On parle de l'approximation de cœur gelé. Cette approximation peut provoquer des erreurs non négligeables dans le cas de calcul d'énergie avec extraction d'un électron de cœur. Même s'il est possible à partir du formalisme PAW de prendre en compte la relaxation des électrons de cœur, comme l'ont montré M. Marsman en 2006 [94].

La théorie de la fonctionnelle de la densité a été reconnue pour son aptitude théorique à décrire les propriétés de l'état fondamental des molécules et des solides. Cette méthode est valable en principe pour des densités lentement variables. Son mérite tient essentiellement au fait qu'elle traite de manière égale l'énergie d'échange et l'énergie de corrélation, ce qui n'est pas réalisé dans la méthode de Hartree-Fock. Cependant, certaines prédictions de la LDA ne s'accordent pas avec l'expérience. Par exemple, l'énergie de cohésion de la plupart des solides et l'énergie de liaison des molécules sont souvent surestimées, alors que leur distance à l'équilibre est sous-estimée. Autre exemple, l'approximation LSDA est fondée sur la théorie du gaz homogène d'électrons, il semble logique d'imputer le désaccord relevé pour ce type de matériaux à la présence d'électrons fortement localisés. Cette forte localisation donne lieu à une densité qui n'est plus lentement variable et engendre des inhomogénéités. L'énergie de corrélation évaluée par LSDA est alors sous-évaluée et ne corrige pas suffisamment le terme de répulsion coulombienne. Ce défaut apparaît essentiellement pour des systèmes comportant des électrons d ou f en couche ouverte. Pour réduire le désaccord survenant lors de l'application pratique de la théorie de Kohn-Sham, de nombreuses améliorations ont été proposées, elles tentent de corriger l'approximation elle-même. La question est donc de savoir si ce désaccord et notamment l'erreur sur la prédiction de la bande interdite dans les calculs DFT-GGA est imputable à l'utilisation de la GGA ou inhérente la DFT elle-même [95].

Pour les systèmes périodiques, l'équation de Kohn-Sham (KS) pour une fonction d'onde d'un seul électron s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff,\sigma}^{KS}(r) \right] \varphi_{i,\sigma}(r) = \varphi_{i,\sigma}(\vec{r}) \varepsilon_{i,\sigma} \quad (\text{II.34})$$

Avec : $V_{eff,\sigma}^{KS}(r) = V_{ext} + V_H + V_{XC,\sigma}$ est le potentiel multiplicatif effectif qui est la somme du potentiel externe, Hartree et le terme d'échange corrélation (XC). Le dernier terme est donné approximativement alors que les autres termes sont calculés numériquement. La DFT ne peut pas prédire les propriétés des états excités, cela dit que les équations de KS sous-estiment le gap des semi-conducteurs ou les isolants. Parmi les solutions possibles l'utilisation du potentiel optimisé effective [96] appliqué au fonctionnel exchange exacte permet d'avoir le gap proche de l'expérimental mais cette méthode est trop lourde et le terme xc est peut-être empirique. Une méthode alternative pour mieux estimer le gap, la fonction hybride [97] qui est une fraction de l'échange exacte remplace une fraction de la LDA/GGA. C'est une méthode trop lourde et n'est pas satisfaisante dans tous les cas alors on propose d'étudier les approches suivantes :

- LDA+U [98] peut être appliqué au système corrélé et les électrons localisés 3d ou 4f.
- GW [99].
- L'approche TB-mBJ.

II.3.5. Code de calcul 'WIEN2k'

Différents codes sont utilisés pour décrire les solides avec des vitesses de calculs et des précisions différentes. Pour réaliser notre étude, nous avons utilisé le code : WIEN2K basé sur la méthode FP-LAPW. Une partie importante du travail consiste à optimiser les structures. Optimiser revient à déterminer une structure à l'équilibre et de déterminer son énergie fondamentale. Sur chaque atome de la cellule primitive s'exercent des forces. Quand ses forces sont négligeables, les atomes ont atteint leur position d'équilibre. En se basant sur la structure optimisée, le calcul itératif (self consistent) sera appliqué pour extraire l'énergie totale, le gap, le moment total ...

On propose un schéma (**Fig. II.4**) qui résume la résolution de l'équation de Schrödinger avec les différentes approches.

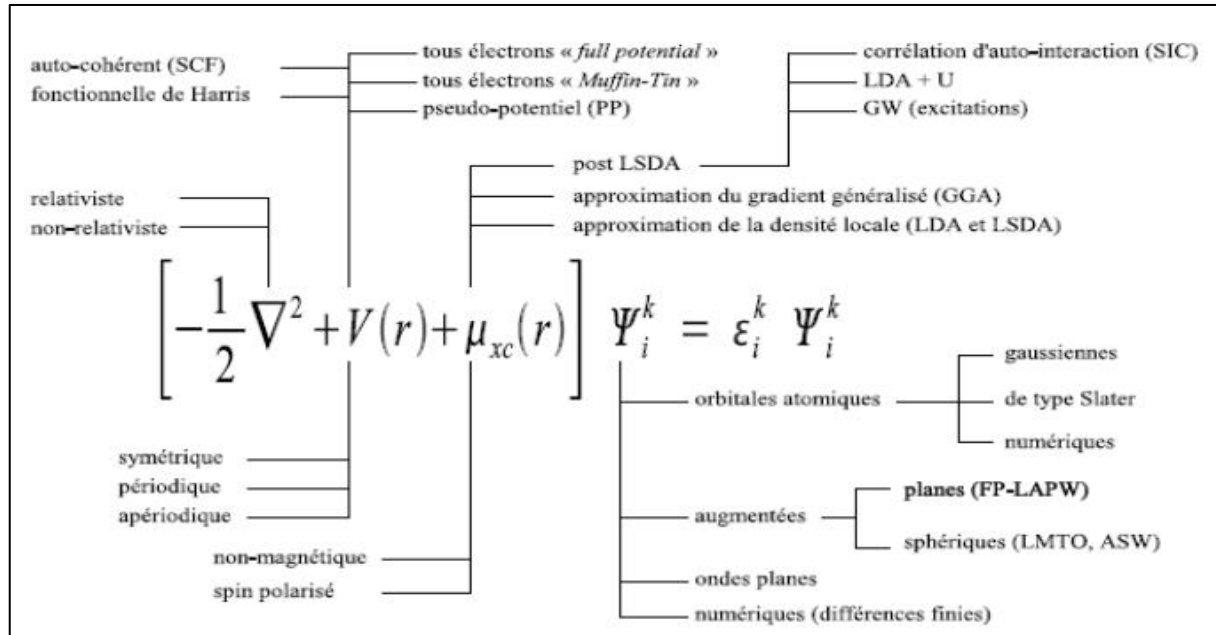


Figure II.4 : Représentation schématique de différentes méthodes basées sur la DFT [100].

Le code WIEN2k est un programme de calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) basé sur la méthode FP-LAPW. Il a été développé par P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka et J. Luitz (Vienna University of Technology, Austria). Wien2k [101] consiste en différents programmes indépendants qui sont liés par le C-SHELL SCRIPT.

Les principaux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-cohérent sont :

- **NN** : C'est un programme qui donne les distances entre plusieurs proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.
- **LSTART** : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.
- **SYMMETRY** : Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.
- **KGEN** : Il génère une maille k dans la zone de Brouillin.
- **DSTART** : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Alors un cycle auto-cohérent est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

- **LAPW0** : Génère le potentiel à partir de la densité.
- **LAPW1** : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.
- **LAPW2** : Calcul les densités de valence.

- **LCORE** : Calcul les états du cœur et les densités.
- **MIXER** : Mélange la densité d'entrée et de sortie.

II.4. Théorie de transport

La théorie de transport traite le flux des charges et le flux de chaleur qui passent à travers un matériau solide sous l'effet d'un champ externe (champ électrique et/ou gradient de température). Les mouvements des porteurs (électrons ou phonons) sont conduits par les champs externes mais résistent par les processus de diffusions internes entre eux et entre d'autres (quasi)-particules. Il existe des échanges d'énergie et de moment au sein des interactions, résultant de la conductivité électrique ou thermique finie. D'autre part, les interactions ont pour conséquence que la conduction des porteurs ne se fait pas dans leurs états d'équilibre. Il existe deux approches pour un tel transport en état hors équilibre, à savoir la théorie de Green-Kubo [102] et la théorie de transport semi-classique de Boltzmann [103]. La première concerne les coefficients de transport de la fonction de corrélation du flux de courant ou de chaleur, la seconde considère les effets des diverses diffusions dans les mécanismes des propriétés de transport, en termes de temps de relaxation. La théorie de transport de Boltzmann a prouvé sa validité dans de nombreuses applications, où les coefficients de transport calculés peuvent être facilement comparés avec les résultats expérimentaux. Dans cette section, on montre comment fusionner la structure électronique provenant de l'approche ab-initio par utilisation de la théorie de la fonctionnelle de densité DFT dans la théorie de transport de Boltzmann, afin de dériver les coefficients de transport électroniques.

II.4.1. Fondement de la théorie semi-classique de transport

La théorie semi-classique de transport est basée sur la solution directe ou approximative de l'équation de transport de Boltzmann déterminée par la fonction de distribution semi-classique $f_n(r, k, t)$. Elle donne la probabilité de trouver une particule dans la région $(r, r+dr)$ et $(k+dk)$ au temps t . Les moments de la fonction de distribution nous donnent l'information sur la densité de particules, la densité de courant et la densité d'énergie. La théorie de Boltzmann décrit le système d'électrons par l'introduction de la fonction de distribution qui est donnée par la fonction de Fermi où les électrons sont dans leurs états d'équilibre. Elle est explicitement dépendante de la bande n et du vecteur d'onde k qui sont les nombres quantiques des états électroniques. Dans les états hors équilibre, la fonction de distribution peut dépendre des coordonnées spatiales r et le temps t , et sera caractérisée par $f_n(r, k, t)$. La fonction de distribution $f_n(r, k, t)$ au voisinage de r , peut changer en raison des mécanismes suivants :

- La diffusion : les électrons de vitesse $v(k)$ restent au voisinage de r des régions adjacentes, tandis que les autres partent, à cause de la diffusion.
- Les champs externes : les électrons sont entraînés par des forces générées par les champs externes, qui sont dans ce cas le champ électrique et le gradient de température.

- Les collisions : les électrons sont dispersés d'un état à un autre par diverses interactions, incluant les interactions électron-phonon, électron-électron, électron impureté et ainsi de suite.

II.4.2. Les coefficients de transport

Les coefficients de transport tels le module de Seebeck, le coefficient de Hall, coefficient de Seebeck, les conductivités électriques et thermiques sont obtenues en utilisant la théorie de transport semi-classique de Boltzmann [104] implémentée dans le code BoltzTrap. La théorie de transport de Boltzmann a prouvé sa validité dans de nombreuses applications où les coefficients de transport calculés peuvent être facilement comparés avec les résultats expérimentaux. Le déplacement des charges sous un champ électrique engendre un courant électrique, pour lequel la densité est donnée par :

$$J_e = \frac{2e}{8\pi^3} \int v(k) f(k) dk \quad (\text{II.35})$$

Où $f(k)$ constitue la fonction de distribution de Fermi-Dirac donnée par :

$$f(k) = f^0(k) + \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) v(k) \tau(k) \left\{ e\varepsilon \left(\frac{\partial \mu}{\partial T} + \frac{E-\mu}{T}\right) \nabla T \right\} \quad (\text{II.36})$$

De la même façon, la densité de courant de chaleur produite par les électrons, est obtenue par :

$$J_Q = \frac{2}{8\pi^3} \int v(k) [E - \mu] f(k) dk \quad (\text{II.37})$$

Avec μ est le potentiel chimique. En substituant l'équation (II.36) dans les deux équations (II.35) et (II.37) et en négligeant le terme f^0 dans l'équation (II.36), on arrive à :

$$J_e = \frac{2e}{8\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) \left[e\varepsilon - \nabla \mu + \frac{E-\mu}{T} (-\nabla T) \right] dk \quad (\text{II.35})$$

$$J_e = \frac{e^2}{4\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) \left[\varepsilon - \frac{1}{e} \nabla \mu \right] dk + \frac{e}{4\hbar\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \frac{E-\mu}{T} (\nabla T) dk \quad (\text{II.36})$$

Et :

$$J_Q = \frac{2}{8\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) \left\{ e\varepsilon - \nabla \mu + \frac{E-\mu}{T} (-\nabla T) \right\} [E - \mu] dk \quad (\text{II.37})$$

$$J_Q = \frac{e^2}{4\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \left[\varepsilon - \frac{1}{e} \nabla \mu \right] (E - \mu) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) dk + \frac{1}{4\pi^3} \int v(k) \tau(k) v(k) \frac{E-\mu}{T} (-\nabla T) \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) dk \quad (\text{II.38})$$

En définissant maintenant l'intégrale :

$$K_n = \frac{1}{4\hbar\pi^3} \int v(k)\tau(k)v(k)[E - \mu]^n \left(-\frac{\partial f^0}{\partial E}\right) dk \quad (\text{II.39})$$

Les équations (II.36) et (II.39) peuvent être exprimée en termes de K_n :

$$J_e = e^2 K_0 \varepsilon + \frac{eK_1}{T} (-\nabla T) \quad (\text{II.40})$$

$$J_Q = eK_1 \varepsilon + \frac{K_2}{T} (-\nabla T) \quad (\text{II.41})$$

Quand il n'y a pas de gradient de température, c'est-à-dire $\nabla T = 0$ dans l'équation (II.40), on obtient

$$J_e = \sigma \varepsilon \quad (\text{II.42})$$

Où σ est la conductivité électrique, qui prend la forme :

$$\sigma = e^2 K_0 \quad (\text{II.43})$$

Lorsque le champ électrique est absent et seulement un gradient de température existe, on pourrait être tenté de penser que la conductivité thermique est simplement obtenue en le prenant comme coefficient du gradient thermique dans l'équation (II.41), c'est-à-dire dans les conditions d'un champ électrique externe nul. C'est une question primordiale avant de s'assurer qu'aucun courant électrique ne passe à travers le matériau. Dans ce cas, la relation $J_e = 0$ dans l'équation (II.40) devient valable. En substituant l'équation (II.40) dans l'équation (II.41) pour éliminer les rendements des champs électriques.

$$J_e = k(\nabla T) \quad (\text{II.44})$$

Où k est la conductivité thermique électronique :

$$k = \frac{1}{T} \left[k_2 - \frac{k_1^2}{k_0} \right] \quad (\text{II.45})$$

Si on suppose qu'il existe un gradient de température à travers le matériau, dans une condition de circuit ouvert, alors il n'y a pas de courant électrique mais un champ électrique est produit :

$$\varepsilon = \frac{k_1}{eTk_0} \nabla T \quad (\text{II.46})$$

A partir de la définition du coefficient de Seebeck, on obtient donc :

$$S = \frac{k_1}{eT k_0} \quad (\text{II.47})$$

II.5. Simulation d'effet de contrainte mécanique sur les propriétés de Bi₂Te₃

II.5.1. Description et détail du calcul

Les propriétés structurales, électroniques et thermoélectriques du tellure de bismuth (Bi₂Te₃) ont été étudié sous l'effet des contraintes mécaniques biaxiales, en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (Full Potential Linearized Augmented Plane Wave, FP-LAPW) implémentées dans le code Wien2k dans le cadre de la DFT. Ce matériau a récemment fait l'objet de nombreuses recherches scientifiques en raison de ses propriétés thermoélectriques prometteuses et de son intégration dans de nombreuses applications solaires telles que le générateur thermoélectrique et le système hybride PV-TE [105]. Les propriétés thermoélectriques du Bi₂Te₃ [106] en volume, des nano-films [107-112], et de tout effet technologique, tel que la variation de la méso-structure [113,114], le dopage [115] et autres, ont été explorés théoriquement et expérimentalement. Tous cela afin d'optimiser son efficacité de conversion, qui passe par une améliorer du facteur de mérite $ZT = TS^2 \frac{\sigma}{K}$. Cette amélioration nécessite une conductivité électrique σ faible et une conductivité thermique élevée (K), avec S le coefficient de Seebeck. Les contraintes biaxiales font parties des approches importantes pour améliorer les propriétés de transport de ce matériau (Bi₂Te₃) à basse température ainsi que son efficacité de conversion, surtout que différentes études théoriques et expérimentales ont montré qu'une contrainte mécanique peut être utilisée pour contrôler la bande interdite de SnO₂, TiO₂, ZnO et MgO.... De plus, il a été rapporté que la déformation en compression avait un impact significatif sur les paramètres structurels et la bande interdite [116]. Cette découverte nous a encouragés à nous pencher sur l'utilisation de la compression et de la dilatation pour améliorer les propriétés de transport. Ce travail a consisté d'abord à évaluer le comportement de la structure de la bande et la mobilité du porteur sous l'effet de ces contraintes avant d'analyser leur effet sur les propriétés thermoélectriques de ce composé.

Le calcul effectué est semi-relativistes (l'effet de spin-orbite est négligé). Les interactions électron-électron ont été approchées moyennant seule l'approximation GGA pour les propriétés structurales, électroniques et la théorie du transport de Boltzmann pour les propriétés thermoélectriques. Cette approche est réputée pour donner de bons résultats pour le band-gap ainsi que la structure de bande du matériau. Le rayon de muffin-tin (RTM) est choisi comme étant égal à 2.5 Å pour les deux atomes Bi et Te et l'énergie de coupure ainsi que le nombre de points k ont été optimisés de manière à ce que l'énergie totale converge avec une précision. Comme mentionné précédemment dans ce chapitre, ce composé cristallise dans une structure de type hexagonal ($a = b \neq c$) au niveau du groupe d'espaces 166_R-3m où : Le «R»

représente rhomboédrique. Trois cellules unitaires rhomboédriques forment la cellule unité hexagonale. Le «3» dans le groupe d'espace fait référence à une inversion de rotation. La cellule unitaire est tournée trois fois avant de revenir à sa position initiale, puis la rotation est suivie d'une inversion.

Les paramètres expérimentaux de réseau $a = b = 4,4 \text{ \AA} \neq c = 30.5 \text{ \AA}$ [117].

Les atomes sont classés en positions : Bi (0.4001, 0.4001, 0.4001), Te1 (0, 0, 0), Te2 (0.2095, 0.2095, 0.2095), et la configuration électronique du bismuth et tellure sont respectivement $[\text{Xe}] 4f^{14} 5d^{10} 6s^2 6p^3$, and $[\text{Kr}] 4d^{10} 5s^2 5p^4$. Sous contrainte biaxiales (**Fig. II.5**), les paramètres a et b dépendent des pourcentages de compression ou de dilatation d'intervalle [-3%, 3%], cependant le paramètre c sur l'axe z est calculé pour chaque valeurs de "a" suivant l'équation :

$$\varepsilon_{xx}(\%) = \varepsilon_{yy}(\%) = \frac{a(b) - a_0(b_0)}{a_0(b_0)}. \quad (\text{II.48})$$

Les propriétés de transport calculées à l'aide du code BoltzTrap associé au Wien2k nécessite un nombre de point k très élevé, dans notre cas ; nous avons atteint 1000 k-points. Le temps de relaxation τ a été supposé constant par rapport au vecteur d'onde k et à l'énergie autour du niveau de Fermi.

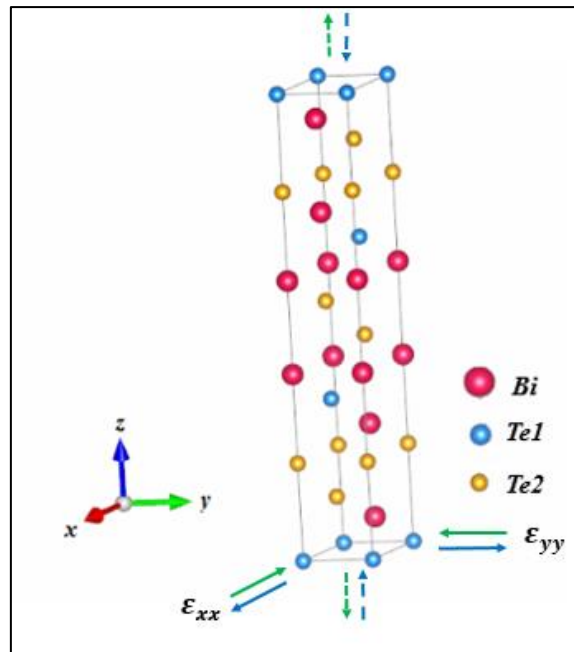


Figure II.5 : Géométrie représentant l'unité de cellule hexagonale de Bi_2Te_3 sous effet des contraintes mécanique : les flèches vertes représentent une contrainte de compression, tandis que les flèches bleues indiquent la contrainte de dilatation. Les flèches en pointillés indiquent le mouvement du réseau sous ces contraintes.

II.5.2. Propriétés structurales et électroniques

II.5.2.1. Propriétés structurales

Avant l'étude des propriétés électroniques du composé tellurure de bismuth dont la description structural est représenté par la figure II.5 sans et sous contraintes, nous avons calculé les paramètres de réseau d'équilibre en utilisant la méthode de relaxation, telles que les valeurs obtenues sont comparés avec des résultats expérimentaux et regroupés dans le tableau suivant :

	a	b	c
paramètres calculé	4,583 Å	4,583 Å	31,93 Å
paramètres expérimentaux	4,4 Å	4,4 Å	30,5 Å

Tableau II.2 : Comparaison entre les paramètres de réseau relaxé et ceux de l'expérimental.

D'après ce Tableau (II.2) nous avons remarqué que les résultats obtenus pour les paramètres du réseau sont sous-estimé par rapport aux valeurs expérimentaux. A partir de ces valeurs de paramètres optimisées, nous avons calculé les propriétés électroniques de ce composé (Bi_2Te_3) avec et sans contrainte. L'importance des propriétés électroniques réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments du matériau. Ces propriétés comprennent les structures de bandes, et les densités d'états.

II.5.2.2. Propriétés électroniques

II.5.2.2.1 Structure de bandes

En physique du solide, la théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. A partir de l'équation de dispersion $E(k)$, on peut tirer des grandeurs importantes telles que l'énergie de gap (E_g), la masse effective, les transitions électroniques et la largeur de la bande de valence. Selon la valeur de l'énergie de gap, il est possible de faire la distinction entre un isolant, un semi-conducteur, un semi-métal, un demi-métal et un conducteur. Dans notre étude, comme il était mentionné auparavant, nous avons calculé la bande d'énergie employant l'approche GGA à l'aide d'un calcul self-consistent (SCF), en injectant les paramètres structuraux optimisé. Pour calculer la structure de bande, on a procédé comme suit :

✓ On a exécuté un calcul SCF avec les valeurs optimales des paramètres pour la convergence du potentiel et de l'énergie.

✓ On a utilisé la tache appelée « Band Structure » sur l'interface graphique W2web et on cliquant sur les boutons un par un. L'ensemble des courbes $E_n(k)$ constitue les courbes de dispersion des électrons dans le cristal : aussi nommé structure de bande.

Les résultats obtenus pour le composé Bi_2Te_3 pure et sous contrainte le long de la symétrie $\Gamma \rightarrow \text{M} \rightarrow \text{K} \rightarrow \Gamma$ sont présentés dans la figure (II.6) suivante :

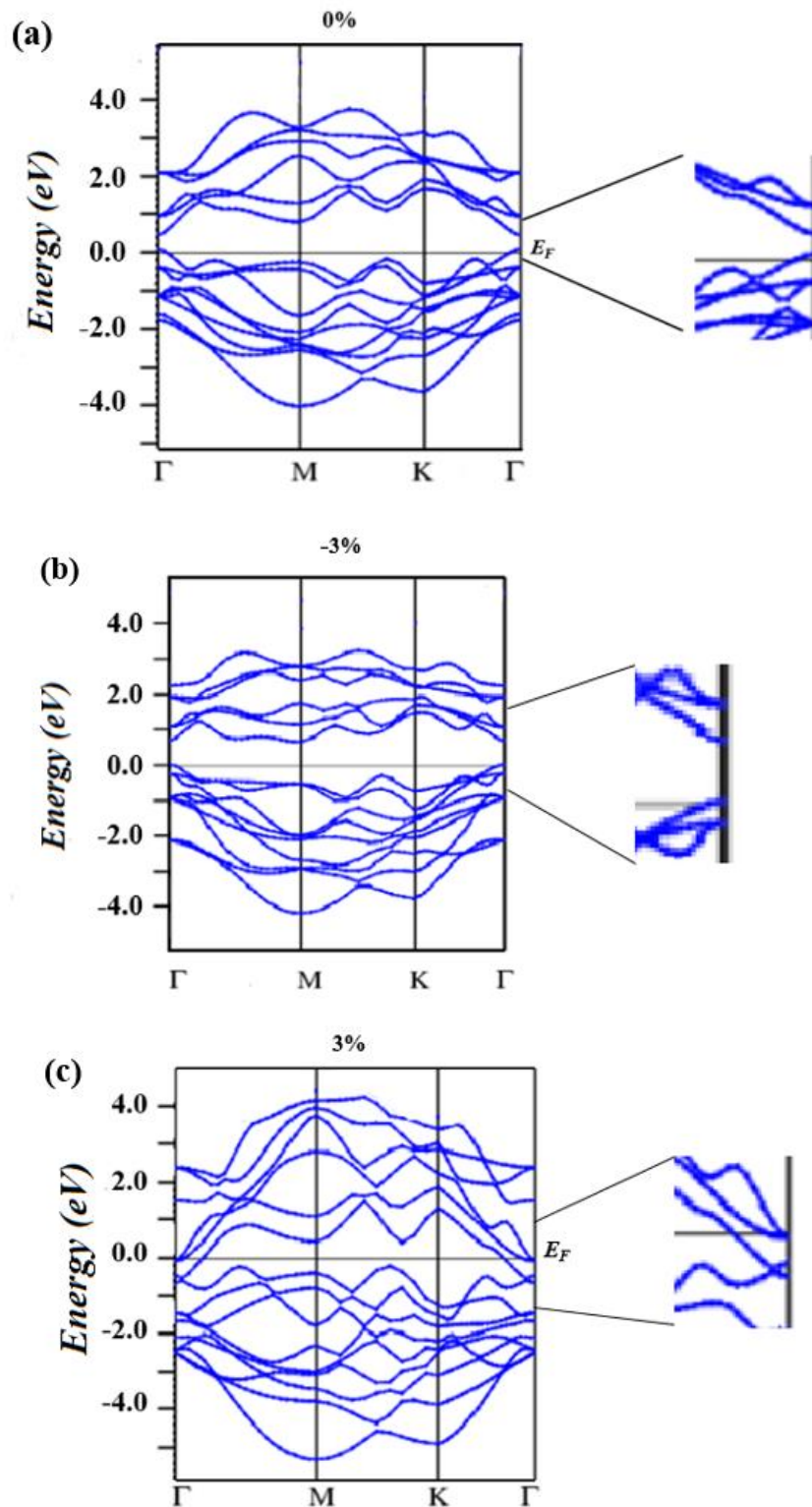
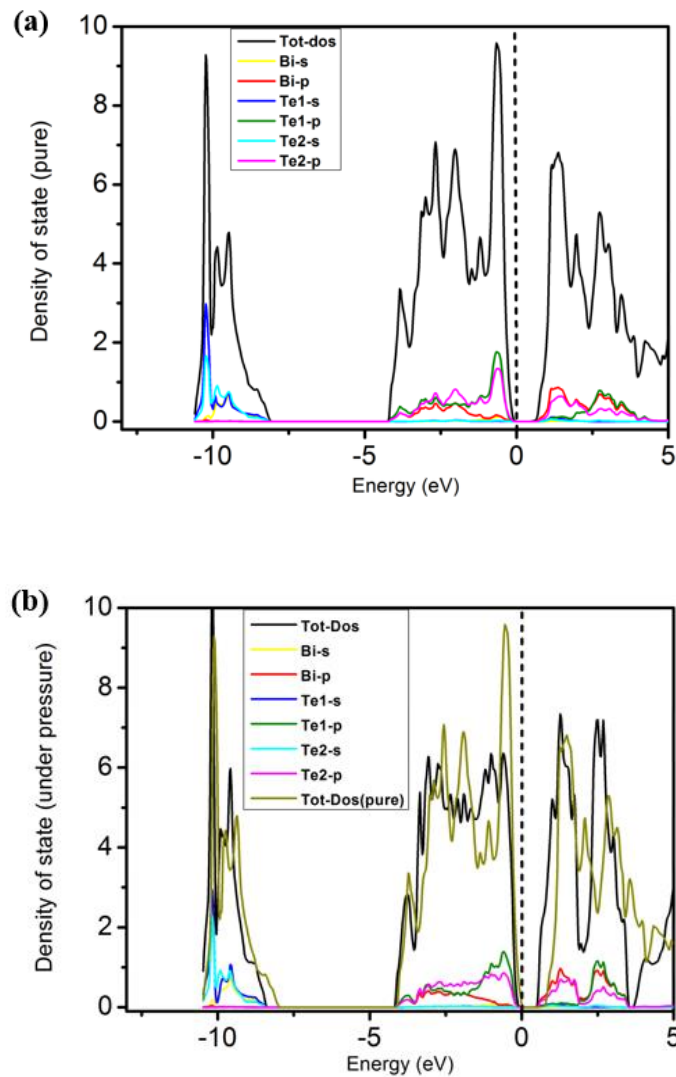


Figure II.6 : Structure de bande électronique de Bi_2Te_3 pure (a), sous compression (b) et sous dilatation (c) le long de la direction de symétrie élevée.

Ces résultats montrent que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situées au même point « Γ », ce qui indique que le Bi_2Te_3 pure est un semi-conducteur avec un gap directe de 0,3 eV (**Fig. II.6.a**) et de 0,6 eV sous compression (**Fig. II.6.b**). Ces résultats sont en accord avec les résultats calculés précédemment [118]. Cependant, sous contrainte de dilatation, Bi_2Te_3 est devenu un conducteur (Métal) (**Fig. II.6.c**), en raison de l'augmentation de la mobilité de ses porteurs de charge, provoquée par l'affaiblissement des liaisons atomiques.

II.5.2.2.2 Densité d'états (DOS)

Pour déterminer le caractère du composé Bi_2Te_3 et la nature de la distribution des électrons dans les bandes de valence et de conduction, nous avons calculé les densités d'états (DOS) totales et partielles de ce système et ils sont illustrées dans la **Fig. II.7** ci-dessous.



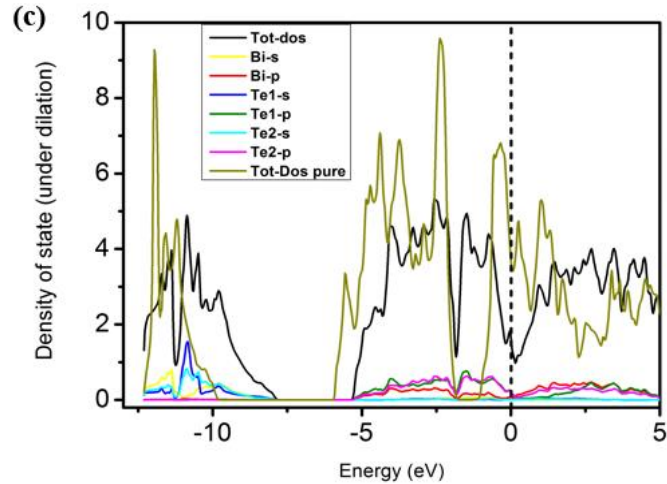


Figure II.7 : Densité d'état totale et partielle de Bi_2Te_3 pure (a), sous compression (b) et sous dilatation (c).

Selon la **Fig. II.7.a** représentant le Bi_2Te_3 pure, nous avons trois régions correspondant aux bandes de cœur, de valence et de conduction. La bande de cœur ou centrale (Cor.B) située à $< -7,98$, connaît une contribution importante des orbitales s des atomes de Te et de Bi. Cependant, la bande de conduction (CB) et la bande de valence (VB) situées entre $[(-4.28) - (0.02)]$ eV et > 0.38 eV respectivement, connaissent une contribution importante des orbitales p des atomes de Te et de Bi. De plus, les **Fig. II.7.b** et **Fig. II.7.c** représentent les densités d'état total et partiel (DOS) sous compression et dilatation, respectivement. Il est à noter que le but de la déformation biaxiale est d'appliquer une déformation de compression ou de dilatation dans le plan XOY, provoquant une variation du paramètre c qui augmente sous la première et diminue sous la deuxième. De ce fait, sous pression (**Fig. II.7.b**) nous avons observé le même comportement de la densité d'états calculée, avec trois régions (Cor.B), (CB) et (VB), spécifiées dans le Tableau (II.3), et accompagnées d'un décalage de la densité totale d'état vers la région de cœur (Cor. B). Cependant, la contrainte de dilation a provoqué un chevauchement des bandes de valence et de conduction (Métal), raison pour laquelle on observe que deux régions, à savoir celle de cœur (Cor. B) et la région de chevauchement (voir **Fig. II.7.c** et **Tab. II.3**).

Bi_2Te_3	Cor. B (eV)	VB (eV)	CB (eV)	Gap (eV)
pure	< -7.98	$[(-4.28) - (0.02)]$	> 0.38	0.3
sous compression	< -8.5	$[(-4.19) - (-0.065)]$	> 0.53	0.6
sous dilatation	< -7.74	zone de chevauchement		Metal

Tableau II.3 : Intervalle d'énergie des différentes régions illustrées dans le DOS pour Bi_2Te_3 pure et sous contraintes.

A partir de ces résultats de la structure de la bande et de la densité d'états de Bi_2Te_3 pure et sous contraintes, nous avons prédit l'amélioration des propriétés de transport sous contrainte. Ceci nous a poussés à étudier en détail le comportement de ces propriétés sous compression et sous dilatation.

II.5.2.3. Propriétés thermoélectriques

La thermoélectricité dans les matériaux est le flux de chaleur qui entraîne un déplacement des porteurs de charges et donc l'apparition d'un courant électrique. Les bons matériaux thermoélectriques ont un coefficient Seebeck et une conductivité électrique élevés, et par ailleurs, une conductivité thermique faible. On ce qui suit, les résultats obtenu pour ces propriétés sous contrainte à travers l'utilisation du code Boltz-Trap, ou l'énergie de fermi obtenue par le calcul de SCF a été utilisé comme potentiel chimique dans les calculs de ces propriétés.

II.5.2.3.1 Coefficient Seebeck

Le coefficient Seebeck (S) ou pouvoir thermoélectrique, permet de quantifier le rapport entre le potentiel électrique et le potentiel thermique. Il a été établi par l'expérience que les valeurs pour les matériaux usuels sont de l'ordre du $\mu\text{V}/\text{K}$. La figure II.8, illustre l'évolution du coefficient Seebeck (S) pour Bi_2Te_3 sous l'effet des contraintes de compression et de dilatation en terme de pourcentage tel que : $(\frac{S-S(a_0)}{S(a_0)})$ avec $S(a_0)$ étant la référence (Bi_2Te_3 phase pure sans contraintes), calculés dans la gamme de températures de 300 à 800 K.

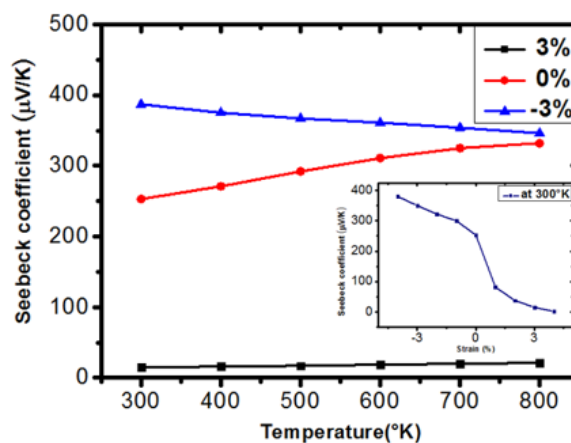


Figure II.8 : L'évolution du coefficient Seebeck en pourcentage ($\mu\text{V}/\text{K}$), en fonction de la température pour Bi_2Te_3 pur, sous compression et dilatation.

La figure révèle que les valeurs de coefficient Seebeck atteint un maximum d'environ 400 $\mu\text{V}/\text{K}$ par rapport à la référence de l'état pure (250 $\mu\text{V}/\text{K}$) lorsque le matériau subit une

compression, et tous en passant à un effet de dilation on constate une démunissions progressive de ce coefficient, atteignant même le zéro à température ambiante.

II.5.2.3.2 Conductivité électrique et thermique

De même, la conductivité électrique σ et thermique k en fonction de la température, est illustrée dans la figure II.9, calculée en pourcentage : $(\frac{x-x(a_0)}{x(a_0)})$, avec x représente (σ, k). Toutefois, contrairement au coefficient Seebeck, cette figure montre que la conductivité électrique et thermique commence à décroître sous l'effet de la compression par rapport à la référence, cette décroissance visible en comparaison pour la conductivité électrique au niveau de la Fig II.9.a entre la courbe en noir représentant la compression d'environ -3% et la courbe en rouge qui représente l'état pure (0%) et de même sur la Fig II.9.b pour la conductivité thermique. Cependant l'effet de la dilation est inverse sur ces deux conductivités, puisqu'il permet l'amélioration de leur valeur.

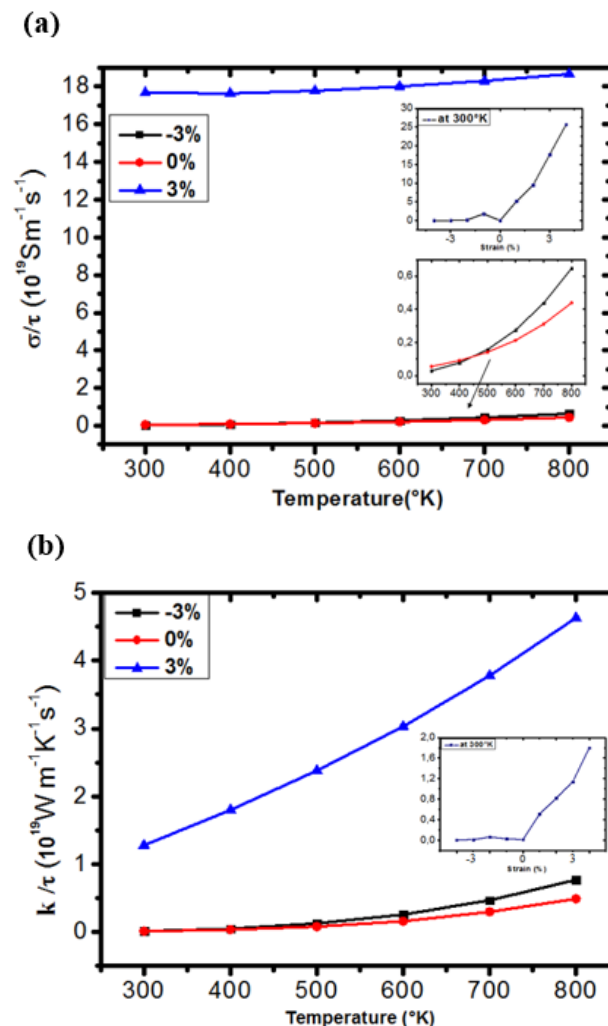


Figure II.9 : L'évolution de la conductivité électrique σ (a) et thermique k (b) par rapport au temps de relaxation τ supposé constant, en fonction de la température pour Bi_2Te_3 pur, sous compression et dilation.

L'effet des contraintes de la compression et de dilatation était clairement visible sur la structure de bande et la densité d'états étudiés précédemment. Ce qui nous permet d'interpréter également l'effet de ces contraintes sur les propriétés thermoélectriques. L'augmentation de la mobilité des électrons sous l'effet de la dilatation a provoqué un accroissement de la conductivité électrique. De plus, l'excès d'e- dans la bande de conduction (CB) a provoqué des collisions inélastiques entre les électrons, entraînant une évacuation de la chaleur. En conséquence, la conductivité thermique a augmentée. La distance interatomique donne aussi d'explication sur le comportement de ces propriétés thermoélectriques. En effet, sous compression, la distance interatomique diminue, provoquant un confinement et un renforcement des liaisons entre les atomes, et augmentant les interactions entre eux. Par conséquent, la libération d'électrons sera faible, ce qui explique la diminution des conductivités thermique et électrique, lorsque le coefficient Seebeck a augmenté. Cependant, sous contrainte de dilatation, la distance interatomique augmente, ce qui conduit à une fragilité des liaisons, facilitant leur rupture et augmentant la mobilité des porteurs de charge. En conséquence, les conductivités thermique et électrique augmentent et le coefficient de Seebeck diminue. Comme nous le savons, il existe peu d'études disponibles sur la masse effective dépendant des contraintes de Bi_2Te_3 , mais prouvant que les propriétés de transport sont en partie liées à la masse effective. En règle générale, lorsque la masse effective diminue, la bande interdite devient étroite et le Seebeck diminue contrairement aux conductivités thermique et électrique. Ces améliorations sont visibles surtout au niveau du coefficient Seebeck et la conductivité thermique conduit à une amélioration du facteur de mérite ZT.

II.5.2.3.3 Facteur de mérite ZT

Cette quantité sans dimension déterminée pour mesurer la performance thermoélectrique globale des matériaux sous le nom de facteur de mérite, et qui regroupe tous les paramètres thermoélectriques étudiés à savoir : la conductivité électrique, la conductivité thermique et le coefficient Seebeck dans la relation $ZT = TS^2 \frac{\sigma}{K}$ est calculés en pourcentage $\left(\frac{ZT - ZT(a_0)}{ZT(a_0)}\right)$, afin de bien montrer l'effet des contraintes sur son évolution par rapport à la référence du matériau pure comme illustré dans la figure (II.10).

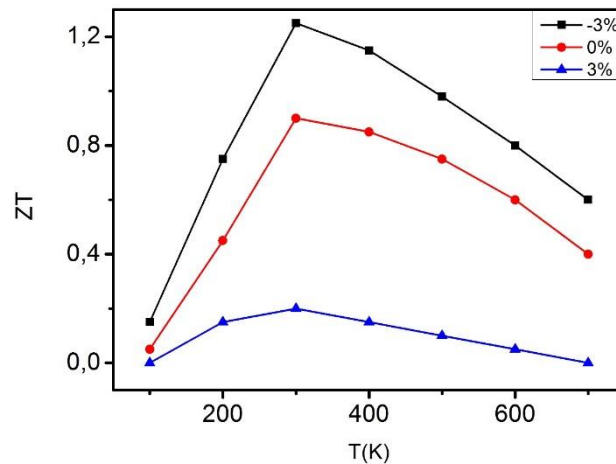


Figure II.10. L'évolution du facteur de mérite de Bi_2Te_3 sous l'effet des Contraintes mécaniques en fonction de la température.

II.6. Conclusion

Le composé Bi_2Te_3 est un semi-conducteur qui suscite depuis peu un intérêt important. En effet, il présente un élément prometteur dans la génération de l'électricité comme en refroidissement Peltier, ainsi que pour sa future utilisation dans le système hybride PV-TE qui fait l'objet de cette mémoire. Suite à cela, ce chapitre a été consacré à l'étude de ce matériau et à l'amélioration de ses propriétés aussi bien au niveau électronique qu'au niveau thermoélectrique sous l'effet des contraintes mécaniques, grâce à la méthode ab-initio détaillée au même chapitre avec les différentes approximations qui en découlent. Cette étude a été réalisée en utilisant la méthode FP-LAPW sous l'approximation GGA. Elle nous a permis de mettre le point sur le comportement des propriétés électroniques de ce composé sous l'effet des contraintes par rapport à son état pur, à partir de la densité d'état et la structure de bande, montrant ainsi qu'il peut se transformer en un conducteur sous l'effet de dilatation tout en gardant son état pur semi-conducteur sous compression, avec une légère augmentation du gap d'un peu près 0.3 eV. Cet effet de contrainte était aussi projeté sur les propriétés thermoélectriques dans l'intérêt de les améliorer pour une bonne génération électrique à l'aide du logiciel BoltzTrap. Cela nous a menés à une augmentation du coefficient Seebeck et une diminution de la conductivité thermique pour un meilleur facteur de mérite ZT, ce qui rend ce composé Bi_2Te_3 un atout majeur pour les applications thermoélectriques et un élément qui peut influencer fortement le fonctionnement du système hybride PV-TE qui sera développé dans le chapitre suivant.

CHAPITRE III

ETUDE CONCEPTUELLE DU SYSTEME
HYBRIDE PV-TE.

III.1. Introduction

La plupart des systèmes photovoltaïques actuelle utilise le Silicium : ils ont été conçus et construits pour être utilisé dans des applications avec des exigences de faible puissance. Car l'efficacité du photovoltaïque est plutôt faible avec des rendements d'environ 18% à 20% et [119], cette faiblesse est accompagné également de plusieurs facteur limitant le rendement dont les plus impactant se sont la transmission et la thermalisation.

Auparavant, la solution proposée pour surmonter ces problèmes d'efficacité et des pertes était la combinaison entre plusieurs matériaux de différent gap mais c'était très couteux. (3ieme génération : multi jonction ou tandem) [120]. De ce fait, afin d'améliorer la performance de ce dispositif nous avons proposé d'interconnecter la technologie PV et TE dans une seul structure dans le but d'exploiter l'augmentation de la température de la cellule et l'irradiation transmise pour générer d'avantage d'énergie via un système hybride PV-TE.

Les travaux engagés dans ce chapitre ont pour objectif d'évaluer les bénéfices potentiels, en termes de gain énergétique, pour le système hybride PV-TE selon le mode de couplage proposé par le biais d'une étude thermique. Nous présentons pour cela notre approche concernant le mode du couplage adapté au fonctionnement optimal de ce système par le développement des équations correspondantes à chaque modèle proposés. Une grande partie de cette étude a été conduite systématiquement à l'optimisation des différents organes de ce dispositif à partir d'une analyse des paramètres influençant la performance de chaque sous-système composant le système hybride PV-TE, afin de finalement développer un système performants nous permettant d'optimiser la production d'énergie.

III.2. Généralités sur les processus de transferts thermique

III.2.1. Principe de transfert de chaleur

Un transfert thermique, appelé plus communément transfert de chaleur est l'un des modes d'échange d'énergie thermique entre deux systèmes. C'est une notion fondamentale de la thermodynamique correspondante au deuxième principe. Contrairement au travail, la chaleur est le bilan de transferts d'énergie microscopiques et désordonnés, qui est définit par un déplacement de flux de chaleur entre deux points où règnent des températures différentes : le transfert s'effectue toujours de la température la plus élevée à la température la plus faible. (Fig. III.1) La différence de température est la force motrice du transfert de chaleur.

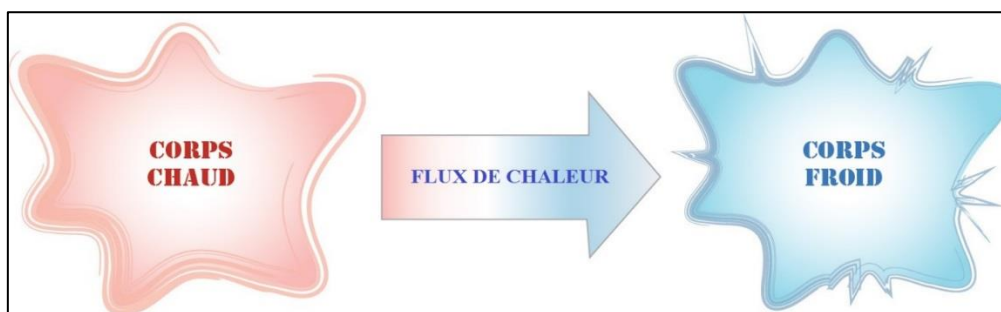


Figure III.1 : Représentation schématique de principe de transfert thermique

On distingue trois types de transfert de chaleur :

- **La conduction** : définie par la propagation de la chaleur de molécules à molécules (ou d'atomes à atomes ou d'ions à ions) dans un corps ou dans plusieurs corps contigus sans qu'il y ait mouvement de ce milieu.
- **La convection** : définie par la propagation de la chaleur dans un fluide en mouvement. La transmission de chaleur s'effectue par l'action combinée de la conduction au sein du fluide et du mouvement du fluide. La conduction intervient donc dans la convection mais le mouvement du fluide entraîne des lois différentes d'un phénomène de conduction sans déplacement de matière. On parlera de convection forcée quand le mouvement du fluide s'effectue grâce à des forces externes (pompe, ventilateur, agitateur) et de convection naturelle quand le mouvement s'effectue sous l'influence de différences de densités dues à des différences de températures au sein du fluide.
- **Le rayonnement** : est l'émission par un corps d'ondes électromagnétiques qui sont les vecteurs de ce transfert de chaleur. Les ondes sont émises dans toutes les directions et appartiennent au domaine de l'infra-rouge et du visible. Aucun support matériel n'est nécessaire pour leur propagation.

Dans la pratique les trois modes de transfert coexistent et il partage la même notion de flux de chaleur mais l'un d'entre eux est généralement prépondérant ce qui conduit à des hypothèses simplificatrices.

III.2.2. Notion de flux de chaleur

Pour tous les modes de transfert de chaleur, on définit le flux de chaleur ou la puissance thermique Φ (W) comme la quantité de chaleur Q (J) traversant une surface isotherme S (m^2) pendant le temps Δt (s) (Eq.III.1).

$$\Phi = \frac{Q}{\Delta t} \quad (\text{III.1})$$

Il est possible d'exprimer le flux de chaleur à l'aide de la notion de résistance thermique. Si on considère deux surfaces S_1 et S_2 respectivement à des températures T_1 et T_2 ($T_1 > T_2$), on a la relation suivante :

$$\Phi = \frac{T_1 - T_2}{R} \quad (\text{III.2})$$

Où les températures sont exprimées en Kelvins ($^{\circ}\text{K}$) ou en degrés Celsius ($^{\circ}\text{C}$). R est la résistance thermique au transfert entre les deux surfaces : elle s'exprime en $\text{K}\cdot\text{W}^{-1}$ et caractérise la difficulté pour réaliser un transfert de chaleur. Pour une même différence de température entre deux surfaces, la chaleur transférée sera d'autant plus faible que la résistance sera importante. On peut faire une analogie avec l'électricité ; la différence de température est assimilable à une différence de potentiel et le flux de chaleur (débit d'énergie) à l'intensité

électrique (débit de charges électriques). La résistance thermique apparaît alors comme l'analogie de la résistance électrique. On reconnaît ainsi dans l'expression précédente la même formulation que la loi d'Ohm.

On définit également le coefficient global de transfert thermique K ($W.m^{-2}.K^{-1}$) défini par rapport à une surface S placée entre les deux surfaces S_1 et S_2 de températures T_1 et T_2 (Eq.III.3) ; dans cette définition générale on ne fait toujours pas référence à un type de transfert particulier. L'intérêt de ce coefficient est de pouvoir s'appliquer à plusieurs processus différents de transfert entre les deux surfaces (conduction, convection ou rayonnement).

$$\Phi = K.S (T_1 - T_2) \tag{III.3}$$

A partir de la loi de Fourier on peut rechercher l'expression de flux de chaleur dans des cas de géométries particulières. On considère par exemple la conduction dans un milieu homogène et isotrope (propriétés physiques identiques dans toutes les directions de l'espace) d'épaisseur e entre deux plans à des températures uniformes T_1 et T_2 (**Fig. III.2 : Zone B**) On suppose que l'écoulement de la chaleur s'effectue perpendiculairement à ces plans isothermes (la température est identique dans un plan). Il n'y a donc pas de pertes latérales de chaleur. Le régime permanent est supposé être atteint : en tous les points du système les températures ne varient plus en fonction du temps. Le flux de chaleur qui traverse chaque surface entre les deux plans est donc identique car dans le cas contraire on devrait supposer qu'il y aurait perte ou accumulation de chaleur en un point ce qui induirait une variation de température contraire aux hypothèses.

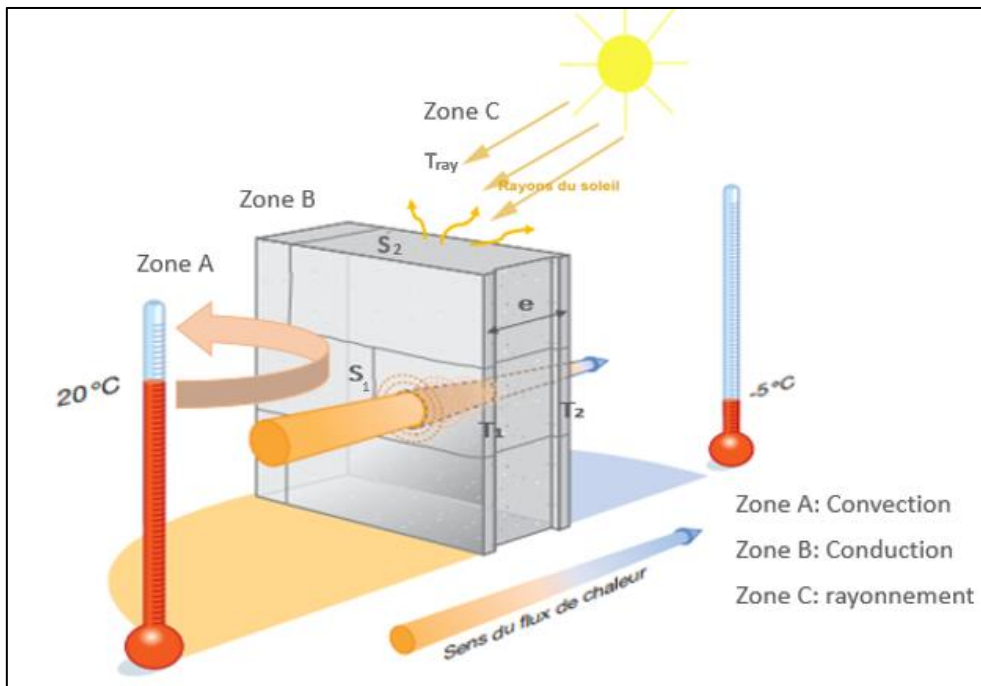


Figure III.2 : Représentation schématique des différents modes de transferts thermique dans un milieu.

La loi de fourrier s'exprime ainsi sous la forme :

$$\Phi_c = -K.S_1 \left(\frac{dT}{dx} \right) \quad (\text{III.4})$$

Où S est la surface d'un plan, K la conductivité thermique du milieu et x l'abscisse sur un axe des longueurs. Le signe - vient de la convention en thermique qui considère toujours des flux positifs. L'intégration de la relation permet d'aboutir à l'expression suivante :

$$\Phi_c = \frac{K.S_1}{e} (T_1 - T_2) \quad (\text{III.5})$$

Avec la résistance thermique $R = \frac{e}{K.S_1}$

Cette loi de Fourier varie bien évidemment selon la géométrie, autrement le flux de chaleur qui traverse une surface entre deux cylindres concentriques de rayon r_i et r_e et de longueurs L s'exprime comme suite :

$$\Phi_c = -K.2\pi.r.L \left(\frac{dT}{dr} \right) \quad (\text{III.6})$$

Avec r est le rayon d'un cylindre.

L'intégration de la relation permet d'aboutir à l'expression suivante :

$$\Phi_c = \frac{K.2\pi.L}{\ln\left(\frac{r_e}{r_i}\right)} (T_i - T_e) \quad (\text{III.7})$$

En cas de convection (**Fig. III.2 : Zone A**), le phénomène se réduit d'un point de vue thermique à une conduction dans la couche mince. Le flux de chaleur échangé entre le fluide (liquide ou air) et la paroi peut donc s'écrire :

$$\Phi_{cov} = \frac{K_f.S_1}{e_c} (T_f - T_p) \quad (\text{III.8})$$

Où K_f est la conductivité thermique du fluide, e_c l'épaisseur de la couche en contact avec le fluide, S la surface de la paroi d'échange, T_f la température au sein du fluide et T_p la température de la paroi. Malheureusement l'épaisseur de la couche n'est que très rarement connue car elle dépend de beaucoup de facteurs. De plus K_f dépend de la température et celle-ci est variable dans la couche. Pour ces raisons, dans un transfert par convection on écrit le flux de chaleur sous la forme proposé par Isaac Newton [121] :

$$\Phi_{cov} = h.S_1 (T_f - T_p) \quad (\text{III.9})$$

Où h est le coefficient thermique de convection. On remarque que ce coefficient h à la même dimension que le coefficient de transfert thermique global K. Le problème de la convection est en fait de déterminer ce coefficient en fonction des conditions d'écoulement du fluide, des caractéristiques géométriques des parois et des éventuels changements d'état du fluide.

La conduction et la convection se produisent uniquement dans les milieux matériels. Or le transport de chaleur se fait aussi dans le vide, simple exemple l'énergie qui traverse l'espace pour atteindre la terre. Ce processus s'appelle le rayonnement (**Fig. III.2 : Zone C**), et il se produit également dans les milieux matériels, et ce n'est qu'un autre mot pour désigner les ondes électromagnétiques caractérisés par leurs longueurs d'ondes et leurs fréquences. Le processus de rayonnement peut être résumé sous l'effet de serre, ou le rayonnement solaire traverse la serre (la terre est considéré comme une immense serre dont l'atmosphère joue le rôle de vitrage), et il est absorbé par les objets qui réémettent du rayonnement à leurs tours. La puissance électromagnétique émise par une surface d'aire A à une T est donnée par la loi de Stefan (1879, Eq.III.10) [122].

$$\Phi_r = \sigma \varepsilon S_2 T^4 \quad (\text{III.10})$$

Avec σ, ε , sont la constante de Stefan ($\sigma = 5.67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$) et l'émissivité respectivement. L'émissivité dépend de la nature et de l'état de la surface et elle est compris entre : $0 \leq \varepsilon \leq 1$, lorsqu'on considère le radiateur comme un corps parfait elle est égale à 1.

La loi de Stefan semble vouloir dire qu'un objet rayonnera de l'énergie jusqu'à ce que sa température atteigne le zéro absol. En fait l'objet rayonne de l'énergie vers son environnement, mais il absorbe aussi de l'énergie en provenance de cet environnement.

Selon la **Fig. III.2 : Zone C**, la surface S_2 émet de l'énergie à la puissance $\sigma \varepsilon T_{S_2}^4$ et il absorbe de l'énergie rayonnée par le soleil avec la puissance $\sigma \varepsilon T_{ray}^4$ (T_{S_2}, T_{Sol} , températures de la surface d'émission et du rayonnement respectivement).

De ce fait la puissance nette s'exprime comme suite :

$$\Phi_{net} = \Phi_{emi} - \Phi_{abs} = \sigma \varepsilon S_2 (T_{S_2}^4 - T_{ray}^4) \quad (\text{III.11})$$

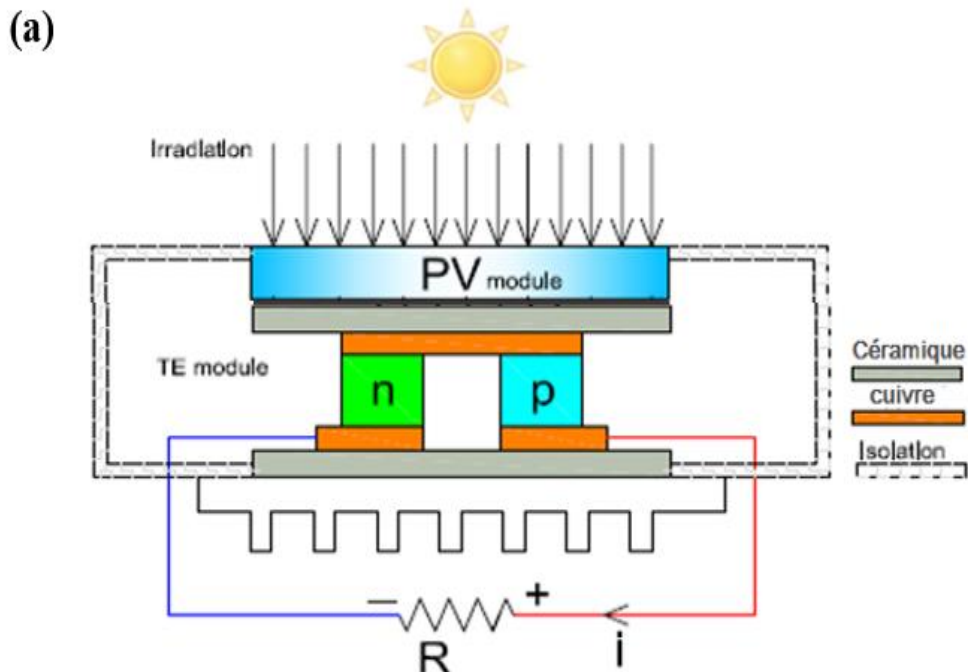
III.3. Etude conceptuelle du système hybride PE-TE

III.3.1. Intérêt et représentation géométrique

L'industrie photovoltaïque des cellules solaires au silicium a connu un développement rapide ces dernières années. Cependant, le coût élevé des matériaux à base de silicium de haute pureté, leur processus de fabrication fastidieux et l'efficacité limitée de la conversion de l'énergie solaire ont entravé ses applications massives [123]. L'utilisation de concentrateurs optiques tels que des antennes paraboliques et des lentilles pour concentrer la lumière solaire sur les cellules PV afin d'augmenter l'intensité de l'irradiation incidente est une méthode utilisée pour acquérir plus de puissance par unité de surface de cellule photovoltaïque. Néanmoins, seule une petite partie de l'ensoleillement est convertie en énergie électrique par la cellule photovoltaïque, le reste est perdu soit par transmission soit par thermalisation, car dans la cellule, la majeure partie de l'énergie incidente du soleil est convertie en énergie thermique et

peut entraîner une élévation de la température de la jonction à moins que la chaleur ne soit efficacement dissipée dans l'environnement [124]. De plus, les systèmes photovoltaïques peuvent subir une baisse d'efficacité avec la montée en température due à une croissance de résistance [123,124]. De ce fait, afin de surmonter ces obstacles et remédier aux pertes mentionner précédemment et détaillé au niveau du chapitre I, un système hybride interconnectant les systèmes photovoltaïques (PV) et thermoélectriques (TE) est proposé. En effet, cette combinaison PV-TE constitue une alternative intéressante dans la mesure où la chaleur excédentaire (ou la thermalisation) du système PV peut être transférée au système TE où elle est convertie en énergie électrique. Ce système TE dont le rôle principale consiste à reconvertir l'irradiation transmise du système PV en énergie électrique supplémentaire.

Ce système hybride PV-TE exposé dans la figure III.3 contient les éléments suivants selon un ordre vertical du haut en bas : un verre de protection, un système photovoltaïque, un concentrateur et un système thermoélectrique. Cependant, il est proposé sous deux modèles, sous couplage direct (Fig.III.3.a) et indirect (Fig.III.3.b). Pour le premier, tous les composants sont physiquement connectés, tandis que pour le second, le concentrateur est intégré sans aucun contact physique direct avec les systèmes PV et TE. Il est à noter que les configurations proposées sont entourées d'un système d'isolation qui retient toute l'énergie solaire accumulée à l'intérieur du dispositif. 7



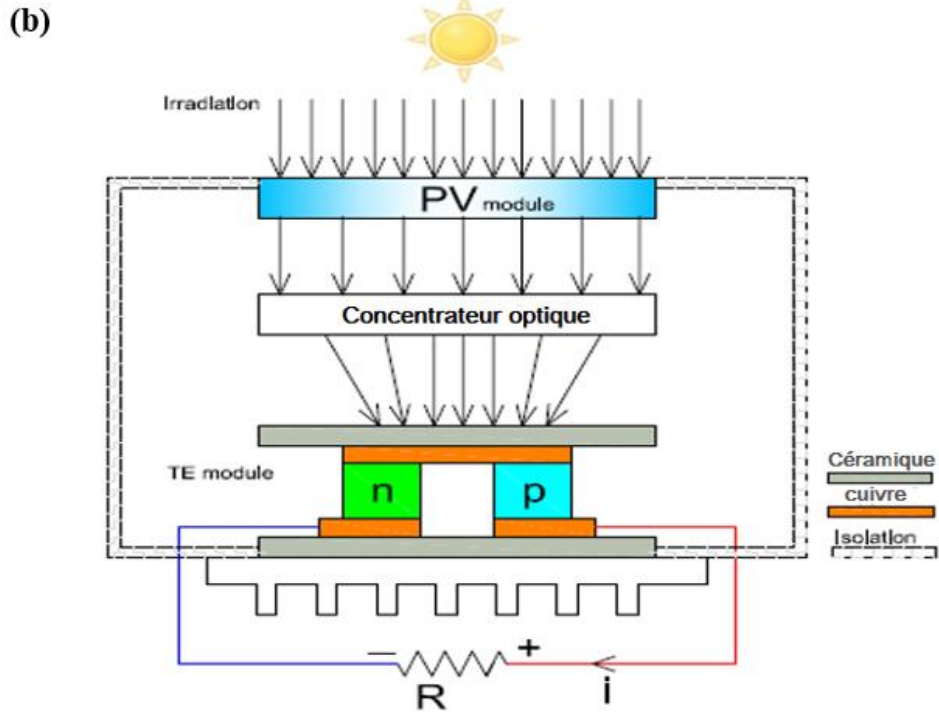


Figure III.3 : Représentation schématique des deux conceptions du système hybride PV-TE : avec couplage direct (a), et avec couplage indirect (b).

III.3.2. Choix et validation du couplage

III.3.2.1. Modèle thermique et distribution de température

Afin d'étudier les performances et la fiabilité de ces deux conceptions proposées, un calcul unidimensionnel est effectué, baser sur une distribution de température considéré comme homogène avec un équilibre thermique atteint à chaque interface. Par conséquent, tous les paramètres intervenant aux calculs sont suivant l'axe z (flux de chaleur, diffusion de la température, variation de la pression et de l'épaisseur, ...) de sorte que l'énergie de conservation puisse alors être écrite [124,125] comme suite :

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (\text{III.12})$$

Où ρ , c_p et k sont respectivement la masse volumique, la chaleur spécifique et la conductivité thermique. Dans cette étude, l'état d'équilibre est pris en compte et le flux de chaleur transféré se propage du haut vers le bas du système comme représenté au niveau de la figure III.4. Les conditions aux limites respectées sont illustrées dans le tableau III.1.

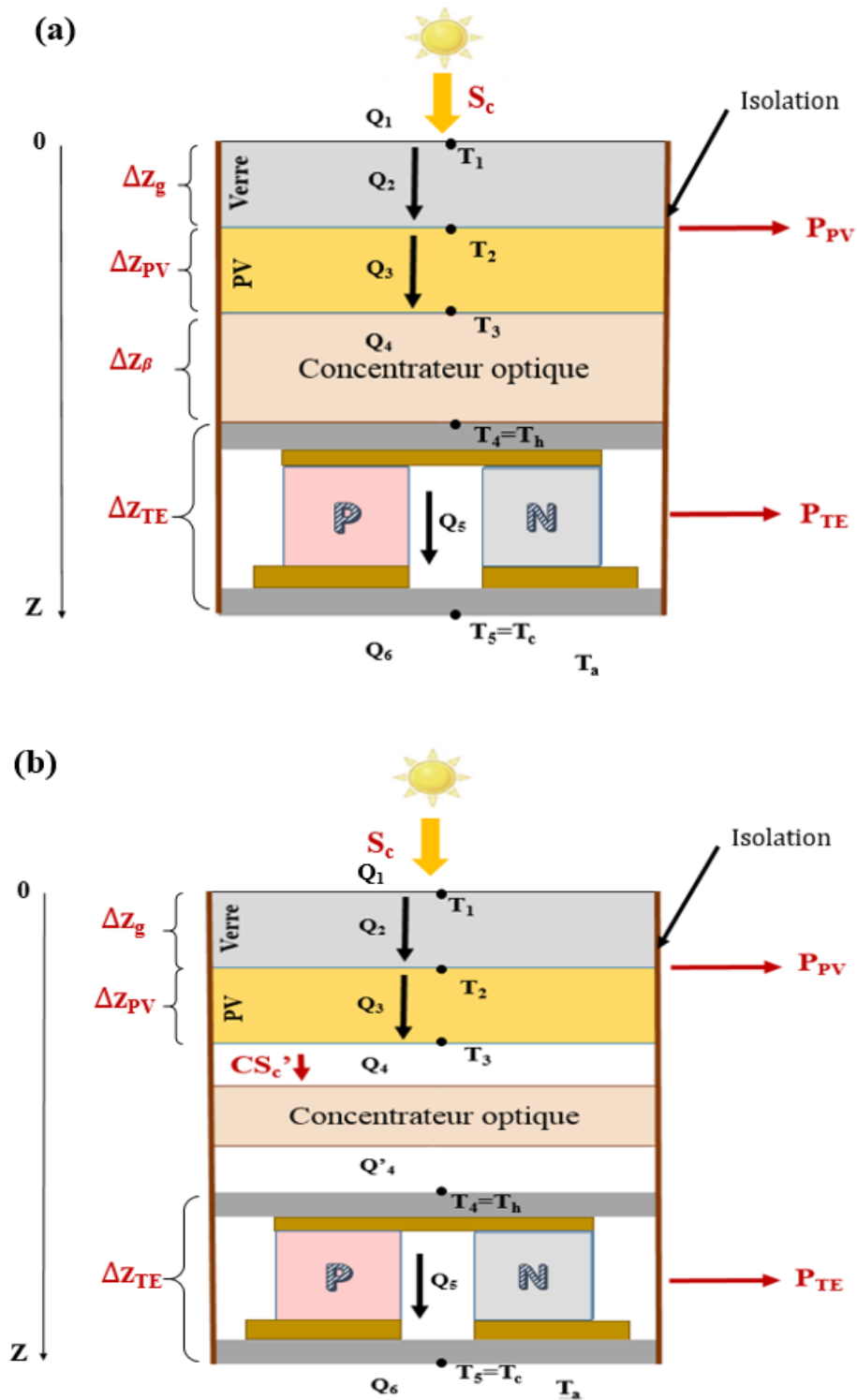


Figure III.4 : Modèle mathématique représentant les flux de chaleur et la distribution des températures au niveau du système hybride PV-TE : avec couplage direct (a), et avec couplage indirect (b).

	condition aux limites	
	couplage direct	couplage indirect
transfert de chaleur par conduction	$0 < z < \Delta z_{PV} + \Delta z_g + \Delta z_\beta + \Delta z_{TE}$	$0 < z < \Delta z_{sub} + \Delta z_g$ $0 < z < \Delta z_{TE}$
transfert de chaleur par convection	$z = 0$ or $z = \Delta z_{PV} + \Delta z_g + \Delta z_\beta + \Delta z_{TE}$	$z = 0$ or $z = \Delta z_{PV} + \Delta z_g$ $z = 0$ or $z = \Delta z_{TE}$

Tableau III.1 : Conditions aux limites respectées pour le couplage direct et indirect entre les dispositifs photovoltaïques et thermoélectriques.

De ce fait, en appliquant la première loi de la thermodynamique et après discrétisation, cinq équations algébriques peuvent être extraites (Eqs. (III.13) à (III.17)).

$$Q_1 + [AS_c - Q_{rad} - \rho S_c A] - Q_2 = 0, \quad (III.13)$$

$$Q_2 - Q_3 - P_{pv} = 0, \quad (III.14)$$

$$Q_3 - \frac{1}{\beta} Q_4 = 0, \quad (III.15)$$

$$\frac{1}{\beta} Q_4 - Q_5 - P_{TE} = 0, \quad (III.16)$$

$$Q_5 - Q_6 = 0, \quad (III.17)$$

Avec $Q_1 = Ah_5(T_a - T_1)$ désigne la convection de la surface supérieure avec l'ambient, Alors que $Q_2 = \frac{KgA}{\Delta z_g}(T_1 - T_2)$ et $Q_3 = \frac{K_{PV}A}{\Delta z_{PV}}(T_2 - T_3)$ correspondent au transfert de chaleur par conduction dans le verre et la couche de silicium respectivement (**Fig.III.4**). Le terme Q_4 joue le rôle de conduction ou de convection selon le type de connexion approprié, ainsi il peut être écrit comme suite :

$$Q_4 = \frac{K_\beta A}{\Delta z_\beta}(T_3 - T_4), \quad \text{Pour couplage direct} \quad (III.18)$$

$$Q_4 = Ah'_1(T_3 - T_a), \quad \text{Pour couplage indirect} \quad (III.19)$$

$$Q'_4 = Ah_3(T_4 - T_a), \quad \text{Pour couplage indirect} \quad (III.20)$$

La première expression (Eq. III.18) correspond à la conduction au sein du concentrateur pour le couplage direct, tandis que le reste présente le terme de convection dans lequel on distingue deux expressions de surface. En fait, les équations (III.19) et (III.20) assignent leur termes à la convection entre les surfaces inférieure de PV et supérieure de TE avec l'ambient respectivement. Cette différence est représentée dans ce qui suit par l'intégration d'un

coefficient de liaison (α) distinguant entre les couplages direct et indirect dans le développement des équations (III.13 – III.17). Q_5 et Q_6 représentent à leur tour, le flux de chaleur par conduction dans le module thermoélectrique et la convection de son côté froid (surface inférieur du TE) avec l'ambient, dont les expressions sont : $Q_5 = \frac{K_{TE} A}{\Delta z_{TE}} (T_4 - T_5)$ and $Q_6 = Ah_1(T_5 - T_a)$.

Tenant compte de ce qui précède, le développement des équations (III.13 – III.17) est comme suite :

- Pour T_1 : correspondant à la surface supérieure du module PV :

$$Ah_5(T_a - T_1) + [AS_c - \varepsilon A \sigma (T_1^4 - T_{env}^4) - \rho S_c A] - \frac{K_g A}{\Delta z_g} (T_1 - T_2) = 0, \quad (III.13.1)$$

- Pour T_2 : correspondant à la température au niveau de la couche du silicium :

$$\frac{K_g A}{\Delta z_g} (T_1 - T_2) - \frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}} (T_2 - T_3) - P_{pv} = 0, \quad (III.14.1)$$

- Pour T_3 et T_4 , nous avons introduit le coefficient de couplage ' α ' évoqué précédemment et qui nous a permis de lier entre les deux types de couplage (direct et indirect), respectivement :

$$\frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}} (T_2 - T_3) + \alpha \frac{1}{\beta} \frac{K_{\beta} A}{\Delta z_{\beta}} (T_3 - T_4) - (1 - \alpha) Ah'_1(T_3 - T_a) = 0, \quad (III.15.1)$$

$$\alpha \frac{1}{\beta} \frac{K_{\beta} A}{\Delta z_{\beta}} (T_3 - T_4) - \frac{K_{TE} A}{\Delta z_{TE}} (T_4 - T_5) + (Ah_3(T_a - T_h) + [CAS_c - P_{pv}]) (1 - \alpha) - P_{Te}(H) = 0, \quad (III.16.1)$$

En fonction de la valeur du coefficient ' α ', nous avons pu établir les équations régissant de chaque type de couplage entre les dispositifs PV et TE.

Lorsque $\alpha = 1$: on obtient un couplage direct et les équations III.15.a et III.16.a deviennent :

$$\frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}} (T_2 - T_3) + \frac{1}{\beta} \frac{K_{\beta} A}{\Delta z_{\beta}} (T_3 - T_4) = 0, \quad (III.15.1.a)$$

$$\frac{1}{\beta} \frac{K_{\beta} A}{\Delta z_{\beta}} (T_3 - T_4) - \frac{K_{TE} A}{\Delta z_{TE}} (T_4 - T_5) - P_{Te}(H) = 0, \quad (III.16.1.a)$$

Lorsque $\alpha = 0$: on obtient un couplage indirect et les équations III.15.a et III.16.a, deviennent :

$$\frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}} (T_2 - T_3) - Ah'_1(T_3 - T_a) = 0, \quad (III.15.1.a')$$

$$- \frac{K_{TE} A}{\Delta z_{TE}} (T_4 - T_5) + (Ah_3(T_a - T_h) + [CAS_c - P_{pv}]) - P_{Te}(H) = 0, \quad (III.16.1.a')$$

- Pour T_5 : correspondant à la température de la surface inférieur du générateur TE :

$$\frac{K_{TE} A}{\Delta z_{TE}} (T_4 - T_5) - Ah_1(T_5 - T_a) = 0, \quad (\text{III.16.1})$$

Les équations ci-dessus seront rassemblées sous une matrice générale reliant les deux types de couplage direct et indirect (**Tab.III.2**).

$$A = \begin{bmatrix} -1 - \frac{h_3 \Delta z_g}{K_g} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{K_g}{\Delta z_g} & -\frac{K_{pv}}{\Delta z_{pv}} - \frac{K_g}{\Delta z_g} & \frac{K_{pv}}{\Delta y_{pv}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{K_{pv}}{\Delta z_{pv}} & -h'_1(1-\alpha) - \frac{K_{pv}}{\Delta z_{pv}} - \alpha \frac{1 K_\beta}{\beta \Delta z_\beta} & \alpha \frac{1 K_\beta}{\beta \Delta z_\beta} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1 K_\beta}{\alpha \beta \Delta z_\beta} & -h_3(1-\alpha) - \frac{K_{pv}}{\Delta z_{pv}} - \alpha \frac{1 K_\beta}{\beta \Delta z_\beta} & \frac{K_{Te}}{\Delta z_{Te}} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 - \frac{\Delta z_{Te} h_1}{K_{Te}} \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \\ T_4 \\ T_5 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{h_5 \Delta z_g}{K_g} T_a + [-S_c + \varepsilon \sigma (T_5^4 - T_{env}^4) + \rho S_c] \times \frac{\Delta z_g}{K_g} \\ \frac{P_{pv}}{A} \\ -T_a h'_1 (1-\alpha) \\ \frac{P_{TE(H)}}{A} - (1-\alpha)(h_3 T_a - CS'_c) \\ -\frac{\Delta z_{TE} h_1}{K_{TE}} T_a \end{bmatrix}$$

Tableau III.2 : Matrice général rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire reliant les deux types de couplage direct et indirect du système hybride PV-TE.

III.3.2.2. Procédure de simulation et paramètres d'entrée

Afin de validé le couplage adéquat pour une efficacité maximal du dispositif hybride PV-TE, les équations restaurées et détaillées précédemment, sont résolu à partir de la méthode des éléments finis et le logiciel standard Matlab / Simulink. Cette étude informatique se divise en plusieurs parties. En premier temps, nous avons déterminé la température de la cellule photovoltaïque (T_2) en résolvant les équations (III.13.1- III.15.1) de manière itérative. Deuxièmement, nous avons calculé la puissance de sortie P_{pv} initialisée par zéro, car on estime que le système ne génère aucune énergie de départ. Puisque ce paramètre est une fonction linéaire de la température, il est calculé à partir de la relation suivante :

$$P_{PV} = AS_C \eta_{ref}(1 - \beta(T_2 - 298.15)), \quad (III.17) \text{ [127, 128]}$$

Avec : $\eta_{ref}, \beta, T_2, A$ et S_C sont le rendement électrique du module à la température de référence ($T_{ref} = 298.15 \text{ ° K}$) à un flux de rayonnement solaire de 1000 W / m^2 , à A.M1.5 selon les condition standard, le coefficient de température du PV, la température de PV, la surface du PV et l'irradiation solaire, respectivement. Sachant que le rendement global du système photovoltaïque et représenté par l'équation (III.18)

$$\eta_{PV} = \eta_{ref}(1 - \beta(T_{PV} - 298.15)) \quad (III.18) \text{ [129]}$$

Dans le cas du sous-système TE, T_h (température du côté chaud du module thermoélectrique) et T_c (température du côté froid) (correspondant respectivement à T_4 et T_5) ont été obtenus à partir de l'équation (III.13.1). La puissance P_{TE} à son tour est calculée à partir de la relation suivante :

$$P_{TE} = AS'_C \left(1 - \frac{T_c}{T_h}\right) \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + \frac{T_c}{T_h}}, \quad (III.19) \text{ [129, 230]}$$

Avec : A et S'_C , ZT correspondent à la surface du module TE, l'irradiation solaire transmise, et le facteur de mérite, respectivement

Les paramètres et hypothèses utilisés dans le calcul pour les deux sous-systèmes sont donnés comme suite :

- Les conductivités thermiques du silicium monocristallin, du verre de protection et du composé thermoélectrique (Bi_2Te_3) sont respectivement de 148 W / mK , $0,75 \text{ W / mK}$ et $0,48 \text{ W / mK}$ [131]. Une épaisseur de 0.1 mm pour les deux premières couches (du silicium monocristallin et de verre de protection) et de $3,9 \text{ mm}$ pour la couche thermoélectrique.
- le côté froid du système thermoélectrique correspondant à la température T_c est supposé constant à la température ambiante (300 K),

III.3.2.3. Résultats et discussions

L'approbation du couplage approprié au système hybride PV-TE passe par une analyse d'efficacité des deux modèles proposés pour ce système. Cela nous a menés en premier ordre à identifier les paramètres influençant la performance de chaque composant, à savoir le photovoltaïque et le module thermoélectrique et ainsi déterminer leur impact sur l'efficacité globale. Pour cette raison, notre stratégie consiste à étudier séparément les systèmes photovoltaïques et thermoélectriques dans le but de fixer les conditions de fonctionnement optimales de chaque sous-système.

Dans la conversion photovoltaïque (interaction d'un photon avec un semi-conducteur), il existe trois processus susceptibles d'être générés [132, 133, 134], à savoir la réflexion, la transmission et l'absorption. Les deux premiers processus sont considérés comme des pertes

d'énergies, tandis que la génération d'électrons est assurée via le processus d'absorption. Ces électrons sont souvent très énergétiques, provoquant une thermalisation lors de la libération d'un excès d'énergie suivant leur déplacement de la bande de valence vers la bande de conduction, un phénomène qui entraîne le chauffage de la cellule. De ce fait, il est important d'estimer la température induite par un tel chauffage en fonction du flux solaire incident.

$$A = \begin{bmatrix} -1 - \frac{h_5 \Delta y_g}{K_g} & 1 & 0 \\ \frac{K_g}{\Delta z_g} & -\frac{K_{PV}}{\Delta z_{PV}} - \frac{K_g}{\Delta z_g} & \frac{K_{PV}}{\Delta z_{PV}} \\ 0 & \frac{K_{PV}}{\Delta z_{PV}} & -h'_1 - \frac{K_{PV}}{\Delta z_{PV}} \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} T_1 \\ T_2 \\ T_3 \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} -\frac{h_5 \Delta z_g}{K_g} T_a + [-S_c + \varepsilon \sigma (T_1^4 - T_{env}^4) + \rho S_c] \times \frac{\Delta z_g}{K_g} \\ \frac{P_{pv}}{A} \\ -h'_1 T_a \end{bmatrix}$$

Tableau III.3 : Matrice rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire régissant de la partie PV du système hybride PV-TE.

Nos calculs finissent par donnés une température maximale du photovoltaïque d'environ 53 ° C pour un flux d'irradiation autour des conditions de fonctionnement nominales (près de 1000 Watt / m²) (**Fig.III.5.a**). A noté que le coefficient de couplage α a été pris égal à 0 au niveau de la matrice générale (**Tab.III.2**) afin d'isolé les équations réservé au système PV (**Tab III.3**). Cette température obtenue est très élevée par rapport à la température de fonctionnement idéale de 25 ° C [131]. Un tel accroissement devrait avoir un impact négatif sur la tension de circuit ouvert produite [135], ce qui entraînerait une chute de la puissance de sortie du dispositif photovoltaïque, comme illustré sur la figure (**Fig.III.5.b**) [136]. Dans ce cas de figure, cet excès de température sera réduit à partir de l'intégration d'un système de refroidissement détaillé et étudier au niveau du prochain chapitre (VI). Toutefois, le module thermoélectrique contribuera dans le fonctionnement du dispositif hybride en tant qu'exploiteur d'irradiation transmise par le système photovoltaïque. De ce fait, la section suivante, présente les résultats obtenu pour l'étude des conditions de fonctionnement optimales de ce système TE, ainsi que son comportement sous l'effet d'irradiation solaire

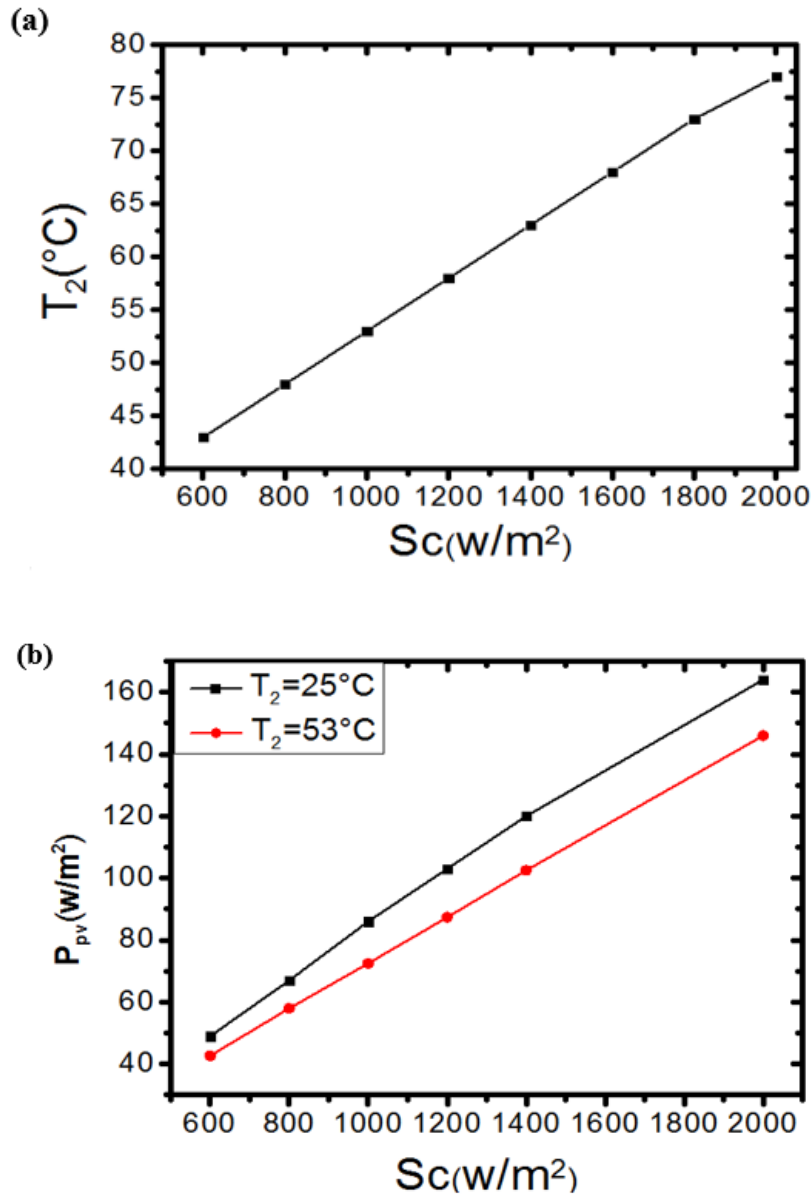


Figure III.5 : Développement de la température (a) et de la puissance de sortie (b) d'un système photovoltaïque en fonction de l'irradiation solaire.

Les paramètres qui affectent l'efficacité du module thermoélectrique sans et a concentration sont modélisés à partir des équations isolé régissant de la partie TE du système hybride PV-TE, et présenté dans le tableau (III.4). Étant donné que le système est supposé isolé, les pertes par rayonnement et réflexion exprimées respectivement par les termes : $Q_{rad} = [\varepsilon A \sigma (T_h^4 - T_{env}^4)]$ et $[\rho S_c' A]$ sont négligeables.

$$A = \begin{bmatrix} -h_3 - \frac{K_{TE}}{\Delta Z_{TE}} & \frac{K_{TE}}{\Delta Z_{TE}} \\ 1 & -1 - \frac{\Delta Z_{TE} h_1}{K_{TE}} \end{bmatrix}$$

$$X = \begin{bmatrix} T_h \\ T_c \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} \frac{P_{TE(H)}}{A} - h_3 T_a + [-CS_c' + \varepsilon\sigma(T_h^4 - T_{env}^4) + \rho S_c'] \\ - \frac{\Delta Z_{TE} h_1}{K_{TE}} T_a \end{bmatrix}$$

Tableau III.4 : Matrice rassemblant les coefficients correspondant aux équations non linéaire régissant de la partie TE du système hybride PV-TE.

Un système thermoélectrique peut convertir directement l'énergie thermique en énergie électrique lorsqu'une différence de température est présente entre ces deux plaques supérieure et inférieure. Son efficacité de conversion maximale est limitée par l'équation de Carnot [137] mentionné précédemment dans se manuscrit sous l'équation I.15 :

$$\eta_{TE} = \frac{W}{Q_h} = \left(1 - \frac{T_c}{T_h}\right) \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + \frac{T_c}{T_h}} \quad (I.15)$$

Où ZT représente le facteur de mérite thermoélectrique, un paramètre dépendant de la température ainsi qu'au matériau utilisé, sachant qu'au sein de cette étude le matériau utilisé est le tellure de bismuth dont le ZT= 0.9, et qui a fait l'objet d'une étude d'amélioration de ces paramètres au niveau du chapitre II, sous inspiration des nombreux efforts qui ont été déployés pour améliorer le facteur de mérite ZT pour les matériaux thermoélectriques [129,130,138,139]. Ce choix de Bi₂Te₃ était motivé par l'efficacité thermoélectrique relativement élevée qu'il représente dans les conditions de température ambiante [140, 141].

Selon l'équation (I.15) l'amélioration de la performance du module TE passe par l'augmentation de la différence de température entre ces plaques supérieure (chaude) et inférieure (froide). Les premiers résultats représenté au niveau de la figure (III.6.a) affiche une très faible augmentation de la température de la plaque supérieure correspondante à T_h (T_h=T₄) illustré en ligne noire. Cela n'était pas très encourageant non plus en termes d'efficacité obtenu, qui n'a pas dépassé les 3% (Fig. III.6.a). Ces résultats sont en très bon accord avec ceux obtenu par d'autres chercheurs [142]. De ce fait, dans l'intérêt de booster ce paramètre, l'intégration d'un concentrateur optique était la solution proposée, cette issue a permis l'amplification du rayonnement transmis par le système photovoltaïque. Par conséquent la température T_h a connu une augmentation significative (Fig. III.6.a) et qui a eu un impact positif sur l'efficacité globale du module dont le rendement s'est amélioré considérablement, atteignant une valeur d'environ

16% pour une irradiation de 1000 W/m^2 sous un coefficient de concentration égale à 100 (**Fig. III.6.a**), sachant que dans une telle configuration la partie inférieure du générateur thermoélectrique est maintenu sur une température de 27°C . D'autre part, l'épaisseur de ce dispositif est un facteur intervenant en faveur de l'augmentation de la différence de température entre ces plaques chaudes et froides, puisqu'une augmentation de la distance entre ces plaques devrait ralentir le transfert de flux de chaleur vers la plaque froide (**Fig. III.7**).

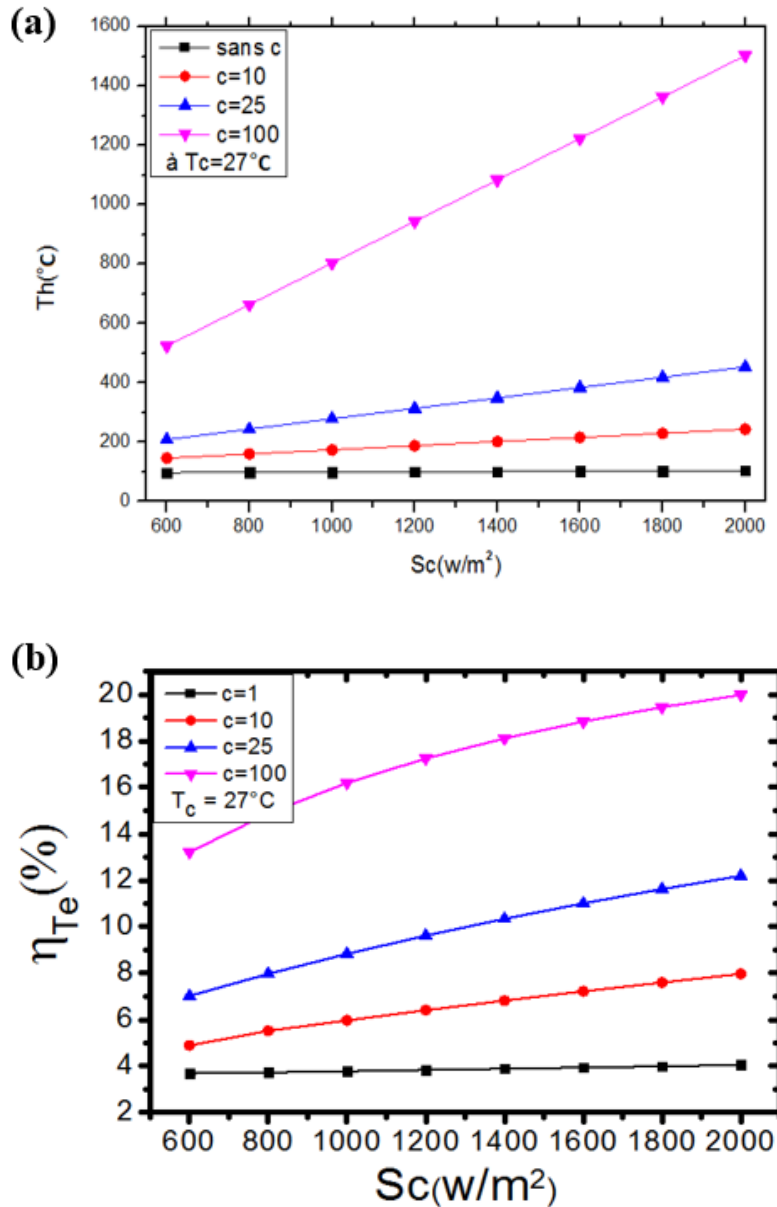


Figure III.6 : Effet de la concentration optique sur la température du côté chaud (a) et le rendement du générateur thermoélectrique (b).

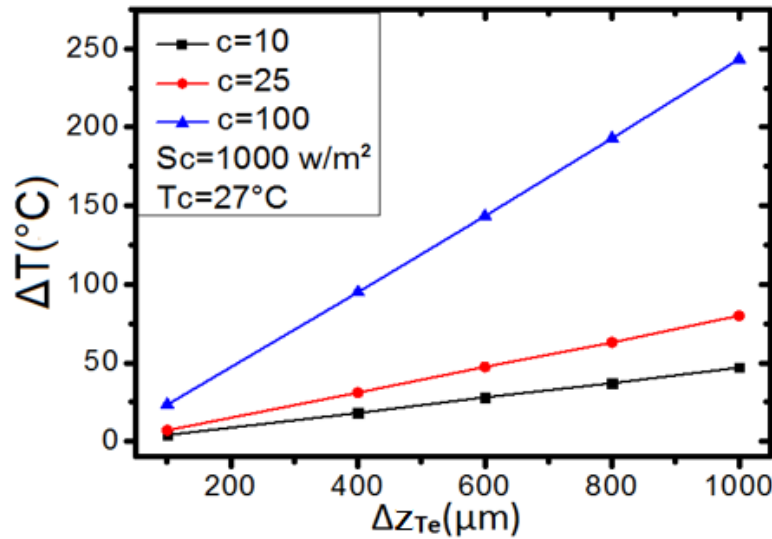


Figure III.7 : Effet de l'épaisseur du module thermoélectrique sur la différence de température (ΔT).

Le concept du dispositif hybride PV-TE développé, a pour but de produire de l'énergie électrique à partir du rayonnement solaire incident tout en exploitant les pertes reconnues par le photovoltaïque. Résultat de la transmission et de la thermalisation, ces pertes ont causé à la fois une dégradation de l'efficacité du système photovoltaïque à cause d'une exploitation très réduite du rayonnement solaire (conversion des rayonnements correspondant aux faibles longueurs d'onde seulement) et l'augmentation de la température de ces cellules imposant ainsi un refroidissement coûteux en terme d'énergie lors de l'utilisation de la ventilation. Cela dit que la combinaison entre les deux systèmes de conversion photovoltaïque et thermoélectrique doit remédier à ces inconvénients, et cela passe par un choix primordial de la manière de coupler ces deux technologies. En effet, L'étude des deux modèles présentés correspondants aux couplages directs et indirects a fini par donner des résultats opposés. D'après la figure (III.8), le système hybride à couplage direct est dépassé largement en termes d'efficacité par le système photovoltaïque seul. Sachant le rendement global du système hybride PV-TE est une somme du rendement de chaque composant selon l'équation (III.20).

$$\eta_{hyb} = \eta_{PV} + \eta_{TE} \quad (III.20)$$

Tandis que le couplage indirect, a permis une croissance du rendement globale du système hybride PV-TE par rapport au système photovoltaïque seul comme illustré sur la figure (III.9)

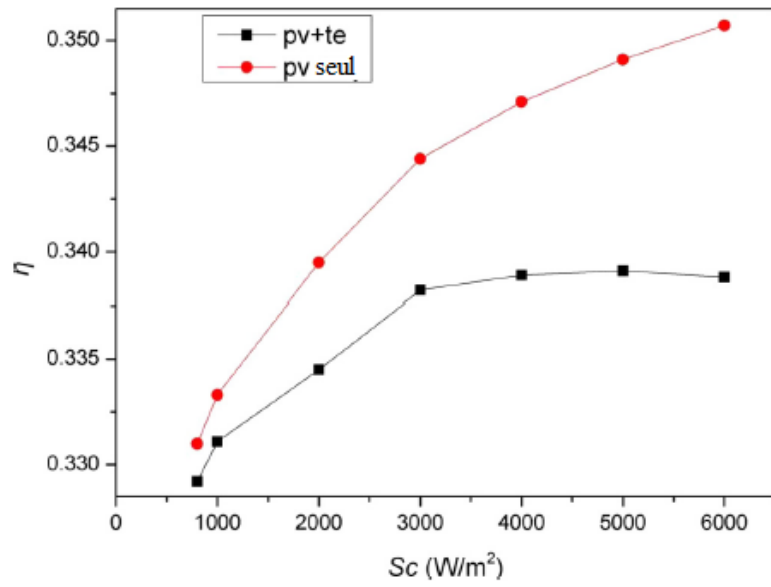
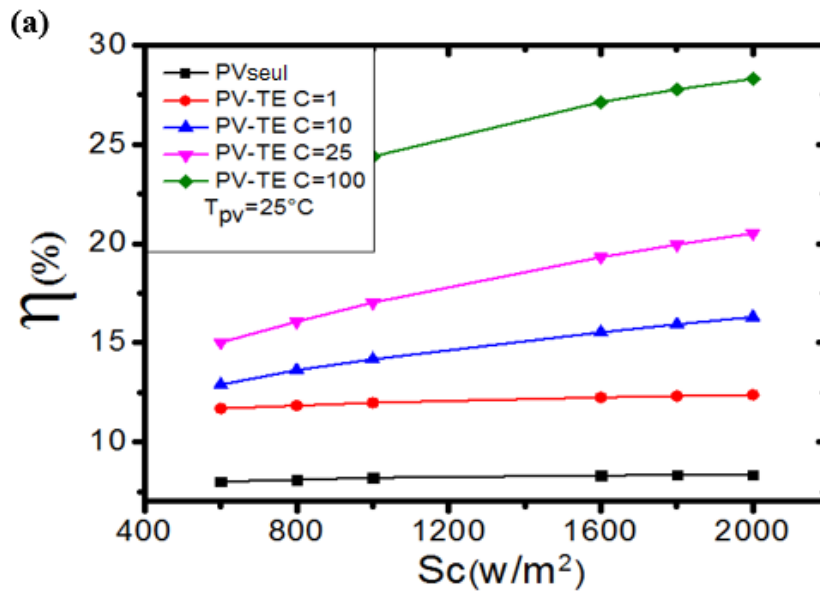


Figure III.8 : Comparaison entre l'efficacité du dispositif PV et le système hybride PV-TE a couplage direct [131]



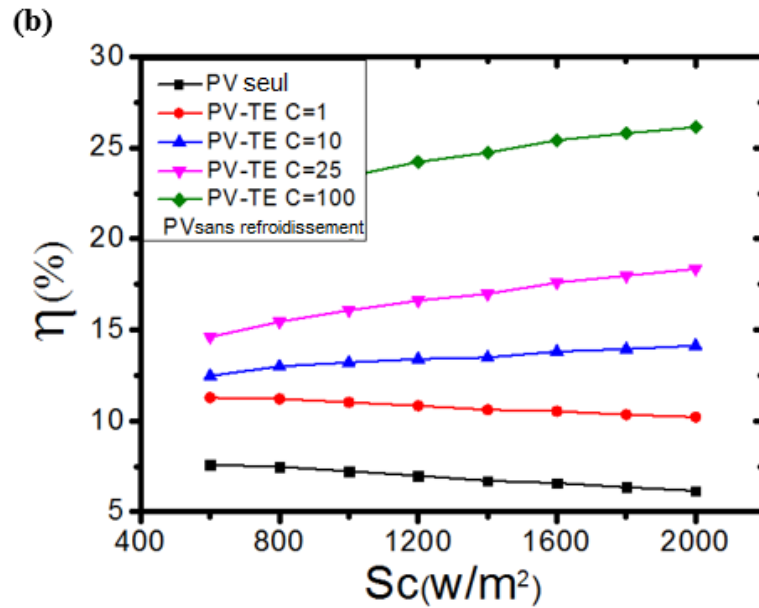


Figure III.9 : Comparaison entre l'efficacité du dispositif PV et le système hybride PV-TE à couplage indirect avec et sans refroidissement.

Ces résultats sont opposés pour les raisons suivantes. Comme illustré sur la figure (III.3), La surface du générateur thermoélectrique est composée d'une couche de céramique reconnue par sa capacité d'emmagasiner la chaleur, ce qui entraîne en cas d'un contact avec une autre surface une augmentation de sa température. Autrement dit, le contact entre cette surface de thermoélectrique et celle du système photovoltaïque suite à un couplage direct causera systématiquement une augmentation de la température des cellules photovoltaïques, puisque ces dernières vont se retrouver en équilibre thermique avec cette surface au lieu d'évacuer cette chaleur. Par conséquent, l'efficacité de tout le système hybride PV-TE sera réduite et affaiblie par rapport au système photovoltaïque seul. De plus, suite à l'analyse de quelques travaux réalisés auparavant, il ressort que la combinaison directe entre les deux systèmes (photovoltaïque et thermoélectrique) avait pour objectif principal le refroidissement des cellules photovoltaïques à travers la dissipation de chaleur sans avoir recours à un système de refroidissement actif ou passif à partir de l'utilisation du module thermoélectrique comme Peltier au lieu d'un générateur. Ceci a d'ailleurs démontré [131], que les cellules photovoltaïques subissent un échauffement excessif au lieu d'être refroidies. De plus, cette conception n'assure pas la conversion totale des irradiances transmises considérées comme la plus grande partie perdue du rayonnement solaire.

Cette analyse a permis d'opter finalement à une connexion indirecte entre ces deux dispositifs. L'objectif de cette dissociation est de réduire l'effet de la surface de céramique sur le photovoltaïque et de procurer davantage de puissances en tenant compte de l'effet Seebeck du module thermoélectrique au lieu de l'effet Peltier. Les résultats obtenus ont prouvé l'avantage de ce couplage en termes de rendement, qui dépasse à la fois le système photovoltaïque seul et le système hybride PV-TE à couplage direct (Fig.III.9).

Le facteur de refroidissement joue un rôle très important dans le fonctionnement optimal du système hybride PV-TE à couplage indirect. Comme on peut le remarquer sur la figure (III.9), le maintien de la cellule photovoltaïque sur une température de fonctionnement optimal (25°C) joue en faveur de la performance globale du système hybride PV-TE. Cela dit qu'un dispositif de refroidissement doit être associé au système hybride pour une telle performance, et c'est ce qui va faire l'objet d'étude au niveau du chapitre suivant.

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principaux modèles proposés pour le système hybride PV-TE dédiés à l'énergie solaire dans un contexte d'optimisation de puissance à travers la réduction et l'exploitation des pertes photovoltaïque. A travers ces modèles, nous avons décrit et étudié les différentes associations possibles entre le système photovoltaïque et thermoélectrique, à savoir les couplages direct et indirect dans l'intérêt de maximiser l'exploitation de l'énergie solaire.

L'approbation du couplage adéquat est passée par des calculs de transfert thermique, d'après cette étude, il s'avère que le couplage indirect améliore considérablement le rendement global, contrairement au couplage direct qui affecte le fonctionnement optimal de chaque composant du système hybride PV-TE. Dans le même contexte on a pu conclure que le système de refroidissement est indispensable pour le bon fonctionnement de tous les dispositifs hybrides que ce soit du côté de maintien des cellules photovoltaïques sur une valeur de fonctionnement optimal ou du côté d'optimisation du rendement du thermoélectrique. De ce fait le chapitre dernier sera réservé à la validation d'un système de refroidissement actif qui sera associé au système hybride PV-TE avec une intégration d'un concentrateur à la fois pour le photovoltaïque et pour le thermoélectrique dans l'intérêt d'amplifier le rayonnement incident, cela dit une étude de faisabilité d'un système hybride CPV-CTE à refroidissement.

CHAPITRE IV

ETUDE D'INTEGRATION D'UN
SYSTEME DE REFROIDISSEMENT

IV.1. Introduction

L'énergie solaire photovoltaïque est l'une des énergies renouvelables les plus prometteuses ; elle présente l'avantage d'être propre et inépuisable. Cependant, le système de conversion photovoltaïque (PV) rencontre plusieurs difficultés s'opposant à son fonctionnement optimal. Mentionné tout au long de ce manuscrit, les pertes par transmission et thermalisation affectent gravement la performance de ce système photovoltaïque. Si la solution apportée au problème de transmission était de proposer l'association d'un générateur thermoélectrique au module photovoltaïque sous forme d'un système hybride PV-TE, la thermalisation quant à elle nécessite un refroidissement. De nombreuses techniques de refroidissement sont proposées dans la littérature, notamment celles utilisant l'eau comme fluide caloporteur [143] ou ont fait circuler cette eau dans un échangeur de chaleur à serpentin selon différentes configurations de ses tubes, ce qui a permis d'améliorer l'efficacité du panneau PV de 10.5 à 17.2%. Pour une meilleure homogénéisation du champ de température dans le panneau PV, [144]. Une autre technique de refroidissement [145], qui améliore l'efficacité de 14.1%, consiste à pulvériser de l'eau, simultanément sur les deux faces du panneau PV [146] ont utilisé une éponge fixée sur la face arrière du panneau PV. Cette éponge qui est continuellement imbibée d'eau a permis d'améliorer l'efficacité de ce panneau de 29.4%. Par ailleurs, un système de ventilation [147] est utilisé pour atténuer l'effet négatif du réchauffement des cellules photovoltaïques. Tenant compte de ce qui précède, le système hybride PV-TE à couplage indirect validé précédemment (chapitre III) nécessite un refroidissement adapté à sa configuration, permettant ainsi de refroidir à la fois le panneau photovoltaïque et la surface inférieure du thermoélectrique pour une efficacité optimale du dispositif hybride PV-TE même sous concentration

De ce fait, le présent chapitre fera l'objet d'une étude analytique d'un modèle de refroidissement à base de fluide caloporteur. Pour ce faire, on représente d'abord le schéma du système de refroidissement proposé en parallèle avec la description d'intégration des concentrateurs optiques dans le système hybride PV-TE, avant de déterminer par la résolution des équations de transfert de chaleur et de mouvement, la distribution du champ de température dans les surfaces concernées, sachant que la complexité de ces équations mises en jeu impose quelques hypothèses simplificatrices pour la résolution. Nous permettant ainsi de démontrer l'effet de l'intégration d'un tel système de refroidissement au sein du dispositif hybride à concentration CPV-CTE.

IV.2. Intégration d'un système de refroidissement active au sein du CPV-CTE

IV.2.1. Position du problème et intérêt d'intégration

Le système hybride PV-TE validé et approuvé précédemment a permis de surmonter certaines obstacles opérer au niveau du fonctionnement du système photovoltaïque seul. Mais cela n'empêche que le rendement reste à améliorer. Parmi les manœuvres proposés, nous pouvons associer un concentrateur optique au système photovoltaïque semblablement au

générateur thermoélectrique, de sorte à avoir un système hybride à concentration CPV-CTE. On peut très bien se demander quelle est l'utilité d'ajouter un système optique devant notre surface photovoltaïque sachant que son efficacité de transmission ne sera pas optimale. La première raison est d'abord d'un point de vue technique. L'utilisation de concentrateurs optiques tels que les antennes paraboliques et les lentilles pour concentrer la lumière solaire sur les cellules photovoltaïque permettent d'augmenter l'intensité de l'irradiation incidente et acquérir plus de puissance par unité de surface de cellule photovoltaïque. D'un point de vue économique, l'élément photovoltaïque est la composante la plus dispendieuse du système hybride PV-TE. L'avantage du concentrateur est la possibilité d'utiliser des cellules ayant une plus grande efficacité. Les panneaux solaires traditionnels utilisent souvent des cellules de silicium amorphe dont l'efficacité est autour de 15-16% afin que le système demeure abordable [148]. Les systèmes de haute concentration ($\geq 100x$) peuvent plutôt utiliser des cellules multi jonctions ayant une efficacité au-delà de 40% mais qui coûtent très cher [149]. En utilisant un système de moyenne concentration, on peut tout de même utiliser des cellules de silicium monocristallin ayant une efficacité d'environ 23%. [150] C'est mieux que les cellules fait de silicium amorphe et c'est beaucoup moins cher que les cellules multifonctions.

Cette manœuvre a beau être une bonne alternative pour booster la performance des panneaux photovoltaïques, mais en contrepartie elle génère d'autre problématique qui se résume dans l'amplification d'effet de thermalisation et systématiquement l'élévation de la température de ces cellules. Autrement dit, le fonctionnement optimal du système hybride à concentration CPV-CTE, passe par le maintien des cellules photovoltaïques et la face inférieure du générateur thermoélectrique sur une température adéquate (autour de 25°C). D'où vient la nécessité d'un refroidissement permanent de ce dispositif. Or, la solution principale apportée à ce problème, était l'utilisation d'un système de refroidissement passive basé sur la ventilation, dont la consommation d'énergie est relativement importante, et non productive, réduisant ainsi la performance de tout le système hybride [147]. Tenant compte de tout ça, nous avons proposé un système de refroidissement actif, efficace et productif, basé sur la circulation d'un fluide caloporteur. Cependant, la nature du fluide caloporteur utilisé reste à arbitrer. Par exemple, l'eau souvent utilisé dans le refroidissement, demeure un faible moyen sous effet de concentration élevé sauf si sa température est moins de 27°C. Cela est peu probable sans un changement de son état liquide au solide, ce qui entrainera un défaut de débit et d'écoulement.

De ce fait, l'alternative proposée pour surmonter cet obstacle consiste à utiliser d'autre type de fluide caloporteur, dont les propriétés de refroidissement à une température de 27 ° C sont plutôt meilleures. Parmi les choix prometteurs trois possibilités sont intéressantes. Tout d'abord, nous avons l'azote qui a la capacité de conserver son état liquide à de très basses températures, mais qui demeure une alternative très couteuse. Ensuite, on a les Nano-fluides dont une suspension de particules de taille nanométrique dispersée dans un liquide de base (eau), et qui ont la qualité d'améliorer les propriétés thermique de ce liquide. Alors que la dernière possibilité est l'huile de synthèse, connue par son utilisation dans les centrales cylindro-parabolique pour des fins d'absorption de rayonnement concentré sur son tube receveur [151].

Bien que chacun de ces propositions à ces avantages et ces inconvénients (**Tab. IV.1**), les Nano-fluides reste les meilleurs candidats pour remplacer le fluide conventionnel, et cela

découle de leur capacité à intensifier les transferts convectifs tout en gardant le même état liquide avec un cout raisonnable.

Fluides et Nano-Fluides	Avantages	Inconvénients
Eau	<ul style="list-style-type: none"> -Meilleur écoulement -Faible viscosité -Disponibilité -Bas cout 	<ul style="list-style-type: none"> - faible refroidisseur à des concentrations élevées de rayonnement. - L'état du fluide change du liquide au solide sous faible température
Azote liquide	<ul style="list-style-type: none"> - Meilleur écoulement - Faible viscosité - Il conserve son état liquide même à moins de 25 ° C - bon refroidisseur même à des concentrations élevées de rayonnement. 	<ul style="list-style-type: none"> -Couteux -Faible disponibilité
Nano-fluides à base de (Cu, Al, Fer)	<ul style="list-style-type: none"> - Meilleur écoulement - Faible viscosité (sous 10% de Nanoparticules) - Bas cout (comparer à l'azote) - bon refroidisseur même à des concentrations élevées de rayonnement. 	<ul style="list-style-type: none"> -Faible disponibilité (à créer)

Table IV.1 : Avantages et Inconvénients de chaque proposition de fluide de refroidissement.

L'idée d'améliorer les propriétés thermiques des fluides par l'adjonction des particules n'est pas nouvelle, mais l'utilisation de particules de taille nanométrique permet potentiellement de minimiser considérablement les problèmes d'érosion et de sédimentation rencontrés avec les particules de taille plus élevée. De plus, certains auteurs ont mis en avant des performances thermiques améliorées en conductivité thermique et en échange thermique liquide et liquide/vapeur dues à la taille nanométrique.

IV.2.2. Modèles théorique et comportement thermique des Nano-fluides

L'utilisation des Nano-fluides suscite un grand intérêt depuis la découverte de leurs propriétés thermiques particulières [152-154]. Dans le cas des fluides caloporteurs, l'un des

premiers paramètres à prendre en compte afin d'évaluer le potentiel d'échange de chaleur est la conductivité thermique [155]. En effet, les fluides de base souvent utilisés dans les applications de refroidissement ou de chauffage ont des conductivités thermiques très faibles qui limitent leur capacité de transfert de chaleur. L'idée est alors d'insérer au sein des liquides de base des Nanoparticules de conductivité très élevée, afin d'augmenter la conductivité thermique effective du mélange et ainsi améliorer ces performances thermiques. Ces Nanoparticules dont le diamètre est typiquement inférieur à 100 nm peuvent être classées selon leur forme en deux grandes catégories :

- Les nanoparticules sphériques : pour lesquelles plusieurs types de matériaux peuvent être utilisés pour leur fabrication. Par exemple les métaux (l'aluminium (Al), cuivre (Cu), fer (Fe), or (Au), argent (Ag)...) et les oxydes (oxyde d'aluminium (Al₂O₃), oxyde de cuivre (CuO), oxyde de titane (TiO₂)...)
- Les nanotubes (les nanotubes de carbone NTC, les nanotubes de titane et les Nanotube de silicium).

Les domaines d'applications des Nano-fluides restent vastes que ce soit pour un éventuel refroidissement ou réchauffement. A titre d'exemple, le refroidissement des systèmes thermiques (moteur des véhicules...), des systèmes électroniques (unité centrale d'un microordinateur), sûreté neutronique dans le domaine nucléaire, traitement du cancer dans la biomédecine et même le refroidissement des armes d'énergie dirigée dans le domaine militaire. Malgré cette réputation, le comportement thermique des Nano-fluides reste difficile à prévoir ce qui a entraîné une incohérence entre plusieurs modèles analytiques destinés au calcul des diverses propriétés physiques des matériaux hétérogènes comme la conductivité thermique et électrique, la permittivité diélectrique, viscosité dynamique, chaleur spécifique...

Bien que ces propriétés physiques soient différentes, elles ont des caractéristiques communes gouvernées par des lois similaires [156]. Dans notre cas de figure on s'intéresse plutôt à deux de ces paramètres pour répondre au besoin d'amplifier le comportement thermique du fluide caloporteur, à savoir la conductivité thermique et la viscosité dynamique. La première caractérise la capacité de conduire ou de transmettre la chaleur et la seconde définit l'aptitude d'un fluide à s'écouler.

Les modèles théoriques destinés au calcul et à l'estimation de ces propriétés reconnaissent un désaccord surtout au niveau des paramètres pris en compte. Par exemple pour le calcul de la conductivité thermique, il existe trois modèles ; celui de Maxwell, Hamilton & Crosser et celui de Chon.

IV.2.2.1. Modèle de Maxwell

Maxwell en 1873 fut le premier à dériver un modèle [157] pour estimer la conductivité thermique d'une suspension contenant des particules dont la représentation est la suivante (Eq. IV.1) :

$$K_{nf} = \left(\frac{K_p + 2K_{bf} - 2\phi(K_{bf} - K_p)}{K_p + 2K_{bf} + \phi(K_{bf} - K_p)} \right) K_{bf} \quad (IV.1)$$

Avec : K_{nf} , K_{bf} , K_p , ϕ , représentent respectivement la conductivité thermique du Nano-fluide (le mélange), du fluide de base, des Nanoparticules, et la fraction volumique des Nanoparticules. Le modèle de Maxwell est satisfaisant pour les suspensions contenant des particules sphériques de concentrations volumiques relativement faibles mais ne tient pas compte de l'effet de la taille des particules ni l'effet des interactions inter-particules.

IV.2.2.2. Modèle de Hamilton & Crosser

Le modèle de Hamilton- Crosser [158] est une extension du model de Maxwell, qui tient compte de la forme des particules. En effet, pour prendre en compte la non-sphéricité des particules, ce modèle intègre un facteur géométrique appelé sphéricité, note Ψ , faisant référence à la géométrie sphérique. De ce fait la conductivité thermique est représentée comme suite :

$$K_{nf} = \left(\frac{K_p + (n-1)K_{bf} - (n-1)(K_{bf} - K_p)\phi}{K_p + (n-1)K_{bf} + \phi(K_{bf} - K_p)} \right) K_{bf} \quad (IV.2)$$

Avec n un facteur de forme empirique donné par $n = \frac{3}{\Psi}$,

$\Psi = 1$ pour les nanoparticules de forme sphérique,

$\Psi = 0.5$ de forme cylindrique,

A noté que ce modèle peut être utilisé lorsque la conductivité thermique des particules est au moins 100 fois plus élevée que celle du fluide de base

IV.2.2.3. Modèle de Chon

Contrairement aux modèles cités précédemment, le modèle de Chon [159] incorpore l'effet de la température, de la taille des particules, de la fraction volumique, des propriétés physico-chimiques du fluide caloporteur et du mouvement brownien. Ce mouvement est une description mathématique des déplacements aléatoires des nanoparticules au sein du liquide de base, il est causé par les collisions avec les molécules du liquide qui se déplacent dans toutes les directions sous l'effet de l'excitation thermique. La conductivité thermique du mélange est ainsi calculer à partir de la relation suivante (Eq IV.3) :

$$K_{nf} = K_{bf} \left(1 + 64.7\phi^{0.746} \left(\frac{d_{bf}}{d_p} \right)^{0.369} \left(\frac{K_p}{K_{bf}} \right)^{0.7476} Pr_{bf}^{0.9955} Re^{1.2321} \right) \quad (IV.3)$$

Avec Pr et Re représentent respectivement le nombre de Prandtl du fluide caloporteur le nombre de Reynolds.

Ces modèles ce joint à une conclusion commun qui se résume dans le fait que la conductivité thermique augmente sous l'effet de la concentration des particules (fraction volumique) dans le mélange (**Fig. IV.1**)

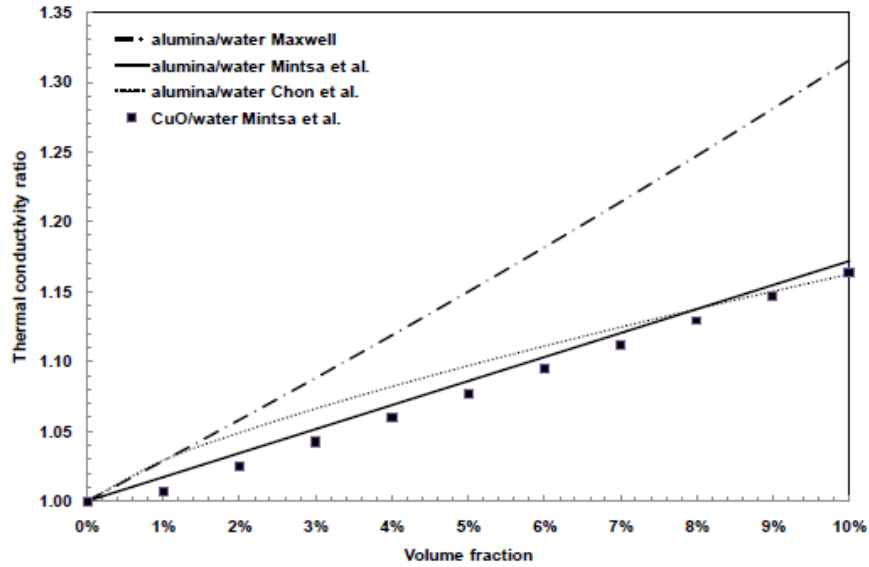


Figure IV.1 : Influence de la fraction volumique ϕ sur la conductivité thermique du Nano-fluide à base d'eau selon les différents modèles théorique. [152]

Bien que l'adjonction des nanoparticules permettent d'améliorer la conductivité thermique du Nano-fluide. Elle peut conduire en même temps à une augmentation défavorable de la viscosité dynamique dont la connaissance est fondamentale pour toutes les applications impliquant le transport de fluide. Ainsi, ces deux propriétés sont étroitement corrélées, et doivent être maîtrisées. De nombreuses études théoriques et expérimentales ont été menées afin d'estimer ou de mesurer la viscosité dynamique des Nano-fluides et de quantifier l'importance des principaux paramètres qui l'influencent. Semblablement à la conductivité thermique, plusieurs modèles théoriques ont été développés pour prédire l'évolution de la viscosité dynamique des suspensions sous certaines conditions.

D'une manière générale, les formules existantes dérivent du travail fondamental d'Einstein (1906). Base sur l'hypothèse que l'énergie a une dépendance linéaire avec la viscosité, Einstein a déterminé l'énergie dissipée autour d'une seule particule dans un fluide en associant son énergie au travail réaliser pour la faire avancer relativement au fluide.

IV.2.2.4. Modèle de Stokes- Einstein

Einstein a étudié la viscosité dynamique d'un Nano-fluide pour un mélange contenant des suspensions diluées de particule fine, sphérique. L'expression qui caractérise ce modèle est la suivante :

$$\frac{\mu_{nf}}{\mu_{bf}} = 1 + 2.5\phi \quad (IV.4)$$

IV.2.2.5. Modèle de Brinkman

Pour le modèle de Brinkman [160], la viscosité dynamique est définie par l'expression suivante :

$$\frac{\mu_{nf}}{\mu_{bf}} = \frac{1}{(1-\phi)^{\frac{5}{2}}} \quad (IV.5)$$

Avec μ_{nf} , μ_{bf} et ϕ désignent respectivement les viscosités dynamique du Nano-fluide, du fluide de base et la fraction volumique des Nanoparticules.

Cette relation décrit une évolution non linéaire de la viscosité dynamique avec la concentration volumique mais ne tient pas compte de la collision entre les particules. En effet, l'écoulement autour de chaque particule est influencé par la présence éventuelle d'autres particules aux proximités et par les collisions entre elles. En plus de ces influences, l'effet de la taille des Nanoparticules était également étudié [161], sauf que les résultats obtenus ont montré qu'à fraction volumique égale, l'augmentation de la viscosité dépend très peu de la taille des Nanoparticules émerger [1159].

Tenant compte de ce qui précède, ces études ainsi que ces modèles ont montré que la concentration et la taille des Nanoparticules sont des paramètres clés gouvernant le comportement de la conductivité thermique effective et la viscosité des Nano-fluides. En effet, une augmentation de la concentration des Nanoparticules entraîne une augmentation de la conductivité thermique. En revanche, aucun modèle jusqu'à présent ne décrit convenablement les propriétés thermiques de ces Nano-fluides. Si les modèles utilisés sont tout à fait adaptés aux composites dont la taille des particules est supérieure au micromètre, il n'est pas certain qu'ils soient valables pour des particules de taille nanométrique. Par ailleurs, la viscosité des Nano-fluides, telle que simulés par les modèles de type Stokes- Einstein ou Brinkman, ont montré que ce type de modèle n'est valable que pour des poudres métalliques et pour des concentrations très faibles. L'ajout des Nanoparticules dans un liquide provoque une augmentation, plus ou moins importante de la viscosité du mélange. Là encore, de nombreux facteurs peuvent être à l'origine des disparités constatées. De ce fait, ces modèles doivent prendre en considération les phénomènes physiques, jusqu'à présent absents dans leur études, pouvant prendre place à l'échelle de la Nanoparticule afin d'expliquer d'une part l'amélioration du transfert de chaleur constatée (augmentation de la conductivité thermique) à l'usage des Nano-fluides, et de cerner l'augmentation de la viscosité pour éviter tout écoulement turbulent. Par conséquent, suite à l'incohérence entre ces modèles analytiques, l'étude d'intégration du système de refroidissement au sein du système hybride CPV-CTE, nous oblige à choisir l'un de ces modèles afin de concrétiser notre étude même si cela pourra avoir un impact sur certains résultats qui seront plus au moins approximative.

IV.2.3. Structure géométrique du modèle proposé

La conception représenté au niveau de la figure (IV.2) est complémentaire de celui validé au chapitre III dont le couplage indirect est pris en compte, suite à son efficacité significative par rapport au coulage direct [162]. N'empêche que cette phase de refroidissement joue un rôle important pour le fonctionnement optimal du dispositif en entier, De se faite, la figure (IV.2) illustre chaque partie du dispositif hybride avec ces nouveaux éléments intégrés. Ainsi, le modèle se divise de haut en bas en deux parties. La première est composée d'un concentrateur optique qui vise à concentrer l'irradiation solaire incidente sur les panneaux photovoltaïques, la vitre de protection, le sous-système photovoltaïque et le système de refroidissement à base de fluides caloporteur (eau ou Nano-fluides). Ce dernier est déployé du côté des panneaux PV, au lieu de la surface arrière afin d'éviter l'absorption des rayonnements transmise destinée au générateur thermoélectrique à concentration (CTE), ce qui pourrait affecter son fonctionnement optimal. La seconde partie commence par un second concentrateur intégré entre les sous-systèmes photovoltaïque et thermoélectrique afin de concentrer les irradiations transmises, canal de circulation du fluide caloporteur chaud, module thermoélectrique et un second canal réserver à la circulation du fluide caloporteur froid. Les fluides caloporteurs chauds et froids suivent le même sens d'écoulement. Il convient de noter que les canaux sont associés à une isolation similaire à celle entourant le CTE.

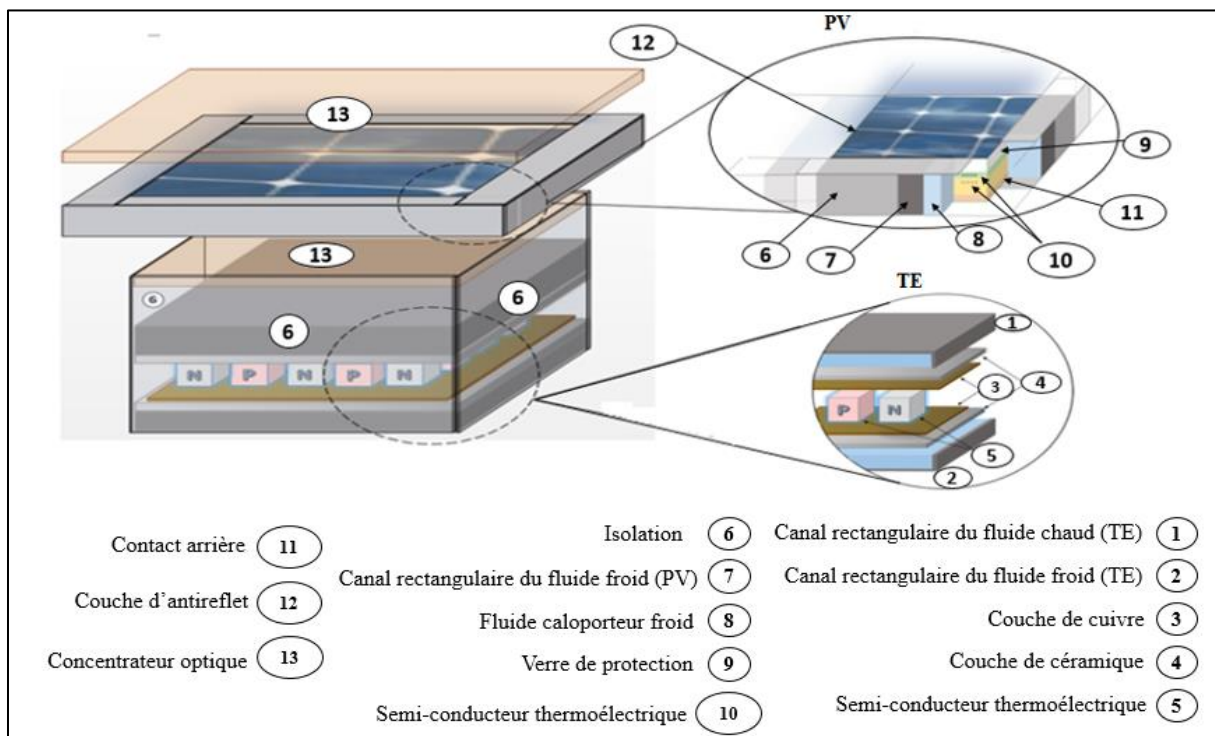


Figure IV.2. Illustration en 3D de système hybride à concentration (CPV-CTE) intégrant le système de refroidissement et de réchauffement

IV.2.4. Equations associées au système hybride CPV-CTE refroidi

IV.2.4.1. Modèle thermique et distribution de température

Afin de montrer l'impact de l'intégration du système de refroidissement et du réchauffement sur le dispositif hybride CPV-CTE. Un calcul de transfert thermique permettant d'analyser l'évolution de la température et de l'efficacité des deux sous-systèmes CPV et CTE sous l'effet de cette intégration est effectué. Puisque cette étude est une extension de celle réalisée pour le choix du couplage (chapitre III), elle suit la même voie et les mêmes conditions. Le calcul est ainsi effectué à l'état stationnaire avec une distribution de température considérée comme homogène et un transfert de flux de chaleur suivant l'axe z.

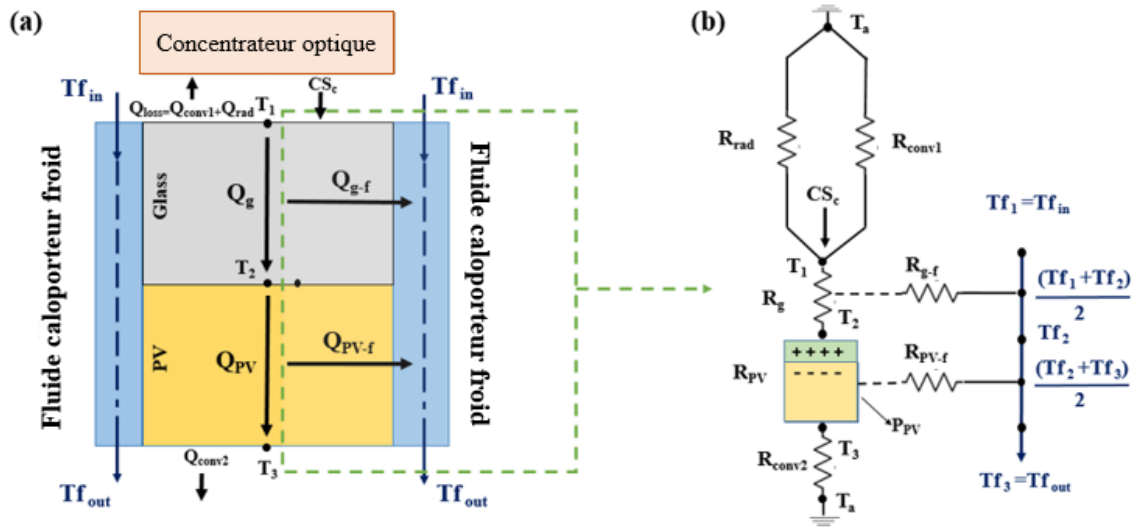


Figure IV.3. Représentation schématique du modèle mathématique du CPV sous refroidissement : (a) transfert de chaleur et distribution de la température, (b) circuit thermique pour partie symétrique en couleur vert.

Le CPV représenté dans le modèle mathématique de la Figure IV.3 fera l'objet de cette étude par symétrie puisque le fluide caloporteur de refroidissement circule dans des canaux collé aux parois du CPV. Ainsi, les résultats seront les mêmes pour les quatre côtés. Comme le montre la figure IV.3b. Il y'a sept résistances thermiques : R_{conv1} , R_{rad} , R_g , R_{g-f} , R_{pv} , R_{pv-f} et R_{conv2} représentant respectivement : les résistances thermiques de la convection et du rayonnement entre la surface CPV et l'ambient, entre la couche de verre de protection et le CPV, entre la couche de verre de protection et le nano-fluide, la résistance thermique du CPV, entre le CPV et le nano-fluide, et enfin, la résistance thermique entre le face arrière du CPV et l'ambient.

Ces résistances thermiques sont extraites à partir des équations suivantes (Eqs. Eqs. (IV.6) à (IV.9)) :

$$R_{conv1} = \frac{1}{Ah_1}; \quad R_{conv2} = \frac{1}{Ah_2} \quad (IV.6) [163]$$

$$R_{rad} = \frac{1}{A\epsilon\sigma(T_1^2 + T_a^2)(T_1 + T_a)} \quad (IV.7) [164]$$

$$R_g = \frac{\Delta z_g}{K_g A} \quad ; \quad R_{PV} = \frac{\Delta z_{PV}}{K_{PV} A} \quad (IV.8) \quad [165]$$

$$R_{g-f} = \frac{1}{A_1 h_f} \quad ; \quad R_{PV-f} = \frac{1}{A_1 h_f} \quad (IV.9)$$

A partir du flux thermique transféré dans le CPV (**Fig.IV.3a**), à savoir $Q_g, Q_{g-f}, Q_{PV}, Q_{PV-f}, Q_{conv1}, Q_{conv2}$ représentant respectivement : la chaleur transférée à travers le verre de protection, entre le verre et le nano-fluide de refroidissement, à travers le CPV, entre le CPV et le Nano-fluide de refroidissement, entre la face supérieure du verre et la température ambiante, et entre le côté inférieur du CPV et la température ambiante. Et en appliquant la première loi de la thermodynamique, trois équations algébriques sont extraites (Eqs. (IV.10) - (IV.12)) et posées de la manière suivante :

$$ACS_c - \rho ACS_c - (Q_{Loss}) - Q_g - Q_{g-f} = 0, \quad (IV.10)$$

$$Q_g - Q_{PV} - Q_{PV-f} - P_{CPV} = 0, \quad (IV.11)$$

$$Q_{PV} - Q_{conv2} = 0, \quad (IV.12)$$

Avec :

$$Q_{Loss} = Q_{conv1} + Q_{rad} = \frac{T_g - T_a}{R_{Loss}}, \quad (IV.13)$$

Sachant que cette Q_{Loss} , représente la somme des pertes par convection et rayonnement que subit la surface du CPV ajouter également au perte par réflexion représentée par le terme ρACS_c au niveau de l'équation (IV.10) ou ρ, A, S_c et C sont la réflectivité du verre de protection, surface du CPV, l'irradiation solaire et le coefficient de concentration, respectivement. Ainsi la résistance thermique des pertes peut s'écrire sous cette forme (Eq. IV.14)

$$R_{Loss} = R_{conv1} // R_{rad} = \frac{1}{\frac{1}{R_{conv1}} + \frac{1}{R_{rad}}} \quad (IV.14)$$

De plus, les flux de chaleur sont représentés comme suite :

$$Q_g = \frac{T_1 - T_2}{R_g}, \quad (IV.15)$$

$$Q_{g-f} = \frac{\frac{T_1 + T_2}{2} - \frac{T_{f1} + T_{f2}}{2}}{R_{g-f}}, \quad Q_{PV-f} = \frac{\frac{T_2 + T_3}{2} - \frac{T_{f2} + T_{f3}}{2}}{R_{PV-f}}, \quad (IV.16)$$

$$Q_{PV} = \frac{T_2 - T_3}{R_{PV}}, \quad (IV.17)$$

$$Q_{conv2} = \frac{T_3 - T_a}{R_{conv2}}, \quad (IV.18)$$

De ce fait, à partir de ce qui précède les équations (IV.10 – IV.12) sont développées comme suite (Eqs. (IV.10 a) - (IV.12 a)) :

$$ACS_c - \rho ACS_c - A\varepsilon\sigma(T_1^4 - T_a^4) - Ah_1(T_1 - T_a) - \frac{K_g A}{\Delta z_g}(T_1 - T_2) - A_1 h_f \left(\frac{T_1 + T_2}{2} - \frac{T_{f1} + T_{f2}}{2} \right) = 0, \quad (IV.10a)$$

$$\frac{K_g A}{\Delta z_g}(T_1 - T_2) - \frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}}(T_2 - T_3) - A_1 h_f \left(\frac{T_2 + T_3}{2} - \frac{T_{f2} + T_{f3}}{2} \right) - P_{CPV} = 0, \quad (IV.11a)$$

$$\frac{K_{PV} A}{\Delta z_{PV}}(T_2 - T_3) - Ah_2(T_3 - T_a) = 0, \quad (IV.12a)$$

A noté que les équations (IV.16) correspondantes aux Q_{g-f} et Q_{PV-f} sont valables en cas du fluide statique, mais pour un fluide en écoulement (dynamique), ces termes sont remplacés par les équations ci-dessous (Eqs. IV.19, IV.20).

$$Q_{g-f} = A_1 h_f \left(\frac{T_1 + T_2}{2} - \frac{T_{f1} + T_{f2}}{2} \right) = DC_P(T_{f2} - T_{f1}), \quad (IV.19)$$

$$Q_{PV-f} = A_1 h_f \left(\frac{T_2 + T_3}{2} - \frac{T_{f2} + T_{f3}}{2} \right) = DC_P(T_{f3} - T_{f2}), \quad (IV.20)$$

Où : D et C_P sont respectivement le débit volumique de fluide et la chaleur spécifique.

Pour le module thermoélectrique a concentration CTE, conçu pour convertir l'irradiation transmise et générer de l'électricité lorsqu'une différence de température est créée entre ces plaques chaude (supérieure) et froide (inférieure), en fonction de l'effet Seebeck [166]. L'amélioration de ces performances passe respectivement par l'augmentation et la diminution des températures de ces plaques. Cela est atteignable à partir de l'association de ces deux plaques a des canaux de fluide chaud et froid, tel qu'il est représenté dans le modèle mathématique de la **Figure (IV.4)**.

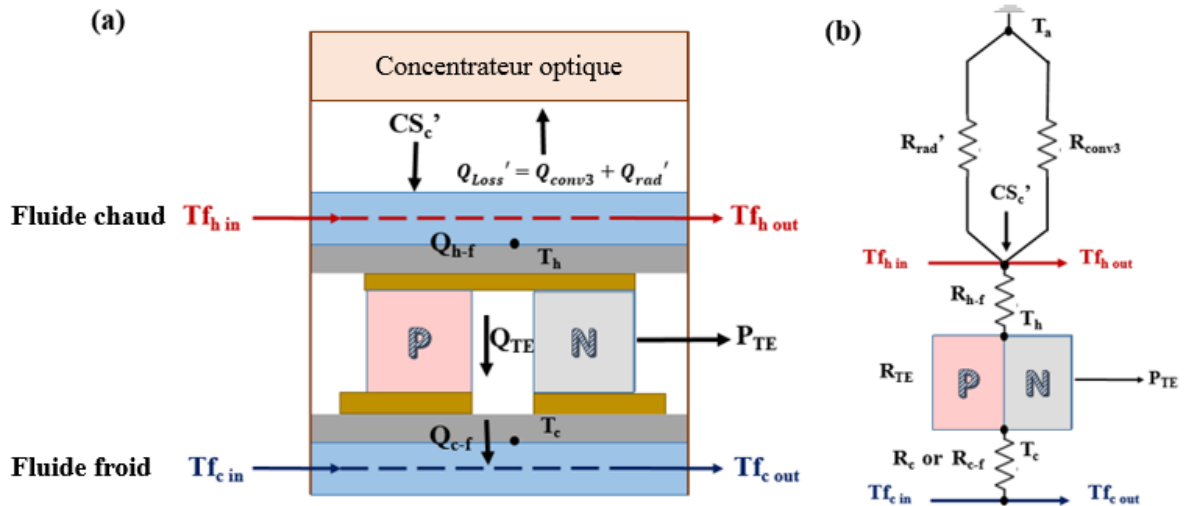


Figure IV.4 : Représentation schématique du modèle mathématique du système CTE sous réchauffement et refroidissement : (a) transfert de chaleur et distribution de la température, (b) circuit thermique.

Les résistances thermiques et les flux de chaleurs indiqués dans les **Figures IV.4a et IV.4b**, sont énumérés ci-dessous comme suit : R_{conv3} , R_{rad}' , R_{TE} , R_{h-f} , R_c , (Eqs. (IV.21)-(IV.25)), représentant respectivement les résistances thermiques : de la convection et du rayonnement entre le fluide caloporteur chaud et la température ambiante, entre ce fluide et la surface supérieure du CTE, à travers le CTE, et finalement entre la plaque inférieure du CTE et l'ambiant.

$$R_{conv3} = \frac{1}{A_2 h_3}, \quad (IV.21)$$

$$R_{rad}' = \frac{1}{A_2 \varepsilon \sigma (T_{fh}^2 + T_a^2) (T_{fh} + T_a)}, \quad (IV.22)$$

$$R_{TE} = \frac{\Delta z_{TE}}{K_{TE} A_2}, \quad (IV.23)$$

$$R_{h-f} = \frac{1}{A_2 h_{fh}}, \quad (IV.24)$$

$$R_c = \frac{1}{A_2 h_4}, \quad (IV.25)$$

Par ailleurs :

Q_{Loss}' , Q_{h-f} , Q_{TE} , Q_c (Eqs. (IV.26)-(IV.30)) désignent : le flux de chaleur perdu au niveau de la surface supérieure du CTE associée au fluide de réchauffement, le flux de chaleur transféré entre le fluide caloporteur chaud et la surface supérieure du CTE, flux transféré à travers le CTE et enfin, le flux de chaleur qui traverse la plaque inférieure du CTE vers l'ambiant.

$$Q_{Loss}' = Q_{conv3} + Q_{rad}' = \frac{T_{fh} - T_a}{R_{Loss}'}, \quad (IV.26)$$

Avec :

$$R_{Loss}' = R_{conv3} // R_{rad}' = \frac{1}{\frac{1}{R_{conv3}} + \frac{1}{R_{rad}'}} \quad (IV.27)$$

Et :

$$Q_{h-f} = \frac{\frac{T_{fh\ in} + T_{fh\ out}}{2} - T_h}{R_{h-f}}, \quad (IV.28)$$

$$Q_{TE} = \frac{T_h - T_c}{R_{TE}}, \quad (IV.29)$$

$$Q_c = \frac{T_c - T_a}{R_c}, \quad (IV.30)$$

À présent, en appliquant la première loi de la thermodynamique, trois équations algébriques sont extraites (Eqs (IV.31) - (IV.32)) :

$$A_2CS'_c - \rho A_2CS'_c - (Q_{Loss}') - Q_{h-f} = 0, \quad (IV.31)$$

$$Q_{h-f} - Q_{TE} - P_{CTE} = 0, \quad (IV.32)$$

$$Q_{TE} - Q_c = 0, \quad (IV.33)$$

Et tenant compte de ce qui précède ils sont développés comme

$$A_2CS'_c - \rho A_2CS'_c - A_2\varepsilon\sigma(T_h^4 + T_a^4) - A_2h_3(Tf_h - T_a) - A_2hf_h \left(\left(\frac{Tf_{hin} + Tf_{hout}}{2} \right) - T_h \right) = 0 \quad (IV.31a)$$

$$A_2hf_h \left(\left(\frac{Tf_{hin} + Tf_{hout}}{2} \right) - T_h \right) - \frac{K_{TE} A_2}{\Delta z_{TE}} (T_h - T_c) - P_{TE} = 0, \quad (IV.32a)$$

$$\frac{K_{TE} A_2}{\Delta z_{TE}} (T_h - T_c) - A_2h_4(T_c - T_a) = 0, \quad (IV.33a)$$

Dans l'équation (IV.31a) les termes correspondants aux pertes par rayonnement $((A_2\varepsilon\sigma(T_h^4 + T_a^4))$ et par convection $(A_2h_3(Tf_h - T_a))$ sont négligés suite à l'isolation conçue autour du système CTE.

Il convient de noter que l'équation (IV.33) n'est valide qu'en cas d'échange de chaleur par convection entre la plaque inférieure du CTE et l'extérieure (ambient) représentée par la résistance thermique R_c et le flux Q_c . Cependant, lors de l'insertion du nano-fluide de refroidissement dans ce côté, le transfert de chaleur se fera entre la plaque inférieure et le nano-fluide froid, dont la résistance thermique est représentée par R_{c-f} et le flux par Q_{c-f} (Eqs. (IV.34) et (IV.35)).

$$R_{c-f} = \frac{1}{A_2hf_c} \quad (IV.34)$$

$$Q_{c-f} = \frac{T_c - \frac{Tf_{cin} + Tf_{cout}}{2}}{R_{h-f}}, \quad (IV.35)$$

Ainsi, l'équation (IV.33a) deviendra sous cette forme :

$$\frac{K_{TE} A_2}{\Delta z_{TE}} (T_h - T_c) - A_2hf_c \left(T_c - \left(\frac{Tf_{cin} + Tf_{cout}}{2} \right) \right) = 0, \quad (IV.33b)$$

Tel que le système CPV, un comportement dynamique du fluide caloporteur circulant au sein des canaux de refroidissement et de réchauffement associé au CTE, entrainera

systématiquement un changement au niveau des équations (IV.28) et (IV.28) poser ci-dessus à travers l'intégration des termes Q_{h-f} , et Q_{c-f} .

$$Q_{h-f} = A_2 h f_h \left(\left(\frac{T_{f_{h\ in}} + T_{f_{h\ out}}}{2} \right) - T_h \right) = D C_P (T_{f_{h\ in}} - T_{f_{h\ out}}) \quad (IV.28a)$$

$$Q_{c-f} = A_2 h f_c \left(T_c - \left(\frac{T_{f_{c\ in}} + T_{f_{c\ out}}}{2} \right) \right) = D C_P (T_{f_{c\ out}} - T_{f_{c\ in}}) \quad (IV.35a)$$

IV.2.4.2. Paramètres de base et méthode de calcul

Pour évaluer la performance et simuler les résultats du système hybride solaire CPV-CTE a refroidissement, nous avons suivi la même procédure de simulation telle qu'elle est détaillé au niveau du chapitre III, tenant compte bien évidemment des nouveaux paramètres régissant de l'intégration du système de refroidissement. De ce fait, la première phase porte sur le calcul des températures des cellules photovoltaïques avec et sans refroidissement à partir de la résolution des équations algébriques (IV.10a) - (IV.12a) de manière itérative, tout en considérant la spécificité du fluide caloporteur et du mode utiliser (eau ou Nano-fluide, statique ou dynamique). Sachant que chaque cas nécessite des modifications spécifiques dans les équations algébriques, permettant ainsi de prendre en compte tous les modes d'utilisation précisés précédemment dans le modèle proposé, par exemple : l'équation (IV.16) correspond à mode statique du fluide caloporteur, mais en cas d'écoulement (mode dynamique), elle est remplacée par les équations (IV.19) et (IV.20). Cependant, la seconde phase est consacrée au calcul des températures du sous-système CTE avec et sans refroidissement, correspondantes respectivement aux T_c et T_h , ces dernières étant calculées à partir des équations ((IV.31a) - (IV.32a)) suivre le même mode itératif et le même spécifié du fluide caloporteur . A noté que les températures de sortie du fluide caloporteur ($T_{f\ out}$, $T_{f_{h\ out}}$, $T_{f_{c\ out}}$) sont également calculées.

Par ailleurs, le rendement global du système hybride à concentration est calculé à partir de la relation suivante :

$$\eta_{hyb} = \eta_{CPV} + \eta_{CTE} - \frac{P_{pump}}{C S_C} \quad (IV.36)$$

Avec η_{CPV} , η_{CTE} et P_{pump} désigne le rendement des systèmes photovoltaïque et thermoélectrique à concentration ainsi que la puissance du pompage nécessaire pour la circulation du fluide caloporteur et qui varie selon le canal utilisé, dont l'expression est représentée ci-dessous [167]

$$P_{pump} = f * \frac{(a_{ch} + b_{ch}) U_w^2 l_{ch}}{4 A_1} * \rho_w * (A_1 + A_2) * U_w * n_{ch} \quad (IV.37)$$

Où le facteur de frottement f peut-être calculer comme suite [163, 165] :

$$f = \frac{64}{Re_w} \quad (Re_w < 2300) \quad (IV.38)$$

$$f = (0.79 \ln Re_w - 1.64)^{-2} \quad (Re_w > 2300) \quad (IV.39)$$

$$Re_w = \frac{2A_1 U_w}{(a_{ch} + b_{ch}) V_w}, \quad (IV.40)$$

En outre, $a_{ch}, b_{ch}, A_1, A_2, l_{ch}, \rho_w, U_w, V_w, n_{ch}, Re_w$ représente respectivement, la hauteur, la largeur, la surface du canal de refroidissement lié au CPV, la surface des canaux connecté au CTE, la longueur, la densité, la viscosité et la vitesse du fluide caloporteur, le nombre de l'ensemble des canaux du système de refroidissement intégrer et le nombre de Reynolds,. Les valeurs de ces paramètres physiques utiliser dans le calcul sont mentionnées dans le Tableau (IV.2).

A rappelé que les termes η_{CPV}, η_{CTE} sont calculés par les équations mentionnées précédemment dans ce manuscrit sous cette forme.

$$\eta_{CPV} = \eta_{ref} (1 - \beta(T_{CPV} - 298.15)) \quad (III.18) \text{ [168]}$$

$$\eta_{CTE} = \left(1 - \frac{T_c}{T_h}\right) \frac{\sqrt{1+ZT} - 1}{\sqrt{1+ZT} + \frac{T_c}{T_h}} \quad (I.15)$$

Les valeurs de la température du fluide caloporteur utilisées pour la simulation de l'effet du système de chauffage sur le côté chaud du module CTE résultent du processus de refroidissement du CPV et correspondent à la concentration maximale et au débit optimal du fluide utilisé. Cela dit que : $T_{f\ out} = T_{fh} = T_{fh-in}$.

Parameters	Unit	Value
ϕ	%	10
D (CPV)	m^3/h	0.5
D (T_h)	m^3/h	0.1
D (T_c)	m^3/h	0.5
a_{ch} (for CPV)	m	0.02
b_{ch} (for CPV)	m	0.02
A_1	m^2	0.004
l_{ch} (for CPV)	m	0.2
ρ_w	$kg\ m^{-3}$	998 [169]
U_w ,	m/s	0.23
V_w (water)	kg/ms	0.001 [170]
V_{nano} (Nano-fluid "cu, Al, Fer")	kg/ms	0.0013 [170]
n_{ch} (for CPV)	-	4
n_{ch} (for CTE)	-	2
a_{ch} (for CTE)	m	0.02
b_{ch} (for CTE)	m	0.2
A_2	m^2	0.04
l_{ch} (for CTE)	m	0.2

Tableau IV.2 : Paramètres physiques utilisés dans le calcul de la puissance du pompage

IV.3. Résultats et discussions

La conception de système hybride CPV-CTE à couplage indirect est apparue entière, car le fait de pouvoir exploiter les pertes par transmission et thermalisation la rend plus performante par rapport au système photovoltaïque seul. Cependant, le refroidissement de ces composants, surtout les cellules photovoltaïques et la face inférieure du module thermoélectrique, est une nécessité majeure afin de préserver leurs performances. Pour cette raison, nous avons proposé une combinaison de refroidissement efficace et productive, capable d'optimiser l'efficacité de chaque composant du système hybride CPV-CTE et systématiquement amélioré la performance globale. L'impact de cette intégration est analysé par la suite.

La thermalisation provoquée par les électrons hautement énergétiques lors de la libération de l'excès d'énergie, générée via le processus d'absorption, provoque le chauffage des cellules photovoltaïques et conduit à une augmentation de la température du système. Cette température devient plus élevée encore avec l'utilisation d'un concentrateur optique. En conséquence, l'efficacité de ce système diminue radicalement (**Fig. IV.5**). Ceci illustre la nécessité d'un refroidissement permanent pour ce dispositif. Pourtant, la solution apportée à un tel défi consistait à utiliser un système de refroidissement basé sur la ventilation, dont la consommation d'énergie est relativement importante et non productive, entraînant une diminution de l'efficacité du système photovoltaïque [147]

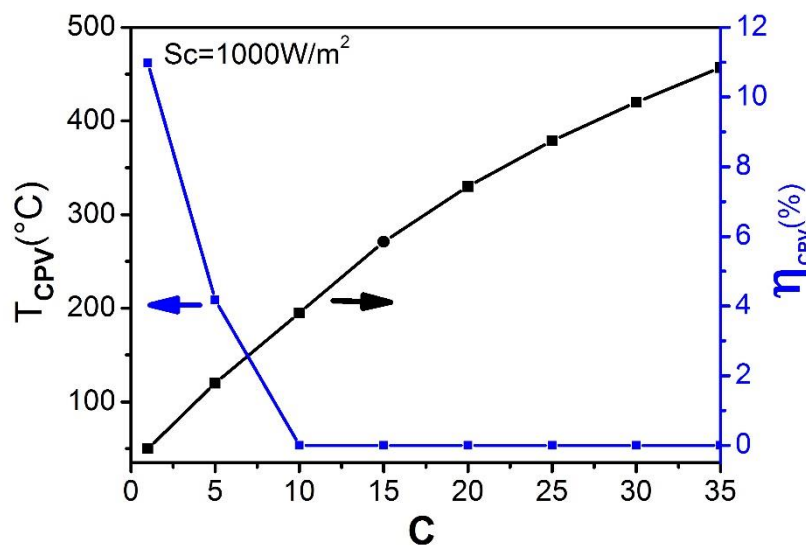


Figure.IV.5 : Effet de la concentration optique sur la température et l'efficacité du CPV sans refroidissement.

De ce fait, l'intégration d'un système de refroidissement actif basé sur la circulation d'un fluide caloporteur selon le modèle proposé (**Fig.IV.2**), demeure une alternative prometteuse. Cette alternative consiste à appliquer un refroidissement à travers des canaux rectangulaires dont la section du conduit a une forme carrée, connectés aux parois du système photovoltaïque au lieu

de sa surface inférieure. Etant donné que le module thermoélectrique est placé juste au-dessous du photovoltaïque dans l'intérêt d'exploiter les rayonnements transmise, ce choix d'emplacement pour les canaux de refroidissement est stratégique afin d'éviter une éventuelle absorption de ces rayonnement par le fluide caloporteur. Pour cette manœuvre de refroidissement, trois Nano-fluides sont testé en parallèle avec l'eau, il s'agit des Nano-fluide à base de Cu, Fer, et Al, nous permettant ainsi de procéder à une comparaison entre la performance de ces fluides caloporteurs. Comme on vient de le mentionné auparavant, le comportement de ces Nano-fluides sera encadré par les modèles de Maxwell et Stokes- Einstein

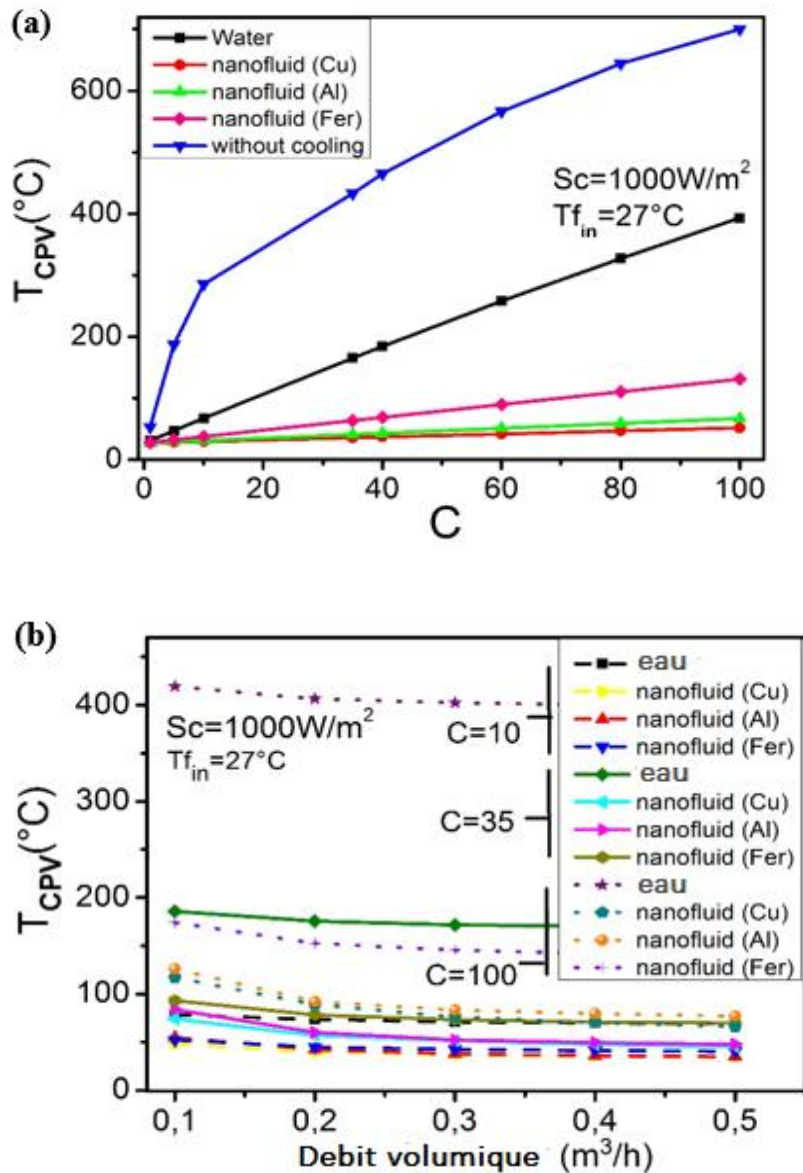


Figure.IV.6 : Comportement de la température du CPV à différentes concentrations : sous l'effet des fluides caloporteur statique (a), et en fonction du débit volumique (b) à $T_{f_{in}} = 27^\circ C$.

D'après la figure (IV.6). La température du CPV décroît énormément sous refroidissement par Nano-fluide par rapport à l'eau et en majeure partie sous l'effet des Nanoparticules de cuivre, même à fortes concentration, l'écart de diminution peut aller jusqu'à 110°C sous concentration de $C=35$ et au-delà de 250°C sous $C=100$. D'autre part, elle montre que le débit affecte clairement l'efficacité du refroidissement. Selon la figure (IV.6b), Tant que le débit d'écoulement est en augmentation, la température nécessaire pour le bon fonctionnement des cellules photovoltaïques sera maintenue. En revanche, un refroidissement statique ne sera d'aucune utilité après un certain temps, en raison de l'équilibre thermique qui s'installera entre les cellules photovoltaïques et le fluide caloporteur. L'impact du débit d'écoulement est visible également sur les températures de sortie du fluide caloporteur sous ces différentes formes (eau ou Nano-fluide). Ces derniers augmentent en fonction du débit (Fig.IV.7), Cela découle du fait que le comportement d'un faible débit est similaire à un fluide statique, cela dit qu'un équilibre thermique est probable après un certain temps de refroidissement. Autrement dit, en mode dynamique à haute débit, le fluide caloporteur absorbera la chaleur en un point x et circulera immédiatement vers un point $x + 1$ en un temps évitant l'équilibre thermique entre ces deux points, ce qui assurera un contact permanent du CPV avec un fluide froid.

Cependant, La viscosité est un facteur important dans ce processus, plus il est faible, plus le fluide caloporteur circule de manière limpide. Tenant compte de cela et en se basant sur les modèles mentionnés antérieurement (Maxwell et Stokes- Einstein), une fraction volumique de 10% reste la plus avantageuse.

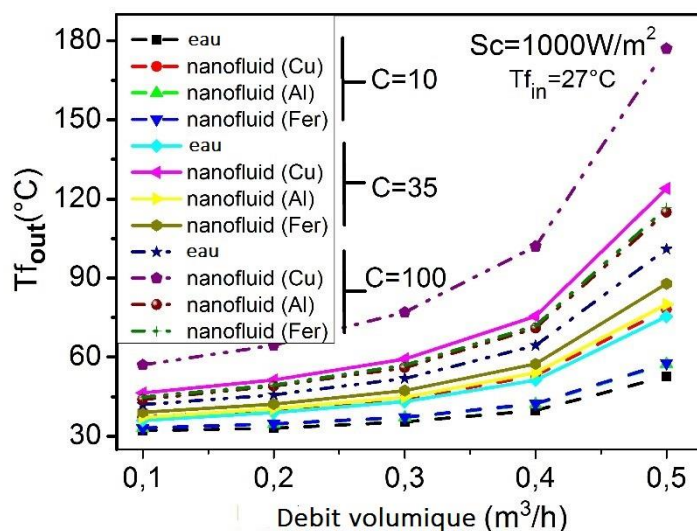


Figure.IV.7 : Températures de sortie des fluides caloporteurs (eau et Nano-fluide) en fonction du débit d'écoulement à différentes concentrations.

Ces résultats de températures exposés précédemment se reflètent sur le rendement du système photovoltaïque. D'après la figure IV.8 l'efficacité s'améliore de 12% sous-utilisation de Nano-fluide de cuivre comparé au photovoltaïque sans refroidissement, et d'un peu moins, sous l'utilisation de l'eau avec une augmentation de 8%, sachant que ces valeurs correspondent à une concentration de $C=40$.

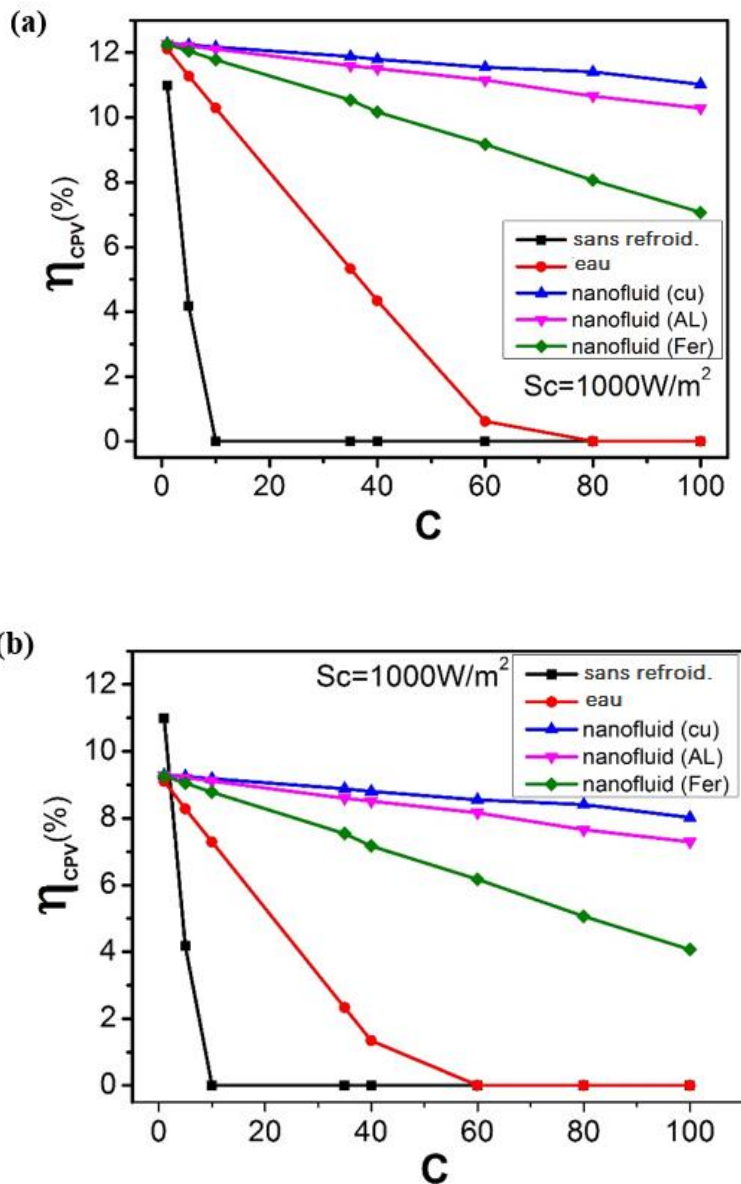


Figure.IV.8 : Effet de concentration optique sur l'efficacité du CPV, avec et sans refroidissement : (a) sous fluide statique et Nano-fluide, (b) sous fluide dynamique et Nano-fluide à $D = 0,5 m^3 / h$ et $T_{fin} = 27 ^\circ C$

Néanmoins, l'analyse de ces résultats (**Fig. IV.8**) montre que l'efficacité du système CPV à basse concentration ($C = 10$) est supérieure par rapport à haute concentration ($C = 100$).

L'objectif visé par le système CPV est non seulement l'amélioration de la production électrique mais également la production maximale de l'énergie thermique qui sera stocker sous forme de fluide chaud ce qui justifie l'utilisation des hautes concentrations. De plus, Le fluide caloporteur chaud résultant du processus de refroidissement du CPV atteignant des températures d'environ 160 °C à 180 °C sous un débit de 0.5 (m³/h) va être exploité au quotidien pour des fins sanitaire et également comme source de chaleur pour le CTE durant la nuit pour générer de l'énergie supplémentaire sans affecter la réserve d'électricité stockée pendant la journée. Cela dit, une production d'énergie prolongée. Pour valider cette hypothèse, dans ce qui suit l'effet du refroidissement et de réchauffement sur le fonctionnement du générateur CTE est exposé.

Dans ce nouveau concept du système hybride à concentration CPV-CTE, le but d'associer la surface supérieure et inférieure du système thermoélectrique à concentration a des canaux de réchauffement et de refroidissement est l'augmentation de la différence de température entre les côtés chaud et froid de CTE, étant donné que ce dernier a la capacité de produire de l'énergie lorsqu'un gradient de température est créé entre ces bornes selon l'effet Seebeck. La figure **IV.9**, montre une augmentation en parallèle des températures du côté chaud (T_h) et du côté froid (T_c) du CTE causé par la circulation du fluide caloporteur chaud au niveau du canal positionné sur la surface supérieure. Par conséquent, la production électrique sera affectée négativement.

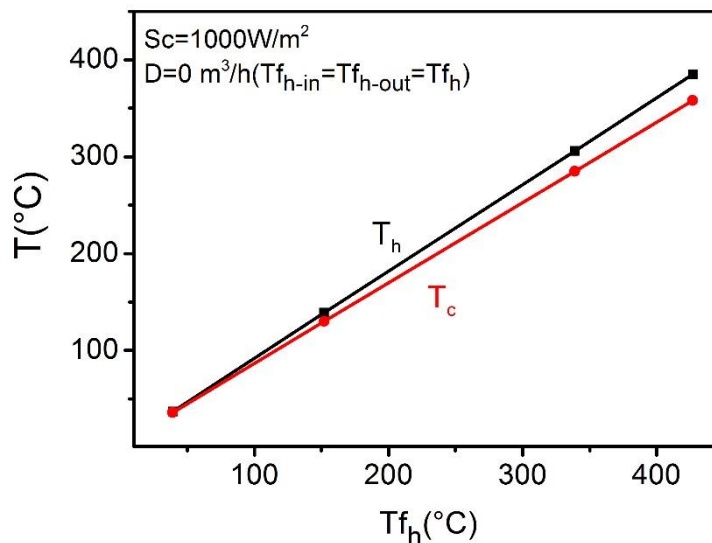


Figure.IV.9 : Comportement des températures du côté chaud (T_h) et du coté froid (T_c) du générateur CTE sous réchauffement statique.

Compte tenu de cela, la surface inférieure correspondante à la température T_c bénéficiera d'un refroidissement similaire à celui du CPV, afin de la maintenir sur une température d'environ 27°C en parallèle avec l'accroissement de la température T_h .

L'effet de ce refroidissement statique est semblable à celui constaté sur les cellules photovoltaïques, d'après la Figure (**IV.10a**) les Nano-fluides présente une performance nette au

niveau de la diminution du T_c par rapport à l'eau sous une température de refroidissement de 27°C , en particulier ceux à base des particules de Cu et Al, et cela même à forte concentration optique. Par exemple, à $C = 10$, la température du côté froid (T_c) diminue de 130°C à 30°C sous Nano-fluide à base de Cu comparé à l'eau dont le décroissement était de 130°C à $39,8^\circ\text{C}$. Cette performance des Nano-fluide inclut également l'augmentation de la différence de température entre le côté chaud et le côté froid du CTE (**IV.10b**). Ce qui signifie une mise à niveau systématique de l'efficacité globale de cet appareil selon le principe de l'effet Seebeck.

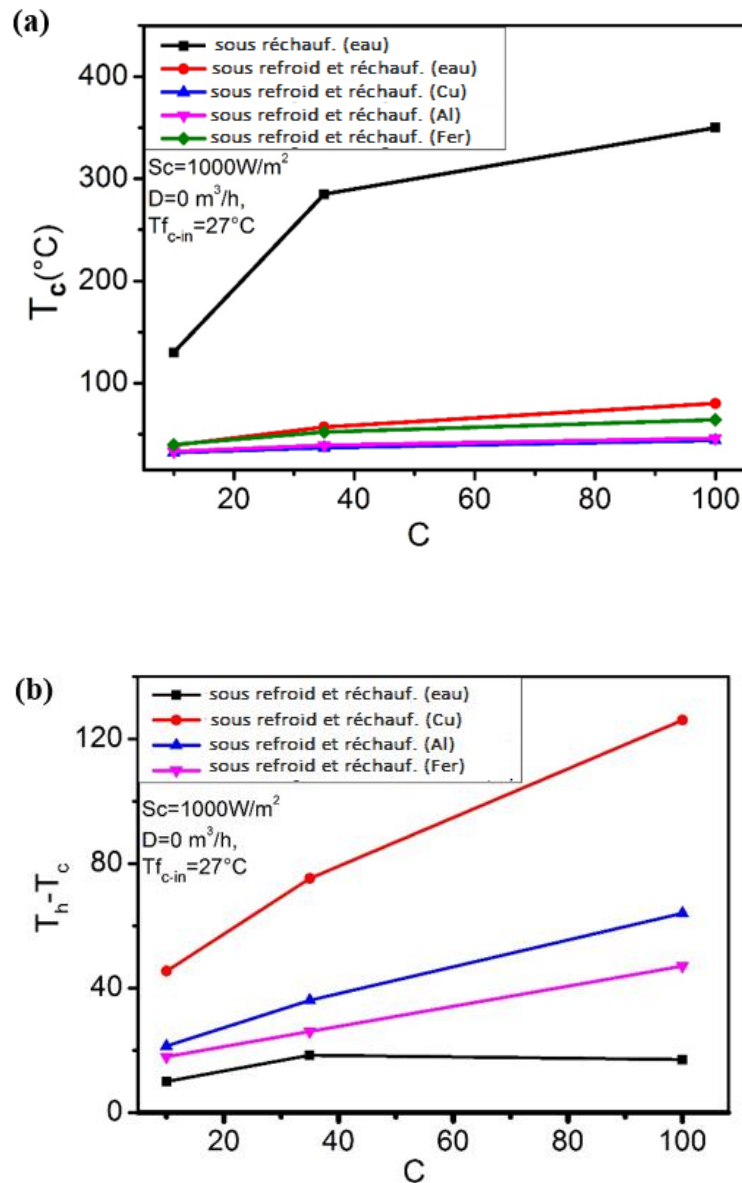


Figure.IV.10 : Comportement de : (a) la température du coté froid (T_c), (b) du gradient de température au niveau du générateur CTE, sous réchauffement et refroidissement statique à $D=0,5 \text{ m}^3 / \text{h}$ et $T_{f_{in}} = 27^\circ\text{C}$

Ce modèle de refroidissement développé pour le système thermoélectrique présente également des résultats particuliers où la vitesse d'écoulement a un impact opposé sur les températures des surfaces supérieure et inférieure. Selon la figure (IV.11a) un faible débit imposé au niveau de la circulation du fluide caloporteur chaud associé à la plaque supérieure du CTE permet une augmentation systématique de sa température T_h . Contrairement à la plaque inférieure correspondant à T_c , qui subit un refroidissement efficace sous un débit considérable, ce qui est en corrélation avec les résultats de refroidissement des cellules photovoltaïques. En conséquence, le fluide sortant de chaque canal de ce processus de refroidissement et de chauffage présentera les mêmes résultats opposés (Fig.IV.11b).

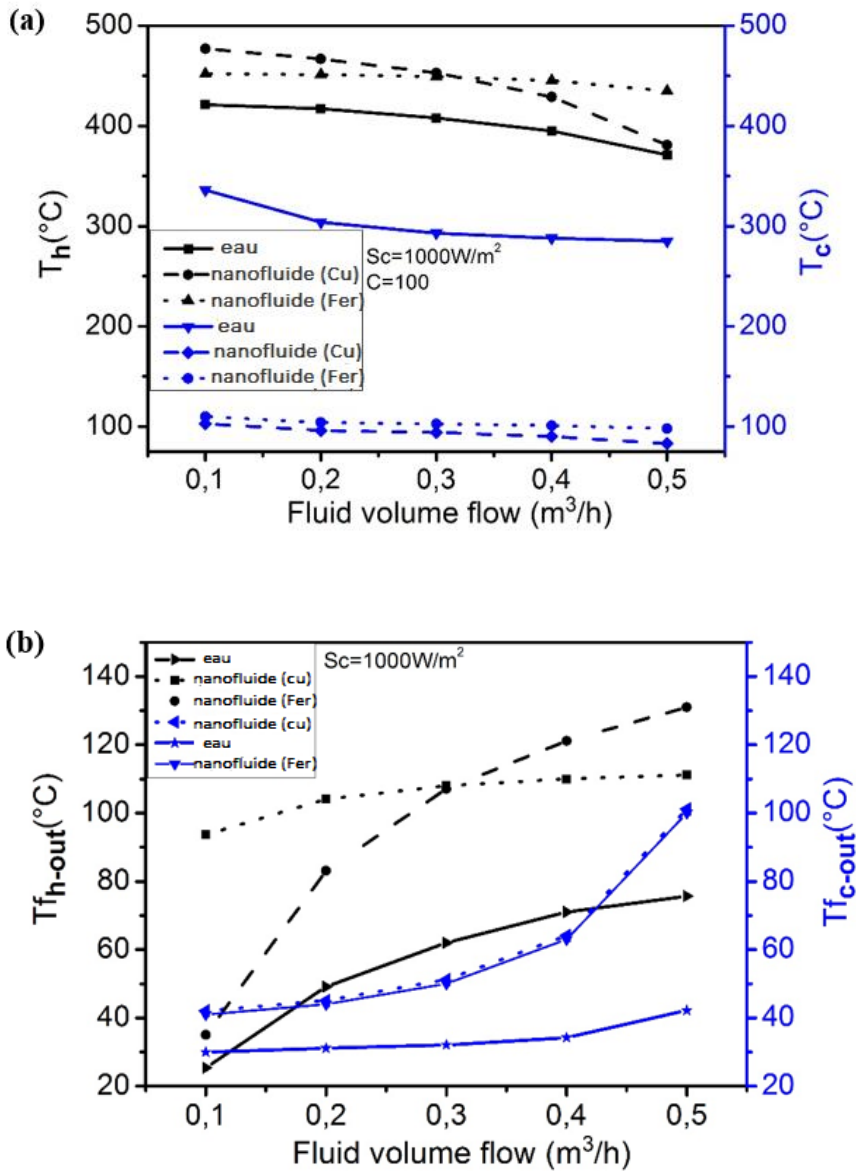


Figure.IV.11 : Effet du réchauffement et refroidissement dynamique sur : (a) les températures T_c et T_h , (b) les températures de sortie du fluide T_{fh-out} et T_{fc-out} au sein du générateur CTE.

Le module thermoélectrique génère une proportion de puissance de sortie inférieure à celle produite par les cellules photovoltaïques, mais sa contribution est déterminante pour la performance globale de cette conception hybride CPV-CTE. De plus, le système de refroidissement et de chauffage améliore l'efficacité du système hybride global par rapport au système photovoltaïque seul, dont l'augmentation peut atteindre les 20%. La figure IV.12 montre clairement l'impact positif de cette combinaison entre le système hybride couplé indirectement et le système de refroidissement actif sur le rendement global.

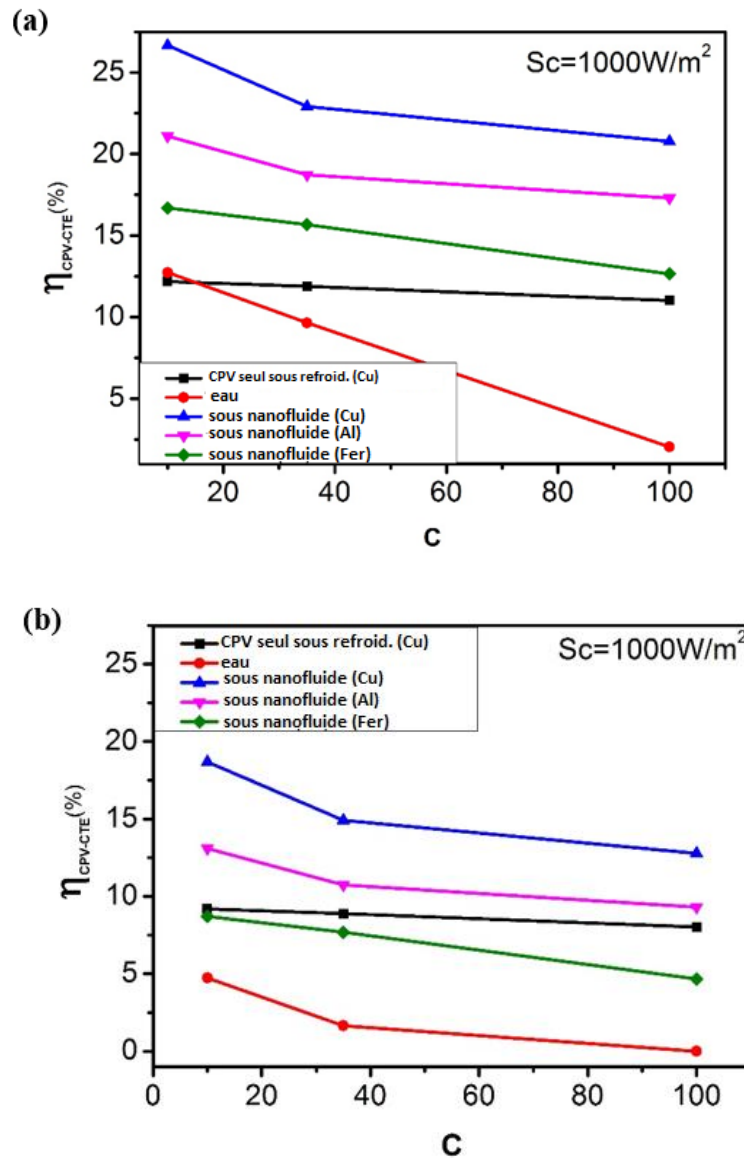


Figure.IV.12 : Effet de la concentration optique sur l'efficacité globale du système hybride CPV-CTE, (a) sous fluide caloporteur statique, (b) sous fluide caloporteur dynamique à $D = 0,5 \text{ m}^3 / \text{h}$ et $T_{f\text{-in}} = 27^\circ \text{C}$ pour le refroidissement et $D = 0,1 \text{ m}^3 / \text{h}$ pour le réchauffement.

IV.4. Conclusion

Ce dernier chapitre s'est concentré sur l'étude d'un système de refroidissement actif associé au système hybride à concentration (CPV-CTE) couplé indirectement. Cette intégration qui vise à optimiser le fonctionnement des sous-systèmes CPV et CTE présente des avantages importants :

- Premièrement : le refroidissement des cellules photovoltaïques par un fluide caloporteur dès que leur température dépasse la valeur de fonctionnement optimale (environ 25 ° C), sachant que cette augmentation peut atteindre 53 ° C sans concentrateur, ce qui aura un impact négatif sur le rendement de ce système

- deuxièmement, le réchauffement et le refroidissement en simultané des surfaces supérieure et inférieure du module thermoélectrique, permettant ainsi d'accroître le gradient de température du module et par conséquent d'améliorer ses performances.

- Troisièmement : le stockage du fluide sortant des canaux combiné au CPV et au CTE dans l'ordre suivant :

- a) fluide caloporteur chaud résultant du processus de refroidissement du CPV et de la plaque inférieure du CTE.

- b) fluide caloporteur froid résultant du processus de chauffage de la plaque supérieure du CTE.

- Enfin, augmentation de l'autonomie de production d'énergie grâce au fonctionnement du module CTE pendant la nuit suite à l'utilisation de fluide chaud stocké, en tant que source de chaleur capable de déclencher le processus de conversion thermoélectrique.

CONCLUSION GENERALE ET
PERSPECTIVES.

Conclusion et perspectives

Les travaux présentés dans cette thèse traitent généralement la problématique de la valorisation de l'énergie solaire par le biais d'un nouveau système hybride combinant entre les technologies photovoltaïque et thermoélectrique. Nous avons ainsi proposé plusieurs pistes et conceptions pour améliorer la conversion d'énergie photovoltaïque qui souffre encore aujourd'hui de problèmes de pertes d'énergie à cause de la transmission et la thermalisation. Notre démarche a été d'explorer les différents types de couplage possible afin de trouver le plus adapté et celui capable d'exploiter les dites pertes et maximiser la production électrique.

Avant d'aborder la problématique proprement dite des pertes, nous avons effectué un état des lieux par filière technologique, des principaux axes de développement photovoltaïque et thermoélectrique et du potentiel de chacun. Il était en effet important pour nos travaux de recherche de connaître les paramètres pertinents contribuant dans chaque conversion solaire ainsi que les obstacles rencontrés lors de ce processus. Cela nous a permis d'avoir une vision globale des avancées technologiques actuelles et futures afin de pouvoir anticiper les besoins et ainsi donner notre propre avis sur le développement de la production énergétique solaire potentiel futur avec des systèmes de conversion plus optimisés comme le système hybride PV-TE.

L'étude théorique entreprise dans le cadre de cette thèse vise trois principaux axes. Elle a porté en premier lieu sur l'analyse du couplage approprié au système hybride PV-TE à partir d'une étude basée sur le transfert thermique et la méthode des éléments finis. Nous nous sommes intéressés dans le deuxième axe au développement des propriétés structurales, électroniques et thermoélectriques du principal matériau utilisé au sein du module thermoélectrique, pour valoriser sa contribution dans la conversion solaire du système hybride PV-TE, grâce à une étude de l'effet des contraintes mécanique sur ses propriétés. Dans ce contexte, nous avons utilisé la méthode FP LAPW basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT ainsi que le modèle semi-classique de Boltzmann. Au final nous avons montré l'utilité d'intégrer un système de refroidissement adapté à la conception du système hybride PV-TE et capable également de contribuer à son fonctionnement optimal.

Ce travail a abouti à des conclusions importantes qui se résument en premier temps dans le fait que le couplage indirect est le plus adapté à l'association des systèmes photovoltaïque et thermoélectrique sous une seule structure hybride, suite à sa capacité à améliorer considérablement le rendement global de ce dispositif, contrairement au couplage direct qui affecte le fonctionnement optimal de chaque composant de ce système. Cette amélioration a pu atteindre des valeurs de plus de 20% par rapport au photovoltaïque seul. Dans le même contexte on a pu conclure que le système de refroidissement est indispensable pour le bon fonctionnement de tout le dispositif hybride que ça soit du côté de maintien des cellules photovoltaïques sur une valeur de fonctionnement optimal ou du côté d'optimisation du rendement du thermoélectrique. De ce fait le chapitre dernier était réservé à la validation d'un système de refroidissement actif qui sera associé au système hybride PV-TE avec une

intégration d'un concentrateur à la fois pour le photovoltaïque et pour le thermoélectrique dans l'intérêt d'amplifier le rayonnement incident, cela dit une étude de faisabilité d'un système hybride a concentration CPV-CTE sous refroidissement.

En parallèle avec tout ça, ce travail nous a permis de montrer que la performance d'un système thermoélectrique passe également à travers l'amélioration de son matériau de base. De ce fait, le composé Bi_2Te_3 qui suscite un intérêt important pour sa future utilisation dans le système hybride PV-TE en particulier au niveau du dispositif thermoélectrique a présenté une amélioration des propriétés de transport sous contrainte de compression. Permettant ainsi d'accroître la valeur de facteur de mérite ZT responsable majeur de la bonne conversion thermoélectrique d'un semi-conducteur.

Ces premiers résultats très encourageants nous motivent donc encore plus à poursuivre des travaux sur de nouveaux concepts plus performants et de projeter ces études théoriques sur des plateformes réelles en 3D et même une réalisation d'un prototype afin de concrétiser ces travaux de recherche. Cela dit qu'on devra passer probablement par une phase d'intégration industrielle pour permettre d'obtenir des rendements de conversion correcte pour ces applications ainsi que d'avoir une estimation sur le cout global de cette technologie, et son adaptation dans les milieux ciblés.

Références

- [1] B. Fleche, D. Delagnes, *Energie solaire photovoltaïque*, [En ligne] : http://www.iufmrese.cict.fr/catalogue/2006/Toulouse/PV/A_Introduction_PV/Energie_solaire_photovoltaïque.pdf (Page consultée le 03/11/2008).
- [2] A. Ricaud, *Photopiles solaires*, 1^{ère} édition, presses polytechniques et universitaires romandes, Lausanne, 1997.
- [3] American Society for Testing and Materials (ASTM) Terrestrial Reference Spectra for Photovoltaic Performance Evaluation, ASTM G173-03 Tables: Extraterrestrial Spectrum, Terrestrial Global 37 deg South Facing Tilt & Direct Normal + Circumsolar disponible sur : <http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5/>
- [4] CR Jordan, R. Hulstron, *What is an air mass 1.5 spectrum? Solar cell performance Calculations*; Photovoltaic Specialists Conference, 1990, Conference Record of the Twenty First IEEE; 21-25 May 1990 Page(s):1085 - 1088 vol.2, Digital Object Identifier 10.1109/PVSC.1990.111784
- [5] J. Bernard, *Energie solaire calcul et optimisation*, 1^{ère} édition, ELLIPES, Paris, 2004.
- [6] E. Becquerel, *Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires*, C.R. Acad. Sci., 1839 ; 9 :561-567.
- [7] S. Quoizola, *Epitaxie en phase vapeur de silicium sur silicium mesoporeux pour report sur substrats économiques et application photovoltaïque bas coût*, Thèse doctorale, école doctorale : électronique, électrotechnique et automatisme, spécialité : dispositifs de l'électronique intégrée, l'institut national des sciences appliquées de Lyon, Lyon, 2003.
- [8] B. Equer, *Energie solaire photovoltaïque (volume1 : physique et technologie de la Conversion photovoltaïque)*, 1^{ère} édition, ELLIPES, Paris, 1993.
- [9] M. Fisac, Francesc X. A. Villasevil, M. López. *High-efficiency photovoltaic technology including thermoelectric generation*. Journal of Power Sources 2014; 252: 264-269.
- [10] D. Zaouk, Y. Zaatari, A. Khoury, C. Llinares, J.-P. Charles, J. Bechara, Ajaka, M. *Electrical and optical characteristics of NAPS solar cells of Si (PiN) structure* Environment and Solar, Mediterranean Conference for 16-17 Nov. 2000; 93 – 95.
- [11] G. Conibeer, *Third-generation photovoltaics* Mater. Today. 2007; 10: 42–50.
- [12] <http://www.photovoltaïque.info/Les-types-de-modules.htm>.

- [13] C. Wang, H. Zhang, T. Wang, L. Zheng, « *Solidification interface shape control in a continuous Czochralski silicon growth system* », *Journal of Crystal Growth*, 287, Issue 2, 25 2006, 287: 252-257.
- [14] T. Tomita, *Production of solar modules- status and outlooks*. Disponible sur : <http://sharp-world.com/corporate/news//index.html>.
- [15] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. P.364
- [16] F. KAZOULA. *Cristallisation assistée par un métal du silicium déposé par différentes techniques*, thèse doctorale. 2013, p24.
- [17] G. Hahn, S. Seren, M. Kaes, A. Schonecker, J.P. Kalejs, C. Dube, C. Grenko, C. Belouet, *Review on Ribbon Silicon Techniques for Cost Reduction in PV Photovoltaic Energy Conversion*, Conference Record of the 2006 IEEE 4th World Conference on Volume 1, May 2006, 1:972 – 975 Digital Object Identifier 10.1109/WCPEC.2006.279280
- [18] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, E. D. Dunlop, *Solar cell efficiency tables (version 45)*, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 2015, 23: 1–9.
- [19] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, E. D. Dunlop, *Solar cell efficiency tables (version 41)*, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 2012, 20:12–20.
- [20] D. M. de Leeuw, *Stability of n-type doped conducting polymers and consequences for polymeric microelectronic devices*, *Synthetic Metals*, 1997, 87: 53-59.
- [21] B. O'regan, M. Gratzel, *A low-cost, high-efficiency solar based on dye-sensitized colloidal TiO₂ films*, *Nature*, 1991, 353:737-740.
- [22] A. Labouret, M. Viloz, *Energie solaire photovoltaïque*, 3ème édition, DUNOD, Paris, 2006.
- [23] S. Quozola, *Epitaxie en phase vapeur de silicium sur silicium mesoporeux pour report sur substrats économiques et application photovoltaïque bas coût*, Thèse de doctorat, école doctorale : électronique, électrotechnique et automatisme, spécialité : dispositifs de l'électronique intégrée, l'institut national des sciences appliquées de Lyon, Lyon, 2003.
- [24] EA. Chávez-Urbiola, YV. Vorobiev, LP. Bulat, *Solar hybrid systems with thermoelectric generators*. *Sol Energy* 2012; 86:369–78.
- [25] K. Emery, J. Burdick, Y. Caiyem, D. Dunlavy, H. Field, B. Kroposki, T.Moriarty, L. Ottoson, S. Rummel, T. Strand, M.W. Wanlass, *Temperature dependence of photovoltaic cells*,

modules and systems, Photovoltaic Specialists Conference, 1996, Conference Record of the Twenty Fifth IEEE, 13-17 May 1996, 1275 – 1278

[26] E. Yin, Q. Li, Y. Xuan. *Thermal resistance analysis and optimization of photovoltaic - thermoelectric hybrid system*, Energy Conver. and Manag. 2017; 143: 188-202.

[27] Y. Ershuai, L. Qiang, X. Yimin. *One-day performance evaluation of photovoltaic-thermoelectric hybrid system*. Energy 2018; 143:337–346.

[28] D. Boudemagh. *Synthèse et Etude des Matériaux Thermoélectriques du Système Mg₂Si_{1-x}Sn_x*. Thèse doctorale Physiques Université Joseph-Fourier - Grenoble I, French. 2010. p : 25.

[29] H. Scherrer, S. Scherrer, C. Penin. *Solutions solides du système Bi₂Te₃-Bi₂Se₃, étude des propriétés de transport*, matériaux à propriété thermoélectrique, UMR 7556, 2009.

[30] J.G. Stockholm, *La thermoélectricité applications et perspectives*, matériaux 2006 :13-17 novembre, Dijon, France, 2008.

[31] A. Linder « *la Thermoélectricité* » presse universitaire de France n°1381, 1970.

[32] V. Richoux, *Elaboration électrochimique en mode pulse de Tellure de Bismuth Bi₂Te₃ et de l'alliage ternaire (Bi_{1-x}Sb_x)₂Te₃* ». Thèse de doctorat à l'université de PAUL VERLINE-METZ, France, 2008.

[33] P. Pichanusakorn, *The optimal Seebeck coefficient for obtaining the maximum power factor in thermoelectric* », Applied Physics letters, 2009; 94.

[34] L. E. Bell, *Cooling, heating, generating power, and recovering waste heat with thermoelectric systems*. Science, 2008; 321:1457-1461.

[35] J. Yang, F. R. Stabler, *Automotive applications of thermoelectric materials*. Journal of Electronic Materials, 2009 ; 38:1245-1251.

[36] M. Ait Hamouda, K. Ziouche, M. Haffar, *Etude du pouvoir thermoélectriques de couches de polysilicium dopées N et P de 20 à 450°C*, Institut d'électronique et microélectronique et de nanotechnologie IEMN, 2010.

- [37] Directive Union Européenne. Directive 2011/37/UE de la commission modifiant l'annexe II de la directive 2000/53/CE du Parlement européen et du Conseil relative aux véhicules hors d'usage. Journal Officiel de l'Union Européenne, 2011.
- [38] B. Lenoir, J.-P. Michenaud, A. Dauscher. *Thermoélectricité : des principes aux applications*. Techniques de l'Ingénieur, 2010.
- [39] W. M. Yim et A. Amith. *Bi-Sb alloys for magneto-thermoelectric and thermomagnetic cooling*. Solid-State Electronics, 1972 ; 15: 1141-1165.
- [40] B. Lenoir, A. Dauscher, M. Cassart, Y. I. Ravich, H. Scherrer. *Effect of antimony content on the thermoelectric figure of merit of $Bi_{1-x}Sb_x$ alloys*. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 1998; 59: 129-134.
- [41] V. S. Zemskov, A. D. Belaya, U. S. Beluy, G. N. Kozhemyakin. *Growth and investigation of thermoelectric properties of Bi-Sb alloy single crystals*. Journal of Crystal Growth, 2000; 212: 161-166.
- [42] X. W. Wang, H. Lee, Y. C. Lan, G. H. Zhu, G. Joshi, D. Z. Wang, J. Yang, A. J. Muto, M. Y. Tang, J. Klatsky, S. Song, M. S. Dresselhaus, G. Chen, Z. F. Ren. *Enhanced thermoelectric figure of merit in nanostructured n-type silicon germanium bulk alloy*. Applied Physics Letters, 2008 ; 93: 193121.
- [43] G. Joshi, H. Lee, Y. Lan, X. Wang, G. Zhu, D. Wang, R. W. Gould, D. C. Cuff, M. Y. Tang, M. S. Dresselhaus, G. Chen et Z. Ren. *Enhanced thermoelectric figure of merit in nanostructured p-type silicon germanium bulk alloys*. Nano Letters, 2008; 8: 4670-4674.
- [44] X. Shi, J. Yang, J. R. Salvador, M. Chi, J. Y. Chao, H. Wang, S. Bai, J. Yang, W. Zhang, L. Chen. *Multiple-filled skutterudites: high thermoelectric figure of merit through separately optimising electrical and thermal transport*. Journal of American Chemical Society, 2011; 133: 7837-7846.
- [45] S. Ballikaya, G. Wang, K. Sun, C. Uher. *Thermoelectric properties of triple-filled $Ba_xYb_yIn_zCo_4Sb_{12}$ based skutterudites with multiple filler atoms: $Ce_{0,1}In_xYb_yCo_4Sb_{12}$* . Journal of Electronic Materials, 2011; 40: 570-576.

- [46] A. Saramat, G. Svensson, A. E. Palmavist, C. Stiewe, E. Mueller, D. Platzek, S. G. K. Williams, D. M. Rowe, J. D. Bryan et G. D. Stucky. *Large thermoelectric figure of merit at high temperature in Czochralski grown clathrates $Ba_8Ga_{16}Ge_{30}$* . Journal of Applied Physics, 2006, 99: 023708.
- [47] K. F. Hsu, S. Loo, F. Guo, W. Chen, J. S. Dyck, C. Uher, T. Hogan, E. K. Polychroniadis, M. G. Kanatzidis. *Cubic $AgPb_mSbTe_{2+m}$: bulk thermoelectric materials with high figure of merit*. Science, 2004; 303: 818-821.
- [48] X. Yan, W. Liu, H. Wang, S. Chen, J. Shiomi, K. Esfarjani, H. Wang, D. Wang, G. Chen, Z. Ren. *Stronger phonon scattering by larger differences in atomic mass and size in p-type half-Heuslers $Hf_{1-x}Ti_xCoSb_{0.8}Sn_{0.2}$* . Energy & Environmental Science, 2012; 5: 7543-7548.
- [49] E. S. Toberer, C. A. Cox, S. R. Brown, T. Ikeda, A. F. May, S. M. Kauzlarich, G. J. Snyder. *Traversing the Metal-Insulator Transition in a Zintl Phase: Rational Enhancement of Thermoelectric Efficiency in $Yb_{14}Mn_{1-x}Al_xSb_{11}$* . Advanced Functional Materials, 2008; 18: 2795-2800.
- [50] J. Sui, J. Li, J. He, Y. Pei, D. Berardan, H. Wu, N. Dragoie, W. Cai, L. Zhao. *Texturation boosts the thermoelectric performance of $BiCuSeO$ oxyselenides*. Energy & Environmental Science, 2013; 6: 2916-2920.
- [51] Rosi, F.D., Abeles, B., and Jensen, R.V., J. Phys. Chem. Solids, 10, 191, 1959.
- [52] Rosi, F.D., Ramberg, F.G. 1960. In Thermoelectricity, P.M. Egli, ed., Wiley, New York.
- [53] H. J. Goldsmid, Thermoelectric Refrigeration, Pion Limited, London. 1986
- [54] Heikes, R.R. and Ure, R.W. Jr., 1961. Thermoelectricity: Science and Engineering, Interscience Ed., New York.
- [55] Rowe, D.M. and Bhandari, C.M. 1983. Modern Thermoelectrics, Holt Rinchort and Winston, London.
- [56] Scherrer H., A., in Thermoelectric Handbook, Rowe DM- Chemical Rubber (Boca Raton FL, 1995), pp. 407..
- [57] C.D. Satterthwaite, R.W. Ure, Phys. Rev., 1957; 108: 1164
- [58] Donges, Z. Anorg. Allgem. Chem., 1951, 56
- [59] Ainsworth Proc. Phys. Soc., London, B 1956; 69: 606
- [60] Harmon, J. Phys. Chem., 1957 ; 2 : 181
- [61] J. P. Fleurial, Thèse de l'I.N.P.L, Nancy, 1988.

- [62] F. A. Kroger, *J. Phys. Chem. Solids*, 1958; 7: 276
- [63] H. J. Goldsmid, *G. E. C. S. J.*, 1962; 29:158
- [64] T. Harman, B. Paris, S. Miller, H. Georing, *J. Phys. Chem. Solids*, 1957; 2: 281
- [65] J. Horak, P. Lostak, A. Montane, *Phys. Stat. Sol. (b)*, 1983; 119: 17
- [66] U. A. Kutasov, I. A. Smirnov, *Phys. Stat. Sol.*, 1966; 18: 479
- [67] Kullmann, *Phys. Stat. Sol (b)*, 1984; 125: 131
- [68] H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, Masson, Paris, 1996
- [69] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* 1964; 136, B864
- [70] Ludwig Boltzmann, *Leçons sur la théorie des gaz*, Gauthier-Villars, 1902-1905 (Réédition Jacques Gabay (1987)).
- [71] R. Brendel, D. Bormann, *J. Appl. Phys.*, 1992 ; 71 :1
- [72] W. Kohn and L.J. Sham, *Phys. Rev.* 1965; 140:A1133.
- [73] G. F. Bassani and G. Pastori Parravicini, *Electronic states and optical transitions in solids*, Oxford; New York: Pergamon Press, (1975).
- [74] D. Born and J. Oppenheimer, *J.R. Ann. Phys. Rev.* 1927; 84:457.
- [75] Hartree D. R. *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 1928; 111-132.
- [76] J. C. Slater, *Phys. Rev.* 1951; 81: 385.
- [77] V. Fock, *Z. Phys.* 1930; 61: 126.
- [78] W. Kohn, L. J. Sham, *Phys. Rev.* 1965; A140-1133.
- [79] L. H. Thomas, *Proc. Cambridge Phil. Roy. Soc.* 1927; 23:542.
- [80] E. Fermi, *Rend. Accad. Naz. Lincei* 1927; 6:602.
- [81] P. A. M. Dirac, *Proc. Cambridge Phil. Roy. Soc.* 1930; 26: 376.
- [82] J.P. Perdew, A. Zunger, *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*, *Phys. Rev. B.* 1981; 23: 5048-5079.
- [83] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.*, 1964; 136: 3B.

- [84] J.P. Perdew, *Physica B*. 1991; 172: 1-6.
- [85] F. Herman, J. P. Van Dyke, and I. P. Ortenburger, *Phys. Rev. Lett.* 1969; 22: 807.
- [86] J. P. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev. B* 1981; 23: 5048.
- [87] Z. Wu and R. E. Cohen, *Phys. Rev. B* 2006; 73: 235116.
- [88] J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, Koblar J. A., M. R. Pederson, D. J. Singh, and C. Fiolhais. *Phys. Rev. B*, 1992; 46:6671.
- [89] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev.Let.* 1996; 77: 3865.
- [90] K.H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. SjöstedtL. Nordstrom, *Phys. Rev. B Cond. Matter Mater. Phys.* 2001; 64:19, 1951341.
- [91] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka J. Luitz, *WIEN2k-userguide*, Vienna University of Technology (2001).
- [92] C. Hartwigsen, S. Goedecker, and J. Hutter. *Phys. Rev. B*, 1998; 58: 3641.
- [93] C.Surgers, K. Potzger, T.Strache, W. Moller, G. Fischer, N.Joshi, H.V. Lohneysen, *Applied Physics Letters*. 2008; 93: 062503.
- [94] M. Marsman and G. Kresse, *J. Chem. Phys.*, 2006; 125:104101.
- [95] Halima ZAARI. Thèse de doctorat, *Etude des modifications induites dans les semiconducteurs Al_xGa_{1-x}N par irradiation aux ions lourds de haute énergie*. Université de MOHAMMED V, (2016).
- [96] M. Stadele, M. Moukara, J. A. Majewski, P. Vogl, A. Görling, *Phys. Rev. B*. 1999; 59: 10031.
- [97] J. Heyd, J. E. Peralta, G. E. Scuseria, R. L. Martin, *J. Chem. Phys.* 2005; 123: 174101.
- [98] V. I. Anisimov, J. Zaanen, O. K. Andersen, *Phys. Rev. B*. 1991; 44; 943.
- [99] F. Bechstedt, F. Fuchs, G. Kresse, *Phys. Status Solidi B* 2009; 246: 1877.
- [100] E. Betranhandy, thèse doctorat, *Proposition et études ab initio des stabilités relatives de nouveaux matériaux par géomimétisme structural : Modélisation des propriétés physicochimiques* (2005).
- [101] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *WIEN2k, An Augmented*

Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, ISBN 3 9501031-1-2, Karlheinz Schwarz, Techn. University at Wien, Austria, (2001).

[102] Ryan Atkins, Sabrina Disch, Zachary Jones, Ines Haeusler, Corinna Grosse, Saskia F. Fischer, Wolfgang Neumann, Paul Zschack and David C. Johnson, *Journal of Solid-State Chemistry* 2013 ; 202: 128–133.

[103] Ali Hussain Reshak and S. Auluck, *Physica B* 2004; 349: 310–315.

[104] J.M. Ziman, *Solids* Oxford University Press, USA, (2001).

[105] M. Hajji, H. Absike, H. Labrim, H. Ez-Zahraouy, M. Benaissa, A. Benyoussef, *Strain effects on the electronic and thermoelectric properties of Bi₂Te₃: A first principles study*. *Comp. Cond. Matter*. 2018; 16: e00299.

[106] B. Qiu, X. Ruan, *Phys. Rev. B* 2009; 80: 165203.

[107] C. Chiritescu, C. Mortensen, D.G. Cahill, D. Johnson, P. Zschack, P. Zschack, *J. Appl. Phys.* 2009; 106: 073503.

[108] V. Goyal, D. Teweldebrhan, A.A. Balandin, *Appl. Phys. Lett.* 2010; 97:133117.

[109] B. Qiu, X. Ruan, *Appl. Phys. Lett.* 2010; 97: 183107.

[110] P. Ghaemi, R.S. Mong, J.E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* 2010; 105: 166603.

[111] J.H. Sung, H. Heo, I. Hwang, M. Lim, D. Lee, K. Kang, H.C. Choi, J.H. Park, S.H. Jhi, M.H. Jo, *Nano Lett.* 2014; 14: 4030-4035.

[112] D. Li, L. Li, D.W. Liu, J.F. Li, *Phys. Status Solid iRRL* 2012; 6: 268-270.

[113] H.L. Ni, X.B. Zhao, T.J. Zhu, X.H. Ji, J.P. Tu, *J. Alloy. Comp.* 2005; 397: 317.

[114] Y.Q. Cao, T.J. Zhu, X.B. Zhao, *J. Alloy. Comp.* 2008; 449: 109.

[115] D.A. Polvani, J.F. Meng, N.V. Chandra Shekar, J. Sharp, J.V. Badding, *Chem. Mater.* 2001; 13: 2068.

[116] K. Zhao, Y. Wang, C. Xin, Y. Sui, X. Wang, Y. Wang, Z. Liu, B. Li, *J. Alloy. Comp.* 2016; 661: 428-434.

[117] C. Yu, G. Zhang, Y.W. Zhang, L.M. Peng, *Nanomater. Energy* 2015; 17: 104-110.

[118] H.A. Rahnamaye Aliabad, M. Kheirabadi, *Phys. B+C* 2014; 433: 157-164.

- [119] V. Tyagi, NA. Rahim, N. Rahim, A. Jeyraj, L. Selvaraj. Progress in solar PV technology: research and achievement. *Renew Sustain Energy Rev* 2013; 20: 443–61.
- [120] Z. Li, Y. Zhao, X. Wang, Y. Sun, Z. Zhao, Y. Li, H. Zhou, Q. Chen. Cost Analysis of Perovskite Tandem Photovoltaics. *Joule* 2018; 2: 1559-1572.
- [121] J. Zhang, Y. Xuan, *Investigation on the effect of thermal resistances on a highly concentrated photovoltaic-thermoelectric hybrid system*. *Energy Convers and Manag.* 2016; 129 1–10
- [122] S. Hod, *Hawking radiation and the Stefan–Boltzmann law: The effective radius of the black-hole quantum atmosphere*. *Physics letter B.* 2016; 757: 121-124
- [123] Y. Gao, H. Huang, Y. Su, *A parametric study of characteristics of concentrating PV modules*, *Int. J. Low-carbon Technol.* 2010; 5: 57-62.
- [124] A. Royne, C.J. Dey, D.R. Mills, *Cooling of photovoltaic cells under concentrated illumination: a critical review*, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells.* 2005; 86: 451-483.
- [125] A. Laazizi, B. Courant, F. Jacquemin, H. Andrzejewski. *Applied multi-pulsed laser in surface treatment and numerical–experimental analysis*. *Opt Laser Technol.* 2011; 43:1257–63.
- [126] T. Zhu, E. Ertekin. *Generalized Debye-Peierls/Allen-Feldman model for the lattice thermal conductivity of low-dimensional and disordered materials*. *Phys Rev B* 2016, 93:155414.
- [127] E. Skoplaki, J.A. Palyvos. *On the temperature dependence of photovoltaic module electrical performance: A review of efficiency/power correlations*. *Sol Energy* 2009; 88:3614–624
- [128] P. Singh, NM. Ravindra, *Temperature dependence of solar cell performance—an analysis*. *Sol Energy Mater Sol Cells* 2012; 101:36–45.
- [129] Hautcoeur D, Lorgouilloux Y, Lericheb A, Gononc M, Nait-Alid B, Smithd DS, *Thermal conductivity of ceramic/metal composites from preforms produced by freeze casting*. *Ceram Int* 2016; 42:14077–85.
- [130] D Kraemer, K. Mc Enaney, M. Chiesa, G. Chen, *Modeling and optimization of solar thermoelectric generators for terrestrial applications*. *Sol Energy* 2012; 86: 1338–50.

- [131] W. Lin, T.M. Shih, J.C. Zheng, Y. Zhang, J. Chen. *Coupling of temperatures and power outputs in hybrid photovoltaic and thermoelectric modules*. International Journal of Heat and Mass Transfer 2014; 74:121–127
- [132] P. Würfel, U. Würfel, *Physics of solar cells from basic principles to advanced concepts*, third ed. VCH W; 2016.
- [133] W. Regan, S. Byrnes, W. Gannett, O. Ergen, O. Vazquez-Mena, F. Wang. *Screening-engineered field-effect solar cells*. Nano Lett 2012; 12: 4300–4.
- [134] SE. Rock, X. Zhao, JE. Garland, D. Roy, *Experimental considerations for temperature controlled measurements of fast charge recombination times in dyesensitized solar cells using open circuit voltage decay and impedance spectroscopy*; J Measur 2014; 03.012.
- [135] Yu C, Zhang X, Leng M, Shaga A, Liu D, Chen F. *Preparation and thermoelectric properties of inhomogeneous bismuth telluride alloyed nanorods*. J Alloy Compd 2013; 570:86–93.
- [136] D. Faiman, S.M. Tuladhar, J.M. Kroon, M.M. Wienk, T. Fromherz, F. Padinger, C.J. Brabec, N.S. Sariciftci, *Temperature dependence for the photovoltaic device parameters of polymer–fullerene solar cells under operating conditions*, J. Appl. Phys. 90 2001; 10:5343 5350.
- [137] Y. Li, S. Witharana, H. Cao, M. Lasfargues, Y. Huang, Y. Ding. *Wide spectrum solar energy harvesting through an integrated photovoltaic and thermoelectric system*. Particuology 2013; 15: 39–44.
- [138] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O’Quinn. *Thin-film thermoelectric devices with high room temperature figures of merit*. Nature 2001; 413:597–602.
- [139] Y. Qi, Z. Wang, M. Zhang, F. Yang, X. Wang. *Thermoelectric devices based on one-dimensional nanostructures*. J Mater Chem A 2013; 1:6110–24.
- [140] B. Poudel, Q. Hao, Y. Ma, Y. Lan, A. Minnich, B. Yu. *High-thermoelectric performance of nanostructured bismuth antimony telluride bulk alloys*. Science 2008; 320: 634–8.
- [141] W. Xie, J. He, H.J. Kang, X. Tang, S. Zhu, M. Laver, *Identifying the specific nanostructures responsible for the high thermoelectric performance of (Bi, Sb)₂Te₃ nanocomposites*. Nano Lett 2010; 10: 3283–9.
- [142] G. Zhang, K. Jiao, Z. Niu, H. Diao, Q. Du, H. Tian. *Power and efficiency factors for comprehensive evaluation of thermoelectric generator materials*. Int J Heat Mass Transfer 2016; 93:1034–7

- [143] A. Al Tarabsheh, S. Voutetakisb, A. I. Papadopoulosb, P. Seferlisb , I. Etiera, O. Saraereh, *Investigation of Temperature Effects in Efficiency Improvement of Non-Uniformly Cooled Photovoltaic Cells*, Chemical Engineering Transactions. 2013; 35.
- [144] A. Muzaffar, H.M. Ali, W. Moazzam, M. B. Saeed, *Performance enhancement of PV cells through micro-channel cooling*, AIMS Energy. 2015; 3(4): 699-710.
- [145] S. Nizetic, D. Čoko, A. Yadav, F. Grubišić'-Čabo, *Water spray cooling technique applied on a photovoltaic panel: The performance response*, Energy Convers and Manag. 2016; 108: 287–296.
- [146] S. Iqbala, S. Afzalb, A. U. Mazharc, H. Anjumd, A. Diyyane, *Effect of Water Cooling on the Energy Conversion Efficiency of PV Cell*, American Scientific Research Journal for Engineering, Technology, and Sciences ‘ASRJETS’ 2016.
- [147] E. Yin, Q. Li, Y. Xuan. *Thermal resistance analysis and optimization of photovoltaic thermoelectric hybrid system*. Energy Convers and Manag. 2017 ; 143: 188-202.
- [148] D. M. Chapin, C.S. Fuller, G. L. Pearson. *A new silicon p–n junction photocell for converting solar radiation into electrical power*. J. Appl. Phys. 1954; 25: 676–7
- [149] G. Conibeer, *Third-generation photovoltaics Mater. Today* 2007; 10: 42–50
- [150] A. Goetzberger, C. Hebling, H-W. Schock. *Photovoltaic materials, history, status and outlook Mater. Sci. Eng.* 2003, 40:1–46
- [151] A. Lomonaco, *Stockage d'énergie thermique par matériaux*, Thèse doctorale, université pau et des pays de l'Adour. 2015.
- [152] C. Popa, S. Fohanno, C.T. Nguyen, G. Polidori, *On heat transfer in external natural convection flows using two nanofluids*. Int. J. Thermal Sciences 2010, 49: 901-908.
- [153] X.Q. Wang, A.S. Mujumdar, *Heat transfer characteristics of nanofluids: a review*. Int. J. Thermal Sciences 2007; 46: 1-19.
- [154] D. Wen, G. Lin, S. Vafaei, K. Zhang, *Review of nanofluids for heat transfer applications*. Particuology 2009; 7: 141-150.
- [155] S. Ozerinc, S. Kakac, A.G. Yazicioglu, 2010. *Enhanced thermal conductivity of nanofluids: a state-of-the-art review*. Microfluid. Nanofluid 2010 ; 8: 145-170.
- [156] S. FOHANNO. *Nano-fluides et transfert de chaleur par convection naturelle*. Mémoire de fin d'étude. Université de Reims Champagne-Ardenne, 2012.
- [157] J.C. Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. 1873 ; Oxford : Clarendon Press.

- [158] R.L. Hamilton, O.K. Crosser. *Thermal conductivity of heterogeneous two-component systems*. I&EC Fundam. 1962; 1: 182-191.
- [159] C.H. Chon, K.D. Kihm, S.P. Lee, S.U.S. Choi, 2005. *Empirical correlation finding the role of temperature and particle size for nanofluid (Al_2O_3) thermal conductivity enhancement*. Applied Physics Letters. 2005; 87: 153107.
- [160] H.C. Brinkman. *The viscosity of concentrated suspensions and solutions*. J. Chem. Phys. 1952, 20: 571-581.
- [161] A. Hadaoui, *Effets de taille et de concentration sur les propriétés des Nano-fluides*, Université Cadi Ayyad de Marrakech. (2013).
- [162] M. Hajji, H. Labrim, M. Benaissa, A. Laazizi, H. Ez-Zahraouy, E. Ntsoenzok, J. Meot, A. Benyoussef, *Photovoltaic and thermoelectric indirect coupling for maximum solar energy exploitation*. Energy Convers. Manag. 2017 ; 136: 184-191.
- [163] A. Makki, S. Omer, Y. Su, H. Sabir, *Numerical investigation of heat pipe-based photovoltaic–thermoelectric generator (HP-PV/TEG) hybrid system*. Energy Convers. Manage. 2016; 112:274–87.
- [164] AD. John, AB. William, *Solar engineering of thermal processes*. 4th ed. New York: Wiley; 2013.
- [165] TL. Bergman, FP. Incropera, DP. DeWitt, AS. Lavine. *Fundamentals of heat and Mass transfer*. 7th ed. New York: John Wiley & Sons; 2011.
- [166] A. Date, C. Dixon, R. Singh, A. Akbarzadeh, *Theoretical and experimental estimation of limiting input heat flux for thermoelectric power generators with passive cooling*. Sol Energy 2015; 111:201–17.
- [167] T. Cui, Y. Xuan, Q. Li. *Design of a novel concentrating photovoltaic– thermoelectric system incorporated with phase change materials*. Energy Convers Manage 2016; 112:49–60.
- [168] G. Notton, C. Cristofari, M. Mattei, P. Poggi. *Modelling of a double-glass photovoltaic module using finite differences*. Appl Therm Eng 2005; 25:2854–77.
- [169] JH. Lienhard. *A heat transfer textbook*. Cambridge: Phlogiston Press; 2013
- [170] RB. Ganvir, PV. Walke, VM. Kriplani, *Heat transfer characteristics in nanofluid—A review*. Renew and Sust. Energy Rev. 2017; 75: 451–

LISTE DES PUBLICATIONS

- 1) M. Hajji, H. Labrim, M. Benaissa, A. Laazizi, H. Ez-Zahraouy, E. Ntsoenzok, J. Meot, A. Benyoussef, *Photovoltaic and thermoelectric indirect coupling for maximum solar energy exploitation. Energy Convers. Manag.* 2017 ; 136: 184-191.
- 2) M. Hajji, H. Absike, H. Labrim, H. Ez-Zahraouy, M. Benaissa, A. Benyoussef, *Strain effects on the electronic and thermoelectric properties of Bi₂Te₃: A first principles study.* Comp. Cond. Matter. 2018; 16: e00299.
- 3) H. Absike, M. Hajji, H. Labrim, A. Abbassi, H. Ez-Zahraouy, *Electronic, electrical and optical properties of Ag doped CuO through modified Becke Johnson exchange potential.* Superlattice. Microst. 2017, 127: 128-138.
- 4) H. Absike, M. Hajji, H. Labrim, B. Hartiti, H. Ez-Zahraouy, *Strain effects on the electronic and thermoelectric properties of copper oxide.* Comp. Cond. Matter. 2018; 16: e00322.
- 5) Faddouli A., Labrim H., Fadili S., Habchi A., Hartiti B., Benaissa M., Hajji M., EZ-Zahraouy H., Ntsoenzok E., Benyoussef A. *Numerical Analysis and Performance Investigation of New Hybrid System Integrating Concentrated Solar Flat Plate Collector with a Thermoelectric Generator System.* Renewable Energy 2019.
- 6) Brevet en cour de traitement au sein de l'OMPIC sous-titre 'Système hybride solaire autonome, indirectement couplé pour la production simultanée de la chaleur et de l'électricité et son procédé de réalisation'

Résumé

Les avancées scientifiques et technologiques ciblent principalement l'optimisation des systèmes de conversion solaire. Dans ce contexte, cette thèse aborde l'un des sujets suscitant un intérêt au cours de ces dernières années, il s'agit d'une conception capables d'exploiter une large gamme spectrale, d'améliorer la performance et de surmonté les obstacles toujours présentent au niveau des installations photovoltaïques classiques, à savoir les pertes par transmission et thermalisation. La proposition d'un système hybride intégrant deux technologies photovoltaïque et thermoélectrique (PV-TE), a fait l'objet d'une étude approfondie basée sur le transfert thermique et la méthode des éléments finis afin d'étudié sa faisabilité et sa performance, en tenant compte de plusieurs paramètres et plusieurs conceptions. Nos résultats montrent que le couplage indirect est le plus adapté à cette interconnexion entre les deux systèmes photovoltaïque et thermoélectrique, permettant ainsi d'optimiser l'efficacité effective du système toute en gardant une structure compacte facile à assemblé, avec un rendement globale amélioré de plus de 20% par rapport au photovoltaïque seul. De plus, cette structure hybride PV-TE est associée à un système de refroidissement actif et innovant capable de garder les composantes du système hybride sous des températures de fonctionnement optimal et faisant également l'objet d'une étude détaillé.

Mots-clés : Système hybride PV-TE, Conversion d'énergie, Transfert thermique, Refroidissement, Efficacité, Couplage indirect.

Abstract

The advances in sciences and technologies are focused on optimizing solar conversion systems. In this context, this thesis addresses one of the topics of interest in recent years, it is a design able to exploit a wide spectral range, to improve performance and to overcome the obstacles present at the conventional photovoltaic installations, namely transmission and thermalization losses. The proposal for a hybrid system integrating photovoltaic and thermoelectric (PV-TE) technologies has been the subject of a detailed study based on heat transfer and the finite element method to study its feasibility and its performance, taking into account several parameters and several designs. Our results show that the indirect coupling is the most adapted to this interconnection between the two photovoltaic and thermoelectric systems, thus making it possible to optimize the effective efficiency of the system while keeping a compact structure easy to assembled, with an overall improved efficiency of moreover 20% compared to photovoltaic alone. In addition, this hybrid PV-TE structure is associated with an active and innovative cooling system able to keep the components of the hybrid system under optimal operating temperatures and subject to a detailed study.

Keywords: Hybrid system, Energy Conversion, Heat Transfer, Cooling, Efficiency, Indirect Coupling