

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

Université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi - Bordj Bou Arreridj

Faculté des Sciences et de la technologie

Département d'électronique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par

- **Haddadji Doudja**
- **Bouassi Khaira**

Intitulé

***Etude et simulation d'une cellule solaire à base
des matériaux pérovskite***

Soutenu le :/06/2024

Devant le Jury composé de :

<i>Nom & Prénom</i>	<i>Grade</i>	<i>Qualité</i>	<i>Etablissement</i>
.....	<i>MCB</i>	<i>Président</i>	<i>Univ-BBA</i>
<i>M.Saidani Okba</i>	<i>MCB</i>	<i>Encadreur</i>	<i>Univ-BBA</i>
.....	<i>MCB</i>	<i>Examineur</i>	<i>Univ-BBA</i>

Année Universitaire 2024/2025



REMERCIEMENT

Nous tenons à remercier avant tout DIEU de nous avoir données le courage d'achever ce travail.

Nous tenons à remercier dans un premier temps, toute l'équipe pédagogique d'université de Mohamed El-Bachir El-Ibrahimi- et les intervenants professionnels responsables de l'université, pour tous leurs efforts et leurs conseils.

Nous remercions également Mr. Saidani Okba pour l'aide et les conseils concernant les missions évoquées dans ce rapport, qu'il m'a apporté lors des différents suivis.

Nous remercions également Mr. Yousfi Abderrahim : notre chef d'option.

Je tiens à exprimer mes remerciements et ma gratitude en particulier à tous les professeurs du Département d'Électronique en général et de Microélectronique en particulier.



DEDICACE

*Je dédie ce travail à mes très chers parents qui
ont tant prié à mon réussite, De soutien moral.
Je les remercie de m'avoir encouragé et aidés à
devenir ce que Je suis, Et grand-père et à toute la famille.*

A ma chère amie :

Doudja et Samira et silya et tous les amis.

À toute la promo Microélectronique 2024.

*Et pour tous ceux qui ont contribué de près ou de loin
ce projet puis-je dire merci.*

Khaira Bouaici





DEDICACE

À mes très chers parents qui ont tant prié pour ma réussite, de m'avoir encouragé et d'aidés à devenir ce que je suis

À mes chers frères qui m'a bien aidé,

À mon encadreur Okba. Saidani

À ma famille, mes tous mes cousins.

À toute la promotion master 2 Microélectronique 2024.

À tous mes amis surtout khaira et marwa en outre silya

, et tous ceux qui m'ont aidé à faire ce travail de près et de loin.

Doudja Haddadji



Table des matières

ملخص.....	vi
Résumé.....	vii
Abstract.....	viii
Liste des symboles.....	xi
Liste des abréviations.....	xiii
Liste des Figures.....	xv
Liste des tableaux.....	xxi
Introduction Générale.....	1
<u>CHAPITRE I : Notions générales sur les cellules solaires</u>	
I.1. Introduction	6
I.2. Histoire du photovoltaïque.....	6
I.3. Rayonnement solaire	7
I.3.1. Spectre solaire	9
I.3.2. Air masse	10
I.4. Cellule solaire	11
I.4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	13
I.4.2. Caractéristiques électriques d'une cellule solaire	15
I.4.3. Circuit équivalent d'une cellule solaire	16
I.5. Paramètres d'une cellule solaire	16
I.5.1. Densité du courant de court-circuit (Jsc).....	16
I.5.2. Tension en circuit ouvert (Voc)	17
I.5.3. Puissance maximale (Pm).....	17
I.5.4. Facteur de forme (FF).....	17
I.5.5. Rendement photovoltaïque (η)	18

Table des matières

I.6. Résistances parasites	19
I.6.1. Résistance Série	19
I.6.2. Résistance shunt	20
I.7. Conclusion.....	20

Bibliographie chapitre I

CHAPITRE II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

II .1. Introduction.....	25
II .2. Historique	25
II .3. Matériau pérovskite	27
II .3.1. Structure cristallographique de la pérovskite	27
II .3.2. Propriétés opto-électroniques	27
II.3.2.1. Propriétés optiques.....	27
II.3.2.2. Propriétés électroniques	29
II .4. Applications des matériaux pérovskites	30
II .5. Architecture des cellules solaires Pérovskites	31
II .6. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites	32
II .7. Conclusion.....	35

Bibliographie chapitre II

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

III.1. Introduction.....	38
III.2. Présentation du logiciel SCAPS	38
III.2.1. Utilisation et étapes de la simulation	38

Table des matières

III.3. Description de la structure de la cellule solaire à base des pérovskites.....	39
III.3.1. Description de la structure.....	39
III.3.2. Modèles et paramètres de simulation	40
III.3.3. Diagramme de bande d'énergie	41
III.3.4. Effet de l'épaisseur de la couche de pérovskites	42
III.3.5. Effet de l'épaisseur de la couche ETL	44
III.3.6. Effet de l'épaisseur de la couche HTL	45
III.3.7. Effet des défauts de la couche de pérovskites	47
III.3.8. Effet de la température	49
III.3.9. Effet de la résistance série et shunt	50
V.4. Conclusion.....	52
Bibliographie chapitre III	
Conclusion générale.....	56

يعتبر استخدام خليط البيروفسكايت من الرصاص والقصدير بشكل عام طريقة فعالة لتوسيع الطول الموجي للامتصاص لأغشية البيروفسكايت الرقيقة. في هذه الدراسة، نقتراح إعدادًا مبتكرًا لمحاكاة الخلايا الشمسية باستخدام جهاز محاكاة SCAPS-1D. يدمج إطار المحاكاة الخاص بنا طبقات نقل الإلكترون المتقدمة (ETLs) المستندة إلى بكمينستر فوليرين (C_{60}) وطبقات نقل الثقب (HTLs) المستندة إلى ثاني أكسيد السيريوم (Cu_2O). توضح نتائج المحاكاة أن الهياكل المتغيرة المكونة من $ITO/C_{60}/FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3/Cu_2O/Ag$ تظهر كفاءة ملحوظة في تحويل الضوء. بالإضافة إلى ذلك، يتم إجراء تحليل متعمق لدراسة تأثير المعلمات المختلفة بما في ذلك سمك الامتصاص $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ ، وسمك ETL، وسمك HTL، ودرجة حرارة التشغيل ومقاومة السلسلة. تظهر نتائج المحاكاة جهدًا مثاليًا للدائرة المفتوحة (V_{oc}) يبلغ 1.13 فولت، وكثافة تيار الدائرة القصيرة (J_{sc}) تبلغ 31.45 مللي أمبير/سم²، وعامل التعبئة (FF) بنسبة 82.68 %، وفعالية إجمالية قدرها 29.41 %، وكلها في توافق ممتاز مع البيانات المنشورة في الأبحاث السابقة. لا يوفر بحث المحاكاة المكثف هذا رؤى مفيدة حول العوامل المعقدة التي تؤثر على خلايا البيروفسكايت الشمسية فحسب، بل يشير أيضًا إلى اتجاه واعد للتقدم المستقبلي في هذا المجال.

الكلمات المفتاحية: النمذجة والمحاكاة، $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ ؛ SCAPS-1D ؛ كفاءة.

Résumé

L'utilisation d'une pérovskite mixte au plomb et à l'étain est généralement considérée comme une méthode efficace pour élargir la longueur d'onde d'absorption des films minces de pérovskite. Dans cette étude, nous proposons une configuration innovante pour simuler des cellules solaires en utilisant le simulateur SCAPS-1D. Notre cadre de simulation intègre des couches de transport d'électrons avancées (ETLs) basées sur le Buckminsterfullerène (C_{60}) et des couches de transport de trous (HTLs) basées sur le dioxyde de cérium (Cu_2O). Les résultats de la simulation démontrent que les hétérostructures composées de ITO/ C_{60} /FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃/Cu₂O/Ag présentent une efficacité de conversion de la lumière remarquable. De plus, une analyse approfondie est menée pour étudier l'impact de divers paramètres, notamment l'épaisseur de l'absorbeur FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃, l'épaisseur de l'ETL, l'épaisseur de l'HTL, la température de fonctionnement et la résistance en série. Les résultats de la simulation montrent une tension de circuit ouvert optimale (V_{oc}) de 1.13 V, une densité de courant de court-circuit (J_{sc}) de 31.45 mA/cm², un facteur de forme (FF) de 82.68 % et une efficacité globale de 29.41 %, tous en excellent accord avec les données publiées dans des recherches antérieures. Cette recherche de simulation approfondie offre non seulement des aperçus utiles sur les facteurs complexes affectant les cellules solaires à pérovskite, mais elle indique également une direction prometteuse pour les avancées futures dans le domaine.

Mots clés : Modélisation, Simulation, FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃ ; SCAPS-1D ; efficacité.

Abstract

The use of a mixed lead and tin perovskite is generally considered to be an effective method for broadening the absorption wavelength of perovskite thin films. In this study, we propose an innovative setup to simulate solar cells using the SCAPS-1D simulator. Our simulation framework integrates advanced electron transport layers (ETLs) based on Buckminsterfullerène (C_{60}) and hole transport layers (HTLs) based on cerium dioxide (Cu_2O). The simulation results demonstrate that the heterostructures composed of $ITO/C_{60}/FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3/Cu_2O/Ag$ exhibit remarkable light conversion efficiency. Additionally, an in-depth analysis is conducted to study the impact of various parameters including absorber thickness $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$, ETL thickness, HTL thickness, operating temperature and series resistance. Simulation results show an optimal open circuit voltage (V_{oc}) of 1.13 V, short circuit current density (J_{sc}) of 31.45 mA/cm^2 , fill factor (FF) of 82.68% and an overall effectiveness of 29.41%, all in excellent agreement with data published in previous research. This extensive simulation research not only provides useful insights into the complex factors affecting perovskite solar cells, but it also points to a promising direction for future advancements in the field.

Keywords: Modeling; Simulation; $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$; SCAPS-1D; efficiency.

Liste des symboles

E_g	Gap d'énergie interdite d'un matériau	eV
ND	Concentration des atomes donneurs	cm ³
NA	Concentration des atomes accepteurs	cm ³
E_f	Niveau de FERMI	eV
E_i	Niveau intrinsèque	eV
E_c	Niveau de conduction	eV
E_v	Niveau de valence	eV
T	Température	K
λ	Longueur d'onde	μm
J_{sc}	Densité du courant de court-circuit	mA/cm ²
V_{oc}	Tension en circuit ouvert	V
K_b	Constante de Boltzmann	eV K ⁻¹
R	Coefficient de réflexion	%
α	Coefficient d'absorption	1/cm ³
ϑ	Fréquence de la radiation	s ⁻¹
C	Vitesse de la lumière	m/s
E	Energie du photon	eV
h	Constante de Planck	eV.s
ρ	Résistivité	Ω cm
q	Charge élémentaire d'électrons	C
X_e	Affinité électronique	eV
μ_n	Mobilité des électrons	cm ² /Vs

Liste des symboles

μ_p	Mobilité des trous	cm^2/Vs
R_n	Taux de recombinaison des électrons	$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$
R_p	Taux de recombinaison des trous	$\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$
EQE	Rendement quantique externe	%

Liste des abréviations

AM	Air Mass
AM0	Spectre solaire hors atmosphère
AM1.5G	Spectre solaire terrestre (global).
PV	Photovoltaic
(I-V)	la caractéristique courant-tension
(P-I)	la caractéristique puissance-courant
(P-V)	la caractéristique puissance-tension
(CdTe)	le tellure de cadmium
(CIGS)	le sélénure/sulfure de cuivre- indium et de gallium
DSSC	Dye Sensitized Solar Cell
CaTiO₃	Titanate de calcium
AMX₃	Structure d'un cristal de pérovskite générique.
LED	Diode électroluminescente
ETL	Electron Transport Layer
HTL	Hole Transport Layer
Al	l'aluminium
Ag	l'argent
TiO₂	Le dioxyde de titane
FA0.5MA0.5Pb0.5Sn0.5I₃	formamidinium (FA) et la méthylammonium (MA), tandis que "Pb" fait au plomb et "Sn" à l'étain. "I" représente l'iodure
FTO	l'oxyde d'étain dopé au fluor

CHAPITRE I : Notions générales sur les cellules solaires

Figure I.1 : Les Cellules photovoltaïque.

Figure I.2 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, Notion de la convention AM.

Figure I.3 : Spectre d'émission solaire.

Figure I.4 : Spectres solaires AM0 (rouge) et AM1.5G (noir).

Figure I.5 : Air masse.

Figure I.6 : Différentes positions de soleil.

Figure I.7: Schéma représentatif de l'effet photovoltaïque.

Figure I.8 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.

Figure I.9 : Caractéristiques courant-tension $I(V)$ (Ligne continue) et puissance (Ligne pointillée) d'une cellule solaire.

Figure I.10 : schéma équivalent d'une cellule solaire.

Figure I.11: Les courbe $I=f(v)$.

Figure I.12: L'effet de la résistance série sur la caractéristique J-V, simulation.

Figure I.13: L'effet de la résistance shunt (R_{sh}) sur la caractéristique J-V, simulation.

CHAPITRE II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

Figure II.1 : Un type de pérovskite.

Figure II.2 : Représentation de la structure de la pérovskite.

Figure II.3 : Courbe d'absorption des matériaux : c-Si, CdTe : CuInSe₂, CuGaSe₂ et CH₃NH₃PbI₃ .

Figure II.4 : a) Courbes d'absorption de différentes pérovskites (MAPI, FAPI, CsPI) ; b) d'absorption de FAPbIyBr_{3-y} en fonction du ratio y.

Liste des Figures

Figure II.5 : Exemples d'applications des matériaux pérovskites.

Figure II.6: Les quatre architectures les plus utilisés dans les cellules solaires à pérovskite, (a) mésoporeux, (b) couche de recouvrement, (c) n-i-p planaire et (d) p-i-n planaire.

Figure II.7 : Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique.

Figure II.8 : Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite.

Figure II.9 : Processus de transport de charge dans les cellules à pérovskite(a) structure mésoporeuse, (b) structure planaire.

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

Figure III.1 : La fenêtre du panneau d'action du logiciel SCAPS.

Figure III.2 : Structure de cellule solaire basé sur PVK.

Figure III.3: (a) Alignement du niveau d'énergie, (b) Diagramme de bande à base de $\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$.

Figure III.4: Effet de l'épaisseur de la pérovskite ($\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$) sur J-V (a), V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE (b) et EQE (c).

Figure III.5: Effet de l'épaisseur ETL (C60) sur J-V (a), V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE (b) et EQE (c).

Figure III.6: Effet de l'épaisseur HTL (Cu_2O) sur les V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE.

Figure III.7: Effet de la densité de défauts N_t (cm^{-3}) sur J-V (a), V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE (b) et EQE(c).

Figure III.8: Effet de la température sur J-V (a), V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE (b) et EQE (c).

Figure III.9: Effets de R_s (a) et R_{sh} (b) sur les V_{OC} ; J_{SC} ; FF ; PCE.

CHAPITRE II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

Tableau II.1 : Propriétés physiques des matériaux les plus communs pour le photovoltaïque.

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

Tableau III.1: Les paramètres de structure de cellule solaire basé sur PVK.



Introduction Générale

Introduction Générale

Les pérovskites hybrides organiques-inorganiques ont suscité un intérêt considérable en tant que matériaux semi-conducteurs prometteurs en raison de leurs excellentes propriétés photovoltaïques [1-2]. Des coefficients d'absorption optique élevés, de longues longueurs de diffusion des porteurs, une préparation facile, un faible coût et une efficacité élevée sont parmi les avantages des matériaux pérovskites hybrides organiques-inorganiques [3]. Afin d'atteindre une efficacité de conversion de puissance (PCE) élevée dans les cellules solaires à pérovskite, des chercheurs de divers horizons ont déployé des efforts considérables pour améliorer la structure du dispositif et optimiser la couche de pérovskite [4-5]. Au cours des dernières années, le rendement de conversion de puissance des pérovskites hybrides organiques-inorganiques est passé de 3.81 % à 25.2 % [6-7]. Cependant, pour réaliser l'application industrielle des cellules solaires à pérovskite, de nombreux problèmes subsistent, tels que la recherche et le développement de matériaux non toxiques. L'élément métallique Pb présent dans les matériaux actuels à haut rendement absorbant la lumière des cellules solaires pérovskites est l'un des produits chimiques qui mettent gravement en danger la vie humaine et l'environnement naturel [8-9]. Les cellules solaires à base de pérovskite contenant du plomb ont une stabilité thermique et chimique médiocre, et le plomb métallique contenu dans le film est facilement libéré, polluant ainsi l'environnement [10-11]. Par conséquent, une autre caractéristique des matériaux pérovskites est leur capacité à réguler facilement les éléments constitutifs du matériau, ce qui est très favorable à l'utilisation d'éléments non toxiques ou peu toxiques pour remplacer le plomb métallique dans un souci de respect de l'environnement [12-13]. La recherche sur les cellules solaires à pérovskite sans plomb s'est intensifiée ces dernières années, et de nombreuses études ont exploré des alternatives au plomb telles que l'étain (Sn), le germanium (Ge) et le cuivre (Cu) [14]. Il a été démontré que l'étain remplace totalement ou partiellement le plomb dans les cellules solaires à pérovskite [15]. Le spectre d'absorption des matériaux pérovskites à base d'étain présente un décalage significatif vers le rouge par rapport à ceux à base de plomb. La longueur d'onde de coupure d'absorption a été étendue de 800 à environ 950 nm, et la bande interdite optique a été réduite de 1.45 à environ 1.21 eV [16]. Des chercheurs, comme Zhu et al., ont atteint un rendement de conversion photovoltaïque (PCE) de 15.2 % dans les cellules solaires à pérovskite de composition $\text{MAPb}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}\text{I}_3$. L'augmentation supplémentaire du PCE des cellules $\text{FA}_{0.8}\text{Cs}_{0.2}\text{Pb}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}\text{I}_3$ et $\text{MA}_{0.9}\text{Cs}_{0.1}\text{Pb}_{0.75}\text{Sn}_{0.25}\text{I}_3$ à 14.5-14.6 % était le résultat de l'ajout de Cs à la couche de pérovskite [17].

Introduction Générale

Dans ce travail, nous introduisons une méthode innovante de simulation de cellules solaires à l'aide du simulateur SCAPS-1D. Notre approche intègre des couches de transport d'électrons (ETL) avancées constituées Buckminsterfullerène (C_{60}) et des couches de transport de trous (HTL) composées de d'oxyde de cuivre (Cu_2O). Nos simulations démontrent que le cellule solaire (ITO) / C_{60} / $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ / Cu_2O / Ag, présentent une efficacité de photoconversion exceptionnellement élevée. De plus, notre enquête va au-delà d'un examen au niveau de la surface, en se plongeant dans une exploration complète de multiples facteurs influençant les performances des cellules solaires à base de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$. Nous examinons l'impact de divers paramètres, notamment l'épaisseur de l'absorbeur PVK, l'épaisseur ETL, l'épaisseur HTL, la résistance en série, l'épaisseur ETL et la température de fonctionnement. Ces analyses fournissent des informations précieuses sur l'interaction complexe de ces facteurs, mettant en lumière la manière dont ils affectent la stabilité et l'efficacité de la PCE. En fin de compte, notre étude approfondie de simulation approfondit non seulement notre compréhension des subtilités liées à ces cellules solaires, mais ouvre également des opportunités prometteuses pour la recherche et le développement futurs dans le domaine du photovoltaïque.

Cette mémoire est structurée de la façon suivante :

Chapitre I : nous allons explorer les principes fondamentaux du rayonnement solaire. Nous étudierons les processus qui se produisent lorsque la lumière solaire rencontre un semi-conducteur, notamment l'absorption de la lumière et la création de paires électron-trou. Nous examinerons également le fonctionnement de base des cellules photovoltaïques, ainsi que les divers paramètres électriques qui les caractérisent.

Chapitre II : nous allons explorer l'histoire des pérovskites, leur structure cristallographique, leurs propriétés opto-électroniques, ainsi que leurs applications. Nous aborderons également l'architecture des cellules solaires à pérovskites et les principes de fonctionnement qui les soutiennent.

Chapitre III : Nous expliquerons le programme de simulation SCAPS-1D, suivi d'une brève explication de la méthode utilisée pour simuler les cellules solaires à l'aide de ce programme. Nous discuterons ensuite de la structure de la cellule solaire à pérovskite $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ ainsi que de ses propriétés physiques, des modèles et des paramètres physiques utilisés dans la

simulation numérique. Enfin, nous étudierons et interpréterons les résultats de la simulation électrique de cette structure.

Bibliographie

- [1] Hou, Y., Du, X., Scheiner, S., McMeekin, D. P., Wang, Z., Li, N., ... & Brabec, C. J. (2017). A generic interface to reduce the efficiency-stability-cost gap of perovskite solar cells. *Science*, 358(6367), 1192-1197.
- [2] Chen, L. C., Tien, C. H., Tseng, Z. L., & Ruan, J. H. (2019). Enhanced efficiency of MAPbI₃ perovskite solar cells with FAPbX₃ perovskite quantum dots. *Nanomaterials*, 9(1), 121.
- [3] Wu, Y., Xie, F., Chen, H., Yang, X., Su, H., Cai, M., ... & Han, L. (2017). Thermally stable MAPbI₃ perovskite solar cells with efficiency of 19.19% and area over 1 cm² achieved by additive engineering. *Advanced materials*, 29(28), 1701073.
- [4] Xie, F., Chen, C. C., Wu, Y., Li, X., Cai, M., Liu, X., ... & Han, L. (2017). Vertical recrystallization for highly efficient and stable formamidinium-based inverted-structure perovskite solar cells. *Energy & Environmental Science*, 10(9), 1942-1949.
- [5] Chiang, C. H., & Wu, C. G. (2016). Bulk heterojunction perovskite-PCBM solar cells with high fill factor. *Nature Photonics*, 10(3), 196-200.
- [6] Ye, F., Yang, W., Luo, D., Zhu, R., & Gong, Q. (2017). Applications of cesium in the perovskite solar cells. *Journal of Semiconductors*, 38(1), 011003.
- [7] Fu, F., Pisoni, S., Weiss, T. P., Feurer, T., Wäckerlin, A., Fuchs, P., ... & Buecheler, S. (2018). Compositionally graded absorber for efficient and stable near-infrared-transparent perovskite solar cells. *Advanced Science*, 5(3), 1700675.
- [8] Zhang, H., Cheng, J., Li, D., Lin, F., Mao, J., Liang, C., ... & Choy, W. C. (2017). Toward all room-temperature, solution-processed, high-performance planar perovskite solar cells: a new scheme of pyridine-promoted perovskite formation. *Adv. Mater.*, 29(13), 1604695.
- [9] Qin, X., Zhao, Z., Wang, Y., Wu, J., Jiang, Q., & You, J. (2017). Recent progress in stability of perovskite solar cells. *Journal of Semiconductors*, 38(1), 011002.

Introduction Générale

- [10] Wang, Z., Shi, Z., Li, T., Chen, Y., & Huang, W. (2017). Stability of perovskite solar cells: a prospective on the substitution of the A cation and X anion. *Angewandte Chemie International Edition*, 56(5), 1190-1212.
- [11] Li, B., Li, Y., Zheng, C., Gao, D., & Huang, W. (2016). Advancements in the stability of perovskite solar cells: degradation mechanisms and improvement approaches. *RSC advances*, 6(44), 38079-38091.
- [12] Slavney, A. H., Smaha, R. W., Smith, I. C., Jaffe, A., Umeyama, D., & Karunadasa, H. I. (2017). Chemical approaches to addressing the instability and toxicity of lead-halide perovskite absorbers. *Inorganic chemistry*, 56(1), 46-55.
- [13] Shao, S., Liu, J., Portale, G., Fang, H. H., Blake, G. R., ten Brink, G. H., ... & Loi, M. A. (2018). Highly reproducible Sn-based hybrid perovskite solar cells with 9% efficiency. *Advanced Energy Materials*, 8(4), 1702019.
- [14] Zhu, H. L., Xiao, J., Mao, J., Zhang, H., Zhao, Y., & Choy, W. C. (2017). Controllable Crystallization of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Sn}_{0.25}\text{Pb}_{0.75}\text{I}_3$ Perovskites for Hysteresis-Free Solar Cells with Efficiency Reaching 15.2%. *Advanced Functional Materials*, 27(11), 1605469.
- [15] Prasanna, R., Leijtens, T., Dunfield, S. P., Raiford, J. A., Wolf, E. J., Swifter, S. A., ... & McGehee, M. D. (2019). Design of low bandgap tin-lead halide perovskite solar cells to achieve thermal, atmospheric and operational stability. *Nature Energy*, 4(11), 939-947.
- [16] Lin, R., Xiao, K., Qin, Z., Han, Q., Zhang, C., Wei, M., ... & Tan, H. (2019). Monolithic all-perovskite tandem solar cells with 24.8% efficiency exploiting comproportionation to suppress Sn (ii) oxidation in precursor ink. *Nature Energy*, 4(10), 864-873.
- [17] Stoumpos, C. C., Malliakas, C. D., & Kanatzidis, M. G. (2013). Semiconducting tin and lead iodide perovskites with organic cations: phase transitions, high mobilities, and near-infrared photoluminescent properties. *Inorganic chemistry*, 52(15), 9019-9038.



*Chapitre I : Notions générales
sur les cellules solaires*

I.1. Introduction

Le soleil constitue une source d'énergie presque illimitée, capable de répondre à des milliers de fois notre consommation énergétique mondiale. C'est pourquoi l'humanité cherche depuis longtemps à exploiter cette ressource abondante et largement répartie sur notre planète. Pour atteindre cet objectif, nous avons développé les cellules photovoltaïques, qui convertissent la lumière solaire en électricité. Cette technologie est devenue une alternative cruciale aux sources d'énergie conventionnelles en déclin, comme le pétrole.

Dans ce chapitre, nous allons explorer les principes fondamentaux du rayonnement solaire. Nous étudierons les processus qui se produisent lorsque la lumière solaire rencontre un semi-conducteur, notamment l'absorption de la lumière et la création de paires électron-trou. Nous examinerons également le fonctionnement de base des cellules photovoltaïques, ainsi que les divers paramètres électriques qui les caractérisent.

I.2. Histoire du photovoltaïque

L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien Alexandre Edmond Becquerel, qui a observé un photo-courant en éclairant des électrodes de platine recouvertes de chlorure ou de bromure d'argent dans un liquide. Les premiers rapports sur la photoconductivité du matériau sélénium ont été rédigés par Smith et Adam respectivement en 1873 et 1876. Albert Einstein a expliqué le phénomène photoélectrique en 1905, ce qui lui a valu le prix Nobel de physique en 1921. En 1906, Pochettino et en 1913, Volmer ont observé pour la première fois la photoconductivité dans l'anthracène, un composé organique. En 1954, les chercheurs du Bell Laboratory ont développé la première cellule solaire inorganique avec une efficacité de 4%. Par la suite, en 1958, Hoffman Electronics a réalisé des cellules photovoltaïques avec une efficacité de 9%, puis de 14% deux ans plus tard. À la fin des années 1950, les photorécepteurs à base de composés organiques ont été largement utilisés dans les systèmes d'imagerie, et dans les années 1960, il a été découvert que certains colorants tels que le bleu de méthylène possédaient des propriétés semi-conductrices. De plus, l'effet photovoltaïque a été observé dans plusieurs molécules biologiques telles que les caroténoïdes, les chlorophylles et les porphyrines. L'intérêt scientifique et commercial pour les cellules photovoltaïques a augmenté, conduisant à des améliorations constantes de leur efficacité de conversion au fil des ans. Actuellement, les cellules solaires à base de silicium dominent le marché en raison de leur efficacité et de leur stabilité accrues, résultant en une baisse significative des coûts

de production et une croissance considérable du marché mondial du photovoltaïque au cours des 20 dernières années.

Une solution prometteuse pour réduire davantage les coûts et améliorer l'efficacité consiste à associer le silicium avec la pérovskite dans une configuration tandem. La pérovskite, avec sa bande interdite variable, peut être facilement couplée avec le silicium. Cette technologie présente plusieurs avantages, notamment une fabrication à basse température, des coûts réduits, des dispositifs flexibles et une variété de matières premières. Malgré les progrès réalisés, la technologie photovoltaïque organique-inorganique est encore en phase de recherche et développement en laboratoire. Toutefois, la commercialisation de cette technologie dépendra principalement du développement de procédés à faible coût et d'une amélioration continue de son rendement de conversion [1].



Figure I.1 : Les Cellules photovoltaïque [2].

I.3. Rayonnement solaire

Le rayonnement solaire se compose de photons dont les longueurs d'onde s'étendent de l'ultraviolet ($0.2 \mu\text{m}$) à l'infrarouge lointain ($2.5 \mu\text{m}$). La notion d'AM (Air Mass) est utilisée pour caractériser le spectre solaire en termes d'énergie émise. L'énergie totale transportée par le rayonnement solaire sur une distance soleil-terre est d'environ 1350 W/m^2 (AM0) dans l'espace, en dehors de l'atmosphère terrestre. Lorsque ce rayonnement traverse

l'atmosphère, il subit une atténuation et une modification de son spectre, notamment en raison de phénomènes d'absorption et de diffusion dans les gaz, l'eau et les poussières. Par exemple, la couche d'ozone absorbe une partie du spectre lumineux du soleil, notamment les ultraviolets dangereux pour la santé.

Le rayonnement solaire direct reçu au niveau du sol (à 90° d'inclinaison) atteint environ 1000 W/m^2 en raison de l'absorption dans l'atmosphère (AM1). Cette valeur varie en fonction de l'inclinaison des rayons lumineux par rapport au sol. Plus l'angle de pénétration θ est faible, plus l'épaisseur atmosphérique traversée par les rayons est importante, ce qui entraîne une perte d'énergie conséquente. Par exemple, l'énergie directe transportée par le rayonnement solaire atteignant le sol avec un angle de 48° est d'environ 833 W/m^2 (AM1.5). Pour obtenir le rayonnement global reçu au sol, il faut ajouter à cela le rayonnement diffus. Le rayonnement diffus comprend tout le rayonnement dont la trajectoire entre le soleil et le point d'observation n'est pas géométriquement rectiligne et qui est dispersé ou réfléchi par l'atmosphère ou le sol. En tenant compte de cela, on obtient une référence du spectre global notée AM1.5 avec une puissance de 1000 W/m^2 , qui correspond à nos latitudes habituelles [3].

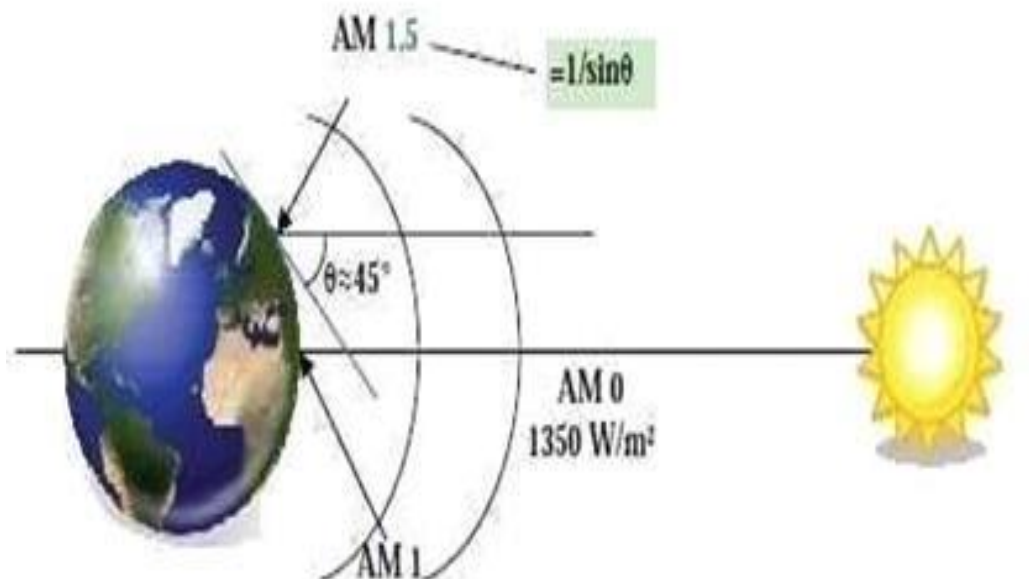


Figure I.2 : Normes de mesures du spectre d'énergie lumineuse émis par le soleil, Notion de la convention AM [4].

L'énergie d'un photon est donnée par la relation :

$$E = h \cdot \frac{c}{\lambda} \quad (\text{I-1})$$

Où h est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière et λ sa longueur d'onde. Ainsi, plus la longueur d'onde est courte, plus l'énergie du photon est grande [6].

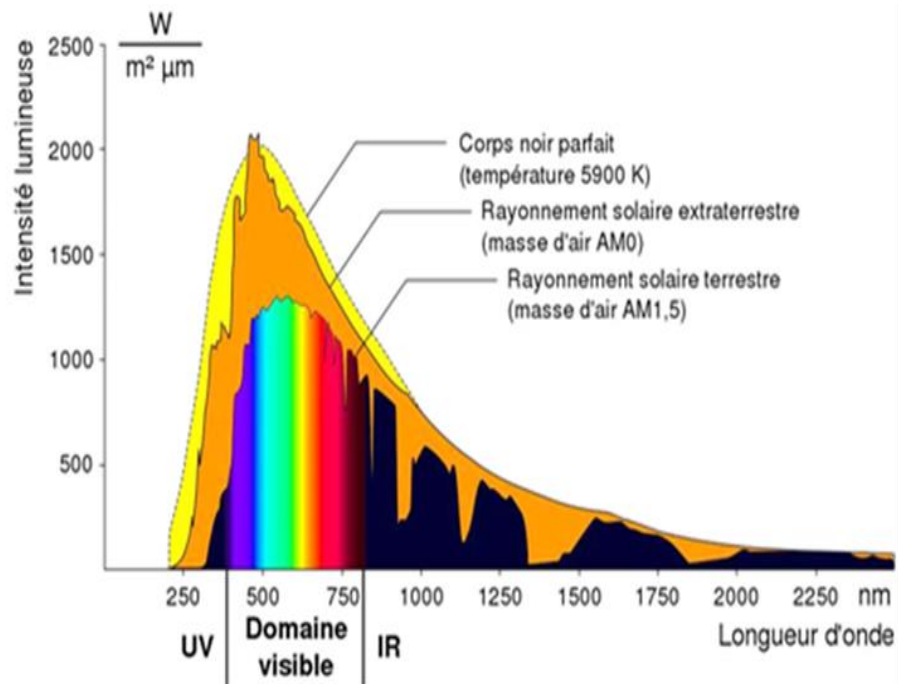


Figure I.3 : Spectre d'émission solaire [7].

I.3.1. Spectre solaire

Le spectre solaire est en fait constitué d'une variété de rayonnements présentant différentes énergies et couleurs, définies par leur longueur d'onde respective. Les photons, particules élémentaires de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique, sont considérés comme des porteurs d'énergie liée à leur longueur d'onde. La distribution du rayonnement solaire extraterrestre, compilée à partir des données satellites, est désignée sous le nom d'AMO (Air Mass Zero) et représente sa répartition en fonction de la longueur d'onde. La figure (I-4) illustre l'atténuation observée après la traversée de l'épaisseur atmosphérique correspondant à une masse d'air de 1.5, équivalant à un angle solaire de 41.8 degrés au niveau de la mer. Ce spectre, appelé

AM 1.5 dans des conditions de ciel clair, devient la référence pour les différentes mesures relatives aux cellules photovoltaïques [8].

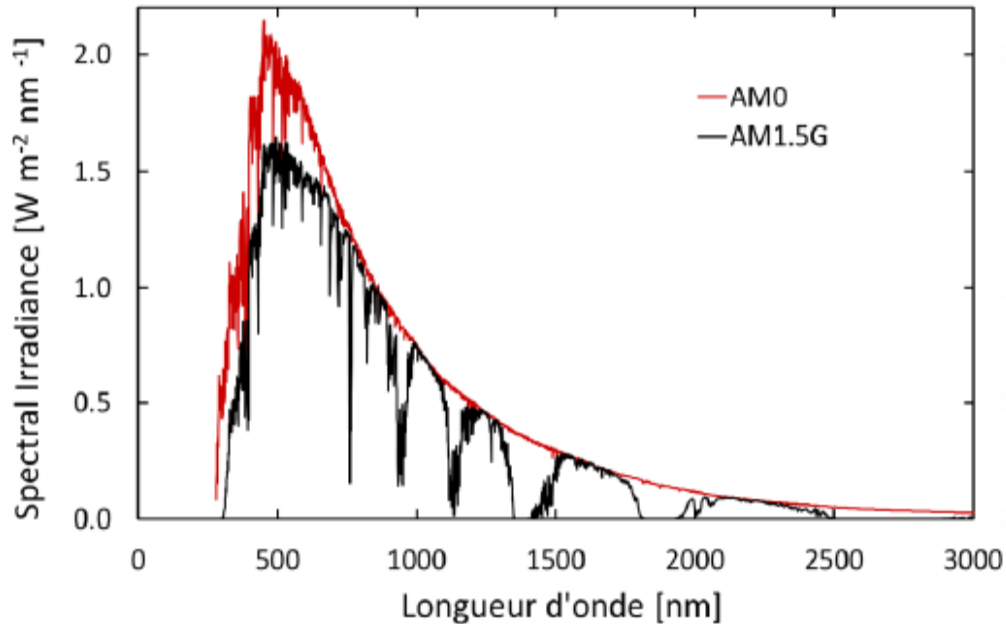


Figure I.4 : Spectres solaires AM0 (rouge) et AM1.5G (noir) [9].

I.3.2. Air masse

Les initiales "AM" désignent la "masse d'air", qui représente la quantité d'air entre une surface donnée et le Soleil, influençant la distribution spectrale et l'intensité de la lumière solaire. Plus précisément, elle correspond à l'épaisseur de l'atmosphère traversée par le rayonnement solaire avant d'atteindre un point spécifique sur Terre. En dehors de l'atmosphère, la masse d'air traversée par le rayonnement solaire est nulle. Le "rapport air-masse" est le rapport entre la trajectoire atmosphérique réellement parcourue par le rayonnement solaire dans une situation donnée et la trajectoire atmosphérique qu'il aurait parcourue s'il était arrivé perpendiculairement à la surface de la Terre (en plein soleil). Ainsi, le rapport air-masse à l'extérieur de l'atmosphère est appelé rapport air-masse = 0 ou simplement AM0. La longueur totale de l'atmosphère au niveau de la mer, avec le soleil à la verticale, est normalisée à 1, donnant un rapport air-masse de 1 ou simplement AM1 dans cette situation. Pour tout autre angle zénithal θ_z , le rapport air-masse peut être estimé comme suit : Rapport air-masse = Y/X , où Y est le chemin réel parcouru par le rayonnement solaire et X est la longueur unitaire de la masse d'air lorsque la position du soleil est à la verticale à cet endroit.

En utilisant la trigonométrie, cette quantité peut être exprimée comme $\sec \theta_z = 1/\cos(\theta_z)$. Les conditions standards sont généralement définies pour permettre la comparaison des performances de différentes unités PV (cellules, modules). Selon l'état actuel de la technologie, la quantité d'énergie solaire exploitable est estimée à environ 1482 EJ, représentant seulement 0.13% du potentiel énergétique total [10].

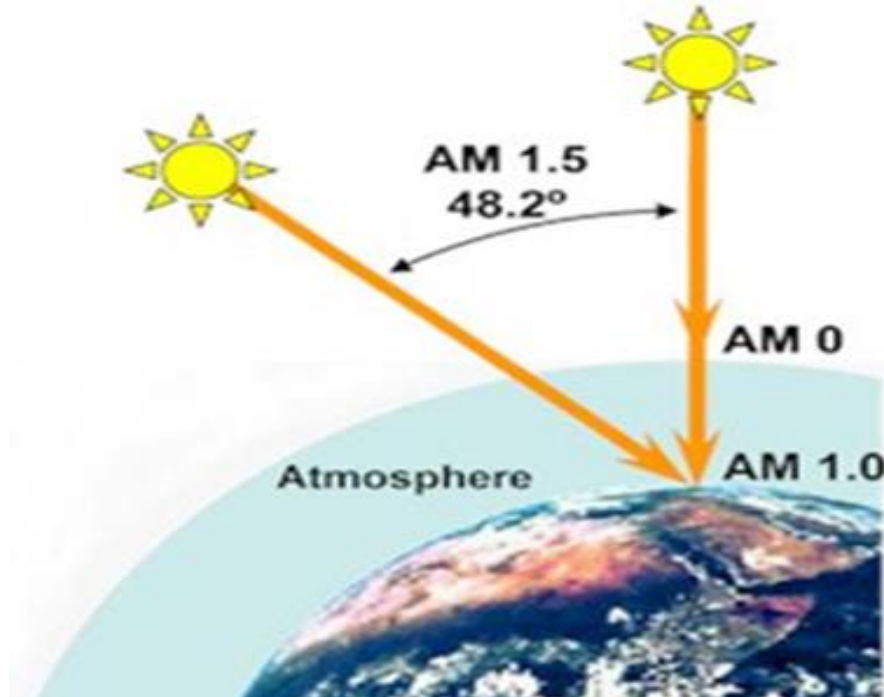


Figure I.5 : Air masse [11].

I.4. Cellule solaire

Les technologies PV tirent leur nom du processus qui les régit, à savoir l'effet photovoltaïque. C'est le phénomène qui permet à un matériau semi-conducteur de convertir la lumière incidente en courant électrique. La configuration typique et la plus simple d'une cellule solaire est une jonction p-n, dans laquelle, un type de couches plus minces appelé émetteur et l'autre est assez épais et appelé base ou absorbeur qui est responsable de la plupart de l'absorption de la lumière. Cette jonction est créée au point de contact entre un matériau de type n et un matériau de type p, à partir d'un semi-conducteur extrinsèque de type n tel que le silicium dopé au phosphore. Ici, les atomes de phosphore sont fixés au cristal, tandis que les électrons supplémentaires introduits sont libres de se déplacer[12].

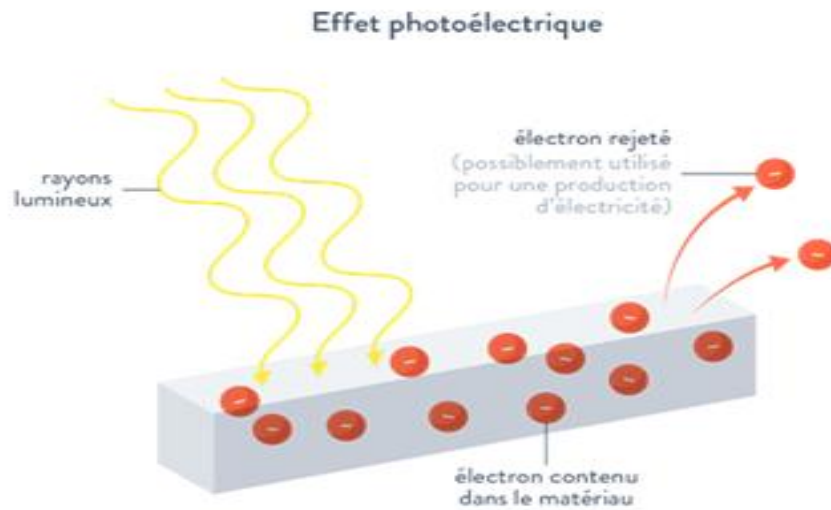


Figure I.6 : Différentes positions de soleil [12].

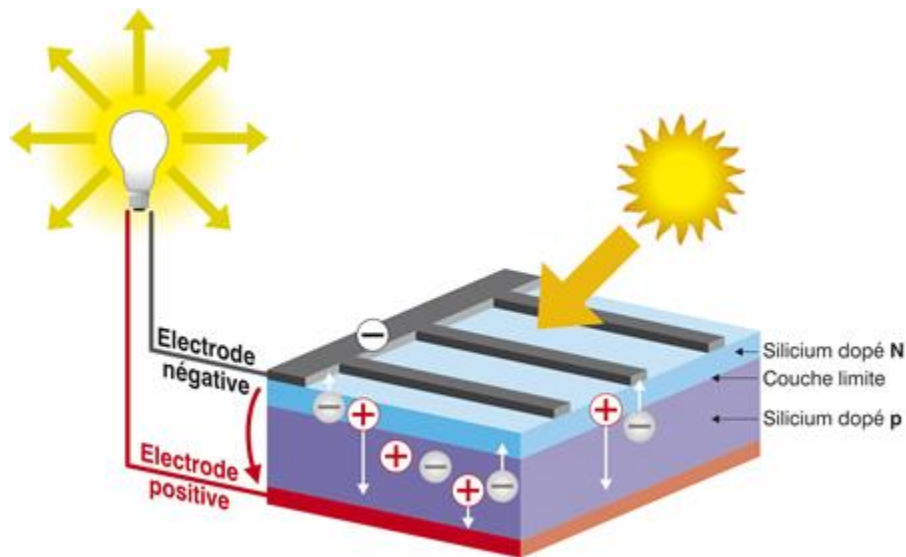


Figure I.7: Schéma représentatif de l'effet photovoltaïque [13].

Les atomes de phosphore agissent en tant que donneurs et sont représentés par des ions P^+ en raison de leur charge positive lorsqu'ils cèdent des électrons. Dans le cas du semi-conducteur de type p, les atomes fixes agissent en tant qu'accepteurs et sont représentés par des ions B^- , car ils sont chargés négativement lorsqu'ils acceptent des électrons (ou libèrent des trous libres). Lorsque les deux matériaux entrent en contact, les électrons libres se déplacent des zones à forte concentration d'électrons vers les zones à faible concentration, un processus connu sous le nom de diffusion, tout

comme les trous libres se déplacent des zones à forte concentration de trous vers celles à faible concentration de trous. Les ions P^+ restent fixés du côté du type n, tandis que les ions B^- restent fixés du côté du type p, créant un champ électrique E entre les ions positifs et négatifs. Ce champ électrique accélère les trous dans la direction d' E et les électrons dans la direction opposée, un mouvement connu sous le nom de dérive. Le champ électrique crée également une région appauvrie en porteurs libres, appelée "région d'appauvrissement". Malgré le champ électrique, certains porteurs libres conservent suffisamment d'énergie pour traverser la zone d'appauvrissement, même à l'équilibre. Enfin, un potentiel V_{bi} intégré est déterminé. Le comportement électrique d'une jonction p-n peut être décrit à l'aide de l'équation de la diode, qui relie la densité de courant à travers la jonction à la tension appliquée. Pour une diode idéale, l'équation est la suivante :

$$J = J_0 (e^{\frac{qV}{kT}} - 1) - J_{ph} \quad (I-2)$$

Où, J_0 est la densité de courant de saturation, q est la charge élémentaire, k est la constante de Boltzmann, T est la température et J_{ph} est un paramètre qui représente le courant photogénéré lorsque la cellule est sous illumination. Cependant, au cours du développement des technologies photovoltaïques, cette structure a évolué et a été modifiée [14].

I.4.1 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

L'effet photovoltaïque utilisé dans les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse des rayons solaires en électricité en utilisant un matériau semi-conducteur pour transporter des charges électriques positives et négatives sous l'influence de la lumière [6]. Ce matériau est constitué de deux parties, l'une ayant un excès d'électrons (dopée de type n) et l'autre ayant un déficit en électrons (dopée de type p). Lorsque ces deux parties entrent en contact, les électrons en excès dans la partie n diffusent vers la partie p. Ainsi, la zone initialement dopée n devient chargée positivement et la zone initialement dopée p devient chargée négativement, créant un champ électrique entre elles qui repousse les électrons vers la zone n et les trous vers la zone p. Cela forme une jonction appelée jonction p-n. En ajoutant des contacts métalliques aux zones n et p, on obtient une diode. Lorsque la jonction est exposée à la lumière, les photons avec une énergie égale ou supérieure à la largeur de la bande interdite transfèrent leur énergie aux atomes, ce qui fait passer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction et crée également des

trous mobiles, formant ainsi des paires électron-trou. Si une charge est connectée aux bornes de la cellule, les électrons de la zone n se déplacent vers les trous de la zone p via la connexion externe, créant une différence de potentiel et permettant au courant électrique de circuler [15].

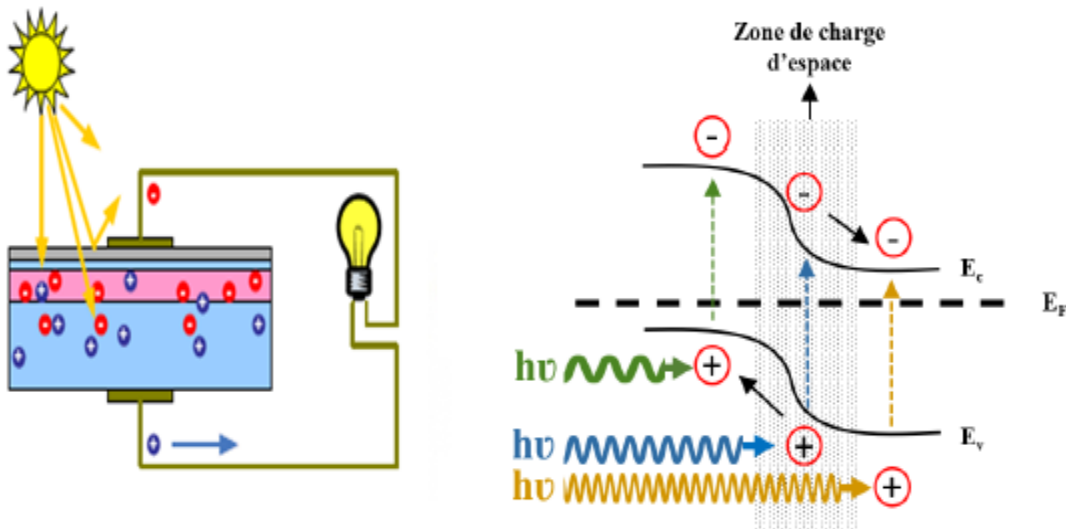


Figure I.8 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [15].

Il convient donc de noter que la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si trois phénomènes physiques de base ont lieu quasi simultanément :

- ❖ L'absorption d'un maximum de photons possible.
- ❖ La transformation de l'énergie ainsi absorbée en charges électriques libres.
- ❖ La collecte, sans perte, de ces derniers vers un circuit électrique extérieur.

Le premier phénomène est l'absorption optique de photons par un matériau semi-conducteur approprié dans la partie la plus intense du spectre solaire. Si l'on prend un semi-conducteur à grand gap, l'absorption sera limitée aux petites longueurs d'onde, dans l'ultra-violet, alors que la partie la plus importante du spectre solaire se situe dans le visible et le proche infra-rouge. Pour absorber un maximum de photons, il faudrait donc un semi-conducteur possédant un petit gap. Mais alors la tension de sortie est proportionnelle au gap, donc la puissance de la photopile ($P = I V$) seraient trop faibles pour exploiter cette pile. La valeur optimale du gap du matériau utilisé comme absorbeur se situe vers 1.5 eV. Le second concerne la séparation rapide des électrons et des trous

avant leur recombinaison. Le troisième porte sur l'entraînement des électrons et des trous vers les électrodes collectrices (collecte des porteurs) photovoltaïque [16].

I.4.2 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire

Les différentes cellules solaires présentent des caractéristiques statiques non linéaires, parmi lesquelles figurent la caractéristique courant-tension (I-V), la caractéristique puissance-tension (P-V) et la caractéristique puissance-courant (P-I). Ces caractéristiques permettent d'analyser le comportement électrique des cellules solaires dans diverses conditions. La caractéristique courant-tension illustre la relation entre le courant électrique produit par la cellule solaire et la tension à ses bornes. La caractéristique puissance-tension montre la relation entre la puissance électrique produite par la cellule solaire et la tension, tandis que la caractéristique puissance-courant représente la relation entre la puissance et le courant. L'analyse de ces caractéristiques est essentielle pour évaluer les performances des cellules solaires, optimiser leur conception et leur utilisation, ainsi que pour intégrer efficacement les systèmes solaires dans les applications d'énergie renouvelable [16].

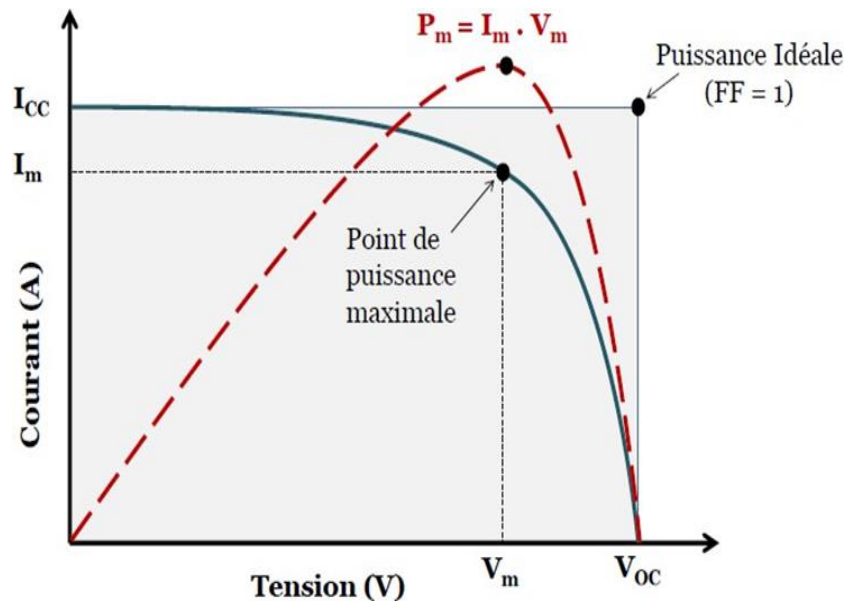


Figure I.9 : Caractéristiques courant-tension I(V) (Ligne continue) et puissance (Ligne pointillée) d'une cellule solaire [22].

I.4.3 Circuit équivalent d'une cellule solaire

Dans le cas simple d'une cellule idéale à jonction donneur-accepteur exposée à un flux lumineux, celle-ci agit comme un générateur de courant. Son modèle équivalent (Figure 16) peut être représenté par une diode idéale en parallèle avec une source de courant. R_s correspond à une résistance série associée à la résistivité volumique et à l'impédance des électrodes et des matériaux. La pente de la courbe $I(V)$ au point V_{co} représente l'inverse de la résistance série ($1/R_s$). R_{sh} représente une résistance parallèle associée aux effets de bord et aux recombinaisons volumiques. La pente de la courbe $I(V)$ au point I_{cc} représente l'inverse de la résistance shunt ($1/R_{sh}$). Pour minimiser les pertes, il est nécessaire de réduire R_s et d'augmenter R_{sh} . Le cas idéal est caractérisé par R_{sh} égal à l'infini et R_s égal à zéro. En d'autres termes, cela signifie qu'aucun courant ne circule à travers R_{sh} (résistance infinie) et qu'aucune tension n'est perdue à travers R_s (résistance nulle), assurant ainsi une efficacité maximale de la cellule solaire [18].

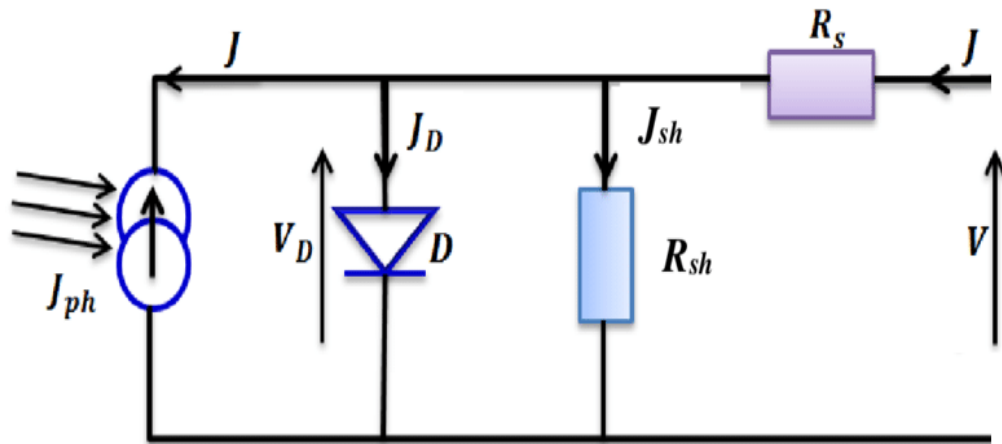


Figure I.10 : schéma équivalent d'une cellule solaire [18].

I.5. Paramètres d'une cellule solaire

I.5.1 Densité du courant de court-circuit (J_{sc})

Le courant de court-circuit I_{cc} d'une cellule photovoltaïque est obtenu pour une tension $V=0$, caractérise la quantité des paires électrons trous générées et qui traverse la jonction sans être recombinées. L'expression du courant de court-circuit est la suivante [14] :

$$I_{cc} = q.G(l_n + l_p) \quad (I-3)$$

Avec G : représente le taux de génération des porteurs de charges, sont respectivement les longueurs de diffusion des électrons et des trous. Le courant de court-circuit dépend des paramètres électriques [14].

I.5.2 Tension en circuit ouvert Voc

En l'absence de lumière ($I = 0$), la cellule fournit un courant égal au courant de court-circuit I_{cc} pour une certaine tension, appelée tension de circuit ouvert V_{oc} . Le courant de saturation de la diode, qui détermine le nombre de porteurs collectés dans l'obscurité, varie en fonction de la température [14].

$$V_{oc} = \frac{k_t}{Q} \times q \times I_n \left(\frac{I_{cc}}{I_0} + 1 \right) \quad (I-4)$$

I.5.3 Puissance maximale Pm

Le point de fonctionnement est déterminé par la résistance de charge et non par la cellule elle-même. Un choix judicieux de la résistance de charge permettra donc d'obtenir la puissance maximale :

$$P_m = I_m \times V_m \quad (I-5)$$

Avec :

- ❖ V_m : la tension correspondante à la puissance maximale fournie.
- ❖ I_m : le courant correspondant à la puissance maximale fournie.

I.5.4 Facteur de forme FF

Un paramètre important est souvent utilisé à partir de la caractéristique $I(V)$ pour qualifier la qualité d'une cellule ou d'un générateur PV, c'est le facteur de forme ou fill factor (FF). Ce coefficient représente le rapport entre la puissance maximale que peut délivrer la cellule notée P_{max} et la puissance formée par le rectangle $I_{sc} V_{oc}$, plus la valeur de ce facteur sera grande, plus la puissance exploitable le sera également. Les meilleures cellules auront donc fait l'objet de compromis technologiques pour atteindre le plus possible les caractéristiques idéales. Il est défini

par la relation suivante [14] :

$$FF = \frac{P_{\max}}{I_{sc} V_{oc}} \quad (I-6)$$

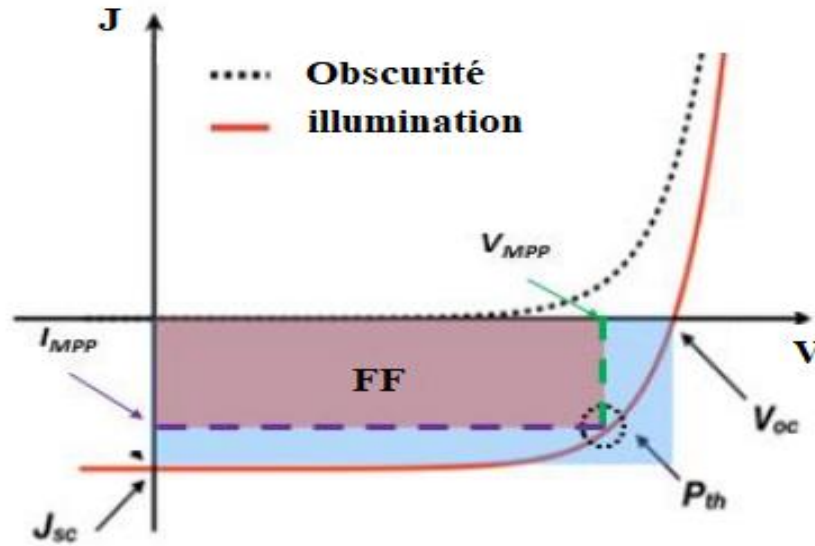


Figure I.11: Les courbes $I=f(v)$ [14].

I.5.5 Rendement photovoltaïque (η)

Le rendement des cellules photovoltaïques fait référence à leur capacité de conversion de l'énergie lumineuse en puissance électrique. Il est exprimé comme le rapport entre la puissance maximale générée par la cellule et la puissance lumineuse incidente P_i [14].

$$\eta = FF \times I_{cc} \times \frac{V_{C0}}{P_0} = I_{\max} \times \frac{V_{\max}}{P_0} \quad (I-7)$$

Avec :

- ❖ P_0 = la puissance du rayonnement solaire incident.
- ❖ V_{ma} = Tension correspondent à la puissance maximale fournie (V).
- ❖ I_{ma} = Courant correspondent à la puissance maximale fournie (A).

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

I.6. Résistances parasites

Le rendement de la cellule solaire est affecté par la présence des résistances parasites, ces dernières dissipent la puissance produite par la cellule solaire sous forme de pertes électriques, leur effet dépend de la géométrie de la cellule solaire et de la technologie de fabrication.

I.6.1 Résistance Série

La résistance série (R_s) provient de l'impédance des électrodes (la métallisation de la grille et de la face arrière) ainsi que du dopage insuffisant dans les zones quasi-neutres (émetteur-base). Bien que la valeur basse de la résistance série n'ait pas d'impact sur le courant de court-circuit (J_{cc}) et la tension en circuit ouvert (V_{co}), elle réduit la valeur du facteur de forme. Pour une cellule de qualité optimale, la R_s doit être inférieure à 1 [32].

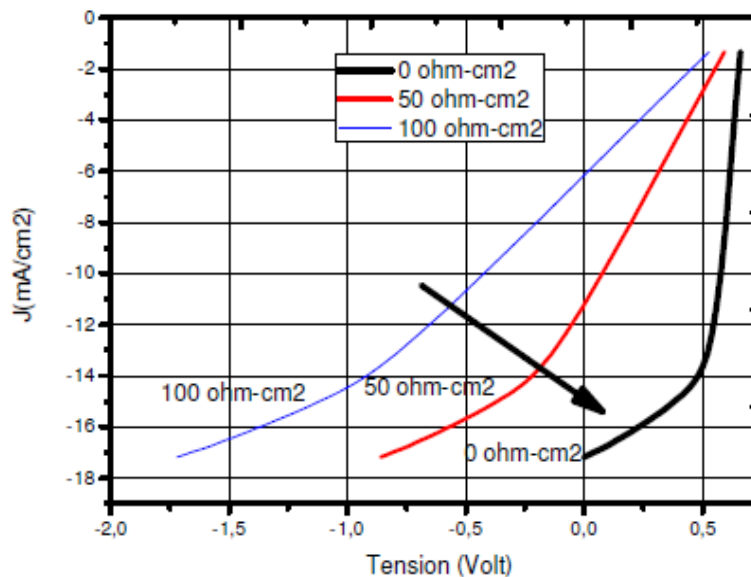


Figure I.12: L'effet de la résistance série sur la caractéristique J-V, simulation [32].

L'effet de la R_s sur la caractéristique courant-tension (J-V) est illustré dans la figure I.12, où l'on observe que la résistance série diminue le courant de court-circuit sans influencer la tension en circuit ouvert. Il est notable que l'émetteur et la grille supérieure de la cellule solaire sont les principaux contributeurs à la perte de résistance série. Cela peut être amélioré en optimisant

l'épaisseur de l'émetteur et la surface de contact métal-semiconducteur, ainsi qu'en réduisant la résistivité des matériaux utilisés [32].

I.6.2 Résistance shunt :

Les pertes attribuées à la résistance shunt (R_{sh}) sont généralement imputables à des défauts de fabrication, tels que la diffusion des contacts métalliques à haute température, qui peuvent percer l'émetteur. Cela se traduit par une résistance de fuite au niveau de la jonction, qui devient significative lorsque la jonction PN est située près de la surface. De plus, la résistance shunt limite la distance de séparation entre les lignes de grille dans les structures solaires à couches minces [32].

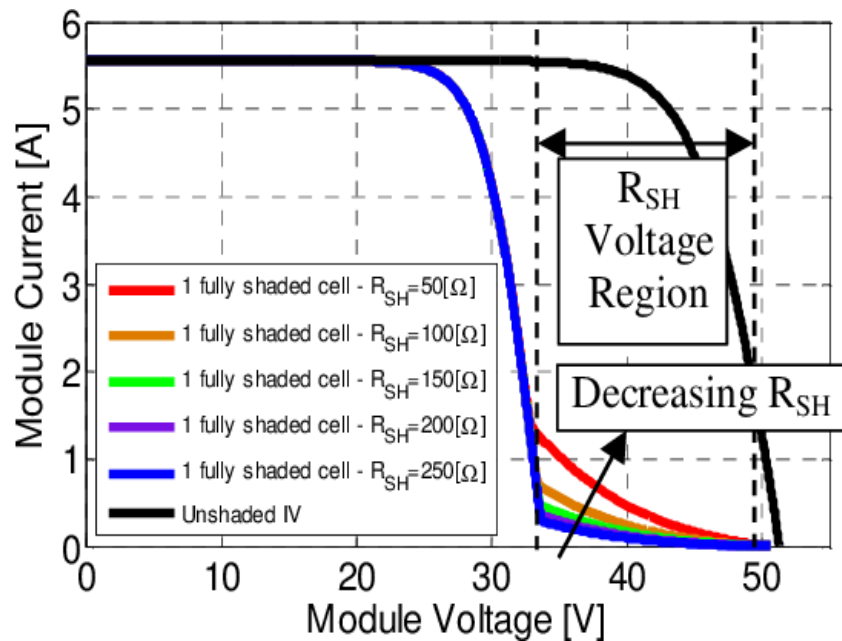


Figure I.13: L'effet de la résistance shunt (R_{sh}) sur la caractéristique J-V, simulation [32].

I.7. Conclusion


Dans ce chapitre, nous avons abordé l'histoire du photovoltaïque et le rayonnement solaire, explorant les cellules solaires et décrivant en détail leur fonctionnement ainsi que leurs différentes caractéristiques électriques. Ensuite, nous avons examiné les résistances parasites.

Bibliographie Chapitre I


- [1] « Tulay Aygan AtesinSajid BashirJingbo Louise Liu "EditorsNanostructured Materials for Next-Generation Energy Storage and ConversionPhotovoltaic and Solar Energy "p 229,2019. ».
- [2] <https://www.google.com/imgresimgurl=https://alsf.int/success/cvL34k2.jpg&tbnid=nIsv3cq4c2kKM&vet=1&imgrefurl=https://alsf.int/success-stories/centraleenergetique-du-lac-kivu-au-rwanda>.
- [3] F Cid-Pastor, A.; Alonso, C.; Estibals, B.; Lagrange, D.; Martinez-Salamero, L.; « Automatic measurement system for testing photovoltaic conversion chains» ; Industrial Electronics Society, 2004. IECON 2004. 30th Annual Conference of IEEE Volume 3.
- [4] https://www.researchgate.net/figure/Figure-21-Normes-de-mesures-du-spectre-denergie-lumineuse-emis-par-le-soleil_fig1_339974502.
- [5] <https://images.app.goo.gl/KhgbndfwmB1hZyzN9>.
- [6] D. Yang, « Solar Irradiance Modeling And Forecasting Using Novel Statistical Techniques», National University Of Singapore, 2014.
- [7] <https://images.app.goo.gl/UNBsemXRPWJCw6kk9>
- [8] Á. C. Lorenzo, « Optimization Of Hydrogenated Amorphous Silicon For Its Use In Different Photovoltaic Technologies », University Of Barcelona, 2016.Á. C. Lorenzo, « Optimization Of Hydrogenated Amorphous Silicon For Its Use In Different Photovoltaic Technologies », University Of Barcelona, 2016.
- [9] <https://images.app.goo.gl/iJxSPHtJzVVGwnnQ7>.
- [10] V. Foncrose, Nanocristaux, films et cellules photovoltaïques de $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SSe})_4$ par impression d'encre, Thèse de Doctorat de l'Université de Toulouse, (2015).
- [11] B. Merabet et al. "Optimal Bandgap of Double Perovskite La-Substituted $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ for Solar Cells: an ab initio GGA+ U Study", CHIN. PHYS. LETT. Vol. 34, No. 1 (2017) 016101.
- [12] <https://images.app.goo.gl/xUEJgDLS32d4qkLq8>.

- [13] <https://images.app.goo.gl/6eG6ETJDbcma4cSG8>.
- [14] Á. C. Lorenzo, « Optimization Of Hydrogenated Amorphous Silicon For Its Use In Different Photovoltaic Technologies », University Of Barcelona, 2016. [8] B.HICHAM, « Etude des différents montages et différents branchements des panneaux solaires », Mémoire de Master en physique Université L'ARBI BEN MHIDI (OUM EL BOUAGHI), 2014.
- [15] <https://images.app.goo.gl/uZiKmZJQbtsDpedA8>.
- [16] S.J. Hou, J., Xi, J., Kampas, F., Bae, S., Fonash, Non-local recombination in “tunnel junctions” of multijunction amorphous Si alloy solar cells, in: Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 336 (1994) 717–722.
- [17] B. MHENNA et G. FERHAT, « Alimentation d'un moteur à courant continu par une source photovoltaïque », mémoire de master académique. Université Mouloud Mammeri de TIZI OUZOU, 2018.
- [18] MOHAMMED KRARROUBI, « Traitement de l'interface anode/matériau organique pour améliorer le rendement cellules solaires » Thèse de Doctorat L'Université d'Oran 1-A.B (2018).
- [19] Thomas Mambrini, « Caractérisation de panneaux solaires photovoltaïques en conditions réelles d'implantation et en fonction des différentes technologies » THÈSE DE DOCTORAT photovoltaïque pour l'alimentation des réseaux de capteurs sans fil autonome pour l'application aéronautique Université Paris Sud - Paris XI, 2014. Français.
- [20] Afiaa KIHAL ‘ ‘ Préparation par électrodéposition de semi-conducteurs en couche minces à base d'étain pour des cellules photovoltaïques’ ’ Thèse de doctorat, Université 8 Mai 1945 Guelma, 2018.
- [21] <https://images.app.goo.gl/rWa7BkF8oue8QUgZ8>.
- [22] M. Oukachmih, Thèse 2003, Université Toulouse-Paul Sabatier.

- [23] A.Chirila, P. Reinhard, et al., Potassium-induced surface <https://www.pv-magazine.fr/2023/02/15/une-cellule-solaire-cigs-avec-alliage-dargent-affiche-un-rendement-de->.
- [24] <https://www.pv-magazine.fr/2023/02/15/une-cellule-solaire-cigs-avec-alliage-dargent-affiche-un-rendement-de-187/>.
- [25] M. Oukachmih, Thèse 2003, Université Toulouse-Paul Sabatier.
- [26] <https://images.app.goo.gl/GY6Bt9qbrzBnaSEw9><https://images.app.goo.gl/>.
- [27] Gonzales Garcia F., Riccardi C. S. & Simoes A. Z. 2010 “Lanthanum doped BiFeO₃ powders: Syntheses and characterization” Journal of Alloys and Compounds 501 (1) 25-29.
- [28] <https://images.app.goo.gl/oxQVz3QXMHNCz2uo6>.
- [29] Seshadri R. & Hill N. A. 2001 “Visualizing the Role of Bi 6s “Lone Pairs” in the Off-Center Distortion in Ferromagnetic BiMnO₃” Chemical Materials 13 (9) 2892-2899.
- [30] Ueda K., Tabata H. & Kawai T. 1998 “Ferromagnetism in LaFeO₃-LaCrO₃ superlattices” Science 280 (5366) 1064-1066.
- [31] <https://images.app.goo.gl/rJ2NPEsjJXdngWnq9>.
- [32] Mahfoud, A. (2015). Modélisation des cellules solaires tandem à couches minces et à haut rendement (Doctoral dissertation, Université Ferhat Abbas).



*Chapitre II : Les cellules solaires à base de
matériaux pérovskite*



II .1. Introduction

Pour répondre à la demande croissante en énergie tout en réduisant les émissions de gaz à effet de serre, il est essentiel de développer des technologies rentables permettant de capturer l'énergie solaire. Historiquement, les cellules solaires ont utilisé des semi-conducteurs cristallins inorganiques comme le silicium, le tellure de cadmium (CdTe) et le séléniure/sulfure de cuivre-indium et de gallium (CIGS) en tant qu'absorbants. Cependant, ces matériaux nécessitent des processus de fabrication énergivores, notamment des températures élevées et le vide. Les cellules solaires à base de pérovskites (PSC) émergent comme une alternative prometteuse. Elles peuvent être conçues pour être légères et flexibles, similaires aux cellules solaires organiques et aux cellules solaires à colorant (DSSC). Les PSC sont de sérieux concurrents sur le marché du photovoltaïque (PV) émergent et suscitent un intérêt croissant.

Dans ce chapitre, nous allons explorer l'histoire des pérovskites, leur structure cristallographique, leurs propriétés opto-électroniques, ainsi que leurs applications. Nous aborderons également l'architecture des cellules solaires à pérovskites et les principes de fonctionnement qui les sous-tendent.

II .2. Historique

XIXe siècles dans les montagnes d'Oural en Russie. Cette prospection provoqua l'apparition de nombreuses mines locales. En 1839, la pérovskite CaTiO_3 fut découverte dans la mine Akhmatov par A. B. Kemmerer et le minéralogiste allemand, Gustav Rose, qui la décrivit pour la première fois et la nomma d'après le minéralogiste Russe Lev Aleksevich von Perovski. Depuis, le terme pérovskite est utilisé pour décrire toutes les structures analogues à celle du composé CaTiO_3 . Ces oxydes, de formule chimique générale AMO_3 , présentent trois sites cristallographiques distincts. Le site A est occupé par un cation, généralement plus large que le cation occupant le site M et les oxygènes dessinent un octaèdre autour de M. La diversité structurale dans la famille des pérovskites est due aux nombreux atomes pouvant jouer chacun de ces rôles. Une autre famille de pérovskites, les pérovskites halogénées, sont intensivement étudiées depuis 2012. A l'image des oxydes, la formule générale décrivant les pérovskites halogénées est AMX_3 . Cette fois-ci, le site A est occupé par un cation monovalent, souvent alcalin. Le site M peut accueillir un cation métal divalent (par exemple Pb^{2+}). Les oxygènes sont remplacés par des halogénures X, les plus courants étant Cl, Br et I [1]. Gustav Rose, qui la décrivit pour la première

fois et la nomma d'après le minéralogiste Russe Lev Aleksevich von Perovski. Depuis, le terme pérovskite est utilisé pour décrire toutes les structures analogues à celle du composé CaTiO_3 . Ces oxydes, de formule chimique générale AMO_3 , présentent trois sites cristallographiques distincts. Le site A est occupé par un cation, généralement plus large que le cation occupant le site M et les oxygènes dessinent un octaèdre autour de M. La diversité structurale dans la famille des pérovskites est due aux nombreux atomes pouvant jouer chacun de ces rôles. Une autre famille de pérovskites, les pérovskites halogénées, sont intensivement étudiées depuis 2012. A l'image des oxydes, la formule générale décrivant les pérovskites halogénées est AMX_3 . Cette fois-ci, le site A est occupé par un cation monovalent, souvent alcalin. Le site M peut accueillir un cation métal divalent (par exemple Pb^{2+}). Les oxygènes sont remplacés par des halogénures X, les plus courants étant Cl, Br et I [1].

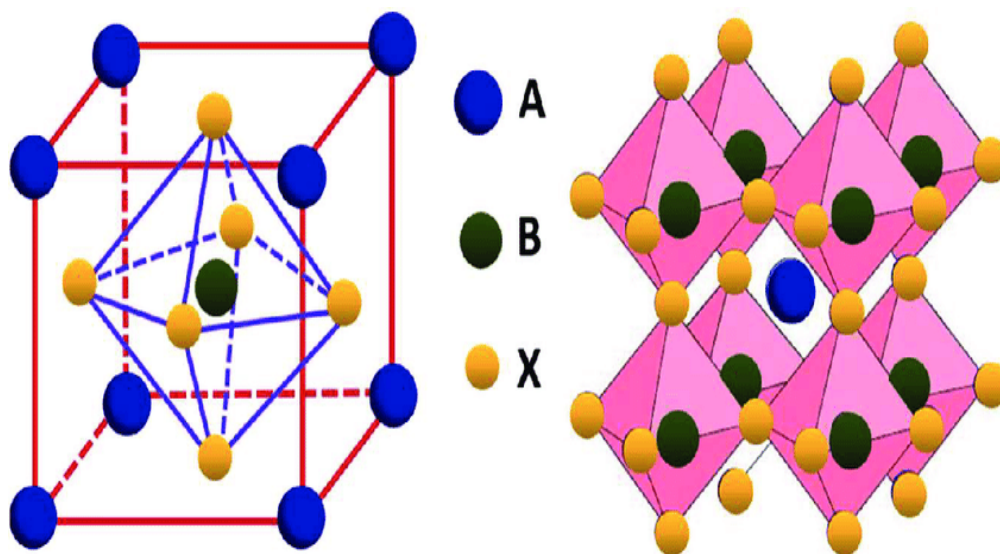


Figure II.1 : Un type de pérovskite [2].

II .3. Matériau pérovskite

II .3.1. Structure cristallographique de la pérovskite

D'une manière générale, le matériau pérovskite est un matériau présentant la même structure que le titanate de calcium (CaTiO_3), c'est-à-dire quatre octaèdres BX_6 qui entourent un cation A et de formule chimique ABX_3 (voir Figure II.2). Il est décomposé en deux groupes : les pérovskites inorganiques, qui sont sous forme d'oxydes, et les pérovskites halogénées qui peuvent être inorganiques ou hybrides (organiques-inorganiques) [3].



II .3.2. Propriétés opto-électroniques

II .3.2.1 Propriétés optiques

Les pérovskites possèdent des propriétés qui en font des candidats appropriés pour les applications photovoltaïques. Outre leur gap direct, et leur quasi-absence de défauts dans le gap, leur coefficient d'absorption est très élevé (quelques 10^4 cm^{-1} à une longueur d'onde de 550 nm. Cette grande absorption, comparée à celle du silicium cristallin (voir Figure II.3), permet ainsi de réduire l'épaisseur de couche nécessaire de pérovskite à environ 500 nm pour une absorption quasi complète. Les porteurs de charges photogénérées sont

alors plus facilement collectés du fait de la plus faible distance à parcourir [5].

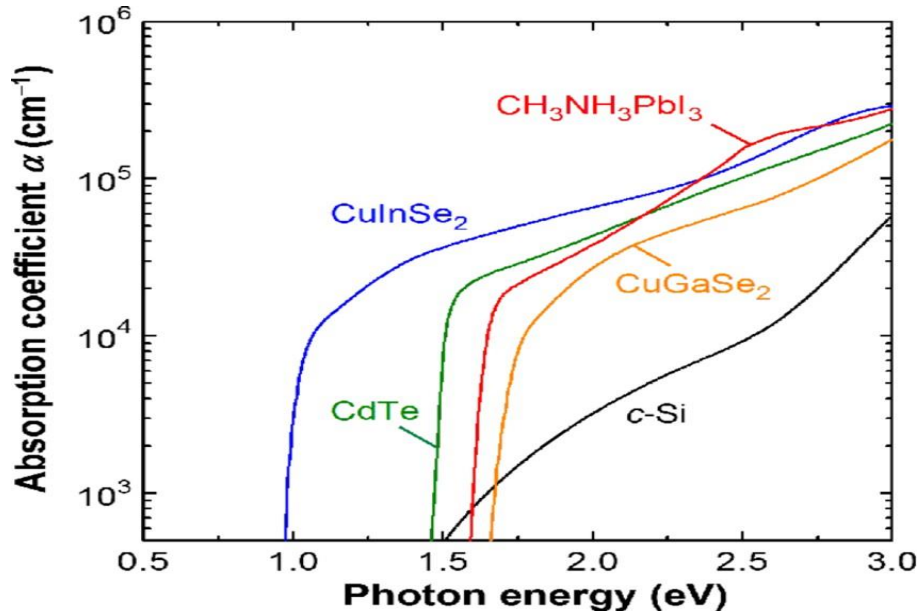


Figure II.3 : Courbe d'absorption des matériaux : c-Si, CdTe : CuInSe₂, CuGaSe₂ et CH₃NH₃PbI₃ [5].

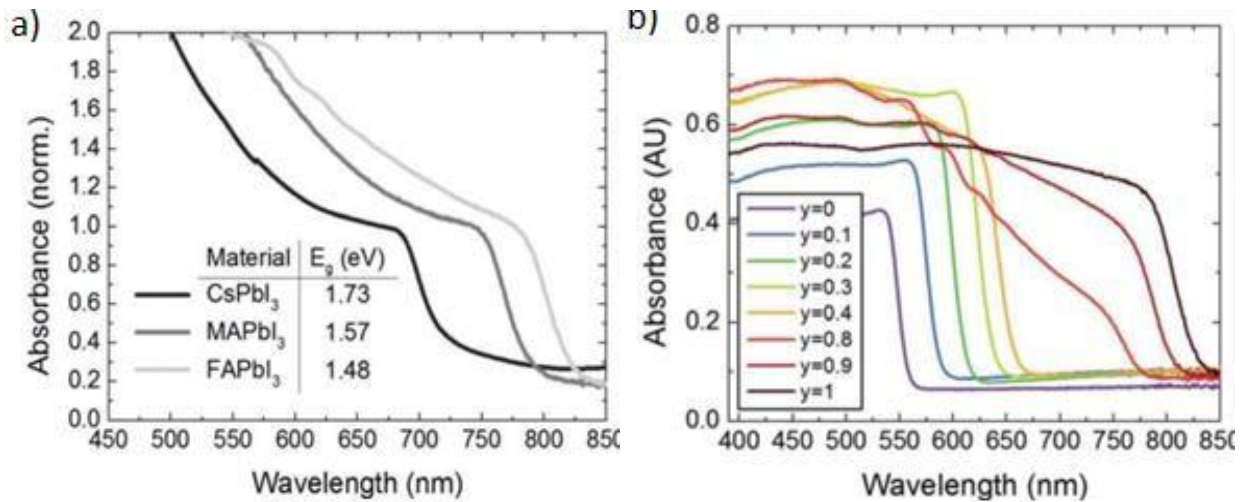


Figure II.4 : a) Courbes d'absorption de différentes pérovskites (MAPI, FAPI, CsPI) ; b) d'absorption de FAPbI_yBr_{3-y} en fonction du ratio y [5].

Les pérovskites ont l'avantage d'avoir un gap ajustable suivant les cations ou anions utilisés (voir Figure II.4 (a)). Par exemple, le gap du MAPI se situe à 1.57 eV. Mais lorsque l'on remplace le métal aluminium (CH_3NH^+) par du formamidinium ($(\text{NH})^+$), le gap diminue à 1.48 eV. En combinant deux anions, il est également possible d'obtenir une variation de l'énergie de gap de manière continue en fonction du ratio y de ces anions. Pour $\text{FAPBI}_y\text{Br}_{3-y}$, Eperon et al. Obtiennent une variation qui va de 1.48 eV à 2.23 eV (Figure II.4 (b))[5].

II .3.2.2 Propriétés électroniques

Comme pour les propriétés optiques, il est possible de modifier les propriétés électriques de la pérovskite en changeant sa composition. Ces propriétés électriques sont également modifiées en fonction de la méthode de synthèse de la pérovskite et du mode d'élaboration de la couche. C'est pour cela que nous pouvons retrouver plusieurs valeurs de mobilité ou de longueur de diffusion différentes dans la littérature. Concernant la longueur de diffusion, on la définit comme étant la relation entre le coefficient de diffusion D et le temps de vie des porteurs τ (équation (1)) :

$$LD = \sqrt{D\tau} \quad (\text{II-1})$$

La longueur de diffusion des électrons et des trous est cruciale dans le photovoltaïque, influençant l'épaisseur de la couche active. Comparée au silicium, la pérovskite présente des longueurs de diffusion plus courtes, généralement de l'ordre de quelques centaines de nanomètres. Les pérovskites avec des ions chlorure montrent des longueurs de diffusion plus longues, améliorant la cristallisation et l'homogénéité. La mobilité des électrons et des trous dans les pérovskites est relativement élevée par rapport aux matériaux organiques, bien qu'encore loin du silicium. Leur caractère ambipolaire permet leur utilisation comme transporteurs d'électrons ou de trous, favorisant la construction de cellules solaires planaires. Les pérovskites présentent une bonne absorption optique, un gap ajustable et une mobilité relativement élevée, les rendant bien adaptées aux applications photovoltaïques. Le Tableau 1 compare les différentes propriétés optiques et électriques pertinentes pour la conversion photovoltaïque des matériaux les plus communément utilisés [6].

	Gap (eV)	Plage de variation du coefficient d'absorption entre 200 et 700 nm (cm ⁻¹)	Mobilité des porteurs (cm ² .V ⁻¹ .s ⁻¹)	Longueur de diffusion (μm)
MAPI	1.57	10 ⁴ – 5.10 ⁵	10	0.1
Pérovskite	Ajustable	10 ⁴ – 10 ⁶	Jusqu'à 2000	Jusqu'à 100
Si	1.1	10 ³ – 2.10 ⁶	1430 (électrons) – 427 (trous)	1 à 20 (trous) – 30 à 300 (électrons)
CIGS	1.1	10 ⁴ – 6.10 ⁵	< 10	1.5
GaAs	1.4	10 ⁴ – 2.10 ⁶	> 10 ³	30 à 50 (trous) – 10 (électrons)
CdTe	1.5	10 ⁴ - 10 ⁶	10	1.75
Organique	1.4 – 3.0	10 ⁴ - 10 ⁵	10 ⁻⁴ à 10	0.01

Tableau II.1 : Propriétés physiques des matériaux les plus communs pour le photovoltaïque [6].

II .4. Applications des matériaux pérovskites

Les premières recherches sur la pérovskite se sont concentrées sur les propriétés optiques biaxiales et les propriétés ferroélectriques. En revanche, les pérovskites aux halogénures ouvrent la porte à l'étude des propriétés optoélectriques en raison de leurs structures électroniques uniques, notamment une bande interdite directement accordable, une forte absorption, des masses efficaces de trous d'électrons petites et équilibrées et une résistance aux défauts, améliorant ainsi leur rendement quantique de photoluminescence. De plus, la flexibilité sans précédent de la composition des pérovskites peut être apportée par des composants organiques ou inorganiques dotés de fonctionnalités optiques ou électroniques. L'avantage le plus important des pérovskites aux halogénures réside dans leurs cristaux et films faciles, accessibles et de haute qualité, permettant l'exploration de la corrélation des propriétés de la structure et l'optimisation des prototypes de dispositifs. Ainsi, les semi-conducteurs aux halogénures pérovskites seront prometteurs pour une variété d'applications fascinantes, notamment le photovoltaïque (PV), les LED, les photodétecteurs, les memristors et les lasers (Figure II.5) [6].

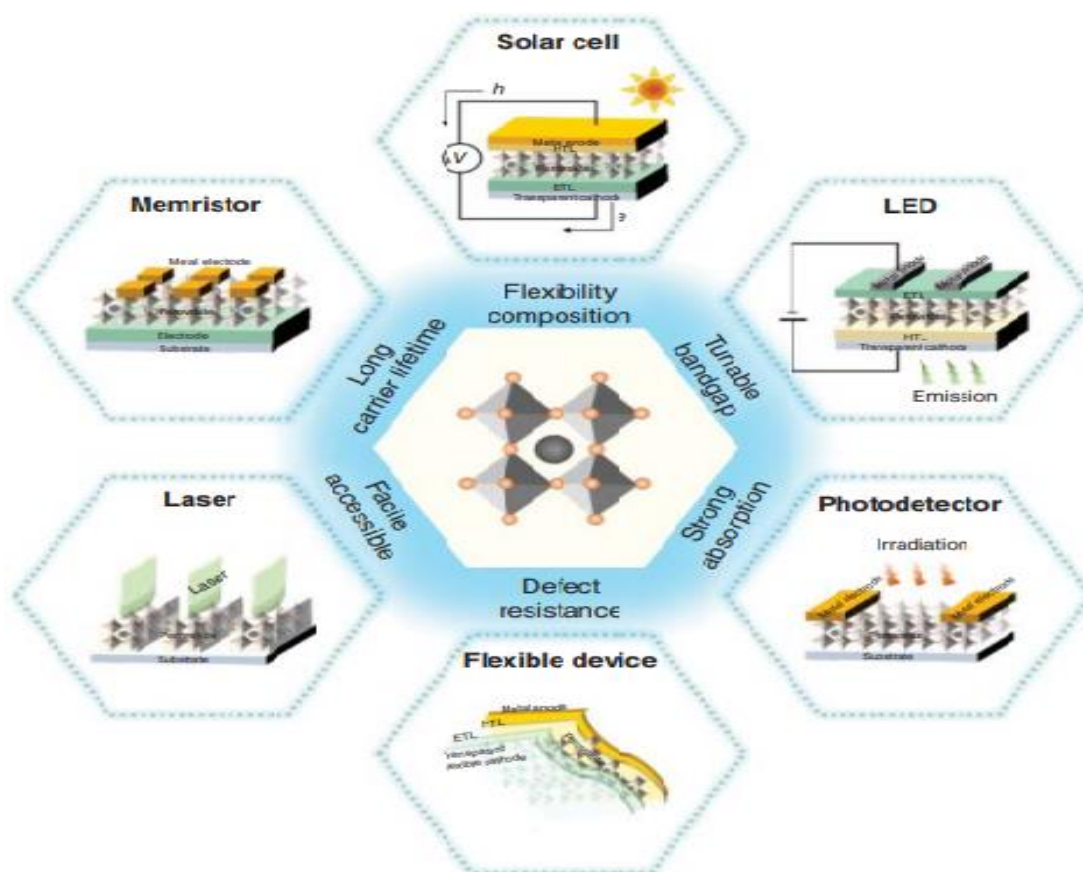


Figure II.5 : Exemples d'applications des matériaux pérovskites [6].

II .5. Architecture des cellules solaires Pérovskites

Il existe quatre architectures principales utilisées dans la conception et la fabrication de cellules solaires à base de pérovskite avec des performances différentes. Ces architectures sont appelées mésoporeux, couche de recouvrement, n-i-p planaire et p-i-n planaire, comme illustrée sur la Figure (II-6) Pour la modélisation et la simulation numérique, il sera préférable d'utiliser la configuration d'une cellule solaire à couche mince type p-i-n ou n-i-p planaire à hétérojonction [7].

La Figure (a) présente une structure mésoporeuse, dans cette architecture une couche compacte de transport d'électrons (ETL) généralement du TiO_2 est déposée sur un substrat de verre et sur l'électrode transparente. Cette structure mésoscopique poreuse est ensuite remplie de la couche active de pérovskite sur laquelle repose la couche de transport de trous solides (HTL), et un contact arrière opaque (généralement de l'or (Au)). Dans cette configuration, la pérovskite n'a pas besoin de l'interface ETL/ pérovskite pour séparer les excitons photo-générés en charges libres. Le

matériau à base de pérovskite est donc capable de transporter efficacement les charges ambipolaires. Pour l'architecture mésoporeux à couche de recouvrement, l'épaisseur de la structure mésoscopique est réduite de manière significative et une couche de recouvrement (coppinglayer) de pérovskite pure est créé sur le dessus Figure (b). En excluant complètement la structure mésoporeuse, une structure n-i-p planaire se forme sans nécessité d'étape de frittage à haute température (Figure (c)). L'architecture p-i-n planaire est réalisée en déposant la couche HTL sur le substrat en verre transparent recouvert par l'électrode. Ensuite, la couche de pérovskite est déposée, suivie du dépôt de l'ETL et d'un contact arrière opaque (de l'aluminium (Al) ou de l'argent (Ag)) (Figure(d)) [7].

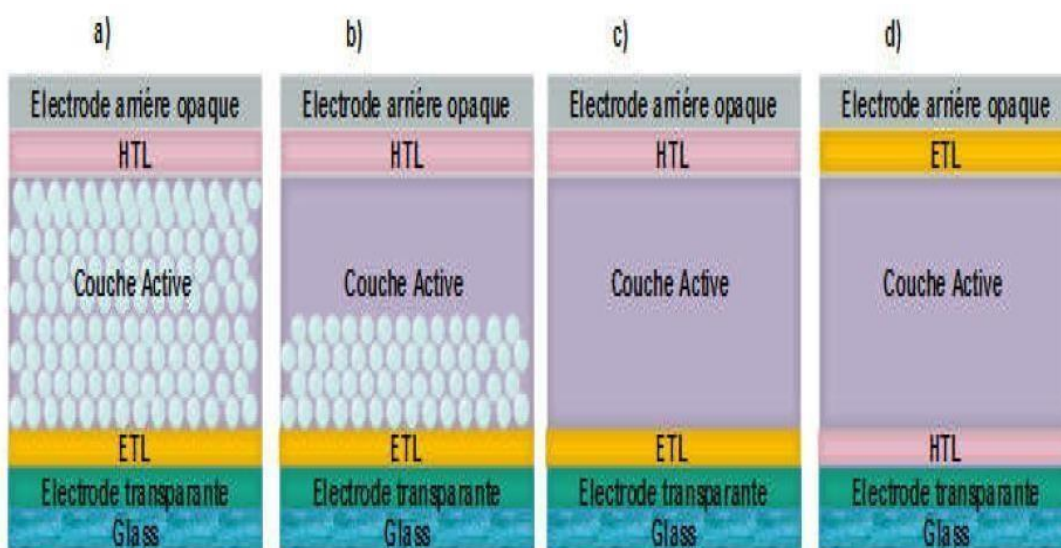


Figure II.6: Les quatre architectures les plus utilisés dans les cellules solaires à pérovskite, (a) mésoporeux, (b) couche de recouvrement, (c) n-i-p planaire et (d) p-i-n planaire [7].

II .6. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites

Leurs principes de fonctionnement n'ont pas été expliqués de manière satisfaisante en raison des différentes couches de matériaux impliquées dans leur fabrication, et peut être différent selon leur structure exacte. Il est admis que la couche pérovskite est excitée lors de l'illumination, produisant une paire électron-trou. Les porteurs de charges peuvent alors diffuser vers une interface où les électrons sont injectés dans la bande de conduction (C_B) de l'ETL tandis que les trous sont transportés vers la bande de valence (V_B) du HTL. Enfin, les électrons et les trous sont alors collectés par les électrodes conductrices (figure II.7). Le processus est thermodynamiquement

favorable lorsque les niveaux d'énergie des V_B et de C_B des couches s'alignent de telle sorte que le transport des électrons passe à un niveau d'énergie inférieur tandis que le transport des trous passe à des niveaux d'énergie plus élevés [8].

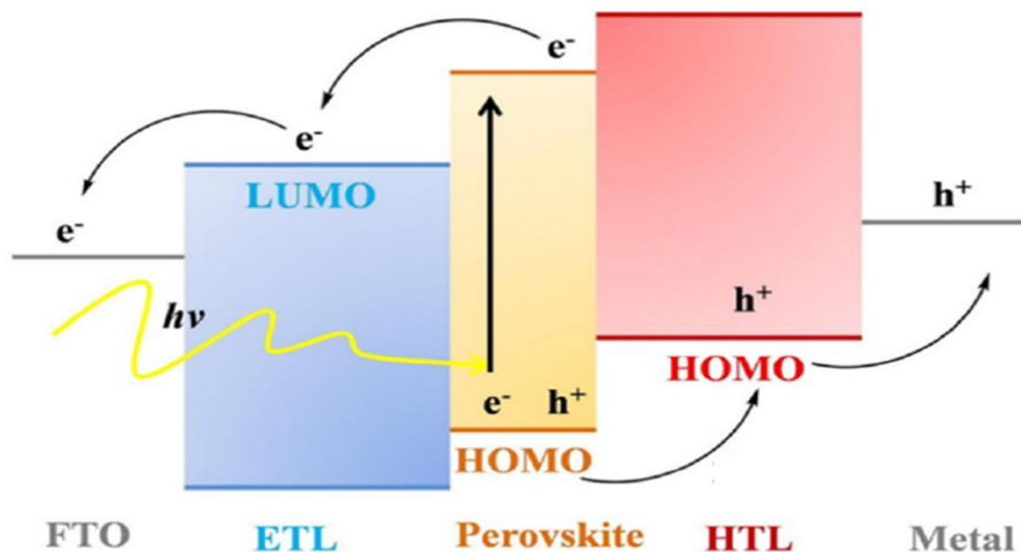


Figure II.7 : Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique [8].

Le succès de la couche pérovskite en tant qu'absorbeur solaire dépend en grande partie de la longue longueur de diffusion des charges, la mobilité élevée des porteurs dans la couche pérovskite et son épaisseur. La longueur de diffusion des électrons et des trous peut atteindre $1 \mu\text{m}$, ce qui est largement suffisante pour que les charges photo-générés atteignent les couches interfaciales et les électrodes sans recombinaison, toute en fonction de la morphologie de la couche pérovskite. D'autre part, il y a plusieurs processus de recombinaison qui limite les performances de la cellule à pérovskite tels que : Les électrons injectés dans la C_B de l'ETL peuvent être capturés par la V_B de la couche pérovskite ou la HTL. L'ensemble des processus de transfert de charge/recombinaison a été montré dans la figure II.8.

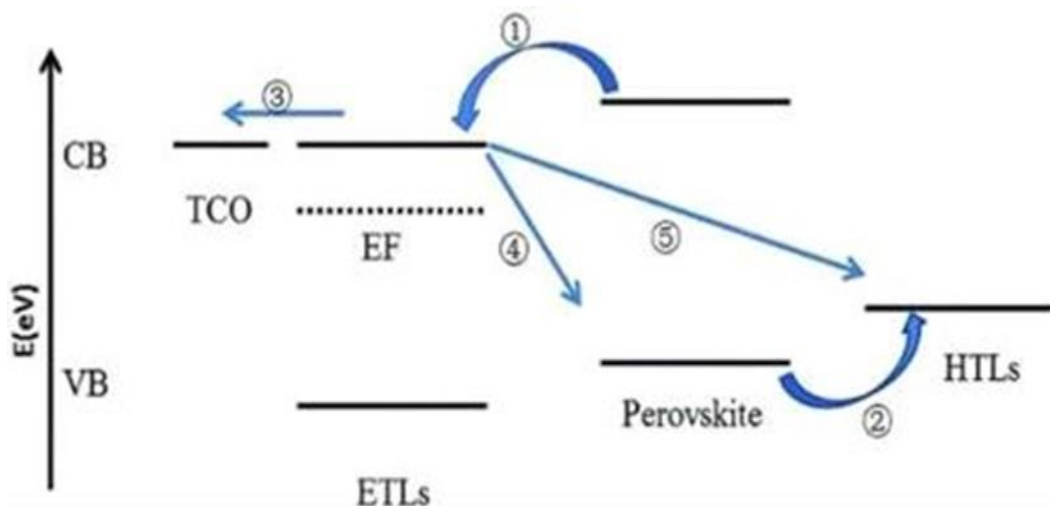


Figure II.8 : Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite [8].

- Route 1 : injection d'électrons
- Route 2 : injection de trou.
- Route 3 : transport et collection d'électrons.
- Route 4 : recombinaison de charges à l'interface entre ETLs et Pérovskite.
- Route 5 : recombinaison de charge entre les électrons dans ETLs et le trou dans HTLs.

Les canaux de transport de charges dans la cellule solaire pérovskite sont souvent discutés en fonction de la structure de dispositif. Dans la structure mésoporeuse, la couche pérovskite est formée sur un semi-conducteur poreux d'oxyde métallique (TiO_2) qui crée un réseau d'interpénétration entre les deux phases, et par conséquent, les électrons photo générés peuvent être transportés le long du domaine d'oxyde de titane vers le FTO pendant que les trous sont transportés le long du domaine de la couche pérovskite jusqu'à la HTM (figure II.9 (a)). Alors, dans le cas d'une structure planaire, les dispositifs sont fabriqués à l'aide de couches tampons d'ETL et HTM à travers lesquelles les charges photo-générées créées dans la couche pérovskite, peuvent être dirigées vers les électrodes lorsque la longueur de diffusion de charge des porteurs, est supérieure à l'épaisseur de la couche pérovskite (figure. II.9 (b)).

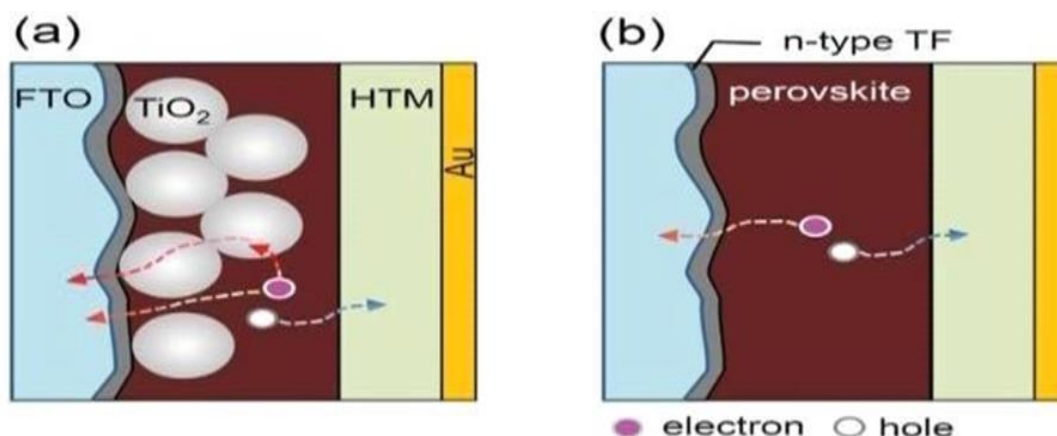


Figure II.9 : Processus de transport de charge dans les cellules à pérovskite(a) structure mésoporeuse, (b) structure planaire [8].


Dans les deux cas, le rendement de conversion d'énergie solaire des dispositifs est fortement dépendant de la qualité de la morphologie du film de pérovskite. De plus, la formation d'un contact ohmique entre la couche pérovskite et ETL/HTL est un facteur critique pour la réussite de la collecte des charges [8].

II .7. Conclusion

Ce chapitre constitue une exploration théorique de l'évolution historique des pérovskites, de leur structure cristallographique, de leurs caractéristiques opto-électroniques et de leurs diverses applications dans le domaine des cellules solaires. Nous examinerons également l'architecture des cellules solaires utilisant les pérovskites ainsi que les principes fondamentaux qui les régissent.

Bibliographie Chapitre II :

- [1] Rose, G. De Novis Quibusdam Fossilibus, Quae in Montibus Uraliis Inveniuntur, Scripsit. Ann. Phys. 1839, 558.
- [2] S. Brittman, G. W. P. Adhyaksa, and E. C. Garnett, "The expanding world of hybrid perovskites: materials properties and emerging applications," MRS Commun., vol. 5, no. 1.
- [3] Shahzada Ahmad, Samrana Kazim, Michael Gratzel - Perovskite Solar Cells_ Materials, Processes, and Devices-Wiley-VCH (2022).
- [4] <https://images.app.goo.gl/uZiKmZJQbtsDpedA8>.
- [5] M. Cyrot et al., "Properties of a new perovskite oxide Sr₂VO₄," J. Solid State Chem., vol. 85, no. 2, pp. 321–325, Apr. 1990.
- [6] Halide Perovskite Semiconductors, Structures, Characterization, Properties, and Phenomena, Edited by Yuanyuan Zhou and Iván Mora-Seró (2024).
- [7] E. Knittle & R. Teanloz. (1987). Synthesis and Equation of State of (Mg,Fe)SiO₃ Perovskite to Over 100 Gigapascals. Science, 235, 668-670.
- [8] Laid KADRI. Thèse de doctorat université Oran Mohamed Boudiafe 'Etude, synthèse et optimisation de la couche compacte de TiO₂ pour applications cellules solaires'.



*Chapitre III : Résultats de simulation
numérique et interprétation*



III.1. Introduction

Nous débuterons ce chapitre en explicitant le programme de simulation SCAPS, suivi d'une succincte explication de la méthode utilisée pour simuler les cellules solaires à l'aide de ce logiciel. Ensuite, nous aborderons la structure de la cellule solaire pérovskite $\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$ ainsi que ses caractéristiques physiques, les modèles et paramètres matériels employés dans la simulation numérique. Enfin, nous examinerons les résultats de la simulation électrique de cette structure et leur interprétation.

III .2. Présentation du logiciel SCAPS

Le SCAPS acronyme de « Solar Cell Capacitance Simulator » est un logiciel de simulation numérique des cellules solaires unidimensionnelles développé par le département des systèmes électronique et informatique (ELIS) de l'Université de Gent, Belgique. Plusieurs chercheurs ont contribué à son développement : Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Alex Niemegeers, Stefaan Degraeve [1]. Ce logiciel est disponible gratuitement pour la communauté des recherches photovoltaïques (PV) (Instituts et établissements de recherche).

III .2.1 Utilisation et étapes de la simulation

Afin de simuler et contrôler tous les paramètres d'un dispositif photovoltaïque au moyen du Logiciel SCAPS nous devons passer par trois grandes fenêtres :

- ❖ Fenêtre d'exécution « action panel ».
- ❖ Fenêtre de conception de dispositif et la définition du problème « Définition panel ».
- ❖ Fenêtre des résultats.

Après avoir cliqué sur l'icône représentant le logiciel, la fenêtre ci-dessous (figure III.1) apparaît, et ce que l'on nomme le panneau d'action se déploie.

Cette fenêtre offre la possibilité de :

1. Indiquer les circonstances et les conditions dans lesquelles la simulation est effectuée (température fréquence, spectre de l'éclairement, irradiation...),
2. Indiquer la mesure (la caractéristique) à simuler,
3. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée (Set-problem),
4. Commencer le(s) calcul(s),

5. Afficher les courbes de simulation.

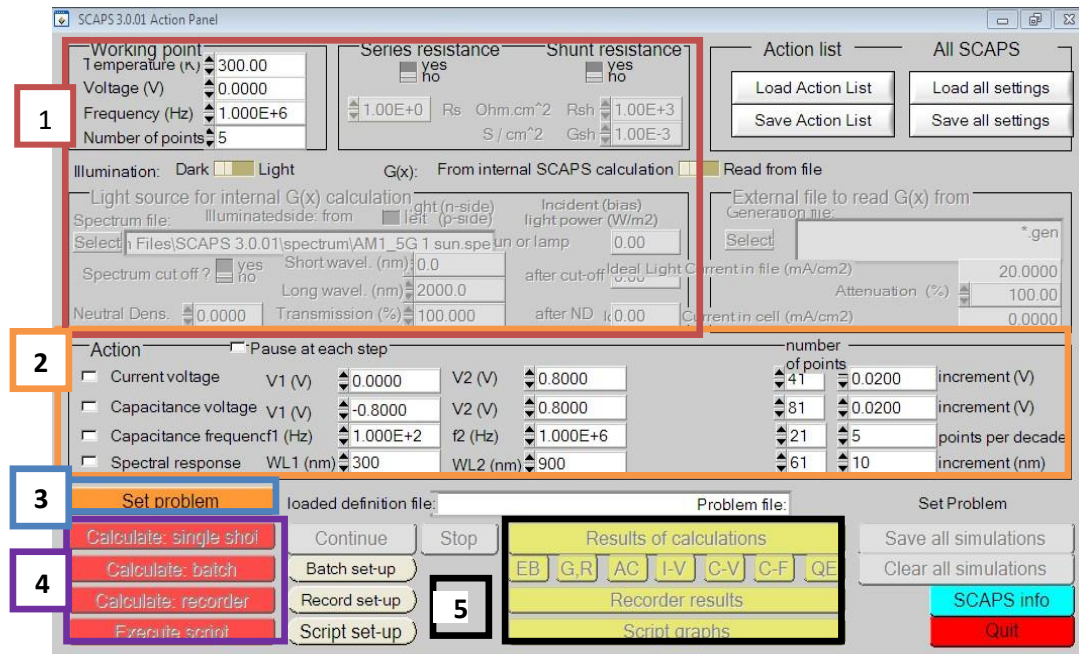


Figure III.1 : La fenêtre du panneau d'action du logiciel SCAPS [2].

III .3. Description de la structure de la cellule solaire à base des pérovskites

III.3.1. Description de la structure

L'architecture des cellules solaires employée dans notre étude comprend trois composants principaux : un ETL, la couche de pérovskite dopée avec un matériau de type p, et un HTL [3-4]. Lorsqu'il est soumis à la lumière, cet arrangement entraîne la génération d'excitons, des paires de particules dans un état d'énergie confinée [5], principalement à l'intérieur de la couche de pérovskite [6]. Ces excitons, composés d'électrons et de trous, possèdent des longueurs de diffusion relativement longues, ce qui leur permet de se déplacer dans la région p pour les électrons ou dans la région n pour les trous [7]. Les paires d'excitons de trous et d'électrons subissent une séparation à la jonction entre l'ETL et la couche PVK [8]. Par la suite, alors que les trous passent effectivement par le HTL, les électrons sont déplacés à travers l'ETL et vers l'électrode appropriée [9]. La présence d'une barrière de potentiel entre l'ETL ou le HTL et la couche de pérovskite facilite la séparation des excitons et leur transmission. La migration des électrons et des trous vers leurs contacts correspondants est accélérée par le champ électrique produit, augmentant ainsi l'efficacité du dispositif [10]. Dans nos simulations, nous avons utilisé des matériaux avancés pour

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

les couches ETL et HTL, en utilisant spécifiquement du dioxyde de cérique Cu_2O pour l'ETL et C_{60} pour le HTL [11]. Les résultats de la simulation ont démontré que les structures des cellules solaires composées d'oxyde d'indium et d'étain $\text{ITO}/\text{C}_{60}/\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3/\text{Cu}_2\text{O}/\text{Ag}$ présentent une efficacité de photoconversion remarquablement élevée, comme l'illustre la figure 1. L'incorporation de ces matériaux avancés permet d'améliorer l'ensemble des performances de la cellule solaire proposée. Les simulations ont été réalisées sous un éclairage AM1.5G et à une température ambiante de 300 K, De plus, nous avons méticuleusement défini les paramètres de simulation pour la couche de transport d'électrons, la couche absorbante $\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$ et la couche de transport de trous, comme indiqué dans les tableaux 1 [12].

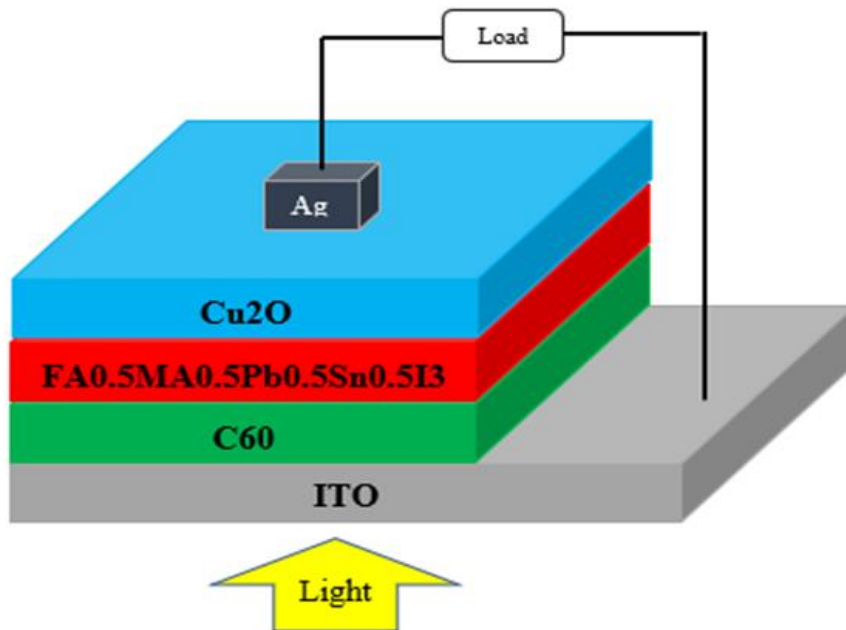


Figure III.2 : Structure de cellule solaire basé sur PVK.

III.3.2. Modèles et paramètres de simulation

Les paramètres des structures de cellules solaires basées sur PVK associés à chaque couche sont résumés dans le tableau III.1. Le logiciel SCAPS-1D effectue la simulation des dispositifs en sections distinctes, comprenant différents panneaux permettant aux utilisateurs d'ajuster les paramètres et d'évaluer les résultats. Les équations différentielles de Poisson (1) et les équations

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

de continuité pour les trous (2) et les électrons (3), respectivement, sont résolues dans la théorie sous-jacente de ce programme [13-14].

$$\frac{d}{dx} \left(\varepsilon(x) \frac{d\Psi}{dx} \right) = q \left[p(x) - n(x) + N_d^+(x) - N_a^-(x) + P_t(x) - n_t(x) \right] \quad (\text{III-1})$$

$$-\frac{1}{j} \frac{dj_p}{dx} + R_p(x) - G(x) \quad (\text{III-2})$$

$$-\frac{1}{j} \frac{dj_n}{dx} + R_n(x) - G(x) \quad (\text{III-3})$$

Parameters	ITO	HTL (Cu ₂ O)	PVK (FA _{0.5} MA _{0.5} Pb _{0.5} Sn _{0.5} I ₃)	ETL (C ₆₀)
Thickness (μm)	0.5	0.1	0.4	0.1
Electron Affinity (eV)	4.1	3.4	4.45	3.9
Band gap (eV)	3.5	2.2	1.25	1.7
Relative Permittivity ε _r	9	7.5	8.2	4.2
Effective Density of States (cm ⁻³)	2×10 ¹⁸	1×10 ¹⁹	1.8×10 ¹⁸	2×10 ¹⁸
Effective Density of States (cm ⁻³)	3.8×10 ¹⁸	5×10 ²⁰	2.2×10 ¹⁸	1.8×10 ¹⁹
Electron Mobility (cm ² /V _s)	20	200	2	8.0 × 10 ⁻²
Hole Mobility (cm ² /V _s)	10	8600	2	3.5 × 10 ⁻³
Acceptor Density (cm ⁻³)	0	0	5×10 ¹⁵	1×10 ¹⁸
Donor Density (cm ⁻³)	10 ¹⁷	1×10 ²⁰	0	0
Defect Density N _t (cm ⁻³)	10 ¹⁴	1×10 ¹⁵	1×10 ¹⁴	1×10 ¹⁴

Tableau III.1: Les paramètres de structure de cellule solaire basé sur PVK.

III.3.3. Diagramme de bande d'énergie

La Figure III.3(a, b) présente graphiquement l'alignement des bandes d'énergie au sein de l'hétérostructure utilisant la pérovskite organométallique à base de plomb et d'étain (FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃) pour l'absorption. Cet alignement est crucial car il influence le déplacement des électrons et des trous à travers le matériau. Dans notre recherche, nous avons

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

utilisé des couches spécifiques pour transporter les électrons (ETL) et les trous (HTL). Les ETL sont composées de fullerène (C_{60}), tandis que le HTL est constitué d'oxyde de cuivre (Cu_2O). En examinant le schéma, nous pouvons également voir comment les contacts en or et en dioxyde d'indium (ITO) jouent un rôle crucial dans la collecte des charges. L'or, en raison de sa fonction de travail élevée (WF) de 5.1 eV, est idéal pour collecter les trous du HTL, tandis que l'ITO, avec un WF de 4.0 eV, est parfait pour collecter les électrons. Le choix de ces matériaux et de leurs valeurs de WF contribue directement à l'optimisation des performances de la cellule solaire, car ils garantissent une collecte efficace des charges et un fonctionnement fluide du dispositif.

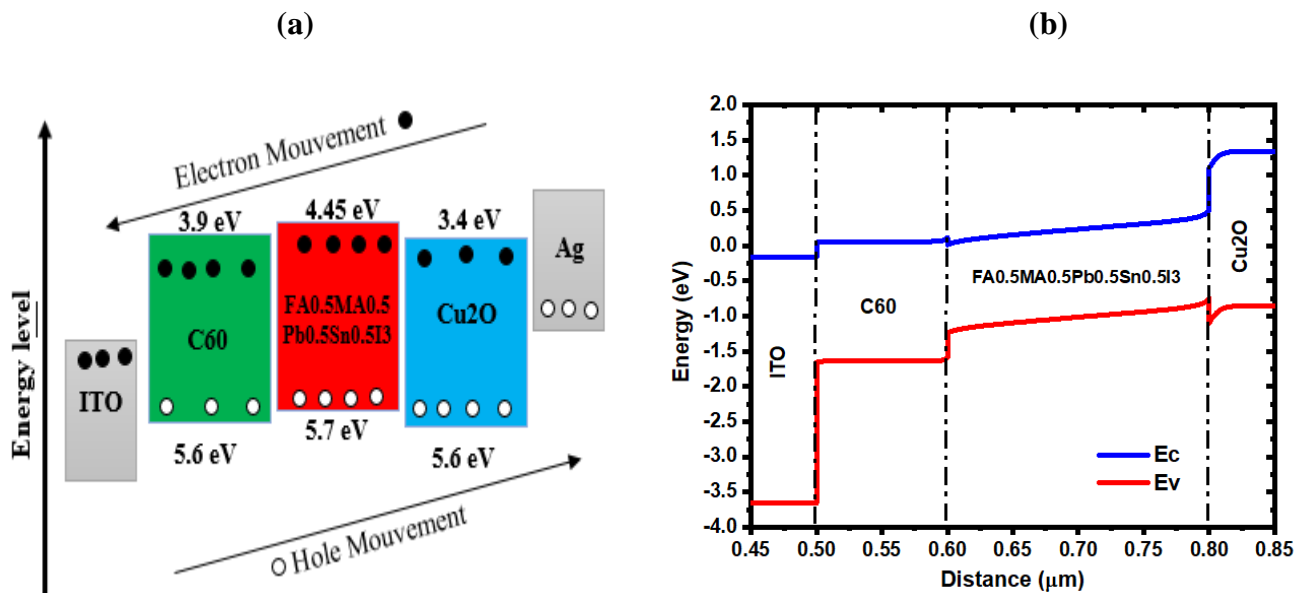


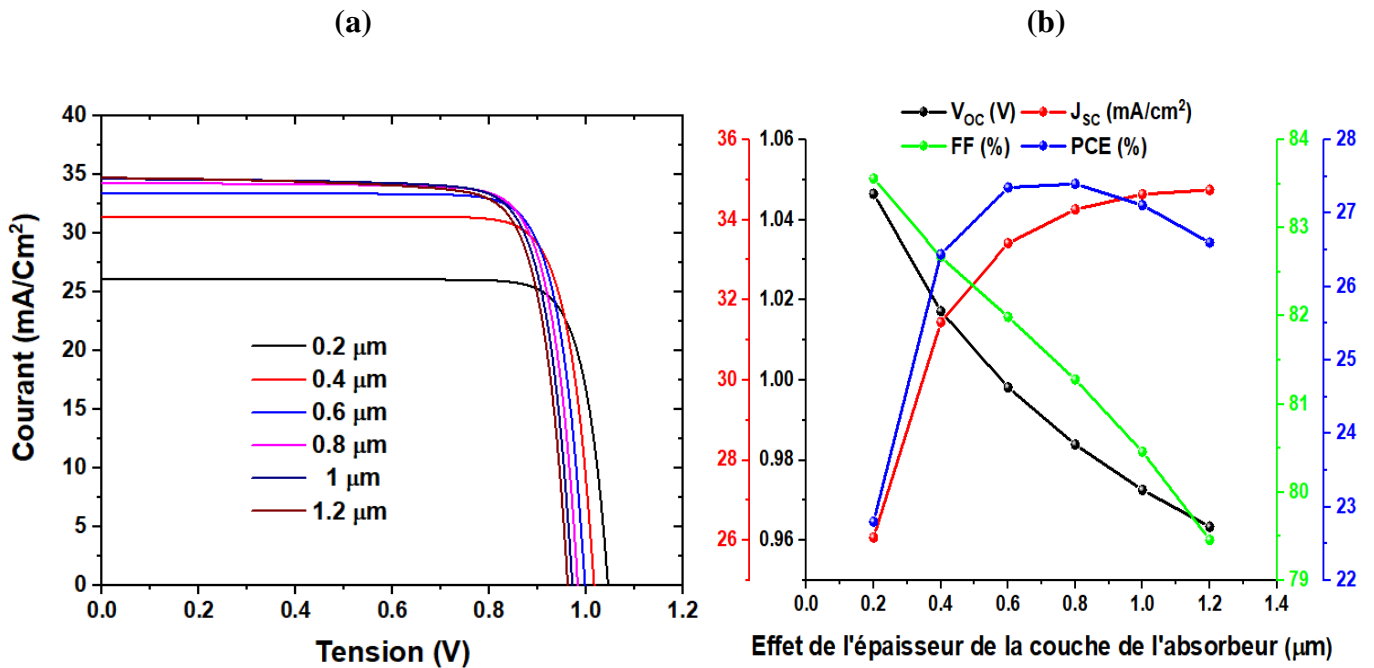
Figure III.3: (a) Alignement du niveau d'énergie, (b) Diagramme de bande à base de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$.

III.3.4. Effet de l'épaisseur de la couche de pérovskites

La figure III.4a fournit une visualisation des caractéristiques de densité de courant et de tension (J-V) concernant la variation d'épaisseur de cellule solaire incorporant $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$. Si l'on passe à la figure III.4b, le J_{sc} et le PCE montrent une augmentation notable de l'épaisseur de la couche PVK. L'augmentation de l'épaisseur contribue à une meilleure absorption de la lumière du soleil, ce qui se traduit par un J_{sc} élevé et une amélioration du PCE [15]. Cette amélioration peut être attribuée à la capacité accrue de la couche de pérovskite plus épaisse à absorber efficacement plus de photons, générant ainsi plus de paires d'électrons et de trous. Cependant, la

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

figure III.4b révèle également une diminution de la FF et des V_{OC} à mesure que l'épaisseur de la couche de pérovskite augmente. Ce déclin est attribué à des problèmes potentiels tels qu'une recombinaison accrue des charges, le piégeage et un manque d'uniformité dans la couche de pérovskite. Une couche excessivement épaisse empêche l'extraction de la charge, ce qui a un impact négatif sur l'efficacité globale du dispositif solaire [16]. La cellule solaire présente un PCE remarquable de 27.4 %, avec un V_{OC} de 1.04 V, un J_{SC} de 34.74 mA cm^{-2} et un FF de 83.56 %. La figure III.4c présente les spectres d'efficacité quantique externe (EQE) de la structure de cellule solaire spécifiée (ITO)/ C_{60} /PVK/ Cu_2O /Ag. La large gamme de longueurs d'onde (550 à 900 nm) observée peut être attribuée à divers facteurs, compte tenu des propriétés distinctives de la pérovskite. La capacité bien connue de la pérovskite à absorber la lumière sur un large spectre devient plus prononcée à mesure que l'épaisseur de la couche de pérovskite augmente, permettant une absorption plus efficace des photons, en particulier vers des longueurs d'onde plus longues dans la région proche infrarouge (au-delà de 700 nm).



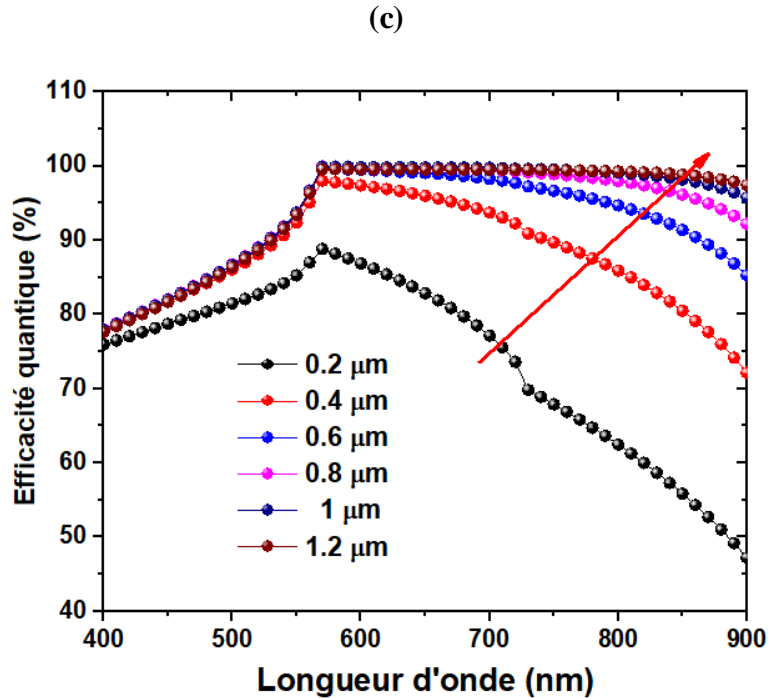


Figure III.4: Effet de l'épaisseur de la pérovskite ($\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$) sur J-V (a), V_{OC} , J_{SC} , FF, PCE (b) et EQE (c).

III.3.5. Effet de l'épaisseur de la couche ETL

La figure III.5 illustre l'influence de l'épaisseur du C_{60} ETL, dans le but d'en comprendre les effets. Sur la figure, une augmentation du J_{sc} , du PCE et du V_{oc} est observée pour des épaisseurs allant de 0.1 à 0.3 μm , suivie d'une diminution ultérieure. Le C_{60} , qui agit comme matériau accepteur d'électrons dans les dispositifs solaires organiques, joue un rôle central. L'augmentation de l'épaisseur de la couche C_{60} améliore les propriétés de transfert d'électrons, améliorant ainsi l'extraction de charge et amplifiant J_{sc} [17]. L'épaisse couche de C_{60} atténue la probabilité de recombinaison des porteurs de charge, en particulier à l'interface arrière au milieu de la couche active ($\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$) et du C_{60} ETL, favorisant ainsi un V_{oc} élevé. La figure III.5 indique également une diminution de FF à mesure que l'épaisseur du ETL (C_{60}) augmente. Ce phénomène peut être attribué à une résistance accrue de la chaîne ou à des interceptions. L'épaisseur accrue de la couche C_{60} introduit des états de résistance en série ou de piégeage supplémentaires, ce qui entrave le transfert de charge et diminue le FF. Des pertes de recombinaison élevées peuvent également contribuer à un FF faible. Les résultats soulignent l'équilibre complexe nécessaire à l'optimisation de l'épaisseur ETL pour obtenir les meilleures performances, compte tenu des

compromis entre l'extraction de charge améliorée et les inconvénients potentiels d'une résistance accrue et des pertes de recombinaison.

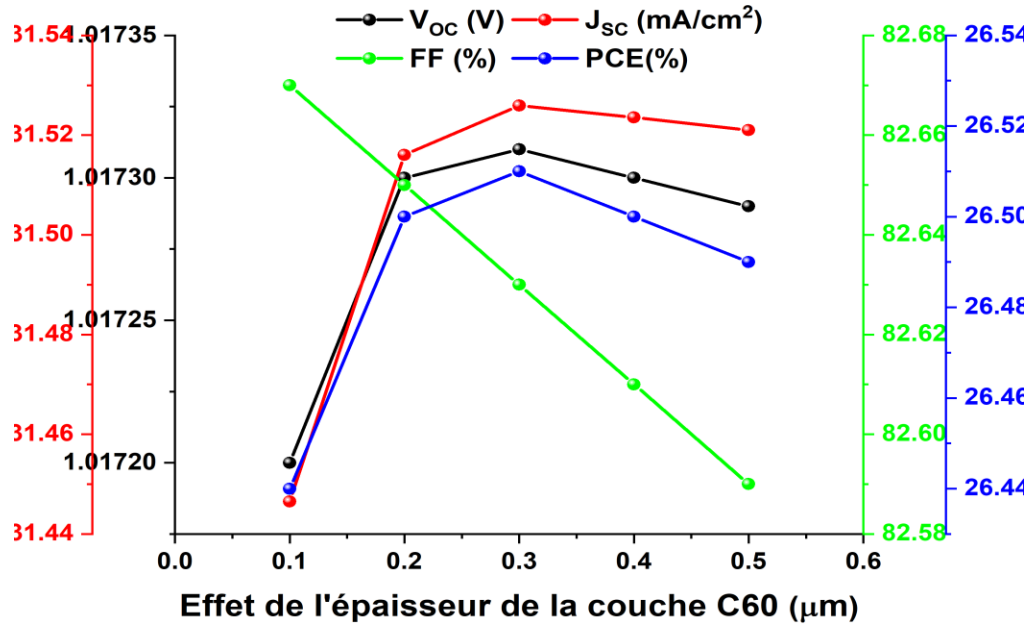


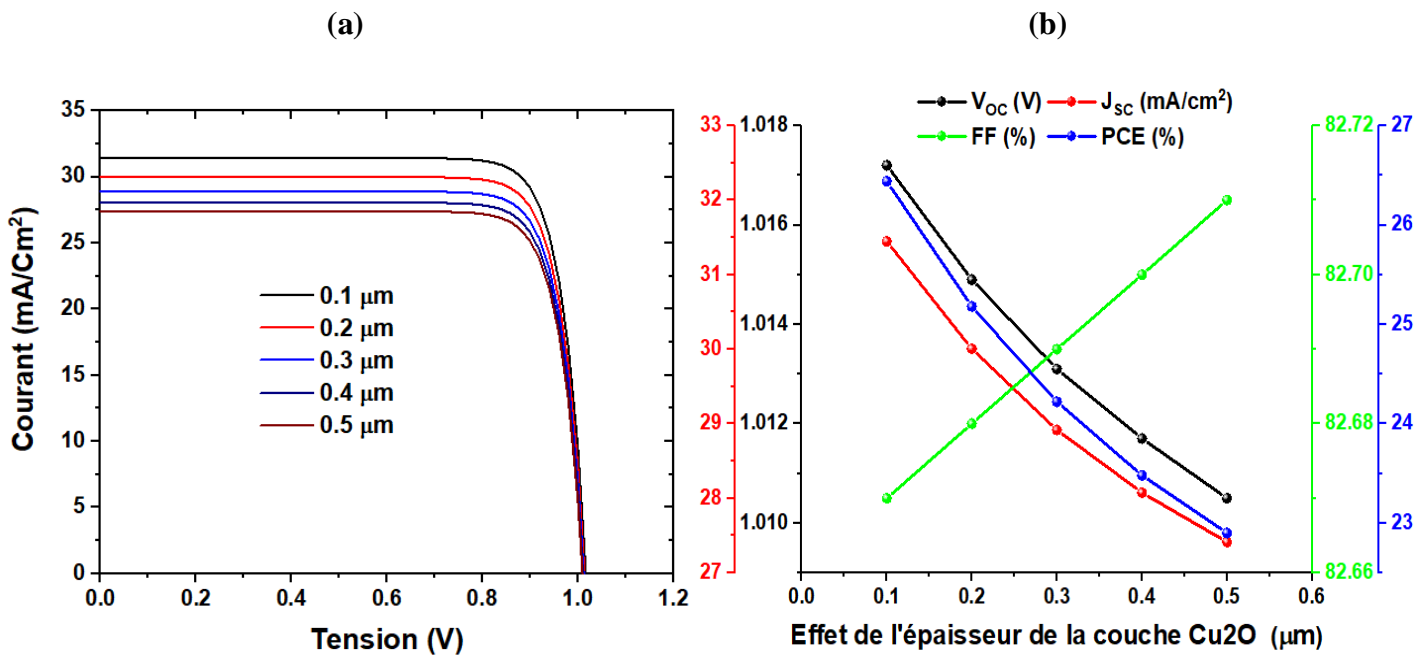
Figure III.5: Effet de l'épaisseur ETL (C₆₀) sur les V_{oc}, J_{sc}, FF, PCE.

III.3.6. Effet de l'épaisseur de la couche HTL

La figure III.6a représente les propriétés J-V avec la variation de l'épaisseur HTL de la cellule solaire proposée. Les écarts d'épaisseur de l'HTL Cu₂O sont explorés pour comprendre leurs effets. La figure III.6b révèle une augmentation de FF au niveau d'une couche épaisse de Cu₂O. Cette amélioration suggère qu'un HTL Cu₂O épais peut améliorer la collecte de charge, atténuant la recombinaison de charge aux interfaces et à l'intérieur de la couche [18]. Par conséquent, cette collecte de charge raffinée conduit à une augmentation de FF. Cependant, la figure III.6b met également en évidence une diminution du J_{sc}, du PCE et du V_{oc} à mesure que l'épaisseur de l'HTL Cu₂O augmente. L'HTL épais absorbe une partie importante de la lumière incidente, diminuant la quantité de lumière atteignant la couche PVK (FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃) et réduisant par conséquent J_{sc} et l'efficacité [19]. L'augmentation de l'épaisseur contribue également à une diminution des V_{oc} car elle introduit plus de défauts ou de sites de pièges, ce qui entraîne une recombinaison accrue des porteurs de charge et, par conséquent, une faible teneur en V_{oc}. La figure

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

III.6c présente les spectres EQE de l'épaisseur de la couche HTL dans la structure PV désignée (ITO)/C₆₀/FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃/Cu₂O/Ag). Les résultats indiquent que une diminution de la valeur de l'EQE avec une augmentation de l'épaisseur de la couche HTL (Cu₂O) sur une large longueur d'onde de 300 à 550 nm, et la réponse spectrale se prolonge jusqu'à environ 900 nm. L'épaisseur optimale de l'HTL dans la structure de l'appareil photovoltaïque peut ne pas correspondre à la gamme de longueurs d'onde spécifiée (300 à 550 nm). Par conséquent, les écarts par rapport à l'épaisseur optimale peuvent entraîner une absorption sous-optimale de la lumière et une diminution de l'EQE. Il est essentiel de considérer et de sélectionner avec précision l'épaisseur de l'HTL pour obtenir les performances optimales dans la gamme de longueurs d'onde spécifiée et au-delà.



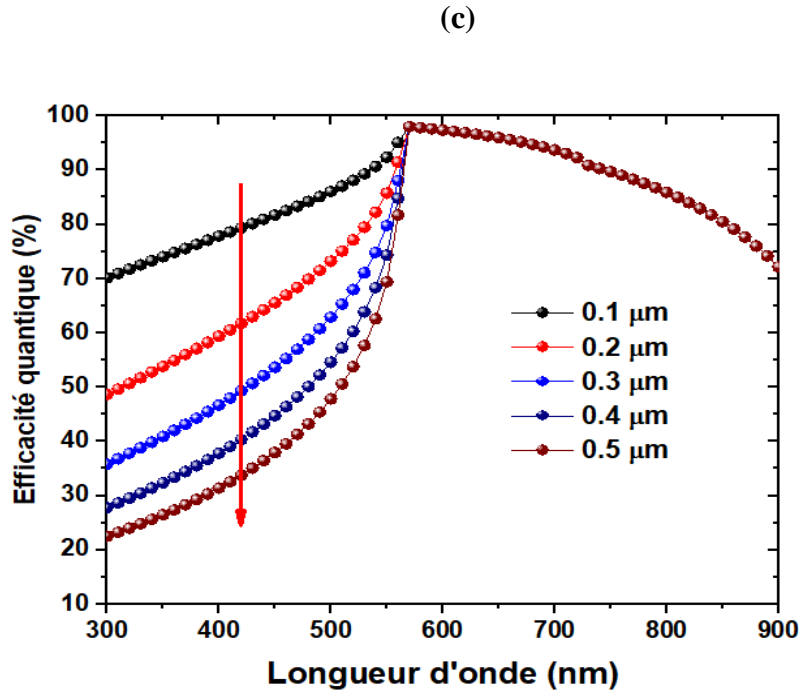


Figure III.6: Effet de l'épaisseur HTL (Cu_2O) sur les sur J-V (a), V_{oc} , J_{sc} , FF, PCE (b) et EQE (c).

III.3.7. Effet des défauts de la couche de pérovskites

La figure III.7a présente les caractéristiques J-V en fonction du défaut de l'absorbeur. La figure III.7b révèle une diminution du J_{sc} , du V_{oc} , du FF et du PCE en présence de l'absorbeur de défauts. L'existence de défauts dans la couche absorbante ($\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$) conduit à une recombinaison accrue des porteurs de charge, englobant à la fois les électrons et les trous. Les défauts peuvent agir comme des pièges de charge, entravant la contribution des porteurs de charge au photocourant et, par conséquent, réduisant le J_{sc} global [20]. De plus, ces défauts peuvent fonctionner comme des pièges à charge ou des centres de dispersion, entravant le mouvement des porteurs de charge. Cet obstacle entraîne à la fois une diminution des V_{oc} et des FF. La mobilité réduite du porteur de charge peut augmenter les pertes de résistance, ce qui finit par diminuer les performances globales de l'appareil. La figure III.7c montre les spectres EQE du défaut de l'absorbeur dans les cellules solaires. Les résultats révèlent une diminution de l'EQE avec une absorption accrue des défauts ($\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$) au sein de la structure de la cellule solaire sélectionnée, (ITO)/ C_{60} / $\text{FA}_{0.5}\text{MA}_{0.5}\text{Pb}_{0.5}\text{Sn}_{0.5}\text{I}_3$ / Cu_2O /Ag sur un large spectre de 300 à 900 nm,

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

avec une réponse spectrale de photons étendue à environ 900 nm. Cette diminution peut être attribuée à l'augmentation des taux de recombinaison, car l'existence de défauts dans la couche absorbante peut faciliter la recombinaison de paires électron-trou photogénérées. Ce taux de recombinaison accru réduit les porteurs de charge contribuant au photocourant, ce qui se traduit par une EQE plus faible

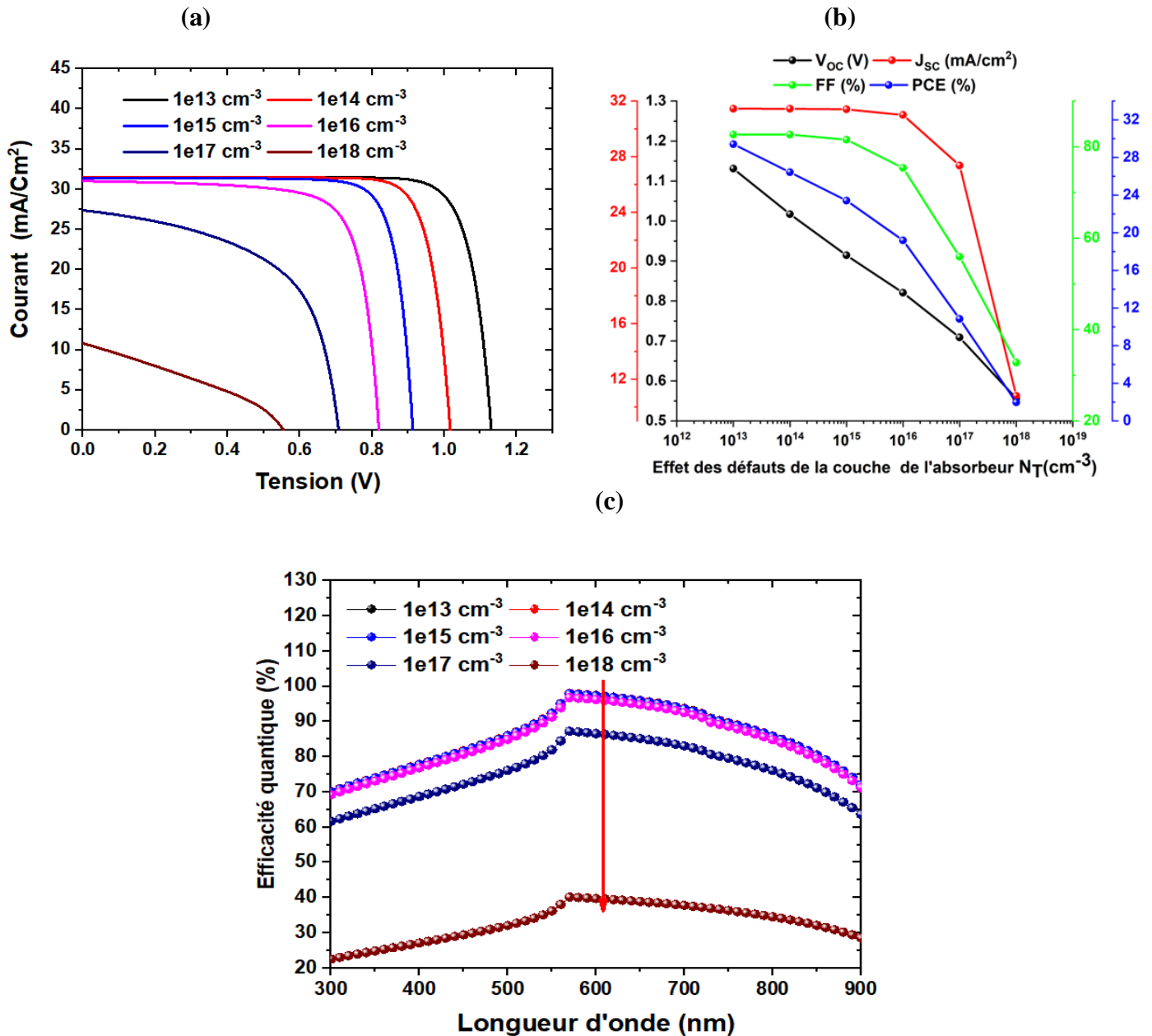


Figure III.7: Effet de la densité de défauts N_t (cm⁻³) sur J-V (a), V_{oc} ,

J_{sc} , FF, PCE (b) et EQE (c).

III.3.8. Effet de la température

La figure III.8a présente les courbes J-V pour illustrer l'impact des changements de température. La figure III.8b met en évidence une augmentation du J_{SC} , du FF et du PCE avec une augmentation de la température. À des températures élevées, le taux de recombinaison non radiative a tendance à augmenter. Cela implique qu'un plus grand nombre de porteurs de charge subissent une recombinaison au lieu de contribuer au photocourant ou à la tension globale [21]. Un taux de recombinaison élevé peut entraîner une baisse du FF et du V_{oc} , ce qui entraînera finalement une baisse de l'PCE. La figure III.8b indique également une augmentation du J_{sc} avec l'augmentation de la température. Bien que l'augmentation de la température puisse augmenter les taux de recombinaison, elle peut également améliorer la mobilité des porteurs de charge. Cette mobilité améliorée peut entraîner une augmentation de la densité de J_{sc} , car les transporteurs se déplacent plus librement à l'intérieur de l'appareil. De plus, des températures élevées peuvent affecter la bande interdite d'un semi-conducteur, ce qui peut entraîner une augmentation de l'absorption des photons et, par conséquent, un J_{sc} plus élevé. La cellule solaire conçue présente un rendement de 26.44 %, avec un V_{oc} de 1.01 V, un J_{sc} de 31.44 mA cm⁻² et un FF de 82.67 %. La figure III.8c représente les spectres EQE en fonction de la température de fonctionnement du PSC. L'augmentation de l'EQE avec l'augmentation des températures dans la structure de cellule solaire sélectionnée (ITO)/C₆₀/PVK /Cu₂O/Ag sur une large gamme de longueurs d'onde de 300 à 550 nm, avec le potentiel pour que la réponse spectrale des photons couvre environ 900 nm, peut être attribuée à un meilleur retrait de charge. L'augmentation des températures favorise une extraction de charge plus ingénieuse, réduisant ainsi la probabilité de recombinaison des porteurs dans l'appareil. Cette conséquence est décisive pour le maintien d'un niveau élevé d'EQE, garantissant qu'une plus grande proportion de porteurs photogénérés contribue activement au courant électrique.

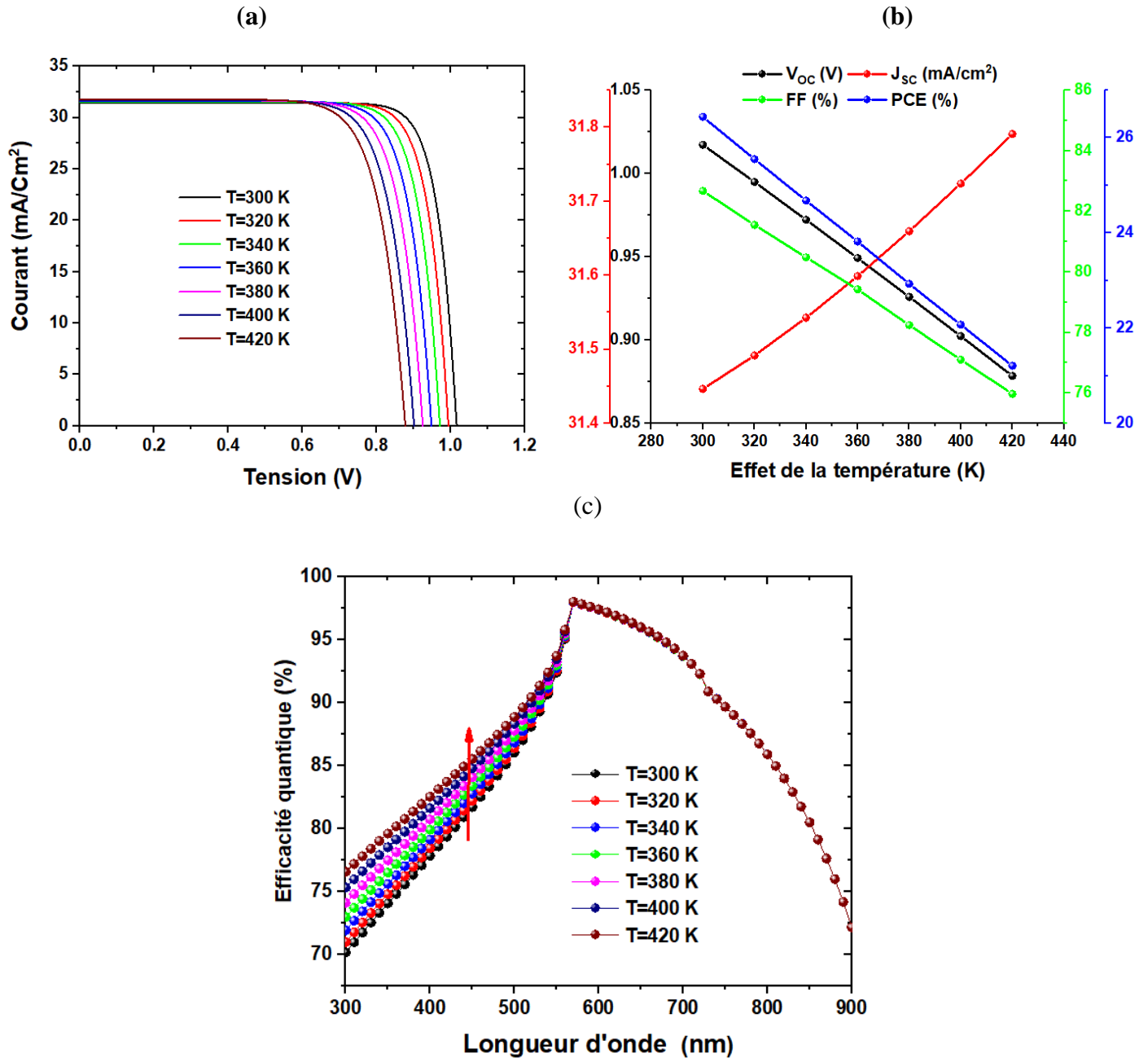


Figure III.8: Effet de la température sur J-V (a), V_{oc}, J_{sc}, FF, PCE (b) et EQE (c).

III.3.9. Effet de la résistance série et shunt

La figure III.9 explique les variations des résistances en série (R_s) et en shunt (R_{sh}) sur les sorties des périphériques. Sur la figure III.9a, on observe une diminution de J_{sc} , FF et PCE pour les R_s allant de 2 à 6 $\Omega\text{-cm}^2$. Selon la loi d'Ohm, une augmentation de R_s entraîne une chute de tension élevée aux bornes de R_s pour un courant donné. Étant donné que J_{sc} est essentiellement le courant

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

produit par la cellule solaire dans des circonstances de court-circuit, une chute de tension accrue aux bornes de R_s réduit la tension effective disponible pour générer du courant, ce qui indique une réduction de J_{sc} [22]. Ceci, à son tour, affecte le FF et le PCE. De plus, une hausse des R_s correspond à une hausse de la V_{oc} . Au fur et à mesure que R_s augmente, la chute de tension aux bornes de R_s augmente, mais comme aucun courant ne circule dans l'état en circuit ouvert, cette chute de tension élevée n'a pas d'impact direct sur le V_{oc} . Par conséquent, les V_{oc} ont tendance à augmenter pour l'augmentation des R_s . Sur la figure III.9b, on observe une augmentation de la teneur en V_{oc} , FF et PCE pour R_{sh} allant de 10^2 à $10^8 \Omega\text{-cm}^2$. La résistance du shunt fournit une voie alternative le long de laquelle le courant circule, ce qui réduit l'amplitude du courant de fuite. Cette réduction de la chute de tension aux bornes de R_{sh} contribue à une augmentation de la V_{oc} . Une R_{sh} élevée minimise les pertes de tension dues aux courants de fuite, ce qui entraîne une tension plus élevée aux bornes de la cellule solaire. Cette réduction des pertes améliore le FF et, par conséquent, le PCE. Il est important de noter que le J_{sc} n'est pas affecté par le R_{sh} . Le J_{sc} est principalement influencé par des problèmes tels que l'absorption de la lumière, la production de porteurs de charge et l'efficacité de la collecte, qui ne sont généralement pas directement affectés par les changements du R_{sh} .

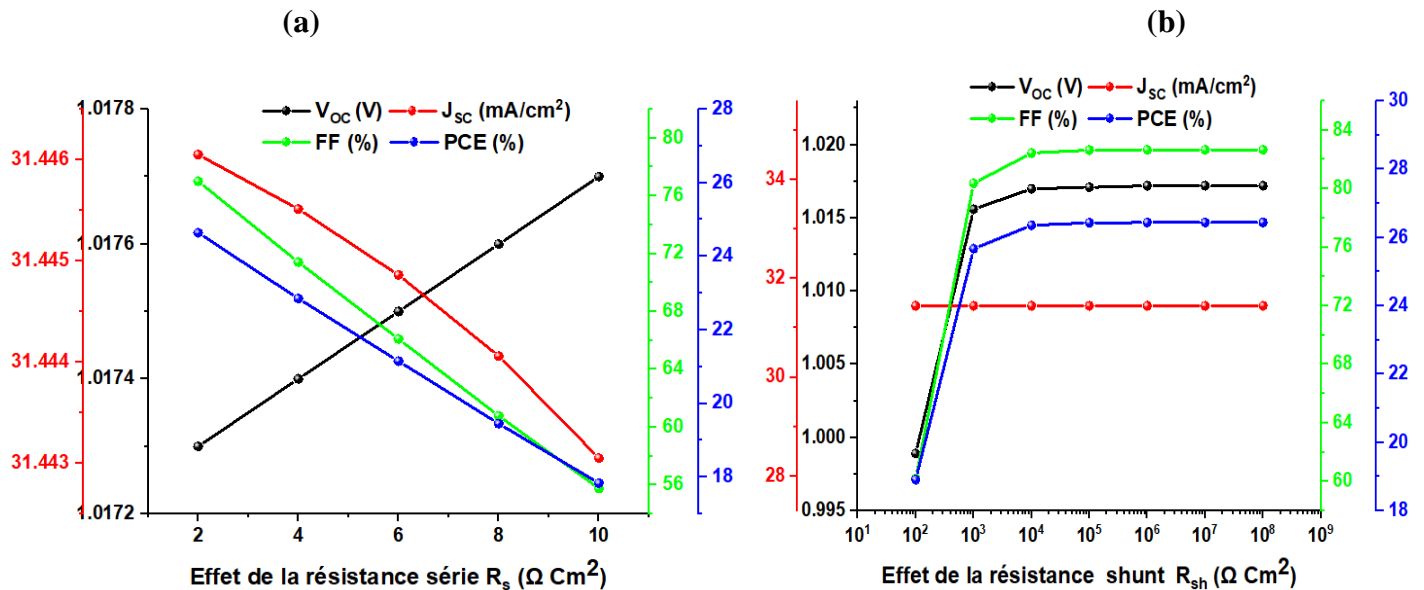


Figure III.9: Effets de R_s (a) et R_{sh} (b) sur les V_{oc} ; J_{sc} ; FF ; PCE.

III.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté et discuté les résultats de simulations numériques des caractéristiques électriques de la structure des cellules solaires composées ITO/C₆₀/FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I₃/Cu₂O/Ag, réalisées à l'aide du logiciel de simulation SCAPS-1D.

Nous avons examiné l'impact de plusieurs paramètres, notamment l'épaisseur de la couche de pérovskite, l'épaisseur des couches ETL et HTL, les défauts de la couche de pérovskite, la température, ainsi que la résistance série et la résistance shunt, sur les caractéristiques électriques I-V. Nous avons également analysé les paramètres V_{oc} , J_{sc} , FF et PCE, ainsi que représenté les spectres EQE. Les résultats de cette approche de simulation ont démontré un V_{oc} optimal de 1.13 V, un J_{sc} de 34.74 mA/cm⁻², un FF de 83.56 %, et un rendement global de 29.41 %

Bibliographie Chapitre III:

- [1] Islam, J. & Hossain, A. K. M. A. Narrowing band gap and enhanced visible-light absorption of metal-doped non-toxic CsSnCl₃ metal halides for potential optoelectronic applications. *RSC Adv.* 10, 7817–7827 (2020).
- [2] GOUFI Meriem & HAMDOUNI Badr « Etude et Simulation D'une Cellule Photovoltaïque à Pérovskite ». Université Larbi Ben M'Hidi O.E.B.
- [3] Kholil, M. I., Bhuiyan, M. T. H., Rahman, M. A., Ali, M. S. & Aftabuzzaman, M. Effects of Fe doping on the visible light absorption and bandgap tuning of lead-free (CsSnCl₃) and lead halide (CsPbCl₃) perovskites for optoelectronic applications. *AIP Adv.* 11, 035229 (2021).
- [4] Kholil, M. I. & Hossen Bhuiyan, M. T. Effects of Cr- and Mn-alloying on the band gap tuning, and optical and electronic properties of lead-free CsSnBr₃ perovskites for optoelectronic applications. *RSC Adv.* 10, 43660–43669 (2020).
- [5] Roknuzzaman, M., Ostrikov, K., Wang, H., Du, A. & Tesfamichael, T. Towards lead-free perovskite photovoltaics and optoelectronics by ab-initio simulations. *Sci. Rep.* 7, 14025 (2017).
- [6] Ur Rehman, J. et al. First-principles calculations to investigate structural, electronics, optical and elastic properties of Sn-based inorganic Halide-perovskites CsSnX₃ (X = I, Br, Cl) for solar cell applications. *Comput. Theor. Chem.* 1209, 113624 (2022).
- [7] Ali, M. H. et al. Numerical analysis of FeSi₂ based solar cell with PEDOT:PSS hole transport layer. *Mater. Today Commun.* (2023).
- [8] Pandey, R. et al. Halide Composition Engineered Non-Toxic Perovskite-Silicon Tandem Solar Cell with 30.7% Conversion Efficiency. *Appl. Electron. Mater.* (2023).
- [9] mp-1070375: CsSnCl₃ (Cubic, Pm-3m, 221) - materials project. The Materials Project <https://materialsproject.org/materials/mp-27394/>.
- [10] Hossain, M. K. et al. Effect of various electron and hole transport layers on the performance of CsPbI₃-based perovskite solar cells: A numerical investigation in DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS frameworks. *ACS Omega* 7, 43210–43230 (2022).
- [11] Srivastava, S., Singh, A. K., Kumar, P. & Pradhan, B. Comparative performance analysis of lead-free perovskites solar cells by numerical simulation. *J. Appl. Phys.* 131, 175001 (2022).

- [12] (X = Cl, Br, and I) perovskite structures as solar cell absorber: A theoretical study using HSE06. *J. Phys. Chem. C* 118, 19655–19660 (2014).
- [13] Rubel, M. H. K. et al. First-principles calculations to investigate structural, elastic, electronic, thermodynamic, and thermoelectric properties of $\text{CaPd}_3\text{B}_4\text{O}_{12}$ (B = Ti, V) perovskites. *Results Phys.* 42, 105977 (2022).
- [14] Islam, M. R., Mazumder, A. A. M., Mojumder, M. R. H., Shifat, A. S. Z. & Hossain, M. K. Strain-induced tunable optoelectronic properties of inorganic halide perovskites APbCl_3 (A = K, Rb, and Cs). *Jpn. J. Appl. Phys.* <https://doi.org/10.35848/1347-4065/acb09e> (2023).
- [15] Rubel, M. H. K. et al. First-principles calculations to investigate physical properties of single-cubic $(\text{Ba}_{0.82}\text{K}_{0.18})(\text{Bi}_{0.53}\text{Pb}_{0.47})\text{O}_3$ novel perovskite superconductor. *Mater. Today Commun.* 33, 104302 (2022).
- [16] Nishio, T., Ahmad, J. & Uwe, H. Spectroscopic observation of bipolaronic point defects in $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$. *Phys. Rev. Lett.* 95, 176403 (2005).
- [18] Hinks, D. G. et al. Synthesis, structure and superconductivity in the $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_{3-y}$ system. *Nature* 333, 836–838 (1988).
- [19] Penn, D. R. Wave-number-dependent dielectric function of semiconductors. *Phys. Rev.* 128, 2093–2097 (1962).
- [20] Mandadapu, U., Vedanayakam, S. V. & Thyagarajan, K. Simulation and analysis of lead based perovskite solar cell using SCAPS-1D. *Indian J. Sci. Technol.* 10, 1–8 (2017).
- [21] Samiul Islam, M. et al. Defect study and modelling of SnX_3 -based perovskite solar cells with SCAPS-1D. *Nanomaterials* 11, 1218 (2021).
- [22] Lin, L. et al. Simulated development and optimized performance of CsPbI_3 based all-inorganic perovskite solar cells. *Sol. Energy* 198, 454–460 (2020).



Conclusion Générale

Conclusion Générale

Dans ce travail, nous introduisons une méthode innovante de simulation de cellules solaires à l'aide du simulateur SCAPS-1D. Notre approche intègre des couches de transport d'électrons (ETL) avancées constituées Buckminsterfullerène (C_{60}) et des couches de transport de trous (HTL) composées de d'oxyde de cuivre (Cu_2O). Nos simulations démontrent que le cellule solaire (ITO) / C_{60} / $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ / Cu_2O / Ag, présentent une efficacité de photoconversion exceptionnellement élevée. De plus, notre enquête va au-delà d'un examen au niveau de la surface, en se plongeant dans une exploration complète de multiples facteurs influençant les performances des cellules solaires à base de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$. Nous examinons l'impact de divers paramètres, notamment l'épaisseur de l'absorbeur PVK, l'épaisseur ETL, l'épaisseur HTL, la résistance en série, l'épaisseur ETL et la température de fonctionnement. Ces analyses fournissent des informations précieuses sur l'interaction complexe de ces facteurs, mettant en lumière la manière dont ils affectent la stabilité et l'efficacité de la PCE. En fin de compte, notre étude approfondie de simulation approfondit non seulement notre compréhension des subtilités liées à ces cellules solaires, mais ouvre également des opportunités prometteuses pour la recherche et le développement futurs dans le domaine du photovoltaïque.

Pour simuler les caractéristiques électriques d'une cellule solaire à l'aide du logiciel Scaps-1D, la première étape consiste à définir la structure de la cellule solaire. Cela implique la spécification des différentes régions de la cellule, ainsi que des électrodes et du dopage associés. Une fois cette étape franchie, nous procédons à la définition des paramètres des matériaux utilisés dans la cellule solaire, ainsi que des modèles physiques qui décrivent son fonctionnement.

L'optimisation des épaisseurs, des défauts, de la température, de la résistance série et shunt de la cellule solaire à base de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ avec une structure (ITO) / C_{60} / $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ / Cu_2O / Ag a abouti à une série de résultats significatifs :

- Avec une épaisseur de $0.8 \mu m$ pour la couche pérovskite de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$, les paramètres photovoltaïques sont les suivants : un courant de court-circuit J_{sc} de 34.74 mA/cm^2 , une tension à vide V_{oc} de 1.04 V , un facteur de forme FF de 83.56% et un rendement PCE de 27.4% .
- Pour la couche de C_{60} avec une épaisseur de $0.3 \mu m$, les paramètres photovoltaïques obtenus sont : un courant de court-circuit J_{sc} de 31.52 mA/cm^2 , une tension à vide V_{oc} de 1.01 V , un facteur de forme FF de 82.63% et un rendement PCE de 26.56% .
- Une couche de Cu_2O avec une épaisseur de $0.1 \mu m$ affiche les paramètres photovoltaïques suivants : un courant de court-circuit J_{sc} de 31.44 mA/cm^2 , une tension

Conclusion Générale

à vide V_{oc} de 1.01 V, un facteur de forme FF de 82.67 % et un rendement PCE de 26.44 %.

- Une couche pérovskite de $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ avec un défaut de 10^{13} présente les paramètres photovoltaïques suivants : un courant de court-circuit J_{sc} de 31.45 mA/cm², une tension à vide V_{oc} de 1.13 V, un facteur de forme FF de 82.68 % et un rendement PCE de 29.41 %.
- Pour la cellule solaire (ITO) / C_{60} / $FA_{0.5}MA_{0.5}Pb_{0.5}Sn_{0.5}I_3$ / Cu₂O/Ag à une température de 300 K, les paramètres photovoltaïques sont les suivants : un courant de court-circuit J_{sc} de 31.44 mA/cm², une tension à vide V_{oc} de 1.01 V, un facteur de forme FF de 82.67 % et un rendement PCE de 26.44 %.
- Enfin, pour la même cellule solaire avec une résistance série de 2 Ω-cm² et une résistance shunt de 10⁴ Ω-cm², les paramètres photovoltaïques sont : un courant de court-circuit J_{sc} de 31.44 mA/cm², une tension à vide V_{oc} de 1.01 V, un facteur de forme FF de 82.66 % et un rendement PCE de 26.44 %.

Ces résultats mettent en lumière l'impact significatif des différents paramètres sur les performances de la cellule solaire, offrant des pistes précieuses pour l'optimisation continue de sa conception et de son rendement.