REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

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

Institut d'électronique et de télécommunications - IET

Département d'électronique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par

- **Boulefrakh Imene**
- **Khababa Dhouha**

Intitulé

Étude et optimisation d'une cellule solaire pérovskite $Na_2TlGaCl_6$ par simulation SCAPS-1D

Soutenu le :8 /6/2026

Devant le Jury composé de :

Nom & Prénom	*Grade*	*Qualité*	*Etablissement*
Yousfi Abderrahim	*MCA*	*Président*	*Univ-BBA*
Saidani Okba	*MCB*	*Encadreur*	*Univ-BBA*
Zouache Rafik	*MCA*	*Examinateur*	*Univ-BBA*

Année Universitaire 2025/2026

REMERCIEMENT

On remercie Allah le tout puissant de nous avoir donné la sante et la volonté d'entamer et de terminer ce mémoire. Nous tenons à remercier vivement notre encadreur Mr. Saidani okba D'avoir accepté de nous guider tous le long de ce travail, la confiance, la patience, qui ont constitué un apport considérable sans lesquels ce travail n'aurait pas pu être mené au bon port. Nous remercier également toute l'équipe pédagogique de l'université de bba et les intervenants professionnels responsables de ma formation, les membres du jury pour leur présence, pour leur lecture attentive de ma thèse ainsi que pour les remarques qu'ils m'adresseront lors de cette soutenance afin d'améliorer travail.

.

DEDICACE

Je tiens c'est avec grande plaisir que je dédie ce modeste travail

A ma mère Abla

Source inépuisable de tendresse, de patience et de sacrifice Ta prière et ta bénédiction m'ont été d'un grand secours tout au long de ma vie.

Puise dieu tout puissant te préserver et t''accorder sante, longue vie et bonheur.

A mon père Messaoud dont le mérite, les sacrifices et les qualités humaines m'ont permis de vivre ce jour.

Merci !

Dhouha

DEDICACE

Je dédie ce projet :

A ma chère mère,

A mon cher père,

Qui n'ont jamais cessé, de formuler des à mon égard, de me soutenir Et de m'épauler pour que je puisse atteindre mes objectifs. A mes frères, nadia, ilyes, loubna Pour ses soutiens moraux et leur conseils précieux tout au ong de mes études.

Merci !

Imene

Table des matières

ملخص…… V

Résumé……vi

Abstract……vii

Liste des symboles……xi

Liste des abréviations……xiii

Liste des Figures……...……...xv

Liste des tableaux……...…xvi

Introduction Générale……...…1

CHAPITRE I : Notions générales sur les cellules solaires

I.1. Introduction ……10

I.2. Histoire du photovoltaïque……...……...10

I.3. Rayonnement solaire ……..……12

I.3.1. Spectre solaire ……...…12

I.3.2. Air masse ……..……..13

I.4. Cellule solaire ……..……...14

I.4.1. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire ……..……15

I.4.2. Caractéristiques électriques d'une cellule solaire ……..……16

I.4.3. Circuitéquivalent d'une cellule solaire …….……..17

I.5. Paramètres d'une cellule solaire ……..……19

I.5.1. Tension en circuit ouvert (Voc) …….……19

I.5.2. Puissance maximale (Pm)…….……..19

I.5.3. Facteur de forme (FF)…… ……20

I.5.4. Rendement photovoltaïque (η) ……..……20

I.6. Résistances parasites ……...……21

I.6.1. Résistance Série ……...……...…21

I.6.2. Résistance shunt ……...……...…22

I.7.Conclusion……...…….....23

Bibliographie chapitre I

CHAPITRE II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

II .1. Introduction……27

II .2. Historique ……...……...27

II .3. Matériau pérovskite ……...……28

II .3.1. Structure cristallographique de la pérovskite ……...……28

II .3.2. Propriétés opto-électroniques ……...……29

II.3.2.1. Propriétés optiques……..……29

II.3.2.2. Propriétés électroniques ……...……...…..……31

II .4. Applications des matériaux pérovskites …...……...…...32

II .5. Architecture des cellules solaires Pérovskites ……...…….……34

II .6. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites ...……36

II .7. Conclusion……38

Bibliographie chapitre II

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

III.1. Introduction……...……...……40

III.2. Présentation du logiciel SCAPS ……...……...…40

III.2.1. Utilisation et étapes de la simulation …….……40

III.3. Description de la structure de la cellule solaire à base des pérovskites……40

III.3.1. Description de la structure…….....……42

III.3.2. Modèles et paramètres de simulation ……...……44

III.3.3. Effet de l'épaisseur de la couche de pérovskites ……...….....…45

III.3.4.Effet de l'épaisseur de la couche ETL ….……...……....46

III.3.5.Effet de l'épaisseur de la couche HTL …….....……..….47

III.3.6. Effet des défauts de la couche de pérovskites ….……..…….....48

III.3.7. Effet de la température …….……..…...51

III.3.8. Effet de la résistance série et shunt ……..….....52

V.4. Conclusion…….....60

Bibliographie chapitre III

Conclusion générale……...

ملخص

تركز هذه الدراسة على تحسين أداء الخلايا الشمسية المعتمدة على البيروفسكايت المزدوج الخالي من الرصاص، وبالتحديد يهدف هذا العمل إلى استكشاف إمكانات هذه المادة .SCAPS-1D، وذلك باستخدام برنامج المحاكاة $Na_2TlGaCl_6$ مادة غير العضوية كبديل صديق للبيئة للبيروفسكايت التقليدي المحتوي على الرصاص، مع السعي لتحقيق كفاءة فوتوفولطية عالية وقد أُجري تحليل بارامتري شامل لدراسة تأثير العوامل الأساسية على أداء الجهاز، بما في ذلك اختيار طبقات نقل الإلكترونات ، وتأثير سُمك الطبقة الماصة، بالإضافة إلى دراسة تأثير العيوب ومستويات التطعيم (HTL) وطبقات نقل الفجوات (ETL) أظهرت نتائج المحاكاة أن أداء الخلية يعتمد بشكل كبير على توافق مستويات .($Na_2TlGaCl_6$) داخل طبقة الامتصاص وقد تم التوصل إلى بنية مثالية للجهاز تتكون من .(Recombination) الطاقة، وجودة المادة، والحد من آليات إعادة الاندماج بسُمك 800 نانومتر)، وطبقة ($Na_2TlGaCl_6$بسُمك 100 نانومتر) كطبقة نقل إلكترونات، وطبقة ماصة من (IGZOطبقة .30.61%بلغت (PCE) بسُمك 100 نانومتر) كطبقة نقل فجوات؛ حيث حققت هذه التركيبة كفاءة تحويل طاقة) CBTS ويعزى هذا الأداء العالي إلى تحسين نقل حاملات الشحنة وتقليل الفواقد الناتجة عن إعادة الاندماج. تؤكد هذه النتائج الإمكانات الواعدة للبيروفسكايت المزدوج الخالي من الرصاص في تطوير خلايا شمسية فعالة ومستقرة وصديقة للبيئة، كما تبرز أهمية كوسيلة فعالة لتسريع تصميم وتحسين الأجهزة الكهروضوئية قبل التحقق SCAPS-1D أدوات المحاكاة المتقدمة مثل .التجريبي

الكلمات المفتاحية:

تحسين الأداء الكهروضوئيSCAPS-1D، بيروفسكايت مزدوج خالي من الرصاص، خلايا شمسية، Na2TlGaCl6

Résumé

Cette étude porte sur l'optimisation des performances des cellules solaires à base de pérovskites doubles sans plomb, en particulier le matériau $Na_2TlGaCl_6$, en utilisant le simulateur numérique SCAPS-1D. L'objectif principal est d'explorer le potentiel de cette pérovskite inorganique comme alternative écologique aux pérovskites contenant du plomb, tout en maintenant des performances photovoltaïques élevées. Une analyse paramétrique approfondie a été réalisée afin d'évaluer l'influence des paramètres clés du dispositif, notamment le choix des couches de transport des charges (ETL et HTL), l'épaisseur de l'absorbeur, ainsi que les effets des défauts, du dopage et des impuretés au sein de la couche absorbante $Na_2TlGaCl_6$. Les résultats de simulation montrent que les performances du dispositif dépendent fortement de l'alignement des bandes d'énergie, de la qualité cristalline du matériau et de la réduction des mécanismes de recombinaison. L'architecture optimale identifiée se compose d'une couche ETL en IGZO de 100 nm, d'un absorbeur $Na_2TlGaCl_6$ de 800 nm, et d'une couche HTL en CBTS de 100 nm. Cette configuration permet d'atteindre un rendement de conversion de puissance (PCE) de 30,61 %, grâce à une amélioration significative du transport des porteurs de charge et à une minimisation des pertes. Ces résultats démontrent l'intérêt des pérovskites doubles sans plomb dans le développement de cellules solaires performantes, stables et respectueuses de l'environnement. Par ailleurs, l'utilisation d'outils de simulation avancés comme SCAPS-1D constitue une approche efficace pour accélérer la conception et l'optimisation des dispositifs photovoltaïques avant leur validation expérimentale.

Mots-clés : $Na_2TlGaCl_6$, pérovskite double sans plomb, cellule solaire, SCAPS-1D, optimisation photovoltaïque.

Abstract

This study investigates the optimization of inorganic perovskite solar cells based on $Na_2TlGaCl_6$ using the SCAPS-1D simulation tool. A comprehensive parametric analysis was conducted to evaluate the influence of critical device parameters on photovoltaic performance. Particular attention was given to the selection and optimization of charge transport layers, including the electron transport layer (ETL) and hole transport layer (HTL), as well as the absorber layer properties such as thickness, defect density, doping concentration, and impurity levels in the $Na_2TlGaCl_6$ material. The simulation results reveal that device performance is highly sensitive to both material properties and layer configurations. An optimized structure consisting of a 100 nm IGZO ETL, an 800 nm $Na_2TlGaCl_6$ absorber layer, and a 100 nm CBTS HTL demonstrated outstanding performance, achieving a power conversion efficiency (PCE) of 30.61%. This high efficiency is attributed to improved charge carrier transport, reduced recombination losses, and optimal energy band alignment across the device. These findings highlight the significant potential of advanced numerical simulation tools such as SCAPS-1D in guiding the design and optimization of next-generation perovskite solar cells. Moreover, this work provides a solid theoretical foundation for future experimental validation and contributes to the development of efficient, stable, and scalable photovoltaic technologies.

Keywords : $Na_2TlGaCl_6$, perovskite solar cells, SCAPS-1D, photovoltaic optimization, simulation

Liste des symboles

Eg	Gap d‘énergie interdite d‘un matériau	eV
ND	Concentration des atomes donneurs	cm^3
NA	Concentration des atomes accepteurs	cm^3
Ef	Niveau de FERMI	eV
Ei	Niveau intrinsèque	eV
Ec	Niveau de conduction	eV
Ev	Niveau de valence	eV
T	Température	K
λ	Longueur d'onde	µm
Jsc	Densité du courant de court-circuit	mA/cm^2
Voc	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
Xe	Affinité électronique	eV
μn	Mobilité des électrons	cm^2/Vs

μp	Mobilité des trous	cm^2/Vs
Rn	Taux de recombinaison des électrons	$cm^{-3}s^{-1}$
Rp	Taux de recombinaison des trous	$cm^{-3}s^{-1}$

Liste des abréviations

AM	Mass d'Air
AM0	Spectre solaire hors atmosphère
AM1.5G	Spectre solaire terrestre (global).
PV	Photovoltaïque
(I-V)	la caractéristique courant-tension
(P-I)	la caractéristique puissance-courant
(P-V)	la caractéristique puissance-tension
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
$Na_2TlGaCl_6$	Double perovskite iodide de soduim thallium gallium
FTO	l'oxyde d'étain dopé au fluor
C_{60}	Fullerène
Cu_2O	Oxyde cuivreux

CHAPITRE I : Notions générales sur les cellules solaires

Figure I.1 : Nombre de publications par année (2001-2024) sur les différentes générations de cellules solaires, les statistiques sont extraites de la base de données SienceDirect

Figure I.2 : Spectres solaires AM0 (rouge) et AM1.5G (noir)

Figure I.3 : Masse d'Air

Figure I.4 : Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Figure I.5 : La structure et le diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque

Figure I.6 : Caractéristiques courant-tension I(V) (Ligne continue) et puissance

(Ligne pointillée) d'une cellule solaire

Figure I.7: Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque: modèle à deux diodes

Figure I.8 : L'effet de la résistance série sur la caractéristique I-V simulation

Figure I.9 : L'effet de la résistance shunt (R_{sh}) sur la caractéristique I-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. (a) Émission de photoluminescence (PL) accordable des cristaux de pérovskite $OA_{0.3}MA_{0.7}PbX_3$ (X = I, Br ou Cl) en fonction de la composition en halogénures mixtes. (b) Coefficient d'absorption des cristaux de pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ comparé à celui d'autres matériaux photovoltaïques. (c) Diagrammes schématiques des niveaux d'énergie de différents cristaux de pérovskite. (d) Diagramme de chromaticité illustrant les coordonnées colorimétriques d'un écran LCD utilisant un filtre de couleur à points quantiques (QD) à base de pérovskite.

Figure II.4. Les applications révolutionnaires rendues possibles par les composants optoélectroniques en matériau pérovskite

Figure II.5. Structures typiques des cellules solaires à pérovskite (PSC) : (a) architecture mésoporeuse n–i–p, (b) architecture planaire conventionnelle n–i–p, et (c) architecture planaire inversée p–i–n

Figure II.6. (a) Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique, (b) Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

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

Figure III.2. (a) Représentation schématique de la structure de la cellule solaire composée de couches d'ITO, d'IGZO, de $Na_2TlGaCl_6$ et de CBTS. (b) Diagramme de bandes correspondant illustrant l'alignement des niveaux d'énergie de la bande de conduction (E_k), de la bande de valence (E_v) et des niveaux de Fermi (F_n, F_p) à travers les couches.

Figure III.3. Comparaison des performances de différentes couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL) dans les cellules solaires. (a) ETL : C_{60}, PCBM, ZnO, IGZO, LBSO, WS_2. (b) HTL : CBTS, CFTS, Spiro-MeOTAD, Cu_2O, PEDOT : PSS, Zn_3P_2.

Figure III.4. Effet (a) de l'épaisseur de la couche absorbante et (b) de la densité de défauts sur les performances photovoltaïques (Voc, Jsc, FF et PCE) de la cellule solaire pérovskite $Na_2TlGaCl_6$.

Figure III.5. Influence de l'épaisseur des couches de transport d'électrons IGZO et de transport de trous CBTS sur Voc, Jsc, FF et PCE de la cellule solaire à double pérovskite sans plomb à base de $Na_2TlGaCl_6$.

Figure III.6: Effet de la température sur V_{OC}, J_{SC}, FF, PCE.

Figure III.7: Influence de la résistance série (Rs) et de la résistance parallèle (Rsh) sur les performances des cellules solaires.

Figure III.8: Mesures comparatives des performances des cellules solaires ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS initiales et optimisées

CHAPITRE II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

Tableau II.1. Bande interdite, mobilité des porteurs de charge et longueur de diffusion dans les cristaux de pérovskites halogénées

CHAPITRE III : Résultats de simulation numérique et interprétation

Tableau III.1 : Paramètres d'optimisation des ETL et de la pérovskite.

Tableau III.2 : Propriétés matérielles des couches HTL.

Tableau III.3 : Comparaison des performances photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS optimisée avec les architectures précédemment décrites.

Introduction Générale

Au cours des dernières décennies, le système énergétique mondial a connu une transformation profonde sous l'effet combiné de contraintes environnementales, économiques et technologiques. La dépendance excessive aux énergies fossiles, qui constituent encore aujourd'hui la principale source d'énergie à l'échelle mondiale, a entraîné une augmentation significative des émissions de gaz à effet de serre, contribuant directement au changement climatique et à la dégradation progressive de l'environnement [1]. Par ailleurs, l'épuisement de ces ressources non renouvelables, associé à la volatilité des prix sur les marchés internationaux, renforce l'urgence de repenser les modèles énergétiques actuels. Dans ce contexte, la transition vers des systèmes énergétiques durables, fiables et respectueux de l'environnement s'impose désormais comme une nécessité incontournable pour assurer un développement socio-économique pérenne [2].

Comme illustré dans la Figure 1, les énergies renouvelables constituent une réponse stratégique à ces enjeux globaux. Parmi celles-ci, l'énergie solaire, l'énergie éolienne, l'hydroélectricité, la biomasse, la géothermie ainsi que les énergies marines représentent des alternatives prometteuses permettant de réduire considérablement l'empreinte carbone tout en garantissant la sécurité énergétique. Ces sources se caractérisent par leur disponibilité quasi illimitée à l'échelle humaine et leur faible impact environnemental, ce qui en fait des piliers essentiels de la transition énergétique mondiale [3].



Figure.1. Principales sources d'énergie renouvelables contribuant aux systèmes énergétiques durables [3].

Parmi ces différentes sources, l'énergie solaire occupe une place privilégiée en raison de son abondance, de sa large distribution géographique et de son potentiel énergétique considérable. La conversion de cette énergie en électricité repose sur les systèmes photovoltaïques, qui représentent aujourd'hui une technologie clé dans la production d'énergie propre [4]. La diversité et la flexibilité des applications photovoltaïques sont clairement mises en évidence dans la Figure 2, où l'on observe leur intégration dans de nombreux domaines, allant des installations résidentielles aux infrastructures urbaines intégrées aux bâtiments (BIPV), en passant par les systèmes de transport et les plateformes photovoltaïques flottantes. Cette adaptabilité confère aux technologies photovoltaïques un avantage stratégique majeur pour répondre à des besoins énergétiques variés et en constante évolution [5].



Figure.2. Classification et applications concrètes des systèmes photovoltaïques [5].

L'amélioration continue des performances des cellules photovoltaïques constitue un facteur déterminant dans leur adoption à grande échelle. Comme le montre la Figure 3, les rendements des différentes technologies photovoltaïques ont connu une progression significative au cours des dernières décennies, grâce aux avancées en science des matériaux et en ingénierie des dispositifs.

Les cellules à base de silicium cristallin dominent actuellement le marché en raison de leur maturité technologique, de leur stabilité et de leur fiabilité. Toutefois, ces technologies approchent progressivement leurs limites théoriques de rendement, ce qui incite la communauté scientifique à explorer de nouveaux matériaux capables d'offrir des performances supérieures tout en réduisant les coûts de fabrication [6].

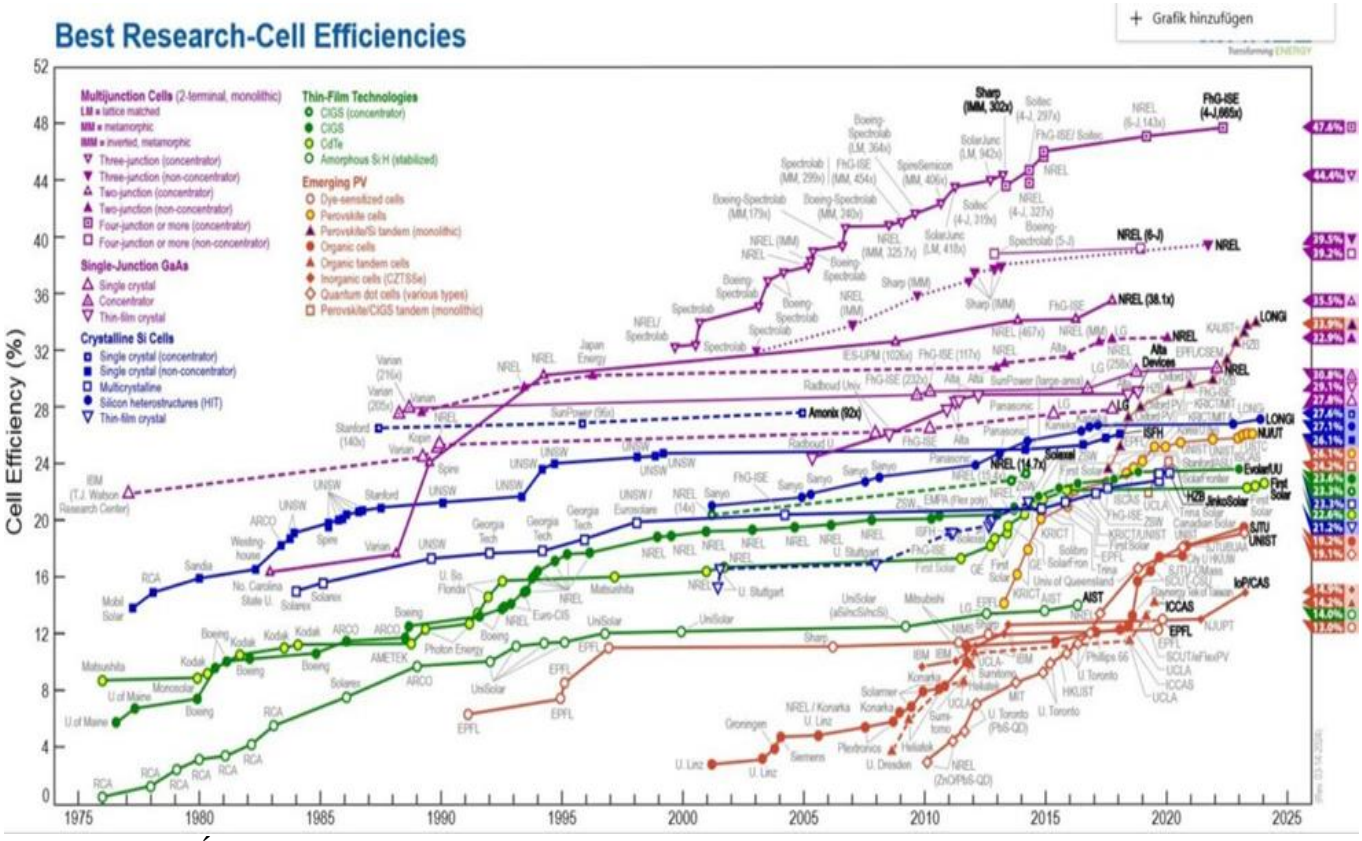


Figure.3. Évolution historique des rendements des cellules photovoltaïques à travers différentes technologies [6].

Dans cette perspective, les cellules solaires à base de pérovskites se sont imposées comme une innovation majeure dans le domaine photovoltaïque. Ces matériaux présentent des propriétés optoélectroniques exceptionnelles, notamment un coefficient d'absorption élevé, une excellente mobilité des porteurs de charge et une bande interdite ajustable, permettant une optimisation efficace de la conversion photovoltaïque [7]. La Figure 4 illustre de manière significative l'évolution rapide du rendement des cellules à pérovskite, accompagnée d'une croissance exponentielle du nombre de publications scientifiques, ce qui témoigne de l'intérêt croissant et soutenu de la communauté scientifique internationale pour cette technologie émergente [8].

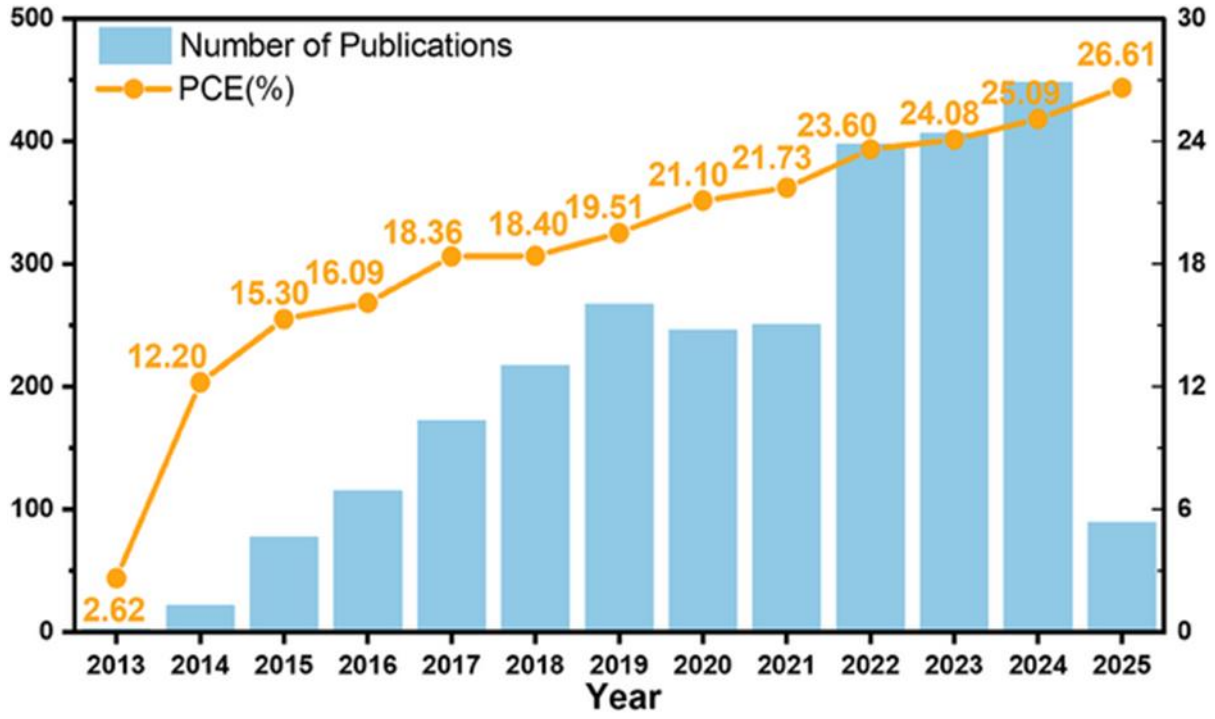


Figure.4. Évolution du rendement des cellules solaires à pérovskite (PCE) et du nombre de publications scientifiques au fil du temps [8].

Sur le plan structurel, les cellules photovoltaïques à pérovskite reposent sur une architecture multicouche sophistiquée, conçue pour optimiser la génération, la séparation et le transport des charges électriques. Comme illustré dans la Figure 5, ces dispositifs comprennent plusieurs couches fonctionnelles essentielles, notamment une électrode transparente (ITO), une couche de transport d'électrons (ETL), une couche active absorbante à base de pérovskite, une couche de transport de trous (HTL) ainsi qu'une électrode métallique. L'ingénierie de ces différentes interfaces joue un rôle crucial dans l'amélioration des performances globales du dispositif, tout en permettant le développement de structures flexibles, légères et potentiellement intégrables dans des applications innovantes [9].

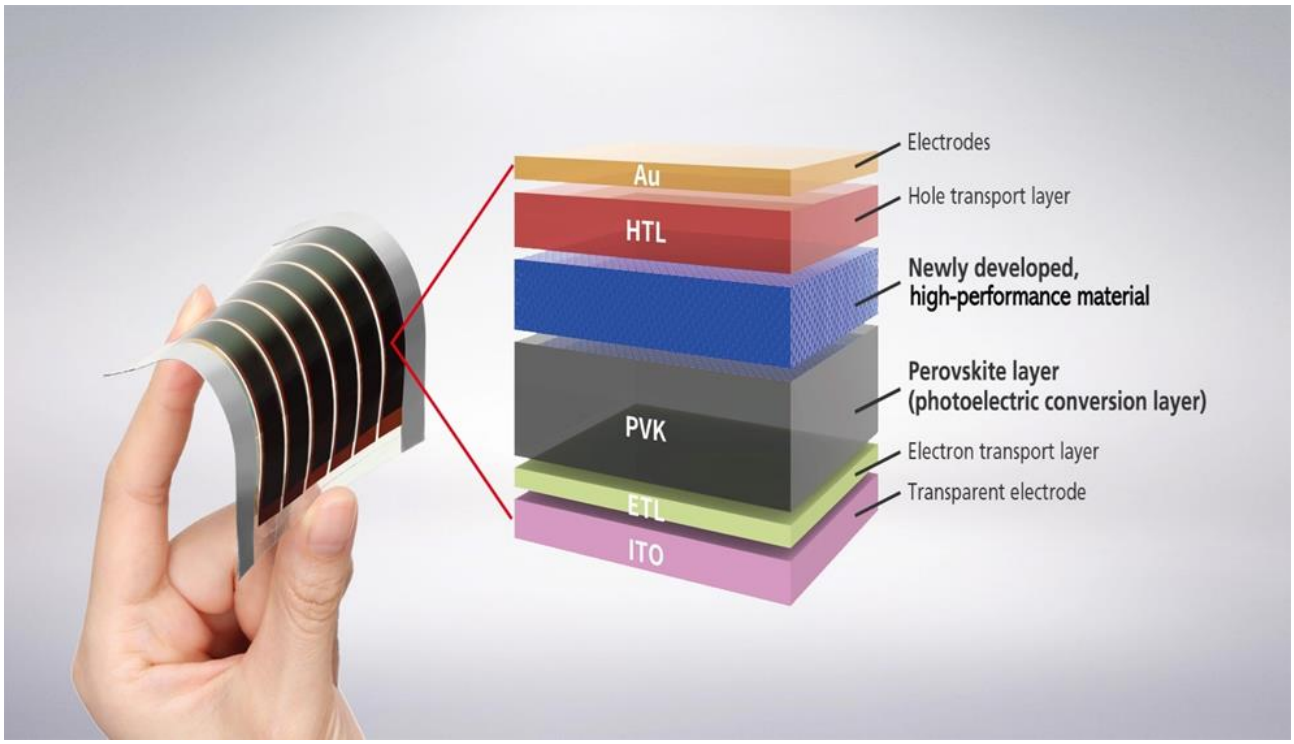


Figure.5. Architecture multicouche d'un dispositif de cellule solaire pérovskite flexible [9].

Au-delà des avancées technologiques, les perspectives économiques associées aux cellules solaires à pérovskite sont particulièrement prometteuses. Comme le montre la Figure 6, le marché mondial de ces technologies devrait connaître une croissance rapide et soutenue au cours des prochaines années [10]. Cette expansion est principalement attribuée à leurs faibles coûts de fabrication, rendus possibles par des procédés à basse température, ainsi qu'à leurs performances élevées et à leur compatibilité avec des techniques de production à grande échelle. Ces caractéristiques positionnent les cellules à pérovskite comme des candidates idéales pour les futures générations de dispositifs photovoltaïques [11].



Figure.6. Croissance prévue du marché mondial des cellules solaires à pérovskite [11].

Néanmoins, malgré ces avancées remarquables, des verrous scientifiques et technologiques subsistent, en particulier en ce qui concerne la toxicité et la stabilité des pérovskites conventionnelles à base de plomb. La présence de plomb dans ces matériaux soulève des préoccupations environnementales et sanitaires majeures, susceptibles de freiner leur industrialisation à grande échelle. Dans ce contexte, les pérovskites doubles sans plomb ont émergé comme une alternative innovante et écologiquement viable. Généralement décrites par la formule $A_2BB'X_6$, ces structures permettent de substituer le plomb par des combinaisons de cations métalliques tels que Ag^+, Bi^{3+}, Sb^{3+} ou In^{3+}, conduisant à des matériaux plus stables chimiquement et thermiquement. CES composés présentent une meilleure résistance aux facteurs de dégradation environnementale, notamment l'humidité, la température et l'oxydation, améliorant ainsi leur durabilité opérationnelle. Toutefois, malgré ces avantages, les pérovskites doubles sans plomb présentent encore des limitations en termes de performances photovoltaïques, notamment en raison de leur bande interdite souvent indirecte et de mécanismes de recombinaison non radiative plus prononcés. Ainsi, les recherches actuelles s'orientent vers l'ingénierie avancée des matériaux et des interfaces, incluant le dopage, la gestion des défauts cristallins et l'optimisation des architectures de dispositifs, afin d'améliorer leur efficacité et de les rendre compétitives face aux technologies existantes [11].

Ce mémoire est structuré de la façon suivante :

Chapitre I : Dans ce chapitre, nous proposons une analyse des jalons fondamentaux nécessaires à la compréhension de la conversion photovoltaïque, en mettant en évidence les principes physiques qui régissent cette technologie. Notre étude commence par un rappel de l'histoire du photovoltaïque, suivi d'un examen approfondi du rayonnement solaire, moteur de la conversion, en analysant son spectre ainsi que l'influence de la masse d'air (**Air Mass**) sur l'intensité reçue au sol. Une attention particulière est accordée au principe de fonctionnement de la cellule solaire qui, grâce à l'effet photovoltaïque, génère une force électromotrice sous exposition lumineuse. À travers l'examen de son circuit équivalent et de ses caractéristiques électriques, nous définissons les paramètres essentiels dictant ses performances, tels que la densité du courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert, le facteur de forme (**FF**) et le rendement global. Enfin, les résistances parasites (série et shunt) sont analysées en tant que principaux facteurs limitants de l'efficacité réelle des dispositifs. Ainsi, ce chapitre établit une base théorique solide pour les travaux ultérieurs, en posant les concepts indispensables à l'étude des matériaux et des architectures de nouvelles générations.

Chapitre II : Dans ce chapitre, nous proposons une analyse approfondie des matériaux pérovskites, en mettant en évidence leur évolution historique ainsi que leur émergence en tant que composants clés des cellules solaires de nouvelle génération. Une attention particulière est accordée à la structure cristallographique de type ABX_3, ainsi qu'aux structures dérivées des pérovskites doubles, dont les caractéristiques jouent un rôle déterminant dans leurs propriétés physiques et électroniques. Ces matériaux se distinguent notamment par une forte absorption lumineuse, une bande interdite ajustable, une émission photoluminescente modulable, ainsi qu'une mobilité élevée et une longue durée de vie des porteurs de charge, contribuant à l'amélioration des performances photovoltaïques. Par ailleurs, les différentes architectures des cellules solaires à pérovskite, telles que les structures mésoporeuses, planaires et inversées, sont examinées afin de mieux comprendre l'impact de la configuration du dispositif sur l'efficacité, la stabilité et les procédés de fabrication. Enfin, les principes fondamentaux de fonctionnement sont analysés, en détaillant les mécanismes d'absorption des photons, de génération, de séparation et de transport des charges, indispensables à la compréhension du fonctionnement global des dispositifs. Ainsi, ce chapitre établit une base théorique solide pour les travaux ultérieurs, notamment en matière de

modélisation, de simulation et d'optimisation des cellules solaires à base de pérovskites, en particulier les pérovskites doubles sans plomb, tout en ouvrant des perspectives prometteuses pour le développement de dispositifs photovoltaïques performants, stables et respectueux de l'environnement.

Chapitre III : Ce chapitre est consacré à l'étude et à l'optimisation des performances d'une cellule solaire basée sur cette pérovskite sans plomb, en utilisant le simulateur numérique SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator). Cet outil permet d'analyser le comportement électrique du dispositif en tenant compte des mécanismes fondamentaux tels que le transport des porteurs, la recombinaison et les effets des défauts. L'objectif principal de ce chapitre est d'évaluer l'influence des paramètres clés de la structure du dispositif, notamment le choix des couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL), l'épaisseur des différentes couches, la densité de défauts, la température de fonctionnement, ainsi que les résistances série et parallèle. Une attention particulière est portée à l'identification d'une configuration optimale permettant d'améliorer significativement les performances photovoltaïques. Enfin, les résultats obtenus seront présentés et analysés de manière détaillée afin de mettre en évidence les facteurs déterminants influençant le rendement de conversion de puissance (PCE) et d'orienter la conception de cellules solaires à pérovskite plus efficaces, stables et respectueuses de l'environnement.

Bibliographie

[1] Allegre, J. (2024). Matériaux pérovskites et élaboration de cellules solaires tandem toutes pérovskites (Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes (2020).

[2] Gavotto, L. (2023). Fabrication, caractérisation et modelisation de cellules multijonctions à base de matériaux III-Sb pour application photovoltaïque sous concentration solaire (Doctoral dissertation, Université de Montpellier).

[3] https://smartclass4kids.com/types-of-renewable-energy/.

[4] Haddadji Doudja, B. K. (2024). Etude et simulation d'une cellule solaire à base des matériaux pérovskite (Doctoral dissertation, faculté des sciences et de la technologie* univ bba).

[5] Dally, P. (2019). Cellules Solaires à base de Matériaux Pérovskites: De la caractérisation des matériaux à l'amélioration des rendements et de la stabilité (Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes).

[6] Spalla, M. (2019). Stabilité intrinsèque des cellules solaires pérovskites: impact de la formulation de la couche active et des couches de transport de charges (Doctoral dissertation, Université Grenoble Alpes).

[7] Abdessamed, C. (2025). Investigation et Simulation des Cellules Solaires à Matériaux Pérovskite (Doctoral dissertation, Faculté des sciences et de la technologie).

[8] Ma, Y., Lu, Z., Su, X., Zou, G., & Zhao, Q. (2023). Recent progress toward commercialization of flexible perovskite solar cells: from materials and structures to mechanical stabilities. Advanced Energy and Sustainability Research, 4(1), 2200133.

[9] https://global.canon/en/technology/perovskite.html.

[10] Yousfi, A., Saidani, O., Messai, Z., Zouache, R., Meddah, M., & Belgoumri, Y. (2023). Design and simulation of a triple absorber layer perovskite solar cell for high conversion efficiency. East European Journal of Physics, (4), 137-146.

[11] https://www.visionresearchreports.com/perovskite-solar-cell-market/41284

Chapitre I : Notions générales sur les cellules solaires

I.1. Introduction

La technologie photovoltaïque représente aujourd'hui une solution énergétique d'avenir, capable de transformer directement une fraction du flux solaire en électricité. Bien qu'elle soit l'une des plus récentes parmi les énergies renouvelables, elle s'impose par son abondance, son caractère non polluant et sa grande fiabilité [1].

Ce premier chapitre a pour objectif de poser les jalons fondamentaux nécessaires à la compréhension de cette conversion. Notre étude commence par un rappel de l'histoire du photovoltaïque suivi d'une analyse du rayonnement solaire, moteur de la conversion, en examinant son spectre et l'influence de l'Air Masse sur l'intensité reçue au sol. Au cœur de ce processus, nous détaillerons le principe de fonctionnement de la cellule solaire qui, grâce à l'effet photovoltaïque, génère une force électromotrice sous l'exposition lumineuse. À travers l'examen de son circuit équivalent et de ses caractéristiques électriques, nous définirons les paramètres essentiels dictant ses performances, tels que la densité du courant de court-circuit, la tension en circuit ouvert le facteur de forme (FF) et le rendement global. Enfin, nous porterons une attention particulière aux résistances parasites (série et shunt), qui constituent les principaux facteurs limitants de l'efficacité réelle des dispositifs photovoltaïques.

I.2. Histoire du photovoltaïque

L’effet photovoltaïque réalise la transformation directe d’une énergie électromagnétique (rayonn ement solaire) en énergie électrique continue directement utilisable. Il a été découvert par Antoin e Becquerel en 1839 qui a mis en évidence l’apparition d’une tension aux bornes de deux électro des immergées dans une solution électrolytique, lorsque celleci était exposée à la lumière naturell e. En 1873 Willoughby Smith découvre la photoconductivité du sélénium et par la suite, Werner Von Siemens expose en 1875 devant l’Académie des Sciences de Berlin un article sur l’effet ph otovoltaïque dans les semiconducteurs. Sur le même thème, en 1877 W. G. Adams et R. E. Day développent une jonction solide à base de sélénium dont le rendement de conversion était de l’or dre de 1%. Cependant, la première véritable vision de l’énergie photovoltaïque revient à Charles Fritts. Ce dernier en reprenant les travaux d’Adams et Day, il a établi un développement industri el des cellules au sélénium. Fritts pensait pouvoir faire concurrence aux technologies de producti on électrique naissantes de l’époque. En 1886, il a écrit que les cellules photovoltaïques utilisent

une source d'énergie qui est sans limites, sans coûts et qui continuera à inonder la terre après que nous ayons fini de consommer nos réserves de combustibles fossiles. Le monde scientifique et te chnique de l'époque, n'ayant pas les connaissances physiques nécessaires pour comprendre l'effe t photovoltaïque, a conclu que les travaux de Fritts violaient le principe deconservation d'énergie et les a donc considérés frauduleux. Il a fallu attendre l'explication physique de l'effet photoélec trique par Einstein en 1904 et la mécanique quantique pour que l'effet photovoltaïque devienne u n phénomène reconnu par la communauté scientifique. En 1958, une cellule avec un rendement de 9% est mise au point et, par la suite les premiers satellites alimentés par des cellules solaire s fûts envoyés dans l'espace. Le rendement du silicim monocristallin atteint 10% à la fin des ann ées 60, puis 14% en 1973. Cette même année la première maison alimentée par des cellules phot ovoltaïques est construite à l'Université de Delaware. Dix ans plus tard, la première voiture alim entée par énergie photovoltaïque parcourt une distance de 4000 kilomètres en Australie. Depuis les années 1990, et pour les raisonévoquées auparavant, l'énergie photovoltaïque a suscité un int érêt grandissant et de nombreuses avancées technologiques ont été réalisées jusqu'à présent à tra vers plusieurs filières technologiques. La production d'électricité d'origine photovoltaïque s'est même accrue de manière exponentielle depuis 2001 et les projections sont assez optimistes pour l es années à venir comme le montre la figure 1.1 [2].

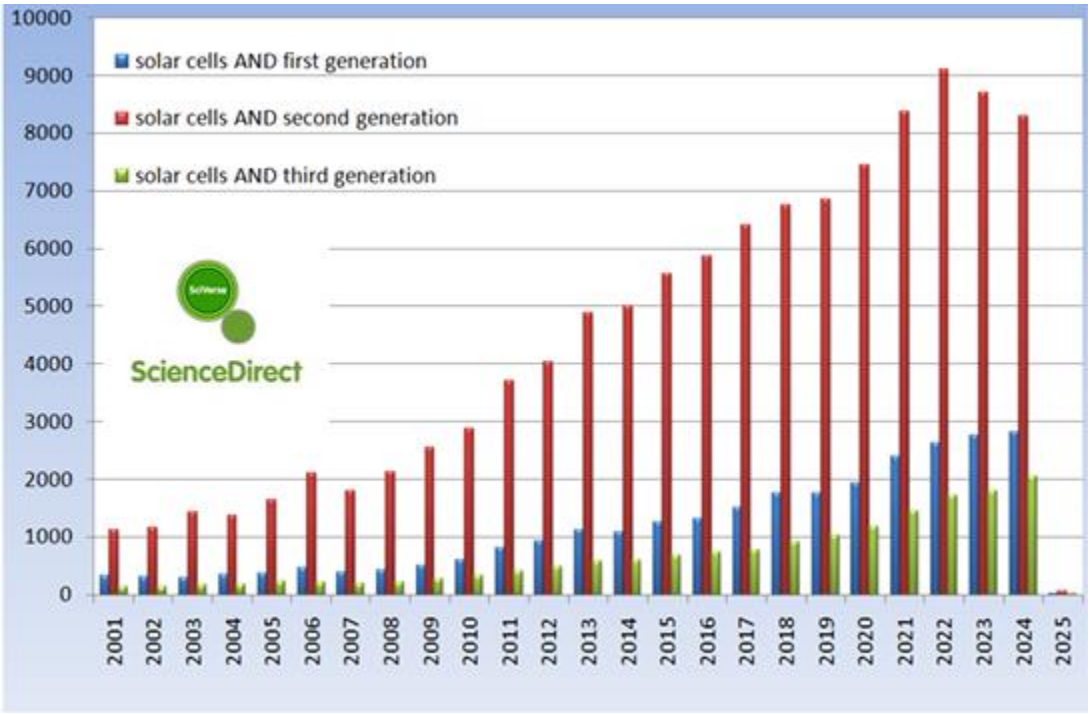


Figure I.1. Nombre de publications par année (2001-2024) sur les différentes générations de cellules solaires, les statistiques sont extraites de la base de données SienceDirect [3].

I.3. Rayonnement solaire

I.3.1. Spectre solaire

Le soleil est le centre de gravité du système solaire. La fusion thermonucléaire entre les atomes d'hydrogène et les atomes d'hélium se déroule sans cesse au cœur du soleil à des Millions de degrés de température. La perte de la matière pendant la fusion libère une énorme quantité d'énergie sous forme de rayonnement électromagnétique. L'énergie atteint la croûte de l'atmosphère terrestre avec une irradiance moyenne de 1367 W/m^2 appelée constante solaire, qui varie en fonction de la distance Terre-soleil. Le rayonnement solaire de la surface du Soleil est transmis à la terre, à la vitesse de la lumière. La figure I.2 montre le spectre solaire, c'est la répartition du rayonnement solaire en fonction de la longueur d'onde. La production de rayonnement total du soleil est approximativement équivalente à celle d'un corps noir à 5776 K. Ce rayonnement solaire correspond parfaitement à l'émission du corps noir dans la région visible et infrarouge à cette température, mais s'écarte de la région UV [4].

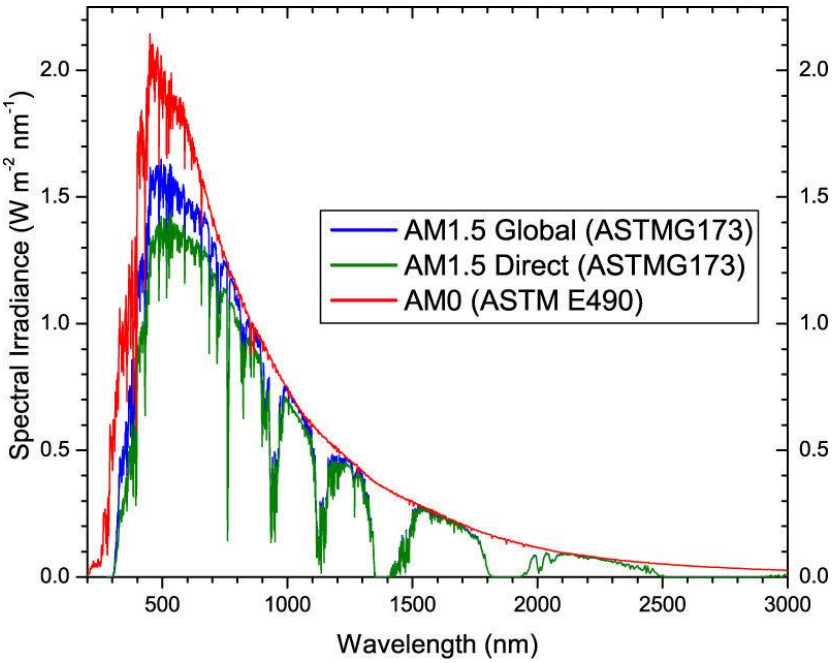


Figure I.2 : Spectres solaires AM0 (rouge) et AM1.5G (noir) [5].

I.3.2. Masse d'Air

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la Terre est appelée la constante solaire. Cette constante est approximativement d'une valeur de 1.4 kW/m² au-dessus de la couche atmosphérique et est réduite sur Terre à 1kW/m² par réflexion et absorption des particules présentes dans la couche atmosphérique. Cette perte est appelée la« masse d'air » (AM). La désignation AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de notre atmosphère à incidence normale. Le titre AM1 correspond lui à une même lumière arrivant à la surface terrestre. L'appellation AM1.5 désigne la masse d'air rencontrée pour la lumière arrivant à 48.2° sur la surface de la Terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande (figure I-6). De manière générale, l'indice m associée à la masse d'air (AM m) est calculé comme suit AM = 1/ sin (θ). A étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre [6].

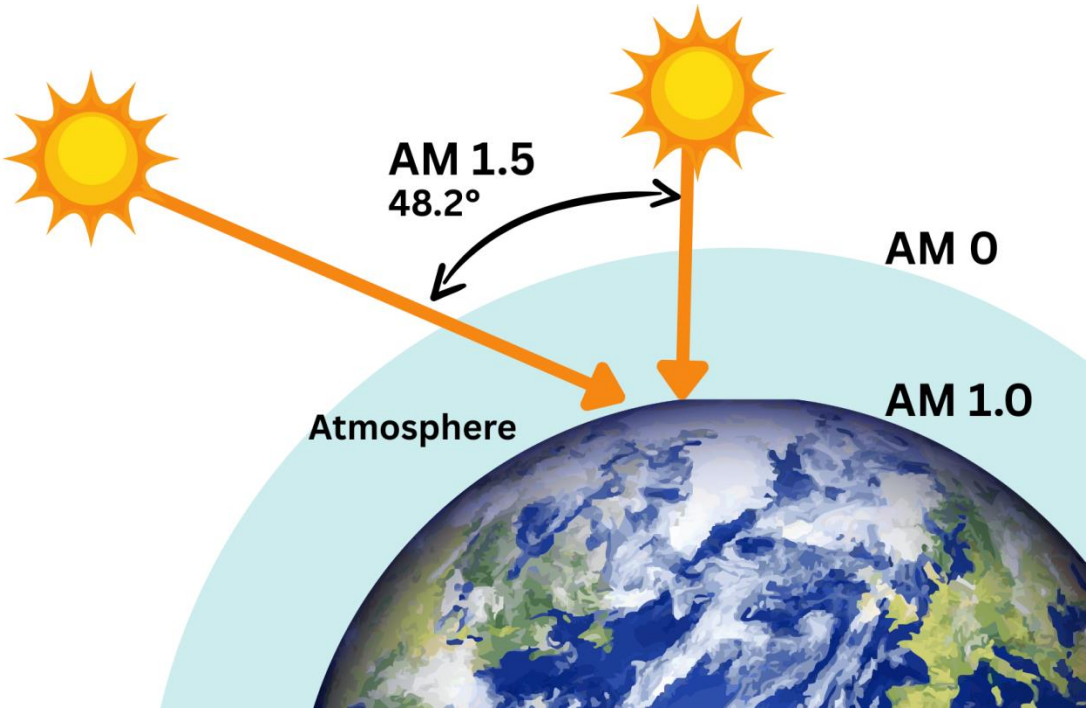


Figure I.3 : Masse d'Air [7].

I.4.cellule solaire

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique une fois exposé à la lumière (Photons), produit de l'électricité grâce à l'effet photovoltaïque ; ce dernier étant à l'origine du phénomène de conversion. La tension délivrée par la cellule photovoltaïque est une tension continue et varie en fonction de la lumière incidente. Les cellules photovoltaïques les plus répandues sont constituées de semi-conducteurs, principalement à base de silicium (Si) et plus rarement d'autres semi-conducteurs : séléniure de cuivre et d'indium (CuIn(Se2) ou CuInGa (Se2), tellurure de cadmium (CdTe), etc. Elles se présentent généralement sous la forme de fines plaques d'une dizaine de centimètres de côté. Les cellules sont souvent réunies dans des modules solaires photovoltaïques ou panneaux solaires, en fonction de la puissance recherchée. Le fonctionnent de la cellule solaire peut s'expliquer aussi par trois phénomènes importants quasi-simultanés : l'absorption des photons, la production et la collecte des charges électriques photo générées [8].

I.4.1. Le principe de fonctionnement

Les cellules solaires ont pour fonction de convertir directement l'énergie lumineuse (rayonnement électromagnétique provenant du soleil) en électricité en utilisant le phénomène photovoltaïque. Les matériaux dopés de type N et de type P sont caractérisés par un excès de porteurs libres : des électrons pour le matériau de type N et des trous pour le matériau de type P. Une cellule photovoltaïque repose sur une jonction PN, qui correspond à la mise en contact d'un matériau de type P avec un matériau de type N. Si ces matériaux sont composés du même matériau, on parle d'une homo jonction, tandis que s'ils sont constitués de matériaux différents, on parle d'une hétérojonction [9].

Le principe de fonctionnement d'une cellule solaire est illustré dans la Figure I.4 et se déroule en trois étapes :

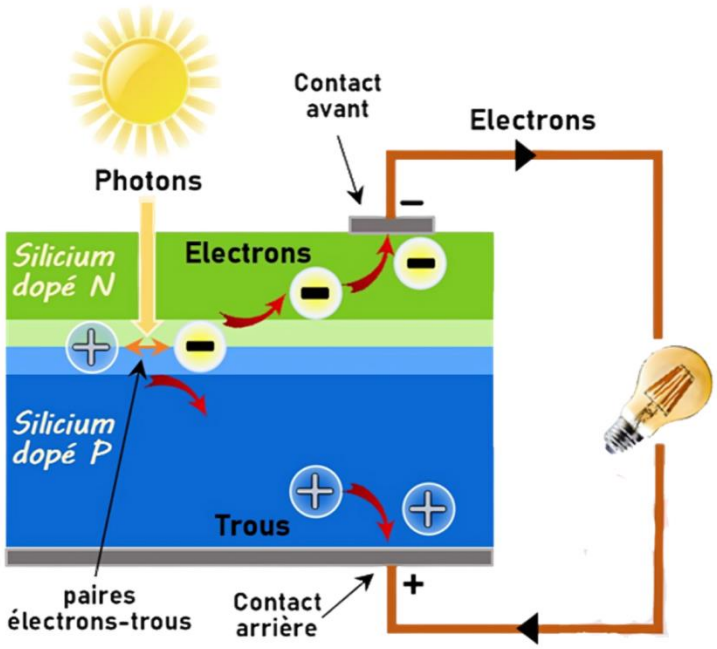


Figure I.4. Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [10].

- ✓ Lorsqu'un matériau semi-conducteur est exposé à la lumière, les photons sont absorbés en raison de la différence d'énergie entre les bandes de valence et de conduction. C'est d'ailleurs l'une des caractéristiques fondamentales des semi-conducteurs. L'absorption de

la lumière provoque une transition des électrons du matériau absorbant de l'état fondamental à un état excité.

- ✓ Dans la région n ou p d'une cellule solaire, les porteurs minoritaires (électrons dans la couche p et trous dans la couche n) qui parviennent à la zone de jonction sont redirigés par un champ électrique vers la couche appropriée, soit la zone p pour les trous, soit la zone n pour les électrons. L'accumulation de ces porteurs permet de générer un courant de diffusion photo-induit. Lorsqu'il s'agit de deux semi-conducteurs différents, cela permet de recueillir les charges générées dans le matériau [9].
- ✓ Lors de la conversion de l'énergie des photons en énergie électrique, au niveau de la zone de jonction, les paires électron/trou résultant de l'interaction des photons seront séparées par le champ électrique. Les électrons se déplaceront vers la région N tandis que les trous se déplaceront vers la région P (voir figure I.5). Cette séparation des charges générées permet de générer un courant photo-induit, également appelé courant de génération [11].

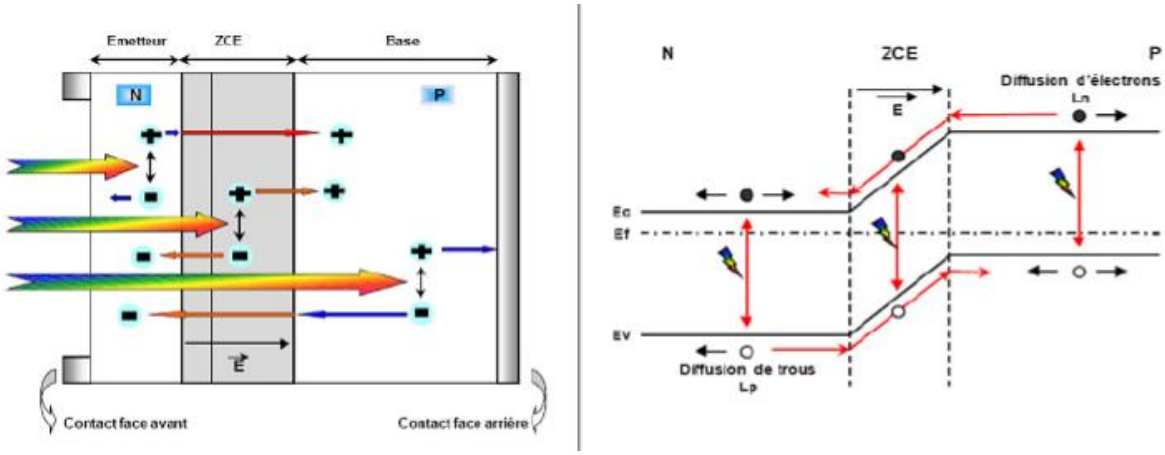


Figure I.5 : La structure et le diagramme de bande d'une cellule photovoltaïque [12].

I.4.2. Caractéristique électrique d'une cellule solaire

La Figure I.8 montre la caractéristique pour une cellule photovoltaïque. Si une résistance variable R est connectée aux bornes de la cellule le point de fonctionnement est déterminé par l'intersection de la caractéristique I=f(V) de la cellule avec la courbe de la charge. Pour une charge résistive, la courbe de charge est une droite de pente 1/R. Par conséquent, si la résistance R est petite, le point de fonctionnement est situé dans la région MB de la courbe. Dans cette région le courant I varie peu en fonction de la tension, il est presque égal au courant de court-circuit. La cellule se comporte

alors comme un générateur de courant. D'autre part, si la résistance R est grande, la cellule fonctionne dans la région CN. Dans cette zone, la tension de la cellule varie peu en fonction du courant I : la cellule se comporte comme une source de tension qui est presque égale à la tension de fonctionnement à vide. Dans la région *BC* sur la courbe, la cellule PV ne peut être caractérisée ni par une source de courant, ni par une source de tension. C'est dans cette zone que se trouve le point pour lequel la puissance fournie par la cellule est maximale dans des conditions fixes d'éclairement et de température [13].

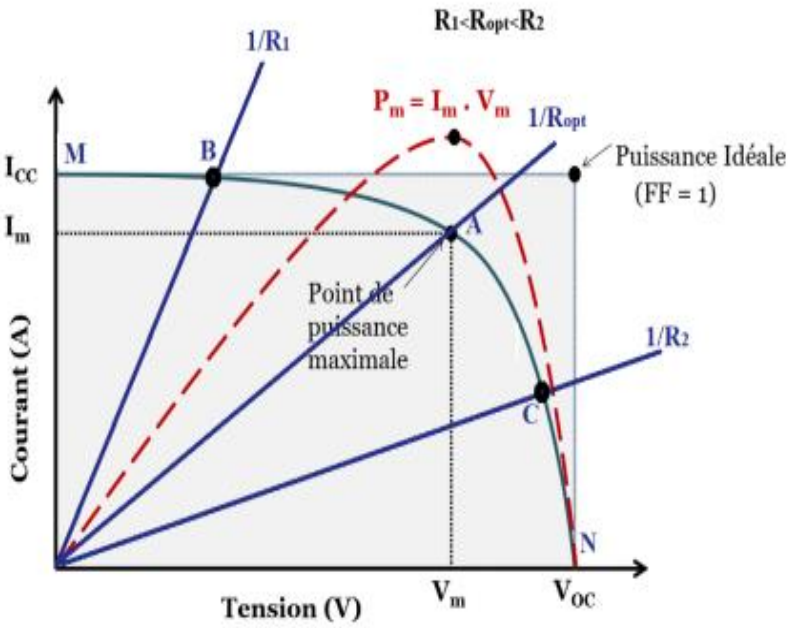


Figure I.6 : Caractéristiques courant-tension I(V) (Ligne continue) et puissance (Ligne pointillée) d'une cellule solaire [13].

I.4.3. Circuit équivalent d'une cellule solaire :

La modélisation électrique d'une cellule photovoltaïque offre trois avantages importants : une facilité d'utilisation grâce au circuit électrique équivalent, une vulgarisation des propriétés du système et donc la compréhension de phénomènes complexes en est facilitée.

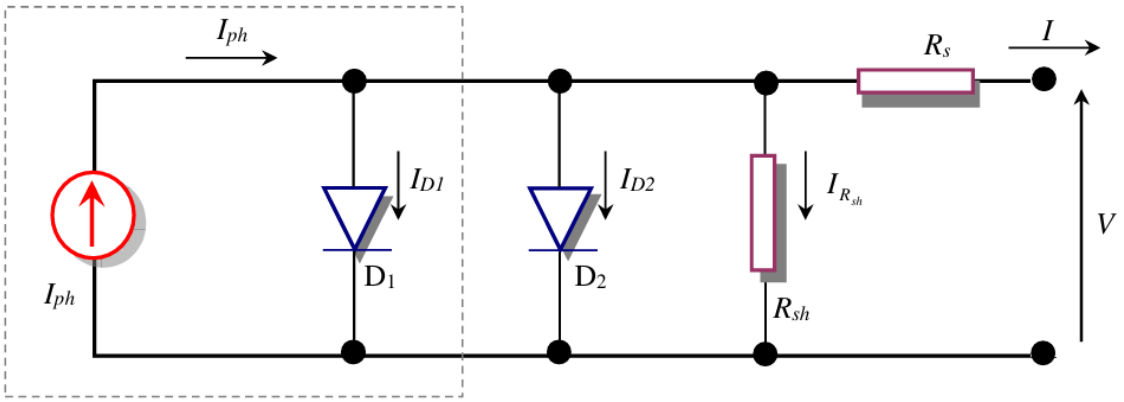


Figure I.7. Schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque : modèle à deux diodes [14].

Dans le cas où la cellule se comporte en générateur de puissance, il existe plusieurs modèles électriques, aussi appelés circuits équivalents, pour reproduire le comportement de la cellule à l'aide de composants électroniques. Les circuits utilisés le plus fréquemment dans la littérature pour modéliser les cellules cristallines constituées d'une jonction p-n sont les circuits à une et deux diodes (Figure). On déduit du schéma de la Figure, l'équation caractérisant la variation du courant en fonction de la tension à l'aide des lois de Kirchhoff :

$$\boldsymbol{I = I_{ph} - I_{d1} - I_{d2} - I_{Rsh}} \qquad \textbf{(1)}$$

$$\boldsymbol{I = I_{ph} - I_{0_1}\left[exp\left(\frac{q(v+I_{R_s})}{n_1 KT}\right) - 1\right] - I_{0_2}\left[exp\left(\frac{q(V+I_{R_s})}{n_2 kT}\right) - 1\right] - \frac{(V+IR_s)}{R_{sh}}} \qquad \textbf{(2)}$$

I_{0_1} est le courant de saturation de la première diode due à la diffusion et I_{0_2} celui de la deuxième diode due aux recombinaisons, n_1 et n_2, sont respectivement les facteurs d'idéalité de ces deux diodes. Le facteur d'idéalité de la diode de recombinaisons varie beaucoup d'une cellule à une autre, ce qui témoigne d'une fréquence de recombinaison plus ou moins grande suivant le matériau et sa qualité. Le modèle à une diode ne fait pas la distinction entre la diffusion et la recombinaison et inclut les deux dans une même diode. Les résistances R_s et R_{sh} tiennent compte des phénomènes dissipatifs au niveau de la cellule. R_s est due à la contribution des résistances de base, du front de la jonction et des contacts avant et arrière. Rsh rend compte des courants de fuites engendrés par des impuretés métalliques dans la jonction ou encore des imperfections du réseau cristallin. La connaissance des valeurs de ces résistances parasites est importante dans l'étude de la qualité du matériau et la recherche de l'amélioration du rendement d'une cellule. En effet, le facteur de forme est directement lié à ces deux résistances. Plus Rsh est grand, moins il y a de courants de fuite et

meilleur est le facteur de forme. Plus R_s est petit, moins il y a de pertes résistives à l'interface entre le métal et le semi-conducteur ou à la surface du semi-conducteur et meilleur est le facteur de forme [14].

I.5.Paramètre d'une cellule solaire :

I.5.1.Tension à circuit ouvert Voc : La tension de circuit ouvert est la tension mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans le dispositif photovoltaïque (obtenu pour I=0). Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction pn, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts (couche active-électrode). Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule. A partir de l'expression du courant total de la cellule sous illumination, dans le cas d'un courant nul, on obtient son expression :

$$Voc = \frac{KT}{q} log\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \qquad (3)$$

Deux régimes peuvent être observés suivant le degré d'éclairement :

- Régime des faibles flux lumineux : dans ce cas, Iph <<Is ce qui permet d'écrire :

$$log\left(\frac{I_{ph}}{I_s} + 1\right) \approx \frac{I_{ph}}{I_s} \text{ d'où :Voc}=\frac{KT}{q}\frac{I_{ph}}{I_s} \qquad (4)$$

C'est la zone de comportement linéaire de la cellule. La formule précédente peut s'écrire aussi

Voc=$R_0 I_{ph}$ (5) en poussant $R_0 = \frac{KT}{q}\frac{I_{ph}}{I_s}$ (6)

R_0: La résistance interne de la diode en polarisation externe nulle (circuit ouvert) et sous faible flux lumineux.

- Régime des flux lumineux suffisamment intenses pour que Iph >>Is, soit $\frac{Iph}{I_s} \gg 1$ c ;est le domaine du comportement logarithmique d'où :[15]

$$V_{oc} = \frac{KT}{q} log\left(\frac{Iph}{Is}\right) \qquad (7)$$

I.5.2. Puissance maximale, Pmax est :la puissance débitée par une cellule solaire est maximum quand le produit V.J est maximum. Si Vmax et Jmax sont la tension et le courant pour lesquels on

a ce maximum, la puissance maximale est la surface du plus grand rectangle de coté Vmax et Jmax qu'on peut inscrire sous la courbe J(V) (Figure passé) [16].

$$p_{max} = (JV)_{max} = V_{max}.J_{max} \qquad (8)$$

I.5.3. Facteur de forme FF

Le facteur de forme détermine la qualité électrique de la cellule, il représente le rapport entre la puissance maximale fournie par la cellule sur le produit de Vco×Icc. Ce rapport doit avoir une valeur la plus proche possible de 1 (100%).

$$\mathrm{FF} = \frac{\mathrm{V}_m \times \mathrm{I}_m}{\mathrm{V}_{oc} \times \mathrm{I}_{cc}} \qquad (9)$$

Dans le cas d'une cellule idéale, le facteur de forme FF ne peut pas être supérieur à 0,89 du fait de la relation exponentielle liant courant et tension [16].

I.5.4. Rendement de conversion (η) : Le rendement des cellules PV désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente $Pinc$:

$$\eta = \frac{Vm.Im}{Pinc} = \frac{ff.VcoIcc}{P_{inc}} \qquad (10)$$

Ces paramètres électriques varient avec l'intensité lumineuse ; la convention est d'utiliser pour les tests sous éclairements, les conditions d'ensoleillement standard AM1.5 et une température de 25°C. On exprimera alors la puissance maximale en Watt - crête (Wc) pour spécifier que les mesures ont été réalisées sous ces conditions standards. Réponse spectrale et cartographie en photo courant : La réponse spectrale Rs permet d'évaluer le rendement quantique d'une cellule solaire en fonction de la longueur d'onde de la lumière incidente. Cette mesure consiste à illuminer la cellule solaire avec un spot monochromatique que l'on fait varier dans la plage d'absorption de la couche active. La mesure du courant débité par la cellule en fonction de la longueur d'onde permet alors de connaître la réponse spectrale de la cellule à l'aide de la relation suivante [17] :

$$R_s(\lambda) = \frac{J(\lambda)}{P(\lambda)} \qquad (11)$$

I.6. Résistances parasites parasites : Le rendement d'une cellule solaire est fortement influencé par la présence de résistances parasites, principalement la résistance série (R_s) et la résistance shunt (R_{sh}). Ces résistances entraînent des pertes électriques internes, limitent les performances globales du dispositif photovoltaïque et affectent directement la caractéristique courant–tension (I–V), le facteur de forme (FF), ainsi que le rendement de conversion énergétique.

I.6.1. **La résistance série (*Rs*)** : La résistance série (R_s) est un paramètre essentiel qui reflète l'état de fonctionnement d'un module photovoltaïque (PV), car elle influence de manière significative la forme de la courbe I–V au voisinage du point de puissance maximale (MPP). Cette résistance représente les pertes électriques survenant à l'interface entre le semi-conducteur et les contacts métalliques de la cellule solaire, ainsi que la résistance intrinsèque de ces contacts eux-mêmes. Pour une cellule solaire typique en silicium, l'effet de l'augmentation de *Rs* sur la caractéristique I–V est illustré à la Figure 9 [18].

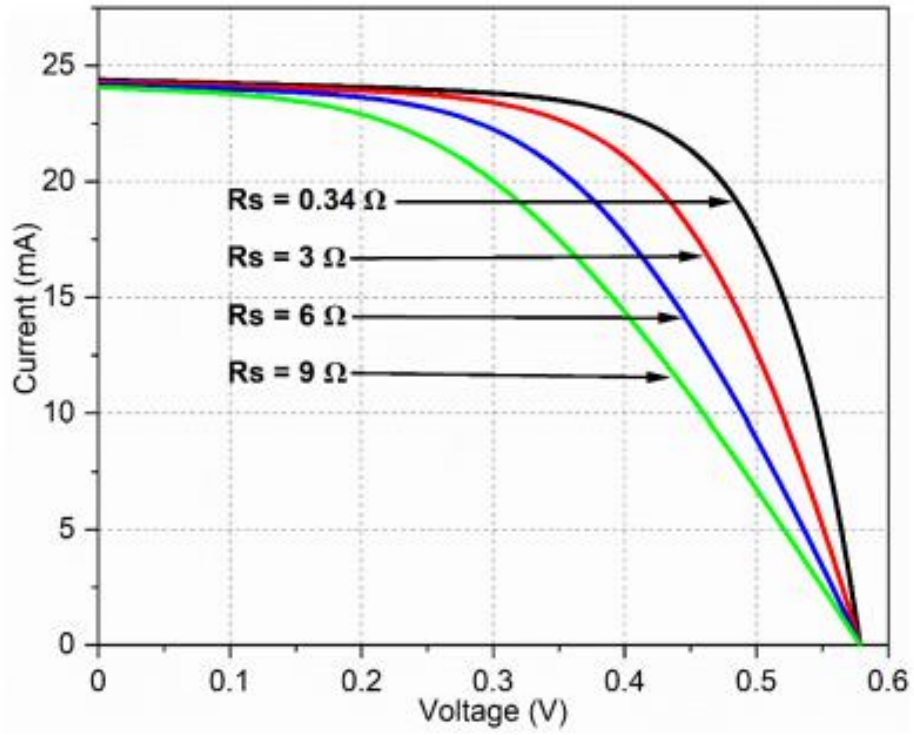


Figure I.8. L'effet de la résistance série sur la caractéristique I-V simulation [18].

I.6.2. Résistance shunt : La résistance shunt (R_{sh}) est un paramètre fondamental qui caractérise les courants de fuite circulant à travers des chemins parasites au sein de la cellule solaire. Ces chemins résultent généralement de défauts structurels, d'impuretés, de discontinuités cristallines ou de dégradations localisées, en particulier au niveau de la jonction p–n et des bords de la cellule. Physiquement, la résistance shunt représente une voie alternative permettant au courant photogénéré de contourner la jonction, ce qui réduit le courant utile délivré au circuit externe. Par conséquent, une faible valeur de *Rsh* entraîne une augmentation des pertes par fuite, une diminution de la tension de sortie ainsi qu'une dégradation globale des performances de la cellule, notamment du facteur de forme et du rendement de conversion. La Figure 2.10 illustre l'effet de la diminution de *Rsh* sur la caractéristique courant–tension (I–V) d'une cellule solaire en silicium, mettant en évidence la dégradation progressive des performances électriques associée à l'augmentation des courants de fuite [18].

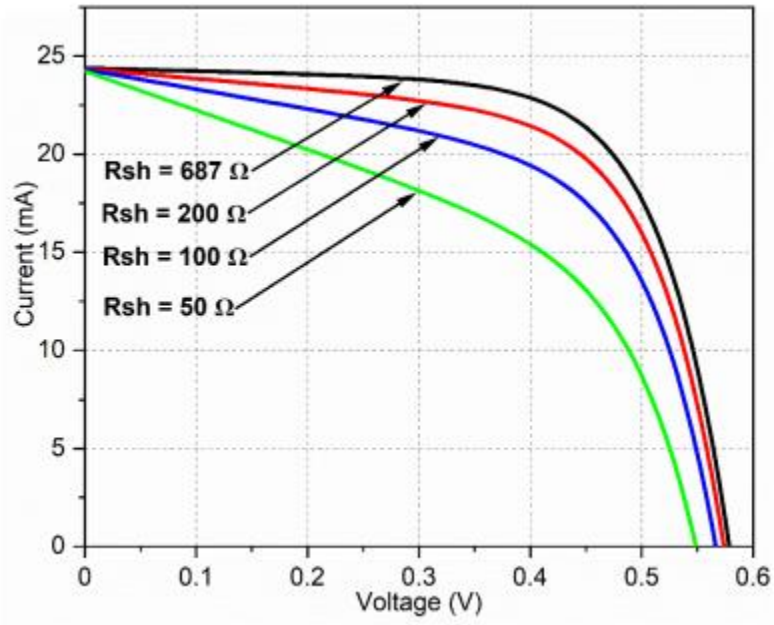


Figure I.9. L'effet de la résistance shunt (R_{sh}) sur la caractéristique I-V simulation [18].

I.7 Conclusion :

Ce chapitre fournit une vue d'ensemble détaillée des technologies photovoltaïques, décrit leur développement historique et explore les principes physiques de base qui régissent leur fonctionnement. Nous avons identifié et étudié les facteurs cruciaux influençant les performances en examinant le rayonnement solaire et le comportement électrique des cellules photovoltaïques. On a particulièrement mis l'accent sur le rôle des résistances parasites, qui peuvent grandement affecter l'efficacité des appareils. Ceci met en évidence l'importance primordiale d'une conception et d'une optimisation minutieuses pour l'élaboration de cellules solaires de haute performance.

Bibliographie chapitre I :

[1] Cid-Pastor, M. A. (2006). Thèse de doctorat. Institut national des sciences appliquées de Toulouse, France.

[2] CHAIB, H. (2025). Contribution à la gestion des flux énergétiques dans un système hybride de sources d'énergie renouvelable : Application de l'intelligence Artificielle pour l'optimisation (Doctoral dissertation, Université IBN-KHALDOUN).

[3] ALEM, S. B. (2004). Thèse de doctorat. Université D'Angers France, 2004.

[4] BOUDAOUD, C. Cellules solaires Tandem à base d'InGaN, pour haut rendement : Modélisation et Simulation des performances (Doctoral dissertation, Université de Tlemcen-Abou Bekr Belkaid).

[5] ResearchGate. Spectre solaire AM0, AM1.5G et AM1.5D. Disponible sur : https://www.researchgate.net/figure/Spectre-solaire-AM0-AM15G-et-AM15D-101_fig5_346394208.

[6] LAZNEK, S. (2019). Simulation numérique des caractéristiques électriques d'une cellule solaire pin à puits quantiques à base de mixture d'Aluminium et d'Arséniure de Galium (Doctoral dissertation, Université Mohamed Khider de Biskra).

[7] Harizanov, M. (2012, May 6). Calculating the available solar energy and logging it to Emoncms. Harizanov.com. https://harizanov.com/2012/05/calculating-the-available-solar-energy-and-logging-it-to-emoncms/.

[8] I. Bouchama, "Contribution à l'amélioration des performances des cellules solaires CuIn1-XGaxSe2,"Thèse de doctorat, Université de Sétif ,2011.

[9] Oleksiy, Nichiporuk. "Simulation, fabrication et analyse de cellules photovoltaïques à contacts arrières interdigités." Institut national des sciences appliquées de Lyon (2005)

[10] Au cœur de la cellule solaire pour comprendre l'effet photovoltaïque : dopage du silicium cristallin, production d'électricité

[11] D. Diouf, "Cellules photovoltaïques silicium à hétérojonctions et à structures interdigitée en face arrière," thèse de doctorat, Paris 11, 2010.

[12] Quoizola, "Epitaxie en phase vapeur de silicium sur silicium méso poreux pour report sur substrats économiques et application photovoltaïque bas coût", Thèse de doctorat, l'institut national des sciences appliquées de Lyon, 2003.

[13] Mehdi, M. (2010). Injection de l'Électricité Produite Par les Énergies Renouvelables Dans le Réseau Électrique. Mémoire de Master, Université Abou Bekr Belkaïd, Tlemcen

[14] Mambrini, T. (2014). Caractérisation de panneaux solaires photovoltaïques en conditions réelles d'implantation et en fonction des différentes technologies (Doctoral dissertation, Université Paris Sud-Paris XI).

[15] Chambon, S. (2006). Etude du vieillissement de cellules solaires photovoltaïques

Plastiques (Doctoral dissertation, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II).

[16] Saidani, O., Yousfi, A., & Sahoo, G. S. Numerical Investigation of CsSnCI3 Perovskite Solar Cells Utilizing WS2 and CuSbS2 Transport Layers for Enhanced Efficiency beyond 24%. (2025), physica status solidi (a), 2400877.

[17] Kanoun, A. A. (2019). Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques.

[18] Atia, A. M. M. (2023). Characterisation and modelling of photovoltaic cells and modules under partial shading (Doctoral dissertation, Cardiff University).

Chapitre II : Les cellules solaires à base de matériaux pérovskites

II .1. Introduction

Les pérovskites hybrides organique–inorganique, ainsi que les pérovskites doubles sans plomb, suscitent un intérêt croissant dans le domaine photovoltaïque en raison de leur capacité remarquable à absorber la lumière et à convertir efficacement l'énergie solaire. En particulier, les pérovskites doubles sans plomb apparaissent comme une alternative prometteuse aux pérovskites conventionnelles à base de plomb, en offrant une meilleure stabilité chimique et une toxicité réduite, tout en conservant des propriétés optoélectroniques attractives. Depuis leur introduction dans les dispositifs photovoltaïques jusqu'aux avancées récentes des cellules solaires à pérovskite à état solide, ces matériaux ont démontré un potentiel considérable pour les technologies énergétiques durables.

Dans ce contexte, ce chapitre propose une analyse approfondie des matériaux pérovskites, en mettant en évidence leur évolution historique ainsi que leur émergence en tant que composants clés des cellules solaires de nouvelle génération. Une attention particulière est accordée à la structure cristallographique de type ABX_3, ainsi qu'aux structures dérivées des pérovskites doubles, dont les caractéristiques jouent un rôle déterminant dans leurs propriétés physiques et électroniques. Ces matériaux se distinguent notamment par une forte absorption lumineuse, une bande interdite ajustable, une émission photoluminescente modulable, ainsi qu'une mobilité élevée et une longue durée de vie des porteurs de charge, contribuant à l'amélioration des performances photovoltaïques. Par ailleurs, les différentes architectures des cellules solaires à pérovskite, telles que les structures mésoporeuses, planaires et inversées, sont examinées afin de mieux comprendre l'impact de la configuration du dispositif sur l'efficacité, la stabilité et les procédés de fabrication. Enfin, les principes fondamentaux de fonctionnement sont analysés, en détaillant les mécanismes d'absorption des photons, de génération, de séparation et de transport des charges, indispensables à la compréhension du fonctionnement global des dispositifs. Ainsi, ce chapitre établit une base théorique solide pour les travaux ultérieurs, notamment en matière de modélisation, de simulation et d'optimisation des cellules solaires à base de pérovskites, en particulier les pérovskites doubles sans plomb, tout en ouvrant des perspectives prometteuses pour le développement de dispositifs photovoltaïques performants, stables et respectueux de l'environnement.

II .2. Historique

La pérovskite est un minéral d'oxyde de calcium et de titane, de formule chimique $CaTiO_3$, découvert en 1839 par le minéralogiste prussien Gustav Rose dans les gisements des monts de l'Oural. Il a été nommé en hommage au minéralogiste russe, le comte Lev Aleksevitch von Petrovski. Les cristaux naturels de pérovskite présentent une dureté de 5.5 à 6 sur l'échelle de Mohs et une densité comprise entre 4 000 et 4 300 kg/m^3. Leur coloration varie du brun foncé au noir en raison d'impuretés, tandis que les cristaux purs sont transparents et présentent un indice de réfraction d'environ 2.38. Bien que sa structure cristalline ait été initialement décrite comme cubique, des analyses ultérieures ont montré qu'elle est orthorhombique. Ce minéral a donné son nom à une vaste famille de composés appelés « pérovskites », caractérisés par une formule générale ABX_3, où A et B représentent des cations et X un anion. À ce jour, plusieurs centaines de composés adoptant cette structure cristalline ont été identifiés. Parmi eux, la bridgmanite, (Fe, Mg) SiO_3, est une pérovskite naturelle et constitue la phase solide la plus abondante à l'intérieur de la Terre, représentant environ 38 % du volume terrestre. Elle se trouve à des profondeurs situées entre 660 et 2 900 km et n'est stable qu'à des températures et pressions très élevées, ce qui explique son absence à la surface terrestre [1].



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

II .3. Matériau pérovskite

II .3.1. Structure cristallographique de la pérovskite

La pérovskite désigne généralement un type de structure cristalline de formule chimique ABX_3, où A et B sont respectivement des cations de tailles différentes et X est un anion (Figure 2). Dans une structure cubique idéale, le cation B présente une coordination octaédrique, étant entouré de six anions formant un octaèdre BX_6, tandis que le cation A occupé une cavité cuboctaédrique avec une coordination de douze anions. La maille élémentaire cubique de cette structure est constituée de cations A situés aux sommets du cube, de cations B au centre du cube et d'anions X positionnés au centre des faces. Avant que les pérovskites halogénées ne suscitent un intérêt majeur en tant que semi-conducteurs pour les applications photovoltaïques, les pérovskites étaient principalement connues sous forme d'oxydes métalliques inorganiques, où A correspond généralement à un cation alcalin ou alcalino-terreux et X à l'oxygène. Les pérovskites halogénées se distinguent de ces oxydes par la substitution de l'anion oxygène par un anion halogénure, conduisant à la formule générale ABX_3, où A est un cation monovalent, B un cation métallique divalent et X un anion halogène (Cl^-, Br^- ou I^-). En raison du caractère fortement ionique des liaisons impliquant les halogénures, ces matériaux présentent une cristallinité ionique élevée et des propriétés électroniques particulièrement nt favorables aux applications optoélectroniques [2].

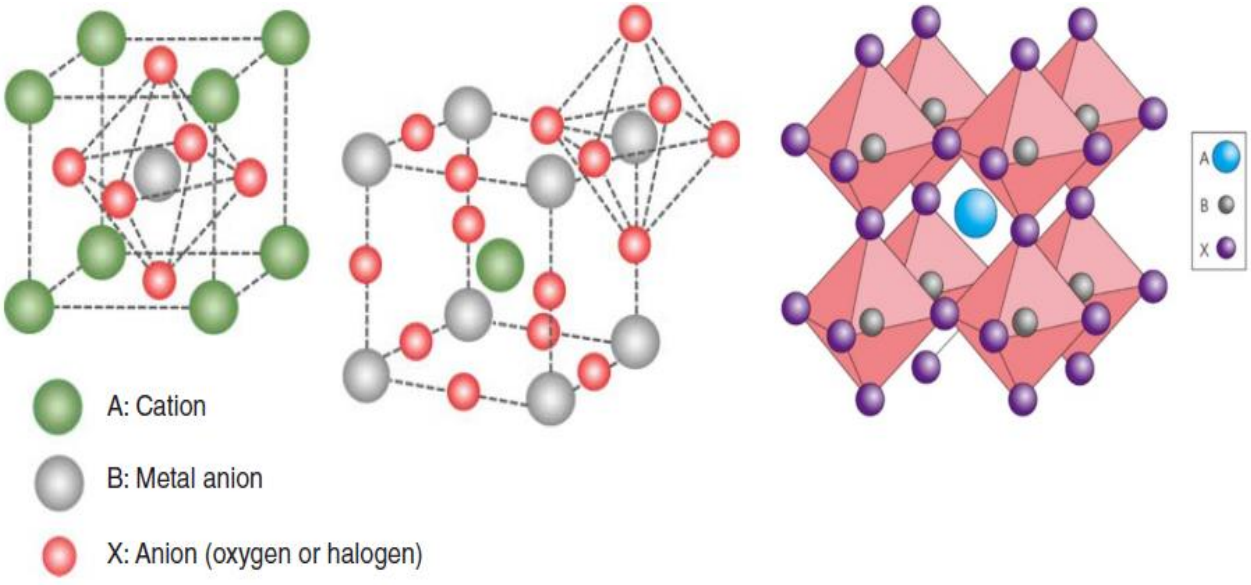


Figure II.2 : Représentation de la structure de la pérovskite [2].

II .3.2. Caractéristiques optoélectroniques de la pérovskite

II .3.2.1 Caractéristiques optiques de la pérovskite : absorption et émission

Les matériaux pérovskites utilisés comme absorbeurs de lumière (par exemple, dans les cellules solaires et les photodétecteurs) présentent une forte absorption optique dans les régions spectrales du visible au proche infrarouge (IR) en raison de leur coefficient d'absorption élevé. Dans le domaine spectral visible (au-dessus de 1.57 eV), le coefficient d'absorption de la pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ dépasse celui des matériaux absorbeurs inorganiques conventionnels tels que GaAs, le silicium amorphe (a-Si) et le silicium cristallin (c-Si) (Figure 2b). En modifiant la composition des cations du site A et des anions halogénures, ou en contrôlant la taille des nanocristaux, le spectre d'absorption peut être ajusté sur une large gamme de longueurs d'onde, de 400 à 800 nm (Figure 2a). Dans les matériaux pérovskites à base de plomb ($APbX_3$), la structure électronique est caractérisée par une bande interdite directe entre la bande de valence (BV) et la bande de conduction (BC). La bande de conduction provient principalement des orbitales 6p du plomb (Pb), tandis que la bande de valence est principalement influencée par les anions halogénures (Cl^-, Br^- et I^-). Par conséquent, le remplacement de l'iodure (I^-) par le chlorure (Cl^-) augmente l'énergie de la bande interdite. Les valeurs typiques de la bande interdite sont d'environ 1,54 eV pour $MAPbI_3$, 2,29 eV pour $MAPbBr_3$ et 3,1 eV pour $MAPbCl_3$. De plus, la substitution de Pb^{2+} par Sn^{2+} modifie la structure de bande en raison des différences de taille ionique et de configuration électronique. De même, les variations du rayon ionique effectif du cation du site A influencent également l'énergie de la bande interdite ; les rayons ioniques effectifs plus petits entraînent généralement une modification de la bande interdite (figure 2c). Grâce à cette même capacité d'ajustement de la composition, les pérovskites utilisées comme émetteurs de lumière (par exemple, dans les diodes électroluminescentes et les lasers) présentent des spectres d'émission accordables sur une large gamme des régions du visible et du proche infrarouge. En faisant varier la composition en halogénures, les pérovskites entièrement inorganiques telles que $CsPbX_3$ ($X = Cl^-$, Br^-, I^-, ou des halogénures mixtes tels que Cl : Br ou Br : I) peuvent atteindre des longueurs d'onde d'émission couvrant la quasi-totalité du spectre visible, de 400 à 780 nm. Cette capacité d'ajustement permet leur utilisation dans les écrans couleur rouge, vert et bleu (RVB) et les technologies d'éclairage avancées. Outre leurs longueurs d'onde d'émission ajustables, les pérovskites entièrement inorganiques $CsPbX_3$ ($X = Cl^-$, Br^- et I^-) présentent des rendements quantiques de

photoluminescence (PLQY) élevés (environ 90 %) et une excellente pureté des couleurs, caractérisée par des largeurs à mi-hauteur (FWHM) étroites, d'environ 20 nm, pour les couleurs primaires. Ces propriétés les rendent très prometteuses pour les technologies d'affichage de nouvelle génération à large gamme de couleurs, notamment la conformité à la norme (Figure 2d). De plus, les nanocristaux de pérovskite monocristalline présentent des largeurs de raie d'émission plus étroites que les films polycristallins, principalement en raison de densités d'états de piège réduites et de voies de recombinaison non radiative minimisées. Grâce à leurs propriétés optiques exceptionnelles et à leurs méthodes de fabrication peu coûteuses par traitement en solution, les matériaux pérovskites conviennent également comme luminophores de conversion descendante dans les unités de rétroéclairage des écrans conventionnels, tels que les écrans à cristaux liquides (LCD), ainsi que dans les couches de verre avant des dispositifs à diodes électroluminescentes organiques (OLED)[3] .

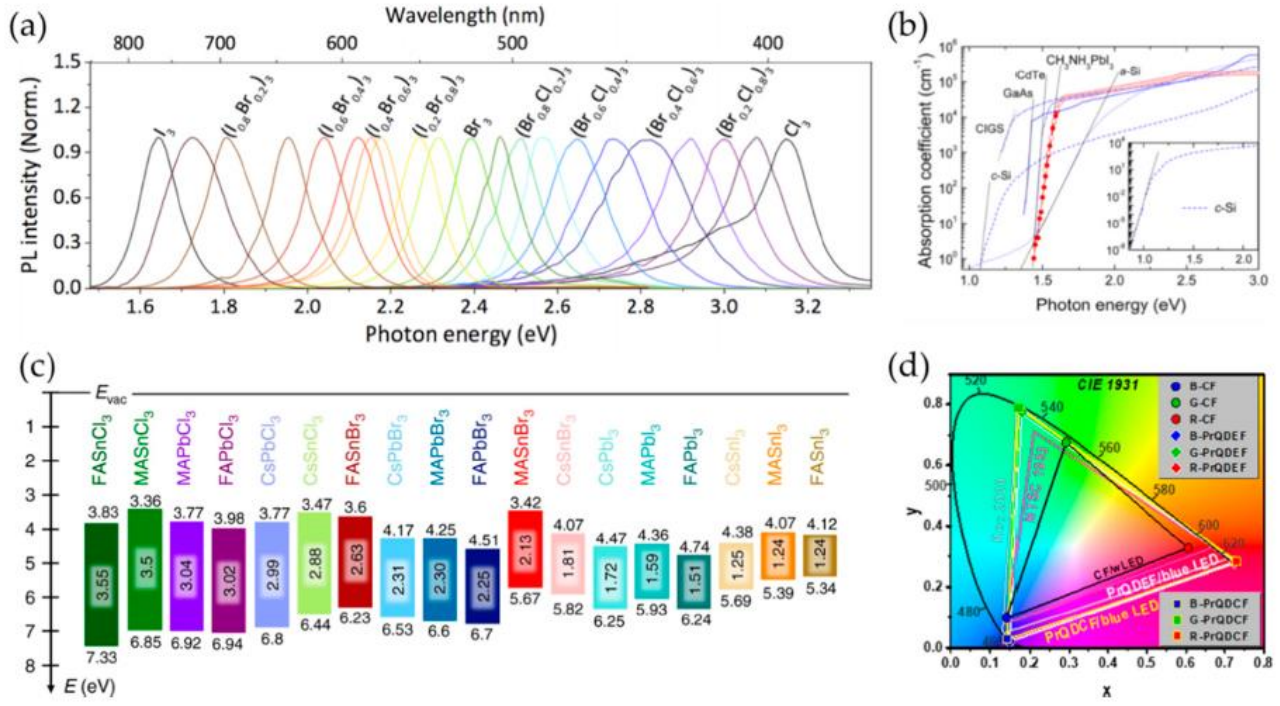


Figure II.3. (a) Émission de photoluminescence (PL) accordable des cristaux de pérovskite $OA_{0.3}MA_{0.7}PbX_3$ (X = I, Br ou Cl) en fonction de la composition en halogénures mixtes. (b) Coefficient d'absorption des cristaux de pérovskite $CH_3NH_3PbI_3$ comparé à celui d'autres matériaux photovoltaïques. (c) Diagrammes schématiques des niveaux d'énergie de différents cristaux de pérovskite. (d) Diagramme de chromaticité illustrant les coordonnées colorimétriques d'un écran LCD utilisant un filtre de couleur à points quantiques (QD) à base de pérovskite [3].

II .3.2.2 Caractéristiques électriques de la pérovskite : mobilité, durée de vie et longueur de diffusion

Les composants électriques des dispositifs, et non la mobilité, la durée de vie et la longue diffusion des porteurs de charge, sont des facteurs déterminants pour les performances des dispositifs optoélectroniques (Tableau 1). Les propriétés électriques des matériaux pérovskites sont compatibles avec le développement de structures monocristallines. L'absorption des joints de grains dans les surfaces perforées monocristallines, avec une surface mate dense, a une épaisseur comprise entre 10^9 et 10^{11} cm^{-3}, ce qui correspond à des dimensions plus importantes. L'épaisseur de la cellule des pérovskites polycristallines est inférieure (10^{15}–10^{19} cm^{-3}). Ceci permet de densifier les pièges, favorisant une longue diffusion des porteurs de charge exceptionnellement élevée, une accumulation mobile des porteurs et une durée de vie prolongée [3].

	Band gap (eV)	Carrier Mobilité (cm^2/Vs)	Longueur de diffusion (um)
$MAPbI_3$	**1. 7**	**0.7 – 3**	0.1-8
$MAPbI_{3-x}Cl_x$	**2.6**	**1.6**	1-1.2
MAPbCl3	**3.1**	**40**	3-9
$MAPbBr_3$	**2.3**	**20 – 100**	3-17
$FAPbI_3$	**1.5**	**27**	6.6
$FAPbBr_3$	2.25	14	**1**9

Tableau II.1. Bande interdite, mobilité des porteurs de charge et longueur de diffusion dans les cristaux de pérovskites halogénées [3].

II .4. Applications des matériaux pérovskites

Les pérovskites sont des matériaux optoélectroniques très prometteurs en raison de leurs propriétés remarquables, telles qu'une forte absorption lumineuse, une bande interdite ajustable, une mobilité élevée des porteurs, une fabrication par voie liquide et une grande flexibilité mécanique. Ces caractéristiques leur confèrent des performances supérieures aux semi-conducteurs

conventionnels, notamment en termes d'efficacité, de flexibilité et d'adaptabilité spectrale, ce qui favorise leur utilisation dans la conversion d'énergie, l'affichage, les communications optiques, la détection et les technologies médicales. Dans les systèmes énergétiques intégrés, les pérovskites permettent le développement de dispositifs innovants tels que les fenêtres photovoltaïques intelligentes, le photovoltaïque intégré aux bâtiments et les systèmes électroniques autonomes. Leur intégration avec des batteries ou des supercondensateurs offre des solutions efficaces pour les dispositifs IoT, l'électronique portable et les infrastructures intelligentes. Dans les technologies d'affichage, les diodes électroluminescentes à pérovskite (PeLED) présentent une forte luminosité, une émission spectrale étroite et des rendements élevés, les rendant adaptées aux écrans haute définition, à l'éclairage et aux dispositifs flexibles. De plus, leur flexibilité mécanique permet le développement d'écrans pliables et extensibles. Pour les communications optiques et la détection, les dispositifs à base de pérovskite, tels que les photodétecteurs, les LED et les lasers, offrent une haute sensibilité, une réponse rapide et des propriétés ajustables, ce qui les rend adaptés à la transmission optique, à l'imagerie, à la surveillance et aux réseaux IoT.Enfin, dans le domaine médical, les pérovskites sont particulièrement prometteuses pour l'imagerie par rayons X, la détection des radiations et le diagnostic biomédical, grâce à leur forte sensibilité et à leurs excellentes propriétés photoconductrices. Malgré les défis liés à la stabilité et à la toxicité, les avancées en ingénierie des matériaux devraient permettre leur intégration dans les technologies électroniques, de communication et de santé de prochaine génération [4].

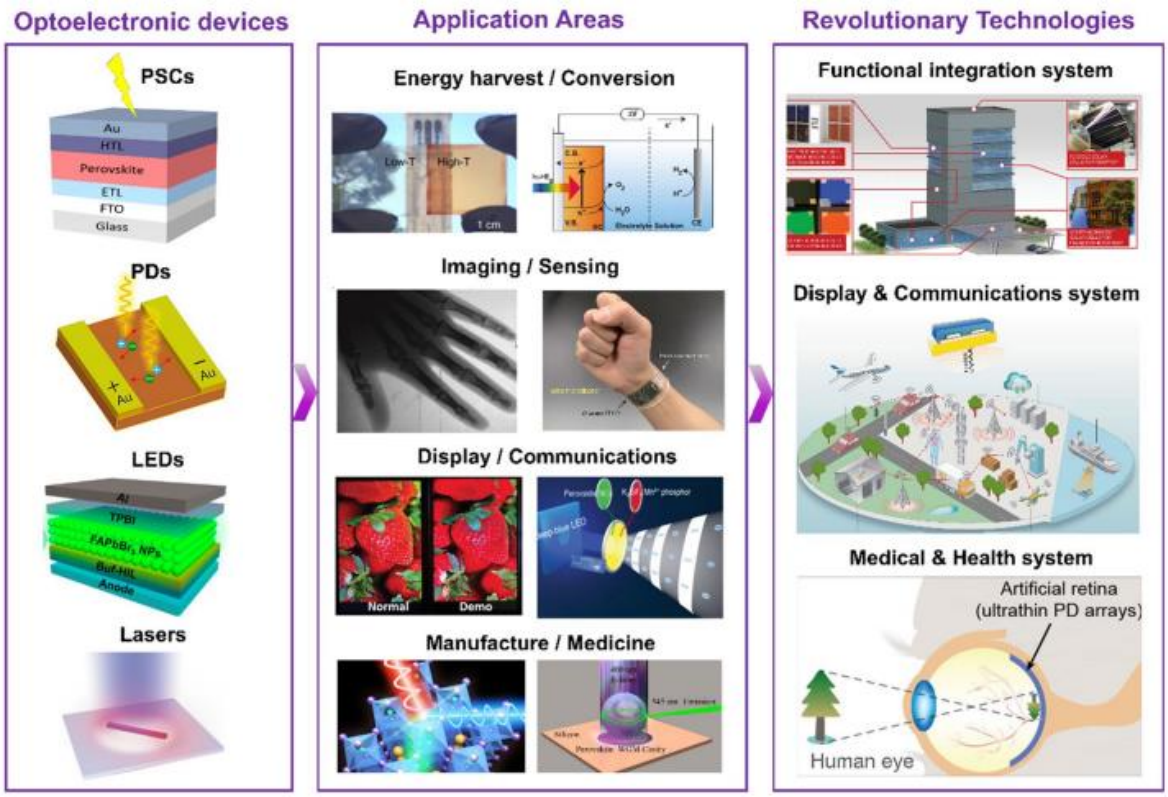


Figure II.4. Les applications révolutionnaires rendues possibles par les composants optoélectroniques en matériau pérovskite [4].

II .5. Architecture des cellules solaires Pérovskites

Les cellules solaires à pérovskite (CSP), comme illustré sur la figure, sont généralement classées en trois architectures principales en fonction de l'organisation des couches de transport de charges et de la présence ou non d'une structure mésoporeuse. La première est la structure mésoporeuse n-i-p (figure 5 a), constituée d'un substrat conducteur transparent, généralement le FTO, suivi d'une couche de transport d'électrons compacte, d'une couche de transport d'électrons mésoporeuse servant de matrice poreuse, de la couche absorbante de pérovskite, d'une couche de transport de trous (HTL), puis d'une électrode métallique supérieure. Dans cette architecture, la couche mésoporeuse joue un rôle essentiel en améliorant le contact interfacial et en facilitant l'injection et le transport des électrons depuis la pérovskite vers l'électrode, tout en réduisant les pertes par recombinaison. Toutefois, cette structure nécessite des procédés de fabrication plus complexes, notamment un traitement thermique à haute température pour assurer une bonne cristallinité, ce qui augmente le coût de production et limite son utilisation dans les dispositifs flexibles. Afin de

surmonter ces contraintes, la structure planaire n-i-p a été développée, comme présenté sur la figure 5 (b). Dans cette configuration, la couche mésoporeuse est supprimée, et le dispositif comprend uniquement un substrat conducteur transparent (FTO ou ITO), une couche de transport d'électrons compacte, la couche de pérovskite, une couche de transport de trous et l'électrode métallique. Cette architecture simplifiée réduit le nombre d'étapes de fabrication, permet des procédés à plus basse température et diminue les coûts de production. Malgré l'absence de structure mésoporeuse, le transport des charges reste efficace grâce aux propriétés électroniques exceptionnelles de la pérovskite, notamment sa grande longueur de diffusion des porteurs et sa faible recombinaison. La troisième architecture est la structure planaire p-i-n, également appelée structure inversée, illustrée sur la figure 5 (c). Contrairement à la structure n-i-p, l'ordre des couches de transport est inversé. Le substrat conducteur transparent, généralement l'ITO, est d'abord recouvert d'une couche de transport de trous, suivie de la couche absorbante de pérovskite, puis de la couche de transport d'électrons et enfin de l'électrode métallique. Cette configuration favorise l'extraction efficace des trous vers l'électrode inférieure et des électrons vers l'électrode supérieure. Elle présente également des avantages importants, tels qu'une fabrication à basse température, une réduction des phénomènes d'hystérésis, une meilleure stabilité des interfaces et une compatibilité accrue avec les dispositifs flexibles et les cellules solaires tandem [5].

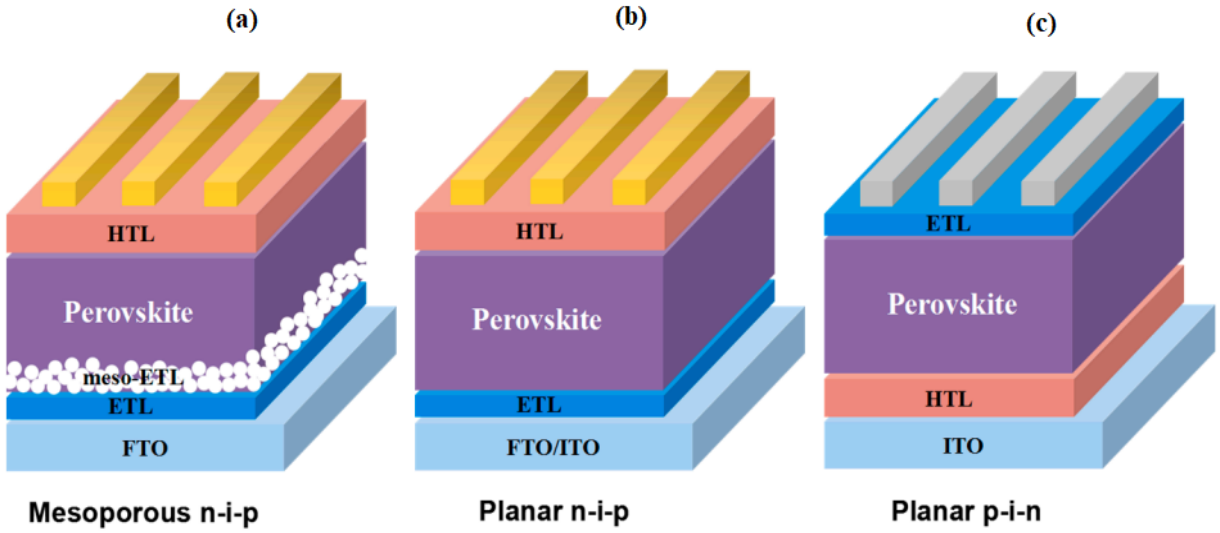


Figure II.5. Structures typiques des cellules solaires à pérovskite (PSC) : (a) architecture mésoporeuse n–i–p, (b) architecture planaire conventionnelle n–i–p, et (c) architecture planaire inversée p–i–n [5].

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.6 (a)). 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. 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 µm, 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 CB de l'ETL peuvent être capturés par la VB de la couche pérovskite ou la HTL. L'ensemble des processus de transfert de charge/recombinaison a été montré dans la figure II.6 (b) [6].

L'ensemble des processus de transfert de charge/recombinaison a été montré dans la figure II.6 (b). Le processus de génération de charges (1), les films de pérovskite avec des bandes interdites plus étroites possèdent une couverture de spectre d'absorption plus large, conduisant à une utilisation plus élevée de photons incidents pour la photo courant mais à une photo tension inférieure. La dissociation de l'exciton en porteurs de charge libres doit surmonter l'énergie de liaison de l'exciton (EB), ce qui est facile pour la pérovskite car l'EB est inférieure à 50 MeV. Séparation de charges, y compris la dérive de charge et le transfert vers ETL/HTL de type N/P (2), se produit après la dissociation de l'exciton, suivi de l'extraction et du transport de charge (3) par ETL/HTL vers l'électrode (Fig. 6b). La recombinaison radiative de charge (4) est inévitable, entraînant une perte de photo tension. La recombinaison non radiative des charges est toujours médiée par des défauts (5) et des imperfections d'interface (6,7). La longueur de diffusion des

charges dans les films de pérovskite est un paramètre important pour évaluer l'efficacité de la collecte des charges avant la recombinaison. Une grande taille de grain et de faibles états de piège peut réduire la recombinaison de charges dans les films de pérovskite et éviter le contact direct CTL afin de réduire le courant de fuite tout au long du processus (5, 6, 7) [6].

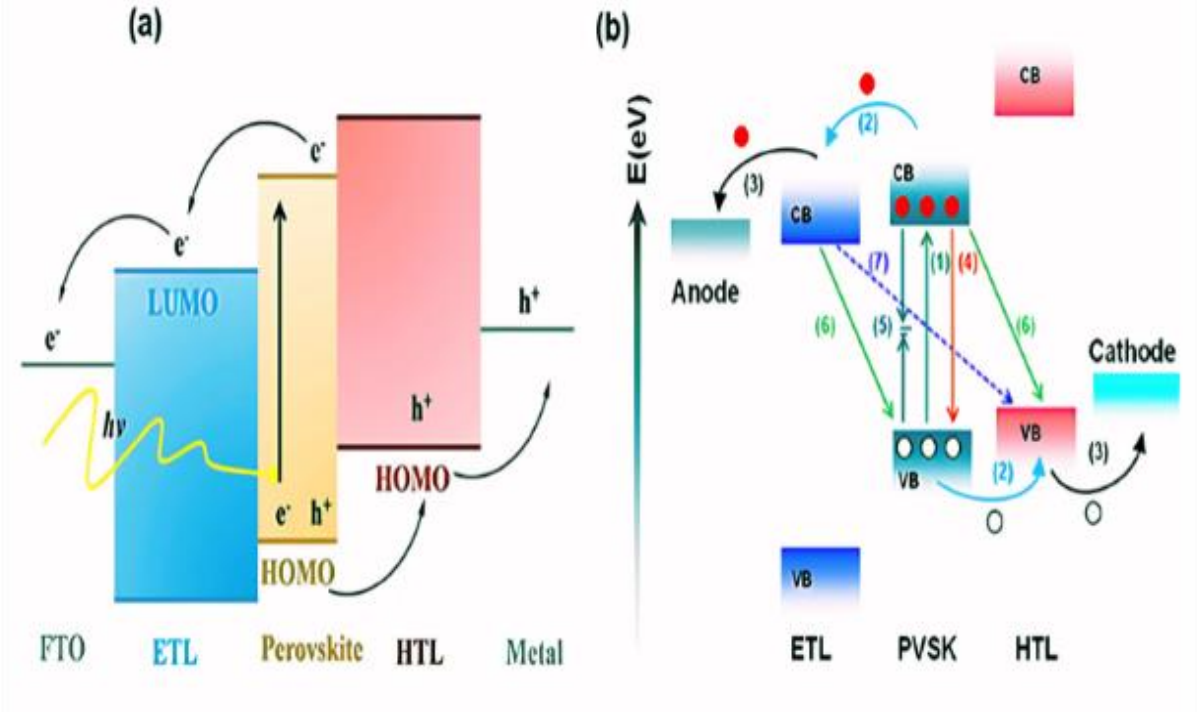


Figure II.6. (a) Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique, (b) Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite [6].

II .7. Conclusion

Ce chapitre a permis d'établir une compréhension approfondie des matériaux pérovskites en tant que composants clés des technologies photovoltaïques de nouvelle génération. L'étude de la structure cristallographique de type ABX_3 a mis en évidence son rôle fondamental dans la détermination des propriétés physiques des pérovskites, notamment leur capacité à offrir une grande flexibilité de composition ainsi qu'une ingénierie fine de la bande interdite. Cette particularité structurelle constitue un levier essentiel pour l'optimisation des propriétés optoélectroniques. Par ailleurs, l'analyse des différentes architectures des cellules solaires à pérovskite, qu'elles soient mésoporeuses, planaires ou inversées, a permis de mettre en évidence l'influence déterminante de la configuration du dispositif sur les performances globales, notamment en termes de rendement, de stabilité et de procédés de fabrication. Cette diversité architecturale offre des perspectives importantes pour l'adaptation des dispositifs à diverses applications, y compris les technologies flexibles et les structures tandem. Enfin, l'étude des mécanismes fondamentaux de fonctionnement a permis de mieux comprendre les phénomènes physiques régissant la conversion photovoltaïque, depuis l'absorption des photons jusqu'à la collecte des charges, en passant par leur génération, leur séparation et leur transport. L'identification des mécanismes de recombinaison et des pertes associées met en lumière les défis encore présents, notamment en matière de stabilité et de réduction des défauts. Ainsi, ce chapitre constitue une base théorique essentielle pour la suite du travail, en fournissant les connaissances nécessaires à la modélisation, à la simulation et à l'optimisation des cellules solaires à pérovskite. Il ouvre également la voie à des recherches futures visant à améliorer davantage les performances, la durabilité et la viabilité industrielle de ces dispositifs prometteurs.

Bibliographie Chapitre II :

[1] Tilley, R. J. (2016). Perovskites: structure-property relationships. John Wiley & Sons.

[2] Miyasaka, T. (2021). Perovskite Photovoltaics and Optoelectronics: From Fundamentals to Advanced Applications. John Wiley & Sons.

[3] Rhee, S., An, K., & Kang, K. T. (2020). Recent advances and challenges in halide perovskite crystals in optoelectronic devices from solar cells to other applications. Crystals, 11(1), 39.

[4] Dong, H., Ran, C., Gao, W., Li, M., Xia, Y., & Huang, W. (2023). Metal Halide Perovskite for next-generation optoelectronics: progresses and prospects. ELight, 3(1), 3.

[5] Qiu, C., Wu, Y., Song, J., Wang, W., & Li, Z. (2022). Efficient planar perovskite solar cells with ZnO electron transport layer. Coatings, 12(12), 1981.

[6] Haddadji Doudja, B. K. (2024). Etude et simulation d'une cellule solaire à base des matériaux pérovskite (Doctoral dissertation, faculté des sciences et de la technologie* univ bb

Chapitre III : Résultats de simulation numérique et interprétation

III.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude et à l'optimisation des performances d'une cellule solaire basée sur cette pérovskite sans plomb, en utilisant le simulateur numérique SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator). Cet outil permet d'analyser le comportement électrique du dispositif en tenant compte des mécanismes fondamentaux tels que le transport des porteurs, la recombinaison et les effets des défauts. L'objectif principal de ce chapitre est d'évaluer l'influence des paramètres clés de la structure du dispositif, notamment le choix des couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL), l'épaisseur des différentes couches, la densité de défauts, la température de fonctionnement, ainsi que les résistances série et parallèle. Une attention particulière est portée à l'identification d'une configuration optimale permettant d'améliorer significativement les performances photovoltaïques. Enfin, les résultats obtenus seront présentés et analysés de manière détaillée afin de mettre en évidence les facteurs déterminants influençant le rendement de conversion de puissance (PCE) et d'orienter la conception de cellules solaires à pérovskite plus efficaces, stables et respectueuses de l'environnement.

III .2. Présentation du logiciel SCAPS

SCAPS, acronyme de Solar Cell Capacitance Simulator, est un outil de simulation numérique dédié à l'étude des cellules solaires unidimensionnelles. Il a été conçu et développé par le département des systèmes électroniques et informatiques (ELIS) de l'Université de Gand, en Belgique. Plusieurs chercheurs, dont Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Alex Niemegeers et Stefaan Degrave, ont activement participé à son élaboration. Ce logiciel est mis à disposition gratuitement pour la communauté scientifique travaillant dans le domaine du photovoltaïque, notamment au sein des instituts et centres de recherche [1].

III .2.1 Utilisation et étapes de la simulation

Pour simuler et maîtriser l'ensemble des paramètres d'un dispositif photovoltaïque à l'aide du logiciel SCAPS, il est nécessaire d'interagir avec trois interfaces principales :

- **Le panneau d'exécution** (*Action Panel*), permettant le lancement et le contrôle des simulations,
- **Le panneau de définition** (*Définition Panel*), où sont configurés la structure du dispositif

et les conditions du problème à étudier,

- **La fenêtre des résultats**, qui affiche les données issues de la simulation pour leur analyse.

Une fois l'icône du logiciel SCAPS lancée, une première interface s'affiche (figure III.1), correspondant au panneau d'action (Action Panel). Cette fenêtre centrale permet d'accéder à plusieurs fonctionnalités essentielles, à savoir :

1. La définition des conditions dans lesquelles la simulation sera réalisée, telles que la température, la fréquence, le spectre lumineux ou encore l'intensité de l'irradiation
2. Le choix de la caractéristique ou de la mesure que l'on souhaite simuler,
3. L'accès à la configuration du problème à étudier, en définissant notamment la géométrie, les matériaux et les propriétés de la cellule solaire via la fonction Set Problem,
4. Le lancement du ou des calculs nécessaires à la simulation,
5. L'affichage des résultats sous forme de courbes pour analyse.

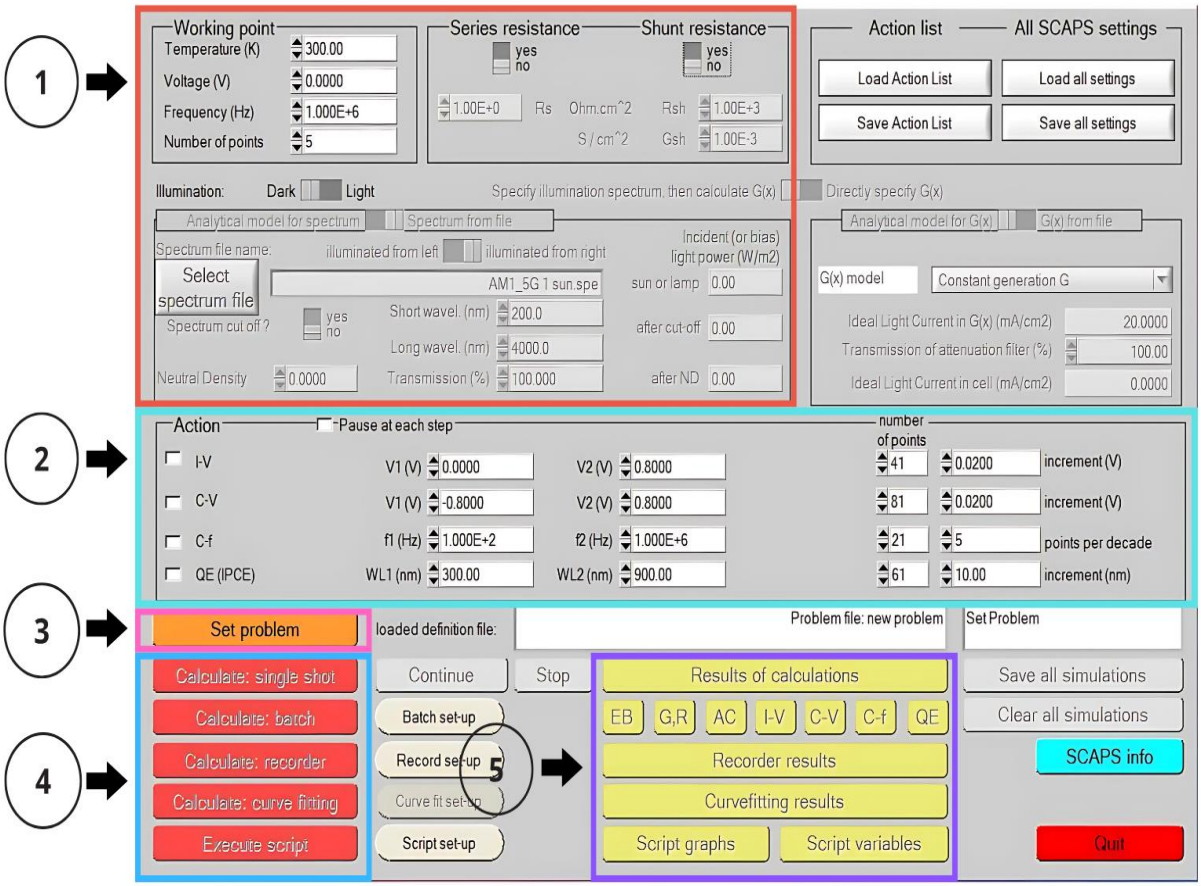


Figure III.1. Fenêtre du panneau d'action du logiciel SCAPS.

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

III.3.1. Description de la structure

La figure 1(a) illustre la structure de la cellule solaire, composée de plusieurs couches : ITO (oxyde d'indium-étain), IGZO (oxyde d'indium-gallium-zinc), pérovskite double sans plomb $Na_2TlGaCl_6$ et CBTS (sulfure de cuivre-bismuth-étain). Cette structure est conçue pour un transport de charges et une absorption de la lumière efficace. La couche d'ITO sert d'électrode transparente, laissant passer la lumière du soleil tout en conduisant l'électricité. L'IGZO, grâce à sa mobilité électronique relativement élevée et sa large bande interdite (3.05 eV), fait office de couche de transport d'électrons (ETL). La couche de pérovskite double sans plomb $Na_2TlGaCl_6$, avec une affinité électronique plus faible (4.00 eV) et une bande interdite plus étroite (1.1 eV), sert de matériau absorbant la lumière ; les photons y sont absorbés et convertis en paires électron-trou. Enfin, la couche de CBTS, avec une bande interdite de 1.9 eV, sert de couche de transport de trous (HTL) [2]. La figure 1(b) présente le diagramme de bandes correspondant à la structure, mettant en évidence l'alignement des bandes d'énergie des matériaux impliqués. Les positions des bandes de conduction (E_k) et de valence (E_v) sont illustrées à travers les couches, indiquant le mouvement des porteurs de charge (électrons et trous) dans le dispositif. Le diagramme montre clairement les décalages énergétiques entre les couches, essentiels pour une séparation et une collecte efficace des charges. L'affinité électronique de chaque matériau ($Na_2TlGaCl_6$, IGZO et CBTS), ainsi que les positions relatives de leurs bandes de conduction et de valence, influencent significativement les performances du dispositif. Les décalages énergétiques entre $Na_2TlGaCl_6$ et IGZO, ainsi qu'entre IGZO et CBTS, déterminent le flux des porteurs de charge et minimisent la recombinaison, améliorant ainsi l'efficacité globale de la cellule solaire [3].

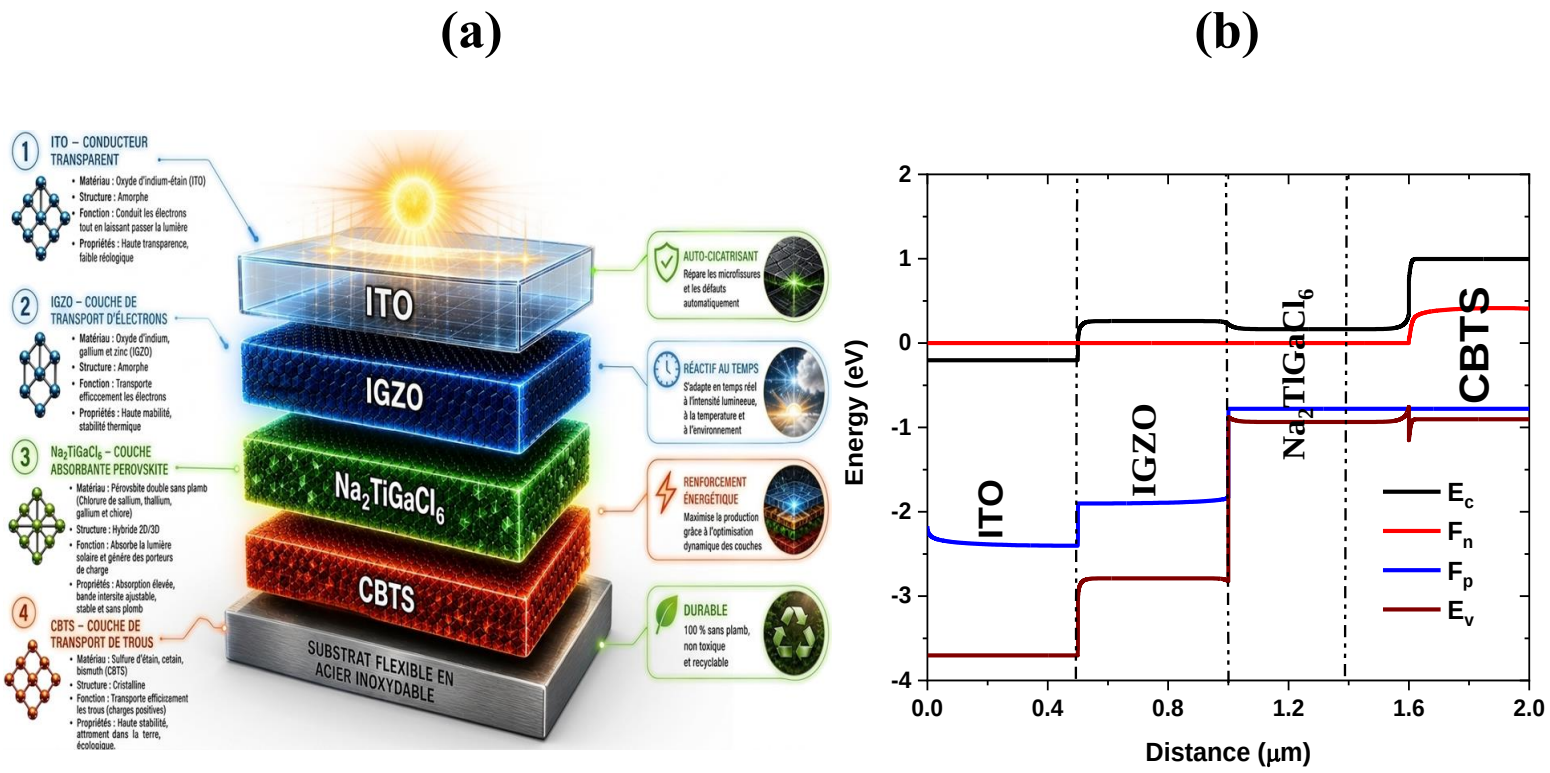


Figure III.2. (a) Représentation schématique de la structure de la cellule solaire composée de couches d'ITO, d'IGZO, de $Na_2TlGaCl_6$ et de CBTS. (b) Diagramme de bandes correspondant illustrant l'alignement des niveaux d'énergie de la bande de conduction (E_k), de la bande de valence (E_v) et des niveaux de Fermi (F_n, F_p) à travers les couches.

III.3.2. Modèles et paramètres de simulation

Les simulations ont été réalisées dans des conditions standard (éclairement AM1.5G, température ambiante de 300 K). Les paramètres de simulation détaillés pour la couche de transport d'électrons (ETL), l'absorbeur $Na_2TlGaCl_6$ et la couche de transport de trous (HTL) sont fournis dans les tableaux 1 et 2 [4].

Paramètres	$Na_2TlGaCl_6$	C_{60}	LBSO	WS_2	ZnO	IGZO	PCBM
Épaisseur d (µm)	0.6	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
Affinité électronique χ (eV)	4.00	4.6	4	3.95	4	3.9	4.4
Bande interdite E_g (eV)	1. 1	1.7	3.12	1.8	3.3	3.05	2
Permittivité relative ε_r	10	10	9	13.6	9	3.9	22
Densité effective des États (CB) N_C ($1/m^3$)	1×10^{18}	1×10^{19}	1×10^{18}	1×10^{18}	1×10^{18}	5×10^{18}	1.8×10^{18}
Densité effective des États (VB) N_V ($1/m^3$)	1×10^{19}	5×10^{20}	2×10^{19}	2×10^{19}	2×10^{19}	5×10^{18}	2×10^{18}
mobilité électronique μ_n(cm^2/Vs)	20	100	20	100	100	15	0.69
Mobilité des trous μ_p(cm^2/Vs)	20	25	10	100	25	0.1	0.69
Densité d'accepteurs N_A($1/cm^3$)	5×10^{15}	0	0	0	0	0	0
Densité des donneurs N_D ($1/cm^3$)	0	1×10^{18}	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{17}	1×10^{18}
Densité de défauts N_t	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}

Tableau 1. Paramètres d'optimisation des ETL et de la pérovskite.

Paramètres	PEDOT: PSS	Cu_2O	Spiro-MeOTAD	CBTS	Zn_3P_2	CFTS
Épaisseur d (µm)	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
Affinité électronique	3.4	3.4	2.2	1.41	4.2	3.6
χ (eV)	1.6	2.2	3	1.9	1.5	1.3
Bande interdite Eg (eV)	3	7.5	3	8.2	7.11	5.4
Permittivité relative εr	1×10^{19}	2×10^{19}	2×10^{21}	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}	2.2×10^{18}
Densité effective des États (CB) NC (1/m3)	5×10^{20}	2×10^{20}	2×10^{21}	2.2×10^{19}	2.2×10^{19}	2.2×10^{19}
Densité effective des États (VB) NV (1/m3)	4.5×10^{-2}	200	2.1×10^{-3}	22	1	30
mobilité électronique µn(cm2/Vs)	4.5×10^{-2}	8600	2.1×10^{-3}	22	10	10
Mobilité des trous µp(cm2/Vs)	1×10^{18}	1×10^{18}	1×10^{18}	2×10^{18}	2×10^{18}	1×10^{18}
Densité d'accepteurs NA(1/cm3)	0	0	0	0	0	0
Densité des donneurs ND (1/cm3)	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}

Tableau 2. Propriétés des matériaux des couches HTL.

Dans la simulation des dispositifs solaires, le simulateur SCAPS-1D explique correctement les équations de dérive-diffusion, de continuité et de Poisson. Cette équation est exprimée comme indiqué dans l'équation (1) et sert de pierre angulaire fondamentale pour comprendre l'électrostatique et la distribution des charges dans les matériaux semi-conducteurs [5].

$$\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}\right) = -\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{\rho}{\varepsilon_s} = -\frac{q}{\varepsilon_s}\left[\, p - n + N_d^+ - N_a^- + N_{def} \,\right] \tag{1}$$

Où Ψ est la potentialité électrostatique, εs est la permittivité relative statique, q est la charge, e et n sont les électrons et les trous respectifs, $Nd+$ est la densité du donneur, $Na-$ est la densité de l'accepteur, et $Ndef$ est la densité de défaut du donneur et de l'accepteur. L'équation de continuité des porteurs dans le dispositif peut être représentée comme suit [6] :

$$-\frac{\partial j_p}{\partial x} + G - U_p(n, p) = 0 \tag{2}$$

$$-\frac{\partial j_n}{\partial x} + G - U_n(n, p) = 0 \tag{3}$$

Ici, j_p et j_n sont les densités de courant des trous et des électrons, G est le taux de génération de porteurs, et Un (n, p) et Up (n, P) sont les taux de recombinaison des électrons et des trous, respectivement. En outre, la densité de courant des porteurs peut également être obtenue à partir de [4] :

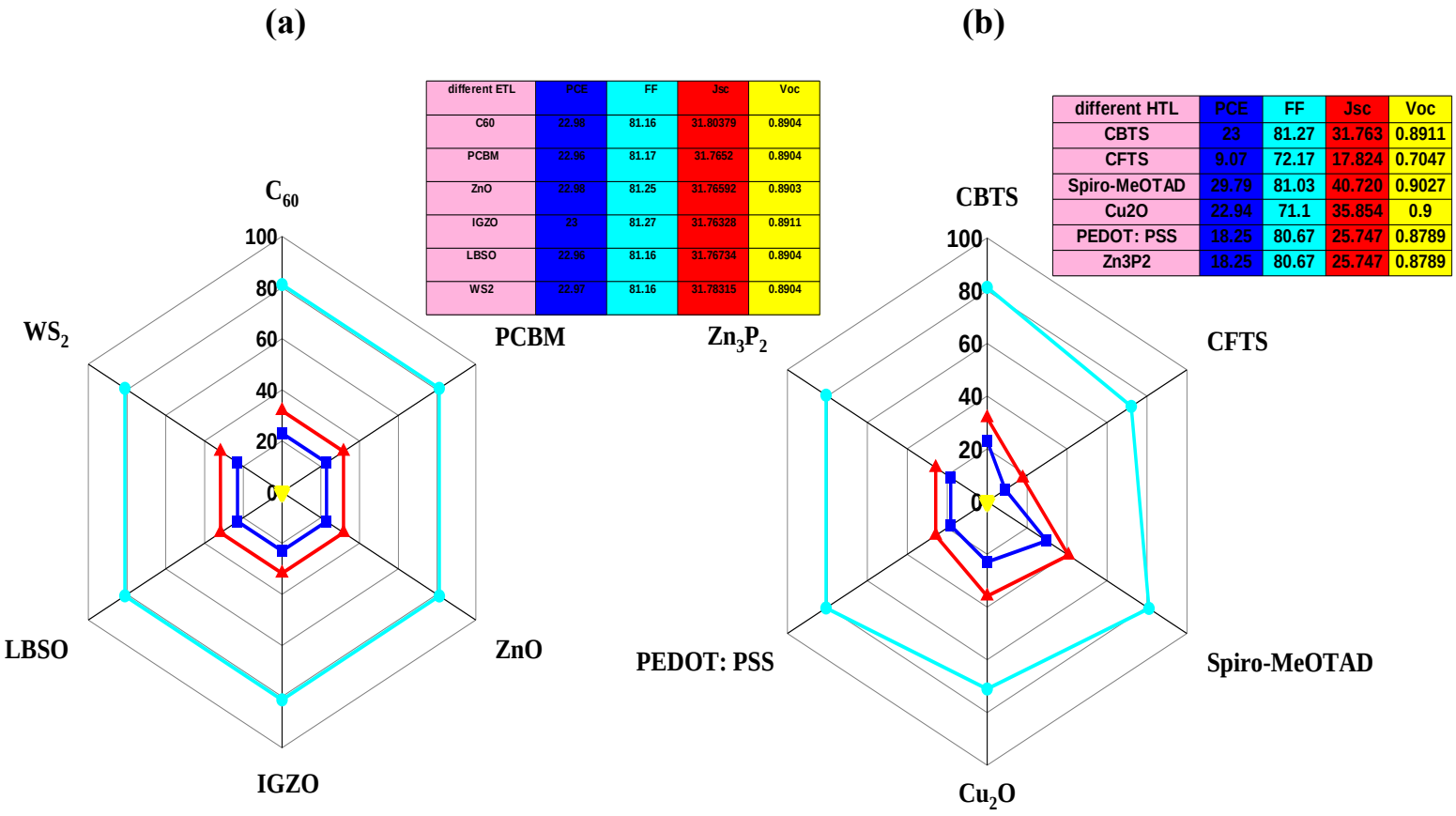
$$j_p = qn\mu_p E + qD_p \frac{\partial n}{\partial x} \tag{4}$$

$$j_n = qn\mu_n E + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \tag{5}$$

Ici, q est la charge, $\mu p\ and\ \mu n$ sont les mobilités des porteurs, et Dp, Dn sont les coefficients de diffusion en effectuant des simulations à l'aide de SCAPS-1D [7].

III.3.3. Effet de différents (ETL) et (HTL) :

La figure 3(a) représente l'influence de différentes couches de transport d'électrons (ETL) sur les performances de la cellule solaire. Les diagrammes radar présentent les paramètres de performance : rendement de conversion de puissance (PCE), facteur de remplissage (FF), courant de court-circuit (Jsc) et tension en circuit ouvert (Voc) pour diverses ETL, notamment C60, PCBM, ZnO, IGZO, LBSO et WS2. Parmi celles-ci, l'IGZO offre les meilleures performances, avec un PCE de 23.00 %, un FF de 81.27 %, un Jsc de 31.76 mA/cm² et un Voc de 0.8911 V. Ceci indique que l'IGZO est le matériau ETL le plus efficace de cette étude, offrant les meilleures performances globales. La figure 3(b) illustre l'influence de différentes couches de transport de trous (HTL) sur les performances de la cellule solaire. Les diagrammes radar illustrent les performances des cellules solaires avec différentes couches de transport de trous (HTL), notamment CBTS, CFTS, Spiro-MeOTAD, Cu_2O, PEDOT:PSS et Zn_3P_2. Le CBTS atteint le rendement de conversion de puissance (PCE) le plus élevé (23 %), avec une densité de courant de court-circuit (Jsc) de 31.76 mA/cm² et une tension en circuit ouvert (Voc) de 0.891 V, démontrant ainsi sa supériorité en tant que matériau de transport de trous. Bien que Spiro-MeOTAD, Cu_2O, PEDOT : PSS et Zn_3P_2 présentent également de bonnes performances, le CBTS se distingue comme le matériau HTL le plus efficace. Les données, résumées dans le tableau ci-joint, mettent en évidence les principaux paramètres de performance pour chaque couche de transport d'électrons (ETL) et HTL [8]. Ces résultats soulignent l'impact significatif des matériaux ETL et HTL sur l'efficacité des cellules solaires, le choix du matériau et son intégration dans la structure du dispositif influençant les performances globales.



different ETL	PCE	FF	Jsc	Voc
C60	22.98	81.16	31.80379	0.8904
PCBM	22.96	81.17	31.7652	0.8904
ZnO	22.98	81.25	31.76592	0.8903
IGZO	23	81.27	31.76328	0.8911
LBSO	22.96	81.16	31.76734	0.8904
WS2	22.97	81.16	31.78315	0.8904

different HTL	PCE	FF	Jsc	Voc
CBTS	23	81.27	31.763	0.8911
CFTS	9.07	72.17	17.824	0.7047
Spiro-MeOTAD	29.79	81.03	40.720	0.9027
Cu2O	22.94	71.1	35.854	0.9
PEDOT: PSS	18.25	80.67	25.747	0.8789
Zn3P2	18.25	80.67	25.747	0.8789

Figure III.3. Comparaison des performances de différentes couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL) dans les cellules solaires. (a) ETL : C_{60}, PCBM, ZnO, IGZO, LBSO, WS_2. (b) HTL : CBTS, CFTS, Spiro-MeOTAD, Cu_2O, PEDOT : PSS, Zn_3P_2.

III.3.4. Effet de l'épaisseur et des défauts sur la couche absorbante des pérovskites doubles sans plomb $Na_2TlGaCl_6$

La figure 4 illustre l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante et de la densité de défauts sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire à double pérovskite sans plomb $Na_2TlGaCl_6$. Comme le montre la figure 4(a), l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante de 0.2 à 0.8 µm entraîne une nette amélioration de la densité de courant de court-circuit (Jsc), qui passe de 23.74 à 32.61 $mA \cdot cm^{-2}$ grâce à une meilleure absorption optique et à une génération de porteurs de charge plus efficace. En revanche, la tension en circuit ouvert (Voc) diminue progressivement de 0.935 à 0.878 V, ce qui peut être attribué à une recombinaison volumique accrue dans les couches absorbantes plus épaisses [9]. Le facteur de remplissage (FF) reste relativement stable à environ 80 %, ce qui indique que le transport et la collecte des charges ne sont pas

significativement dégradés dans cette gamme d'épaisseurs. Par conséquent, le rendement de conversion de puissance (PCE) augmente régulièrement et atteint une valeur optimale de 23.2 % pour une épaisseur d'absorbeur de 0.8 µm. Une augmentation supplémentaire de l'épaisseur à 1.2 µm entraîne une légère réduction du PCE, principalement due à l'augmentation des pertes par recombinaison et aux limitations du transport des porteurs dans les couches d'absorbeur excessivement épaisses [10]. En revanche, la figure 3(b) montre que la densité de défauts dans la couche d'absorbeur a un impact beaucoup plus négatif sur les performances du dispositif. Lorsque la densité de défauts augmente de 10^{13} à 10^{17} cm^{-3}, la tension en circuit ouvert (Voc) chute brutalement de 1.01 à 0.56 V, accompagnée de réductions substantielles de la densité de courant de court-circuit (Jsc) et du facteur de remplissage (FF). En conséquence, le PCE diminue considérablement, passant de 25.85 % à 2.84 %. Cette forte dégradation des performances est principalement attribuée à la formation d'états de piège profonds qui agissent comme centres de recombinaison non radiative, réduisant ainsi la durée de vie des porteurs et entravant l'extraction efficace des charges [11]. Ces résultats indiquent clairement que, si l'optimisation de l'épaisseur de la couche absorbante est essentielle pour équilibrer l'absorption et la recombinaison de la lumière, le contrôle rigoureux de la densité de défauts dans la couche absorbante $Na_2TlGaCl_6$ est le facteur le plus critique pour obtenir des cellules solaires à double pérovskite sans plomb à haut rendement.

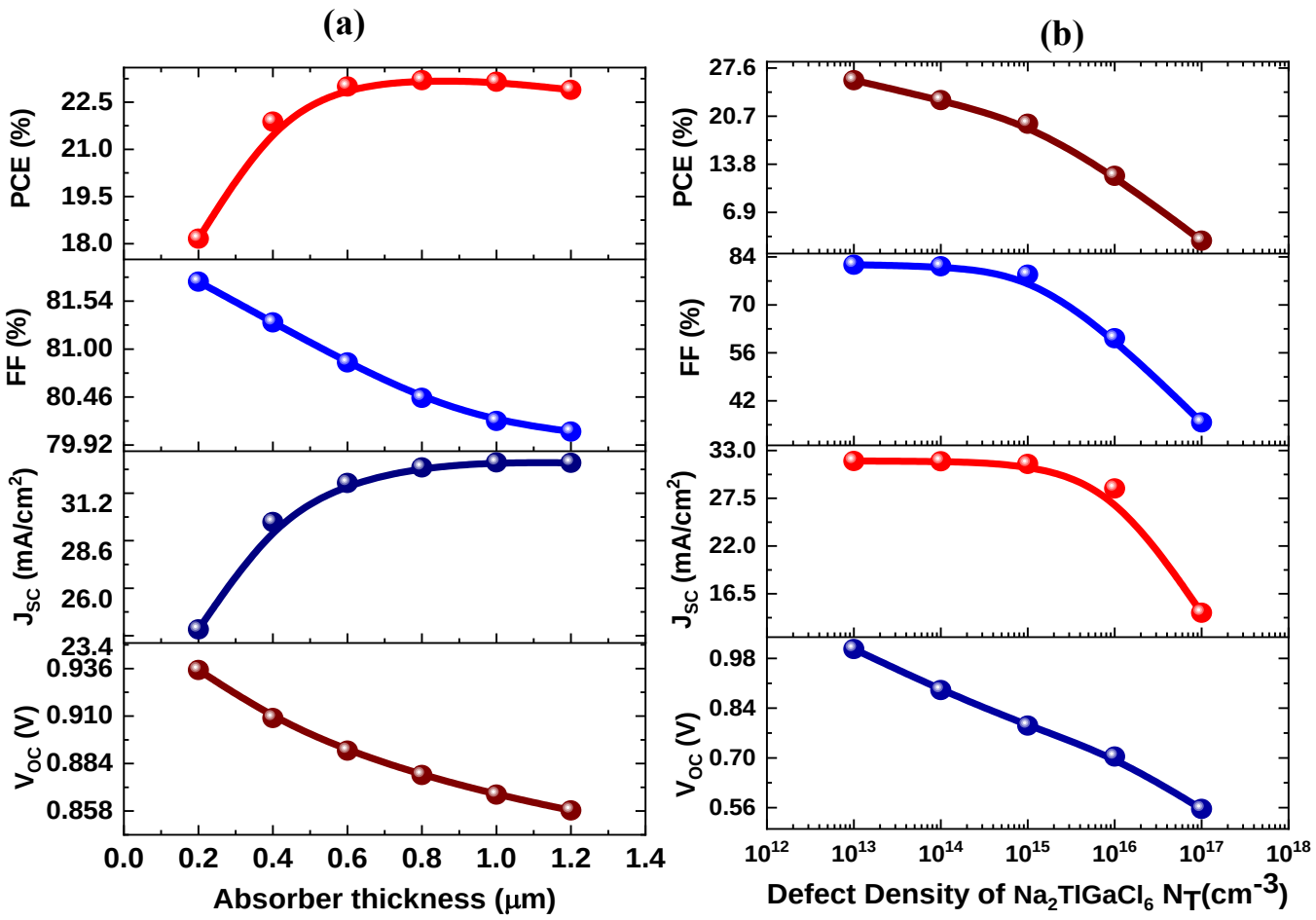


Figure III.4. Effet (a) de l'épaisseur de la couche absorbante et (b) de la densité de défauts sur les performances photovoltaïques (Voc, Jsc, FF et PCE) de la cellule solaire pérovskite $Na_2TlGaCl_6$.

III.3.5. Effet de l'ETL (IGZO) et du HTL (CBTS)

La figure 5 illustre l'influence de l'épaisseur des couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire à double pérovskite sans plomb $Na_2TlGaCl_6$, utilisant l'IGZO comme ETL et le CBTS comme HTL. Comme le montre la figure 5(a), la variation de l'épaisseur de l'ETL IGZO de 0,1 à 0.5 µm a un impact négligeable sur les performances du dispositif. Les paramètres photovoltaïques restent constants : Voc = 0.891 V, Jsc = 31.76 mA·cm^{-2}, FF = 81.27 % et PCE = 23 %. Ce comportement indique une extraction et un transport efficaces des électrons à travers la couche IGZO dans cette gamme d'épaisseurs, suggérant que l'IGZO assure un alignement de bandes favorable et une mobilité des porteurs suffisamment élevée, minimisant ainsi les pertes résistives et la recombinaison à l'interface

ETL/absorbeur. En revanche, la figure 5(b) montre que l'épaisseur de la couche HTL joue un rôle beaucoup plus déterminant dans l'efficacité du dispositif. Lorsque l'épaisseur de la couche CBTS augmente de 0.1 à 0.5 µm, la densité de courant de court-circuit (Jsc) diminue significativement, passant de 38.52 à 31.76 $mA \cdot cm^{-2}$, accompagnée d'une légère réduction de la tension en circuit ouvert (Voc), de 0.901 à 0.891 V, tandis que le facteur de remplissage (FF) reste quasiment constant aux alentours de 81 %. Par conséquent, le rendement de conversion de puissance (PCE) chute considérablement, passant de 28.1 % à 23 %. Cette dégradation peut être attribuée à une augmentation de la résistance série et à des pertes par recombinaison volumique accrues au sein des couches HTL plus épaisses, ce qui entrave le transport et l'extraction efficaces des trous [12]. Ces résultats soulignent que, contrairement à la couche ETL, une optimisation précise de l'épaisseur de la couche HTL CBTS est essentielle pour minimiser les pertes de transport et obtenir des cellules solaires à double pérovskite sans plomb à base de $Na_2TlGaCl_6$ à haut rendement.

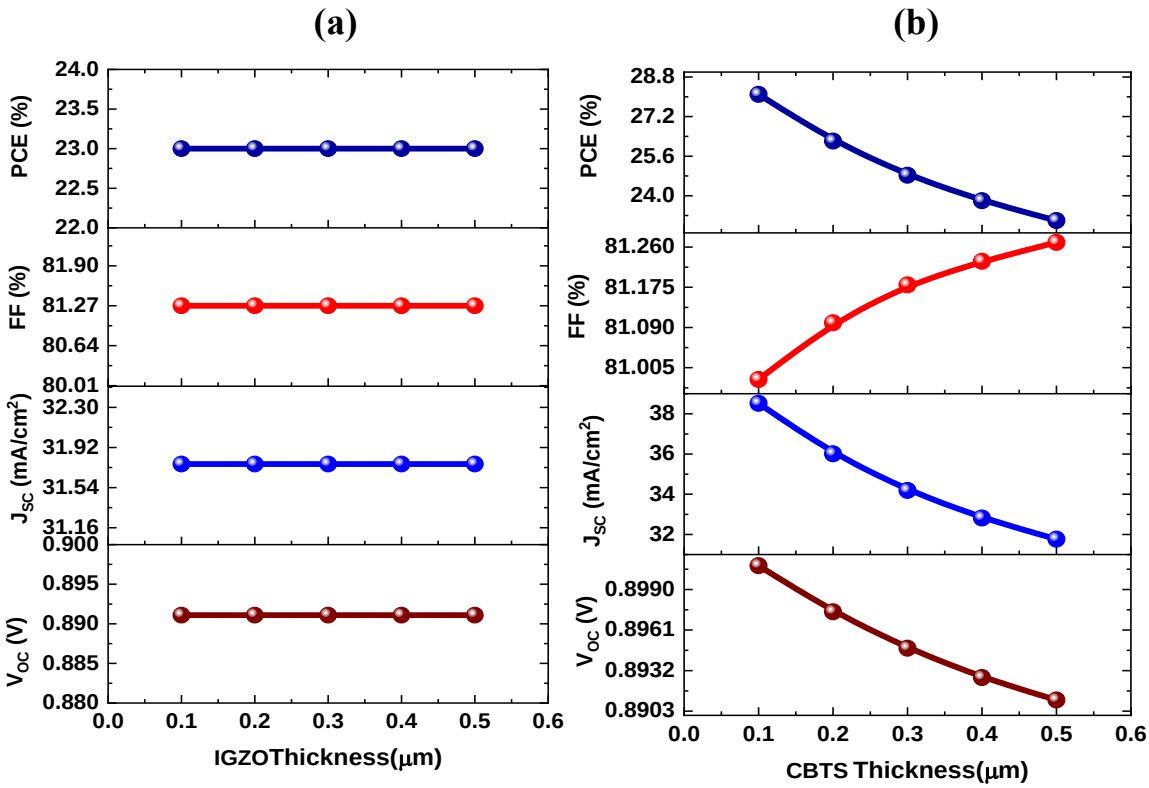


Figure III.5. Influence de l'épaisseur des couches de transport d'électrons IGZO et de transport de trous CBTS sur Voc, Jsc, FF et PCE de la cellule solaire à double pérovskite sans plomb à base de $Na_2TlGaCl_6$.

III.3.6. Effet de la température sur la structure des cellules solaires

La figure 6 illustre l'influence de la température sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire à double pérovskite sans plomb $Na_2TlGaCl_6$. Lorsque la température augmente de 280 à 420 K, on observe une dégradation continue du rendement de conversion de puissance (PCE), dont les valeurs diminuent de 23.78 % à 17.91 %. Cette baisse est principalement due à la réduction marquée de la tension en circuit ouvert (Voc), qui chute de 0.912 V à 0.760 V avec l'élévation de la température. La diminution de Voc s'explique par le rétrécissement de la bande interdite du semi-conducteur induit par la température et par l'augmentation de la concentration intrinsèque de porteurs, ce qui favorise la recombinaison et accroît le courant d'obscurité. En revanche, la densité de courant de court-circuit (Jsc) augmente légèrement, passant de 31.74 à 31.90 $mA \cdot cm^{-2}$, grâce à une meilleure génération de porteurs associée au rétrécissement de la bande interdite à haute température. Cependant, ce gain modeste de Jsc est insuffisant pour compenser la dégradation simultanée de Voc et du facteur de remplissage (FF). Le FF diminue significativement, passant de 82.16 % à 73.83 % avec l'augmentation de la température, principalement en raison de l'accroissement de la résistance série et de la recombinaison accrue des porteurs [13]. Globalement, ces résultats démontrent que les performances électriques de la cellule solaire $Na_2TlGaCl_6$ sont fortement dépendantes de la température, soulignant l'importance de la stabilité thermique et d'une gestion thermique efficace pour maintenir un rendement élevé dans des conditions de fonctionnements réels.

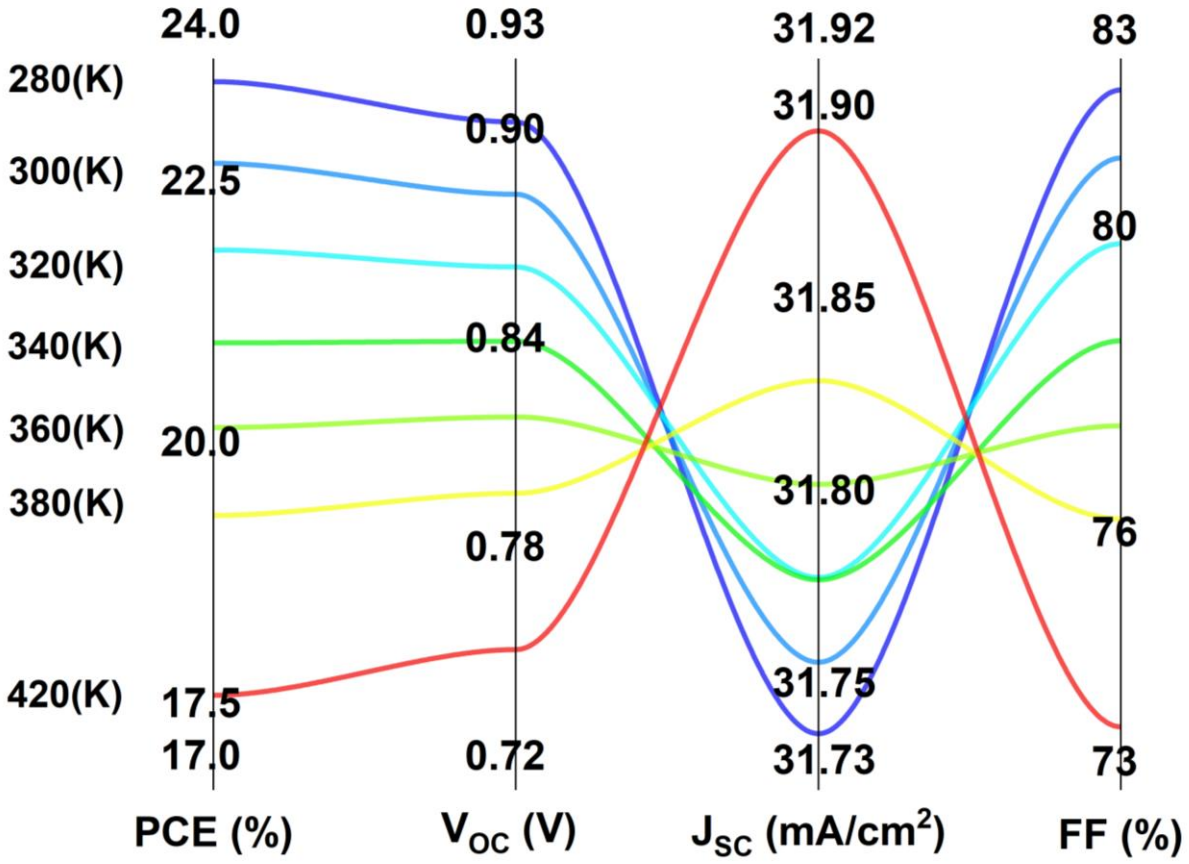


Figure III.6: Effet de la température sur V_{OC}, J_{SC}, FF, PCE.

III.3.7. Effet de la résistance série et shunt

La figure 7 illustre l'influence de la résistance série (R_s) et de la résistance parallèle (R_{sh}) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire. Comme le montre la figure 7(a), l'augmentation de la résistance série de 2 à 10 Ω·cm² entraîne une dégradation marquée des performances du dispositif. Alors que la tension en circuit ouvert (Voc) reste quasiment constante à 0.760 V et que la densité de courant de court-circuit (Jsc) ne diminue que légèrement, le facteur de remplissage (FF) chute significativement de 66.93 % à 42.73 %. Par conséquent, le rendement de conversion de puissance (PCE) diminue fortement de 16.16 % à 10.3 %. Ce comportement est principalement dû à l'augmentation des pertes résistives, qui limitent le flux de courant, réduisent le point de puissance maximale et déforment les caractéristiques courant-tension en polarisation directe [14]. En revanche, la figure 7(b) illustre l'influence de la résistance parallèle sur les performances du dispositif. L'augmentation de la résistance shunt de 100 à 10^8 Ω·cm² entraîne une amélioration

notable du facteur de remplissage (FF) (de 60.48 % à 73.84 %) et du rendement de conversion de puissance (PCE) (de 14.26 % à 17.83 %), tandis que la tension en circuit ouvert (Voc) et la densité de courant de court-circuit (Jsc) restent quasiment inchangées. Cette amélioration des performances pour des valeurs de résistance shunt plus élevées est liée à la suppression des courants de fuite et à la réduction des voies de recombinaison parasites au sein du dispositif. Pour des valeurs de Rsh suffisamment élevées ($\geq 10^5\ \Omega \cdot cm^2$), les paramètres photovoltaïques tendent à se saturer, ce qui indique que les pertes liées à la résistance shunt deviennent négligeables. Ces résultats soulignent l'importance cruciale de minimiser la résistance série et de maximiser la résistance shunt pour obtenir des cellules solaires à hautes performances [15].

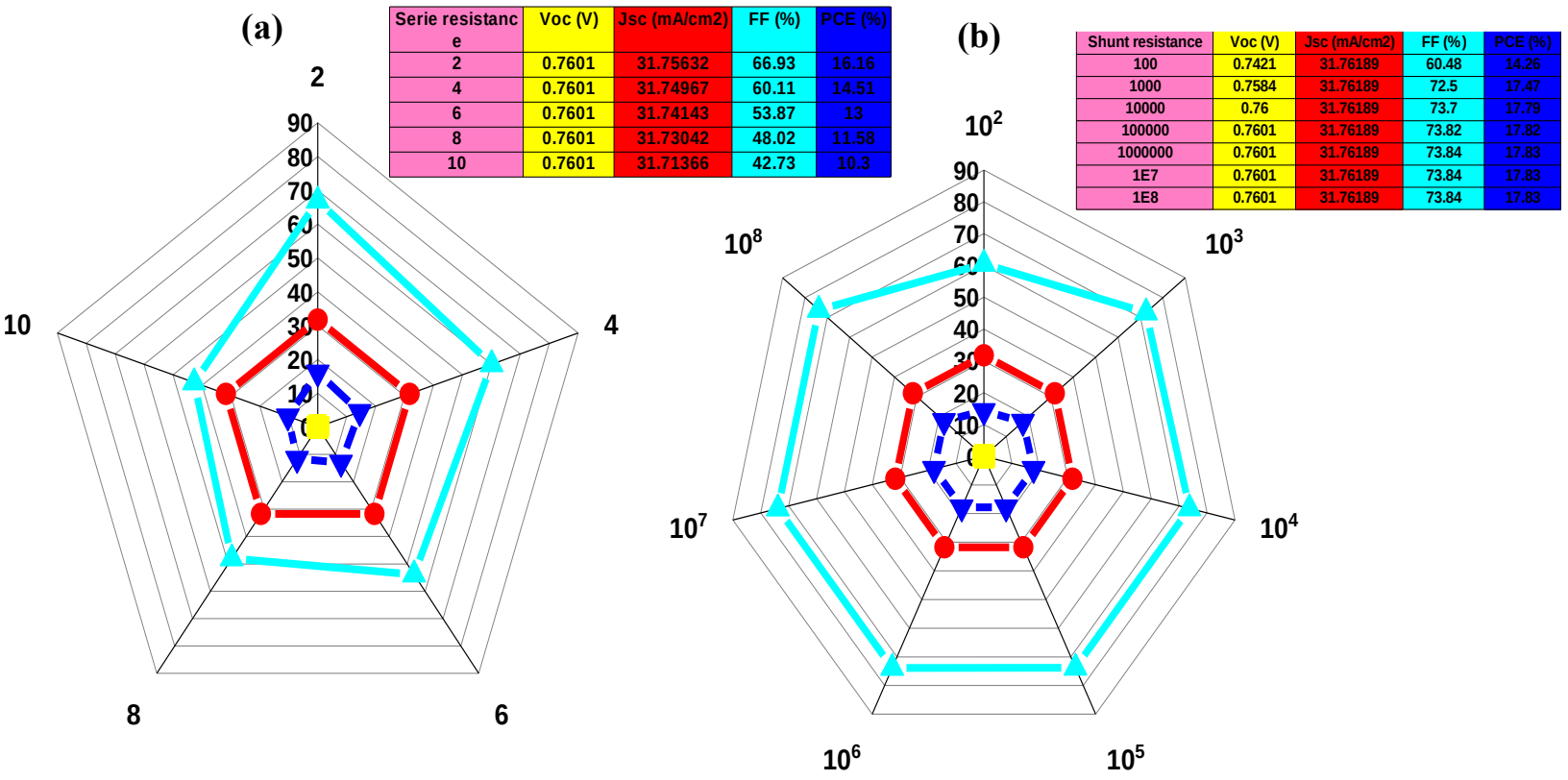


Figure III.7: Influence de la résistance série (Rs) et de la résistance parallèle (Rsh) sur les performances des cellules solaires.

La figure 8 présente les caractéristiques courant-tension (J-V) de la cellule solaire pérovskite pour les structures initiale et optimisée. Les paramètres photovoltaïques correspondants, résumés dans le tableau en encart, révèlent des améliorations significatives après optimisation. La tension en

circuit ouvert (Voc) est passée de 0.89 V à 1.02 V, indiquant une réduction des pertes par recombinaison et une meilleure extraction des charges. La densité de courant de court-circuit (Jsc) a légèrement augmenté, passant de 31,76 mA/cm² à 32,66 mA/cm², reflétant une absorption de la lumière et une efficacité de collecte des porteurs améliorées. Notamment, le facteur de remplissage (FF) a considérablement augmenté, passant de 81.27 % à 87.77 %, ce qui suggère une réduction de la résistance série et une amélioration du transport des charges au sein du dispositif [16]. Par conséquent, le rendement de conversion de puissance (PCE) a fortement augmenté, passant de 23 % à 29.5 %, démontrant que l'optimisation structurelle améliore efficacement les performances photovoltaïques globales. Ces résultats confirment collectivement que la structure optimisée du dispositif offre des caractéristiques électriques supérieures, constituant ainsi une approche prometteuse pour les cellules solaires pérovskites à haut rendement.

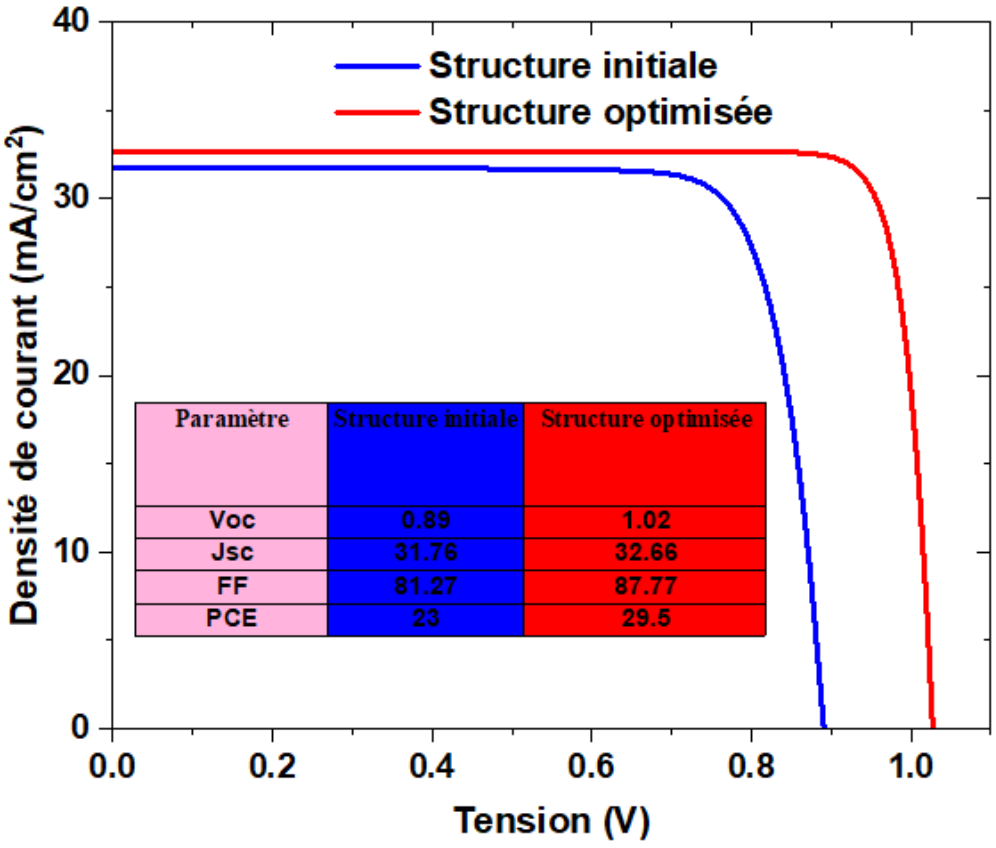


Figure III.8: Mesures comparatives des performances des cellules solaires ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS initiales et optimisées.

Le tableau 3 présente une analyse comparative des performances photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite (PSC) ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS optimisée, par rapport aux architectures de dispositifs précédemment décrites. La structure FTO/CdS/$BaZrS_3$/HTL/Ir présente une densité de courant de court-circuit (Jsc) de 23.46 mA/cm², mais est limitée par un faible facteur de remplissage (FF) de 8.90 %, ce qui se traduit par un rendement de conversion de puissance (PCE) de 18.50 %, principalement en raison d'une extraction de charge inefficace et de pertes par recombinaison élevées. Le dispositif FTO/TiO_2/$MgHfS_3$/Cu_2O/Au affiche des performances améliorées, atteignant une tension en circuit ouvert (Voc) de 1.26 V et un FF élevé de 89.46 %, ce qui lui confère un PCE de 27.61 %, attribué à un transport d'électrons et une collecte de charge efficaces. La configuration FTO/WS_2/$Cs_4CuSb_2Cl_{12}$/$CuSbS_2$/Ni présente une densité de courant de court-circuit (Jsc) de 22.51 mA/cm² et une tension en circuit ouvert (Voc) de 1.16 V, ce qui se traduit par un rendement de conversion de puissance (PCE) modéré de 23.10 %, indiquant la nécessité d'améliorer le transport de charges. Le dispositif ITO/PCBM/pérovskite mixte/$CuSbS_2$/Ag atteint une Jsc de 29.84 mA/cm², une Voc de 1.12 V et un PCE de 28.01 %, reflétant la forte absorption de la pérovskite mixte et un transport de charges efficace. En comparaison, la cellule solaire pérovskite optimisée ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS présente des performances supérieures, avec un Jsc de 32.66 mA/cm², un Voc de 1.02 V, un FF de 87.77 % et un PCE de 29.50 %. Ces performances améliorées sont attribuées aux propriétés optoélectroniques favorables de la double pérovskite sans plomb $Na_2TlGaCl_6$, qui optimisent l'absorption de la lumière et le transport des charges, tandis que le CBTS assure une extraction efficace des trous. L'incorporation d'IGZO comme couche de transport d'électrons réduit davantage les pertes d'énergie, confirmant ainsi que le dispositif optimisé constitue une alternative compétitive, à haut rendement et sans plomb aux cellules solaires pérovskites conventionnelles.

	Jsc(mA/cm²)	**Voc (v)**	**FF (%)**	**PCE (%)**
FTO/CdS/$BaZrS_3$/HTL/Ir	**23.46**	**8.86**	**8.90**	**18.50**
FTO/TiO_2/$MgHfS_3$/Cu_2O/Au	**24.44**	**1.26**	**89.46**	**27.61**
FTO/WS_2/$Cs_4CuSb_2Cl_{12}$/$CuSbS_2$/Ni	**22.51**	**1.16**	**83.33**	**23.10**
ITO/PCBM/mixed perovskite/$CuSbS_2$/Ag	**29.84**	**1.12**	**83.78**	**28.01**
ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$ /CBTS [optimized]	**32.66**	**1.02**	**87.77**	**29.5**

Tableau 3. Comparaison des performances photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS optimisée avec les architectures précédemment décrites.

III.8. Conclusion

Ce chapitre a été consacré à l'étude approfondie, par simulation numérique à l'aide de l'outil SCAPS-1D, des performances d'une cellule solaire à base de pérovskite double sans plomb $Na_2TlGaCl_6$. L'objectif principal était d'identifier et d'optimiser les paramètres physiques et structurels influençant le comportement photovoltaïque du dispositif, en vue d'améliorer son rendement et sa stabilité. L'analyse comparative des différentes couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL) a mis en évidence le rôle déterminant du choix des matériaux dans les performances globales de la cellule. Parmi les matériaux étudiés, l'IGZO s'est révélé comme le meilleur ETL grâce à ses propriétés électroniques favorables et son alignement énergétique optimal avec la couche absorbante, tandis que le CBTS a démontré une supériorité notable en tant que HTL, assurant une extraction efficace des trous et une réduction des pertes par recombinaison.

L'étude de l'épaisseur de la couche absorbante $Na_2TlGaCl_6$ a montré qu'un compromis optimal doit être trouvé entre l'absorption des photons et les phénomènes de recombinaison. Une épaisseur d'environ 1 µm permet d'atteindre un équilibre optimal, garantissant une génération efficace des porteurs tout en limitant les pertes. En parallèle, l'analyse de la densité de défauts a révélé son impact critique sur les performances du dispositif, où une augmentation des défauts entraîne une dégradation drastique du rendement. Par ailleurs, l'influence des épaisseurs des couches de transport a démontré que l'épaisseur du HTL joue un rôle clé dans la limitation des pertes résistives et des recombinaisons, affectant directement le rendement global. L'étude thermique a également confirmé que l'augmentation de la température dégrade significativement les performances, principalement en raison de la diminution de la tension en circuit ouvert (Voc).En outre, l'analyse des résistances série et shunt a démontré que la minimisation de la résistance série et la maximisation de la résistance parallèle sont essentielles pour optimiser le facteur de remplissage (FF) et, par conséquent, le rendement de conversion de puissance (PCE).L'ensemble des optimisations réalisées a permis d'aboutir à une structure optimale ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS, caractérisée par une épaisseur de 0,1 µm pour les couches de transport et de 1 µm pour l'absorbeur, conduisant à un rendement élevé de 29.5 %, avec une amélioration notable de tous les paramètres photovoltaïques (Voc, Jsc et FF). Cette performance positionne cette architecture comme une alternative prometteuse aux cellules solaires pérovskites conventionnelles.

Bibliographie Chapitre III :

[1] Yousfi, A., Saidani, O., Benmakhlouf, A., Helaimia, T., Alsubaie, A. S., Al Ahmed, S. R., & Islam, M. R. (2025). Design and simulation of high efficiency KSnI3 based perovskite solar cells using DFT and SCAPS-1D. Scientific Reports, 15(1), 37022.

[2] Shukla, D., Dixit, A., Shukla, A., Abraham, J. A., Misra, A., Kumari, P., ... & Sharma, R. (2025). Study of physical attributes and optoelectronic devices potential of Na2TlGaZ6 (Z= Cl and I): a DFT investigation. Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design, 8(9), 414.

[3] Yousfi, A., Saidani, O., Belhadad, Y., Zouache, R., Brahimi, A., Bhattarai, S., & Sahoo, G. S. (2026). Leveraging machine learning for the design and optimization of environmentally friendly K2CuCrCl6 perovskite solar cells. Materials Science and Engineering: B, 323, 118697.

[4] Yousfi, A., Saidani, O., Zerrougui, R., Assassi, T., Bhattarai, S., Rahman, M. F., & Sahoo, G. S. (2025). Harnessing machine learning to revolutionize perovskite solar cells: Optimizing RbTmCl3-based photovoltaic performance. Materials Research Bulletin, 113731.

[5] Vaish, S., Dixit, S. K., Saidani, O., Yousfi, A., & Joshi, B. (2026). Enhanced performance of lead-free tandem solar cells with CsSnCl3 perovskites: 44% power conversion efficiency. Next Energy, 11, 100594.

[6] Islam, M. R., Yousfi, A., Islam, S., Saidani, O., Gomha, S. M., Zaki, M. E., & Rana, M. M. (2026). Synergistic First-Principles and SCAPS-1D Study of Halide-Site Engineered Sr_3BiX_3 (X= I, Br, and Cl) Perovskites for Optoelectronic Applications. Chinese Journal of Physics.

[7] Taye, B. Z., Bi, Z., Zhilenkov, A. V., Cao, S., Luo, S., Gutsev, L. G., ... & Xu, X. (2026). Co-passivation of Buried Interfaces in Perovskite Solar Cells with Sulfonate and Amine Salts. The Journal of Physical Chemistry Letters.

[8] Apurba, I. G. G., Islam, M. R., Saidani, O., Bakhsh, F. I., Roy, S., Quraishi, A. M., ... & Rana, M. M. (2026). From Static to Tunable: Strain-Engineered Functional Modulation in Mg3PX3 (X= I, Br, Cl, and F) Inorganic Perovskites Using First-Principles Calculations. Chemical Physics Impact, 101008.

[9] Yousfi, A., Saidani, O., & Elyazid, Z. (2025). Numerical engineering of Double-Absorber Na2AuGaBr6 perovskite solar cells with MPPT-Enhanced efficiency for renewable energy and motor drive systems. Sustainable Energy Technologies and Assessments, 84, 104745.

[10] Sultana, B., Mia, M. M., Farhat, L. B., Brahmia, A., Saidani, O., & Rahman, M. F. (2025). Introducing a Sustainable Novel Double Absorber Perovskite Solar Cell Using CsSnI3 and La2NiMnO6: A Strategy to Achieve 32.73% Efficiency. International Journal of Energy Research, 2025(1), 6693434.

[11] Neupane, K., Bhattarai, S., Deka, N., Alali, A. S., Yousfi, A., Saidani, O., ... & Karamti, H. (2025). Exclusive optimization of Cs2AgBi0. 75Sb0. 25Br6-based solar cells using dual ETL with better photo transmission. Multiscale and Multidisciplinary Modeling, Experiments and Design, 8(9), 390.

[12] Sultana, B., Bakkar, A., Saidani, O., Bhattarai, S., Irfan, A., & Rahman, M. F. (2025). Introducing a sustainable strontium-based double perovskite solar cell exceeding 32% efficiency for advanced solar technology. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 200, 112582.

[13] Kanouni, L., Saidi, L., Yousfi, A., & Saidani, O. (2024). Performance enhancement via numerical modeling and optimization of FASnI3 perovskite solar cell. East European Journal of Physics, (3), 404-415.

[14] Uddin, M. S., Al Mashud, M. A., Toki, G. I., Pandey, R., Zulfiqar, M., Saidani, O., ... & Hossain, M. K. (2024). Lead-free Ge-based perovskite solar cell incorporating TiO2 and Cu2O charge transport layers harnessing over 25% efficiency. Journal of Optics, 53(4), 3726-3742.

[15] Loumachi, L., Yousfi, A., Saidani, O., Alsubaie, A. S., Abed, O., Amiri, S., ... & Islam, M. R. (2024). Strengthen the power conversion efficiency of solar cell based RbGeI3: numerical approach. East European Journal of Physics, (3), 416-424.

[16] Sahoo, G. S., Bhattarai, S., Feddi, E., Verma, M., Rashed, A. N. Z., Saidani, O., & Mishra, G. P. (2024). Unveiling the potential of lead-free Cs2AgBiBr6 (CABB) perovskite for solar cell application. Solar Energy Materials and Solar Cells, 271, 112873.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Ce mémoire propose une stratégie d'optimisation innovante appliquée aux cellules solaires à base de pérovskites doubles sans plomb, en mettant particulièrement en évidence le potentiel du matériau émergent $Na_2TlGaCl_6$. Dans un contexte mondial marqué par la nécessité de développer des technologies énergétiques durables et respectueuses de l'environnement, l'exploration des pérovskites sans plomb constitue une alternative prometteuse aux matériaux conventionnels, souvent limités par leur toxicité et leur instabilité. L'approche adoptée dans ce travail repose sur une modélisation numérique avancée à l'aide du logiciel SCAPS-1D, reconnu pour sa précision dans l'étude des dispositifs photovoltaïques. Cette méthode a permis de simuler de manière détaillée le comportement électrique et optoélectronique de la cellule, tout en offrant la possibilité d'explorer un large éventail de paramètres influençant ses performances. Ainsi, la simulation s'est révélée être un outil puissant pour orienter la conception et l'optimisation des structures photovoltaïques sans recourir immédiatement à des expérimentations coûteuses.

L'architecture étudiée, de type ITO/IGZO/$Na_2TlGaCl_6$/CBTS, repose sur une ingénierie fine des matériaux et des interfaces. Le choix de l'IGZO comme couche de transport d'électrons (ETL) s'est avéré particulièrement judicieux en raison de ses propriétés électroniques favorables, notamment sa mobilité élevée et son alignement énergétique optimal avec la couche absorbante. De son côté, le CBTS a démontré une efficacité remarquable en tant que couche de transport de trous (HTL), contribuant à une extraction efficace des porteurs positifs et à une réduction significative des recombinaisons interfaciales. Cette combinaison a permis d'assurer une gestion optimale des flux de charges au sein du dispositif. Les résultats issus de l'optimisation ont permis d'identifier une configuration optimale caractérisée par une couche ETL en IGZO de 100 nm, une couche absorbante en $Na_2TlGaCl_6$ de 800 nm et une couche HTL en CBTS de 100 nm. Cette structure a conduit à l'obtention d'un rendement de conversion de puissance (PCE) élevé de 30.61 %, reflétant une excellente maîtrise des mécanismes fondamentaux de génération, de transport et de collecte des porteurs de charge. Ces performances positionnent cette architecture parmi les configurations les plus prometteuses dans le domaine des pérovskites sans plomb. En outre, une analyse paramétrique détaillée a permis d'examiner l'influence de plusieurs facteurs clés, tels que l'épaisseur de la couche absorbante, la densité des défauts, les niveaux de dopage et les propriétés des interfaces. Cette étude a mis en évidence le rôle critique des phénomènes de recombinaison, des pertes énergétiques et des résistances parasites dans la limitation des performances. Elle a également permis d'identifier des conditions optimales favorisant un équilibre entre absorption optique, transport des charges et minimisation des pertes.

Conclusion Générale

Les résultats obtenus dans ce mémoire confirment l'importance stratégique de la modélisation numérique dans le développement des technologies photovoltaïques de nouvelle génération. En permettant une compréhension approfondie des mécanismes physiques et une optimisation fine des paramètres du dispositif, cette approche constitue un levier essentiel pour la conception de cellules solaires à haut rendement, stables et potentiellement industrialisables. Enfin, les perspectives ouvertes par ce travail sont nombreuses. Il apparaît indispensable de valider expérimentalement les résultats obtenus par simulation afin de confirmer la faisabilité pratique de la structure proposée. Par ailleurs, l'exploration d'autres matériaux de pérovskites doubles sans plomb, l'amélioration de la stabilité à long terme des dispositifs, ainsi que l'étude de leur comportement sous des conditions réelles de fonctionnement (température, humidité, éclairement variable) constituent des axes de recherche prioritaires.