

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

Faculté des Sciences et de la technologie

Département de Génie mécanique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Génie mécanique

Spécialité : Génie des matériaux

Par

➤ **ABBAS MERIEM**

➤ **MAARAF AMANI**

Intitulé

Optimisation du rendement d'une cellule solaire perovskite
TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI : Effet du coefficient d'absorption des phases
cristallines (MAPbI₃)

Soutenu le :28/06/2026

Devant le Jury composé de :

Nom & Prénom	Grade	Qualité	Etablissement
Pr. Rouabah Zohir	Pr	Président	Univ-BBA
Dr. Slimani Wahiba	MCA	Encadreur	Univ-BBA
Dr. Bentoumi Mohammed	MCA	Examineur	Univ-BBA
Dr. Mechta Ahlam	MCB	Examineur	Univ-BBA

Année Universitaire 2025/2026

Remerciements

Avant tout, nous remercions Allah le Tout-Puissant de nous avoir donné la force, la patience et le courage pour mener ce travail à terme.

Nous adressons nos sincères remerciements à notre encadrante pour son accompagnement, ses précieux conseils et son soutien tout au long de la réalisation de ce mémoire.

Nous remercions également les membres du jury pour l'honneur qu'ils nous font en acceptant d'évaluer ce travail.

Nos remerciements s'adressent aussi à tous nos enseignants qui ont contribué à notre formation universitaire.

Enfin, nous exprimons notre profonde gratitude à nos familles ainsi qu'à toutes les personnes qui nous ont soutenus et encouragés durant ce parcours.

Merci à tous

Dédicace



Louange à Dieu qui a transformé la fatigue en joie et la patience en une belle réussite. Ce parcours n'a pas été facile, mais il a été rempli d'espoir et d'une grande foi que Dieu n'abandonne jamais un cœur qui lutte et persévère.

Je dédie cette réussite à mes chers parents, avec tout mon amour et ma gratitude.

Que Dieu vous protège et vous garde comme une bénédiction dans ma vie

À mes chers frères et à mes belles-sœurs, merci pour votre gentillesse et pour chaque belle parole.

À mes petits neveux, propriétaires des sourires qui changeaient mon humeur et semaient la joie dans mon cœur.

Je dédie également cette réussite à moi-même ;

à moi-même qui a supporté beaucoup de choses en silence et qui a continué malgré la fatigue, la peur et la pression.

À moi-même qui se relevait à chaque fois et croyait que les grands rêves nécessitent un cœur patient qui ne renonce jamais.

Cette réussite est le fruit de longues nuits, de nombreuses prières et d'une patience que personne n'a vue.

Je suis très fière de moi, parce que j'ai réussi malgré tout, et parce que j'ai toujours été plus forte que ma fatigue et plus grande que chaque moment où je pensais ne plus pouvoir continuer.

Enfin, merci à toutes les personnes qui m'ont soutenue par une parole bienveillante, une prière sincère ou même un sourire qui a allégé mon chemin.

Et à tous ceux qui ont laissé une belle trace dans ma vie, merci du fond du cœur



Meriem

*D*édicace



Louange à Allah qui m'a accordé la réussite pour accomplir ce modeste travail.

Je dédie le fruit de mes efforts à la mémoire de mon cher défunt, qu'Allah lui accorde Sa miséricorde infinie, illumine sa tombe et lui ouvre les portes du Paradis.

À ma chère mère, source de tendresse, de patience et de prières, qui a toujours été mon soutien dans chaque étape de ma vie. Qu'Allah la protège et lui accorde une longue vie.

À mes chers frères et sœurs, pour leur soutien et leurs encouragements permanents.

À mon cher mari, qui m'a apporté force, réconfort et sérénité tout au long de cette période. Je lui adresse mes plus sincères remerciements et toute ma reconnaissance.

Je dédie également ce travail à ma belle-famille, en témoignage de mon estime et de ma gratitude pour leur soutien et leur bienveillance.

Enfin, à toutes les personnes qui ont contribué de près ou de loin à la réalisation de ce travail.

Je vous dédie ce travail avec tout mon amour et ma profonde gratitude.

مبارك



Amani

Résumé

Dans ce travail, une étude numérique a été menée sur la cellule solaire à pérovskite de structure TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI, à l'aide du logiciel SCAPS-1D, afin d'étudier l'influence du coefficient d'absorption des phases cristallines du Triiodure de plomb et de Méthyl ammonium (MAPbI₃) sur ses performances. Une modélisation de la structure étudiée a été effectuée sous conditions standards d'illumination (AM1.5G, 1000 W/m² et 300 K), avec une variation du coefficient d'absorption des phases cristallines du MAPbI₃ : Phase Cubique, Phase Tétraгонаle et Phase Orthorhombique, pour analyser les performances photovoltaïques obtenues. Les résultats montrent la phase cubique présente les meilleures performances grâce à son absorption élevée, permettant l'amélioration de la densité de courant de court-circuit J_{sc}, du facteur de forme FF, de la tension en circuit ouvert V_{oc} et le rendement de conversion η . De plus, l'optimisation de cette structure a montré une amélioration proportionnelle des performances photovoltaïques avec l'augmentation de l'épaisseur de MAPbI₃. Le rendement maximal théorique obtenu pour la phase cubique est de 27.31% pour une épaisseur égale à 1200 nm, tandis que la phase tétraгонаle a donné un rendement de 23.53%. La phase orthorhombique se classe la troisième avec un rendement de 20.75% ; Les résultats obtenus confirment l'importance des propriétés cristallines et géométriques de la couche absorbante pour l'amélioration des performances des cellules solaires à pérovskite à base de MAPbI₃.

Mots clés : Cellule solaire à pérovskite à base de MAPbI₃, TiO₂, CuI, SCAPS-1D, coefficient d'absorption, phases cristallines du MAPbI₃, rendement photovoltaïque.

Abstract

In this work, a numerical study was conducted on a perovskite solar cell with a TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI structure, using SCAPS-1D software, to investigate the influence of the absorption coefficient of the crystalline phases of lead methylammonium triiodide (MAPbI₃) on its performance. Modeling of the studied structure was performed under standard illumination conditions (AM1.5G, 1000 W/m² and 300 K), with variations of the MAPbI₃ absorption coefficient crystalline phases: Cubic Phase, Tetragonal Phase, and Orthorhombic Phase, to analyze the resulting photovoltaic performance. The results show that the cubic phase exhibits the best performance due to its high absorption, allowing for improvements in: short-circuit current density (J_{sc}), form factor (FF), open-circuit voltage (V_{oc}), and conversion efficiency (η). Furthermore, optimization of this structure showed a proportional improvement in photovoltaic performance with increasing MAPbI₃ thickness. The maximum theoretical efficiency obtained for the cubic phase was 27.31% at a thickness of 1200 nm, while the tetragonal phase yielded 23.53%. The orthorhombic phase ranked third with an efficiency of 20.75%. These results confirm the importance of the crystalline and geometric properties of the absorption layer for improving the performance of MAPbI₃-based perovskite solar cells.

Keywords: MAPbI₃-based perovskite solar cell, TiO₂, CuI, SCAPS-1D, absorption coefficient, MAPbI₃ crystalline phases, photovoltaic efficiency.

في هذ البحث، أُجريت دراسة عددية على خلية شمسية من نوع البيروفسكايت ذات بنية $\text{TCO}/\text{TiO}_2/\text{MAPbI}_3/\text{CuI}$ ، باستخدام برنامج SCAPS-1D ، للتحقق من تأثير معامل امتصاص الأطوار البلورية لثلاثي يوديد ميثيل أمونيوم الرصاص (MAPbI_3) على أدائها. تمت محاكاة البنية المدروسة في ظل ظروف إضاءة قياسية (AM1.5G) ، 1000 واط/م^2 و 300 كلفن)، مع تغيير معامل امتصاص الأطوار البلورية لـ MAPbI_3 الطور المكعب، والطور الرباعي، والطور المعيني القائم، لتحليل الأداء الكهروضوئي الناتج. أظهرت النتائج أن الطور المكعب يُظهر أفضل أداء نظرًا لامتناعه العالي، مما يسمح بتحسينات في: كثافة تيار الدائرة القصيرة (J_{sc}) ، وعامل الشكل (FF) ، وجهد الدائرة المفتوحة (V_{oc})، وكفاءة التحويل (η) علاوة على ذلك، أظهر تحسين هذا التركيب تحسنًا متناسبًا في أداء الخلايا الكهروضوئية مع زيادة سُمك طبقة MAPbI_3 . بلغت الكفاءة النظرية القصوى المحققة للطور المكعب 27.31% عند سُمك 1200 نانومتر ، بينما حقق الطور الرباعي 23.53% . وجاء الطور المعيني القائم في المرتبة الثالثة بكفاءة 20.75% . تؤكد هذه النتائج أهمية الخصائص البلورية والهندسية لطبقة الامتصاص في تحسين أداء الخلايا الشمسية البيروفسكيتية القائمة على MAPbI_3 .

الكلمات المفتاحية: خلية شمسية بيروفسكيتية قائمة على MAPbI_3 ، CuI ، TiO_2 ، SCAPS-1D ، معامل الامتصاص، الأطوار البلورية لـ MAPbI_3 ، الكفاءة الكهروضوئية.

Nomenclatures

Abréviation	Signification
PV	Photovoltaïque
PSC	Pérovskite Solar Cell
TCO	Transparent Conductive Oxide
TiO₂	Dioxyde de titane
MAPbI₃	Méthyl ammonium plomb iodure
CuI	Iodure de cuivre
SCAPS	Solar Cell Capacitance Simulator
HTL	Hole Transport Layer
ETL	Electron Transport Layer
PCE	Power Conversion Efficiency
FF	Fill Factor
Voc	Tension en circuit ouvert
Jsc	Densité du courant de court-circuit

EQE	External Quantum Efficiency
AM1.5G	Air Mass 1.5 Global
eV	Électron-volt
nm	Nanomètre
μm	Micromètre
α	Coefficient d'absorption
Nt	Densité des défauts
σ_n	Section efficace de capture des électrons
σ_p	Section efficace de capture des trous
CB	Bande de conduction
VB	Bande de valence
Eg	Gap énergétique

Liste De Figures

Figure 1 : Illustration des signaux Solaires et leurs spectres	4
Figure 2 : -a- Schéma électronique d'une jonction p-n photovoltaïque. -b- Diagramme énergétique	6
Figure 3 : Courbe J-V typique d'une cellule solaire indiquant J_{sc} , V_{oc} , les points de puissance maximale (MPP) du courant et de tension.....	8
Figure 4 : Évolution des rendements des principales technologies photovoltaïques en fonction des années de développement.....	9
Figure 5 : Schéma des niveaux d'énergie et des mécanismes de transfert de charge dans une cellule solaire à base de MAPbI ₃	10
Figure 6 : Vue en coupe simulatrice d'une cellule solaire à pérovskite utilisant une couche de transport de trous (CuI), et couche de transport d'électrons (TiO ₂)	15
Figure 7 : Les phases thermodynamique du MAPbI ₃ : a- Cubique, b- Tétraogonale, c- Orthorhombique	17
Figure 8 : Niveaux d'énergie et des processus de transfert des porteurs de charge dans une cellule solaire à pérovskite : (a) processus souhaitables d'extraction des charges ; (b) processus indésirables de recombinaison : r_1 : Recombinaison dans le volume, r_2 : Recombinaison à l'interface HTL / Pérovskite, r_3 : Recombinaison à l'interface ETL / Pérovskite, r_4 : Recombinaison interfaciale directe HTL / ETL	20
Figure 9 : Illustration des porteurs dans la cellule solaire pérovskite, mettant en évidence la recombinaison des porteurs induite par les défauts de volume et d'interface (flèches bleues) possédant des états de bande interdite	21
Figure 10 : Zones de paramétrage dans l'interface d'accueil du logiciel SCAPS-1D : 1- Etablir les couches et les interfaces et les propriétés des contacts, 2- Point de fonctionnement et éclairage, 3- Caractéristiques électriques, 4- Méthodes de calcul. 5- Résultats	24

Figure 11 : Structure de la cellule solaire TCO / TiO ₂ / MAPbI ₃ / CuI sous SCAPS-1D.....	25
Figure 12 : Paramètres des défauts introduits dans la couche MAPbI ₃ sous SCAPS-1D	28
Figure 13 : Spectres d'absorptions du MAPbI ₃ en fonction de la longueur d'onde pour différentes phases cristallines	30
Figure 14 : Extraction des valeurs du coefficient d'absorption à l'aide de WebPlotDigitizer.....	31
Figure 15 : Courbe J-V (coefficient d'absorption du MAPbI ₃ calculé par SCAPS)	32
Figure 16 : Courbe J-V avec coefficient d'absorption du MAPbI ₃ , la phase tétragonale.....	33
Figure 17 : Courbe J-V avec le coefficient d'absorption de la phase cubique.....	34
Figure 18 : Courbe J-V avec le coefficient d'absorption du MAPbI ₃ de la phase orthorhombique	35
Figure 19 : Configuration du mode Batch et variation de l'épaisseur dans SCAPS-1D.....	37
Figure 20 : Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase cubique)	38
Figure 21 : Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase tétragonale)	39
Figure 22 : Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase orthorhombique)	40
Figure 23 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase cubique) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire.....	42
Figure 24 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase tétragonale) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire.....	43
Figure 25 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI ₃ (phase orthorhombique) sur les performances photovoltaïques.....	44

Liste du tableau

Tableau 1: Avantages de l'énergie solaire photovoltaïque	5
Tableau 2 : Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque.....	8
Tableau 3 : Comparaison entre différentes technologies photovoltaïques	9
Tableau 4: Principaux avantages des cellules à pérovskite	12
Tableau 5 : Fonctions des couches de la structure étudié	15
Tableau 6 : Comparaison de quelques matériaux TCO	16
Tableau 7 : Résumé des transitions de phase	18
Tableau 8 : Avantages de CuI comme couche HTL	19
Tableau 9 : Niveaux d'énergie des couches de la cellule perovskite	19
Tableau 10 : Paramètres physiques utilisés dans SCAPS	26
Tableau 11 : Paramètres des défauts introduits dans les différentes couches de la structure étudiée.....	27
Tableau 12 : Conditions de simulation.....	28
Tableau 13 : Caractéristiques du Webplotdigitizer	30
Tableau 14 : Comparaison des performances photovoltaïques des différentes phases cristallines du MAPbI ₃	36
Tableau 15 : Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI ₃ (phase cubique)	40
Tableau 16 : Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI ₃ (phase tétragonale)	41
Tableau 17 : Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI ₃ (phase orthorhombique)	41

Table des matières

Introduction Générale	1
------------------------------------	----------

Chapitre 1 : Généralités sur les cellules solaires

1.1 Introduction à l'énergie solaire	4
1.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	5
1.3 Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque	7
1.3.1 Densité de courant de court-circuit (J_{sc})	7
1.3.2 Tension en circuit ouvert (V_{oc}).....	7
1.3.3 Facteur de forme (FF)	7
1.3.4 Rendement de conversion (η)	8
1.4 Types de cellules solaires	9
1.5 Cellules solaires à base de pérovskite	10
1.6 Conclusion	12

Chapitre 2 : Structure étudiée TCO /TiO₂/ MAPbI₃ / CuI

2.1 Introduction	14
2.2 Présentation générale de la structure étudiée.....	14
2.3 Couche TCO (Transparent Conductive Oxide)	15
2.4 Couche TiO ₂ comme ETL	16
2.5 Couche absorbante MAPbI ₃	16
2.6 Couche CuI comme HTL	18
2.7 Alignement énergétique de la structure.....	19
2.8 Mécanisme de fonctionnement.....	20
2.9 Facteurs limitant les performances	21
2.10 Conclusion	21

Chapitre 3 : Modélisation et optimisation d'une cellule solaire TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI par SCAPS-1D

3.1 Introduction	23
3.2 Présentation du logiciel SCAPS-1D.....	23
3.3 Introduction des paramètres de la cellule pérovskite	25
3.4 Paramètres physiques de la simulation.....	26
3.5 Paramètres des défauts utilisés dans SCAPS-1D	27
3.6 Conditions de simulation	28
3.7 Méthodologie de simulation	29
3.8 Importance du coefficient d'absorption	29
3.9 Extraction des données des coefficients d'absorption par WebPlotDigitizer	30
3.10 Résultats et discussion.....	31
3.10.1 Comparaison des résultats	36
3.11 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI ₃	36
3.11.1 Configuration du mode 'Batch' dans SCAPS-1D.....	36
3.11.2 Tableau récapitulatif	40
3.11.3 Courbes de performances	42
3.11.4 Interprétation des résultats.....	44
3.11.5 Conclusion	45
Conclusion générale.....	47
Références	49
ANNEXES.....	51

Introduction Générale

L'accroissement continu de la population mondiale, suivi de la croissance industrielle et technologique, a entraîné une augmentation considérable de la demande en énergie durant les dernières décennies. Cette demande a été généralement comblée par l'exploitation des sources fossiles. Cependant, ces ressources sont limitées et leur utilisation génère d'importantes émissions de gaz à effet de serre, provoquant le réchauffement climatique et de sérieuses dégradations environnementales [1]

Face à ces contraintes énergétiques et environnementales, la recherche de ressources énergétiques durables et renouvelables est devenue un enjeu mondial. Parmi les différentes alternatives exploitées, l'énergie solaire occupe une place privilégiée grâce à son abondance et ses faibles nuisances écologiques. L'énergie solaire reçue par la Terre dépasse abondamment les besoins énergétiques globaux actuels, ce qui en fait une ressource importante pour l'avenir [2]

Des dispositifs photovoltaïques, fondés sur l'effet photovoltaïque, peuvent assurer la conversion directe du rayonnement solaire en électricité, ce phénomène se base sur l'absorption des photons par un matériau semi-conducteur, ce qui provoque l'excitation des électrons de la bande de valence vers la bande de conduction et la création de paires électron-trou, leur collecte aux électrodes génère le courant électrique désiré [3]

Les cellules photovoltaïques à base de silicium cristallin dominent le marché mondial grâce à leur stabilité depuis de longues années, grâce à leurs performances satisfaisantes. Néanmoins, leur réalisation sollicite des procédés complexes, énergivores et chers, particulièrement en raison de la pureté indispensable du matériau et des hautes températures nécessaires lors de leur fabrication. Ces obligations ont poussé le déploiement de technologies photovoltaïques plus rentables et plus flexibles [4]

Les cellules solaires pérovskites ont éveillé un intérêt scientifique considérable grâce à leurs rendements qui ont montré une progression rapide, où il a atteint des valeurs très élevées

dans des conditions théoriques et même validées expérimentalement. Cette évolution marquante est reconnue par les propriétés optiques et électroniques remarquables des matériaux pérovskites, telles que la forte absorption, la bonne mobilité des porteurs de charge, la grande longueur de diffusion et la faible énergie de liaison [5] [6]

Le triiodure de plomb et de méthyl ammonium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$), fréquemment noté par « MAPbI_3 », est l'un des substances les plus étudiées de cette famille. Il présente un gap énergétique direct compris entre 1,5 et 1,6 eV, valeur proche de la limite théorique pour l'absorption du spectre solaire visible. Grâce à son coefficient d'absorption élevé, Une fine épaisseur de ce matériau absorbe une grande quantité de la lumière, un atout primordial pour réaliser des cellules photovoltaïques efficaces et économiques [6].

Son simple procédé de fabrication est un autre avantage important pour des cellules solaires à pérovskite, il peut être fabriqué à basse température par des procédés partiellement simples tels que le spin-coating, l'impression ou procédés en solution. Ce qui permet l'élaboration de cellules solaires légers, flexibles et éventuellement moins chères [5]

Les défis limitant leur diffusion à grande échelle sont : la stabilité et la sensibilité à l'humidité, à l'oxygène, à la chaleur et aux rayonnements ultraviolets. Ces facteurs entraînent un changement des propriétés optiques (coefficient d'absorption) une dégradation graduelle du matériau et une réduction des performances au cours du temps [7]. La recombinaison des porteurs avant d'être collectés aux électrodes, soit dans le volume du matériau actif, soit aux interfaces entre les différentes couches pose aussi un problème. La réduction de ces pertes est donc un axe essentiel pour l'amélioration du rendement des cellules photovoltaïques [8].

La température en particulier a un grand impact sur le matériau pérovskite MAPbI_3 , il présente plusieurs phases cristallographiques selon le niveau de température atteint, en cours de fonctionnement, on cite trois phases très connues : la phase cubique, la phase tétragonales et la phase orthorhombique, et chaque'une présente un coefficient d'absorption différent de l'autre,

Dans ce contexte, on a étudié dans ce mémoire la structure : $\text{TCO}/\text{TiO}_2/\text{MAPbI}_3/\text{CuI}$ qui représente une configuration simple et prometteuse. La couche TCO (Transparent Conductive Oxide) prise comme électrode transparente permet le passage de la lumière incidente. Le matériau pérovskite MAPbI_3 est l'absorbant principal, les couches CuI et TiO_2 sont les couches de transport des trous (HTL) et de transport des électrons (ETL) respectivement, leur

rôle est de faciliter l'extraction des porteurs et la contribuer à la réduction des recombinaisons [9].

L'objectif de ce mémoire est d'étudier, à l'aide du logiciel SCAPS-1D, l'effet de ces coefficients d'absorption sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire à pérovskite TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI, notamment le courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η), afin de déterminer les conditions optimales du bon fonctionnement.

Ce manuscrit est devisé en trois chapitres :

Le premier chapitre établit les bases théoriques du photovoltaïque, tandis que le deuxième chapitre détaille la structure et l'alignement énergétique de la cellule solaire pérovskite choisie. Le troisième chapitre se concentre sur les résultats de simulation, comparant les rendements donnés en intégrant les coefficients d'absorption des différentes phases cristallographique du MAPbI₃ : Tétragonale, Cubique et Orthorhombique.

Une optimisation est exécutée sur les trois structures pour savoir l'effet de l'épaisseur de la couche absorbante, sur leurs performances, et enfin ce manuscrit se terminera par une conclusion générale. Un annexe est ajouter à la fin de ce mémoire pour exposé les coefficients d'absorbions des différente phases cristalline du MAPbI₃, intégrés dans cet étude, pouvant servir la communauté scientifique.

Chapitre 1 :

Généralités sur les cellules solaires

Sommaire

1.1 Introduction à l'énergie solaire	4
1.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque	6
1.3 Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque	9
1.3.1 Densité de courant de court-circuit (J_{sc})	9
1.3.2 Tension en circuit ouvert (V_{oc})	9
1.3.3 Facteur de forme (FF)	9
1.3.4 Rendement de conversion (η)	10
1.4 Types de cellules solaires	11
1.5 Cellules solaires à base de pérovskite	13
1.6 Conclusion	15

1.1 Introduction à l'énergie solaire :

L'énergie solaire provenant du rayonnement électromagnétique émis par le Soleil est le résultat des réactions de fusion nucléaire se produisant en son cœur. Ces réactions libèrent une grande énergie se propageant sous forme d'ondes électromagnétiques dans l'univers. Une partie de ce rayonnement atteint la Terre après avoir traversé l'atmosphère [1]

L'énergie solaire est la principale source naturelle disponible sur Terre. Elle a un impact direct ou indirect dans plusieurs phénomènes naturels, tels que les cycles climatiques, la photosynthèse, les vents...etc. Son exploitation technologique représente donc une solution durable face à l'épuisement progressif des ressources fossiles [1,2].

La puissance solaire reçue est caractérisée par la constante solaire, dont la valeur moyenne est d'environ 1361 W/m^2 , l'irradiance standard utilisée pour évaluer des dispositifs photovoltaïques est généralement de 1000 W/m^2 sous le spectre AM1.5. La quantité réellement reçue à la surface du sol dépend de plusieurs facteurs, notamment la position géographique, la saison, l'heure de la journée, les conditions météorologiques, l'angle d'incidence des rayons solaires ainsi que l'absorption et la diffusion atmosphérique [2].

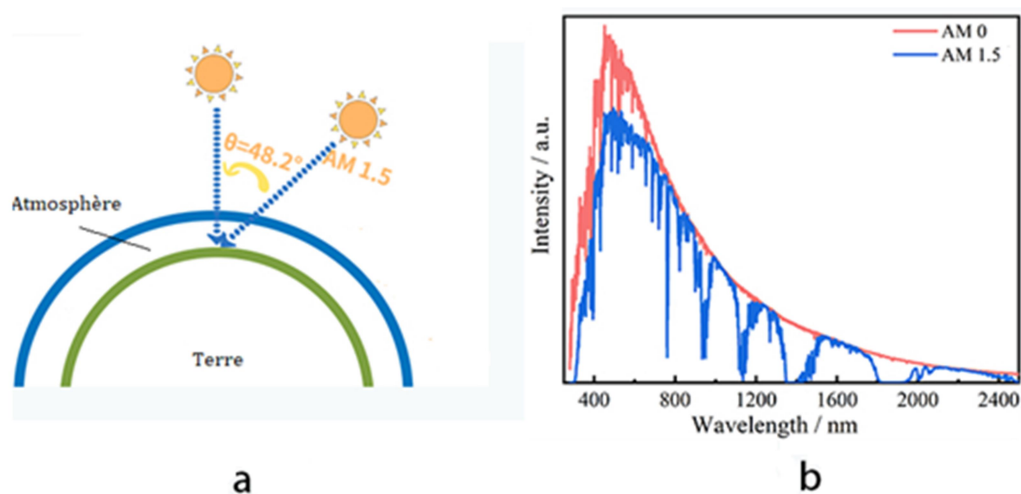


Figure 1 : Illustration des signaux Solaires et leurs spectres [10] .

L'énergie solaire peut être exploitée selon deux voies principales :

a) Conversion thermique : elle consiste à transformer le rayonnement solaire en chaleur utilisée pour le chauffage, la production d'eau chaude sanitaire ou la génération d'électricité dans les centrales solaires thermodynamiques.

b) Conversion photovoltaïque : elle consiste à convertir directement la lumière en électricité à l'aide de matériaux semi-conducteurs.

Cette technologie présente plusieurs avantages :

- Absence de bruit ;
- Faible maintenance ;
- Modularité des installations ;
- Absence d'émissions directes durant le fonctionnement ;
- Adaptation aux sites isolés.

Ces dernières années, le photovoltaïque a connu une expansion remarquable à l'échelle mondiale grâce aux progrès technologiques, à l'amélioration des rendements et à la réduction des coûts de fabrication. Il représente aujourd'hui un pilier majeur de la transition énergétique internationale [4].

Tableau 1 : Avantages de l'énergie solaire photovoltaïque.[4]

Avantage	Description
Renouvelable	Source disponible à long terme
Propre	Très faibles émissions polluantes durant l'exploitation
Silencieuse	Fonctionnement sans bruit
Modulaire	Installation de petite ou grande puissance
Maintenance réduite	Entretien limité

1.2 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Une cellule photovoltaïque est un dispositif capable de convertir l'énergie lumineuse en énergie électrique. Son fonctionnement repose sur l'effet photovoltaïque, lorsqu'un matériau absorbe des photons d'énergie suffisante supérieure ou égale au gap énergétique du semi-conducteur (E_g), il peut transférer son énergie à un électron de la bande de valence. Cet électron passe alors vers la bande de conduction, laissant derrière lui un trou. Il se forme ainsi une paire électron-trou [5]

Pour produire un courant électrique exploitable, ces porteurs de charge doivent être séparés et collectés avant leur recombinaison. Cette séparation est assurée par un champ électrique interne créé au niveau de la jonction ou des interfaces sélectives.

Donc les étapes principales de la génération de l'électricité d'une cellule solaire sont les suivantes :

1. Absorption des photons par la couche active.
2. Génération des paires électron-trou.
3. Séparation des charges.
4. Transport des porteurs vers les électrodes.
5. Collecte des charges et alimentation du circuit externe [4,5].

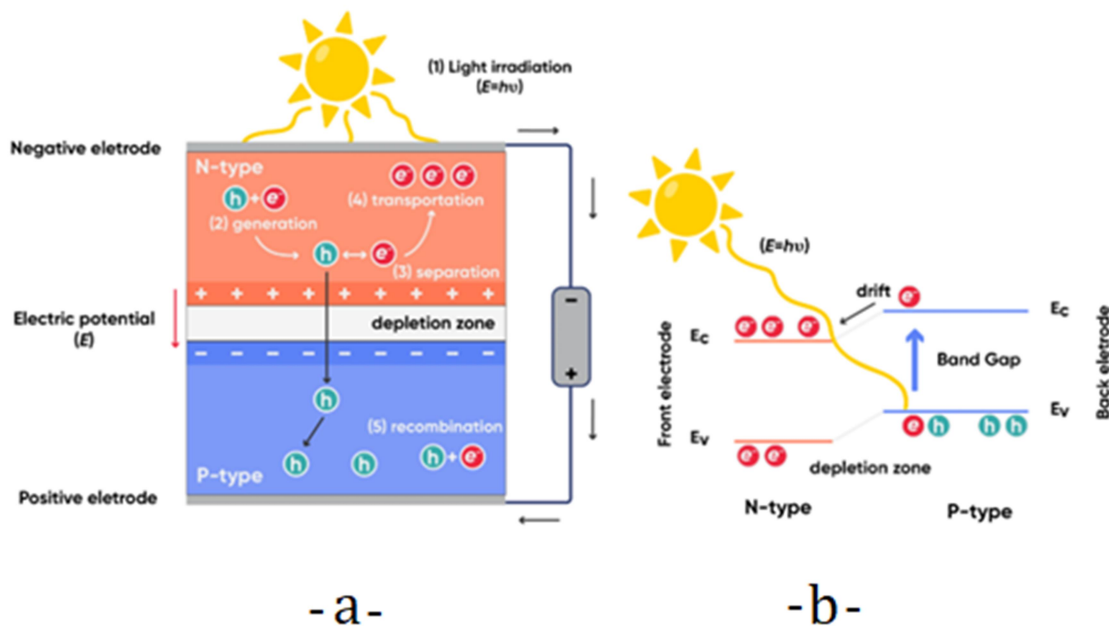


Figure 2 : -a- Schéma électronique d'une jonction p-n photovoltaïque. -b- Diagramme énergétique [11].

Les principales pertes limitant les performances sont :

- Réflexion d'une partie de la lumière incidente ;
- Recombinaison des porteurs de charge ;
- Résistances parasites ;

- Défauts cristallins ;
- Mauvaise qualité des interfaces ;
- Échauffement du dispositif.

L'amélioration des cellules photovoltaïques consiste donc à maximiser l'absorption lumineuse, à favoriser l'extraction des charges et à minimiser les pertes internes. [4, 5, 6].

1.3 Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque

Les performances d'une cellule solaire sont généralement évaluées à partir de sa caractéristique courant-tension (J-V) sous un éclairement standard (AM1.5, 1000 W/m², 25 °C). Cette courbe permet de déterminer les principaux paramètres électriques du dispositif : la densité de courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η) [6].

1.3.1 Densité de courant de court-circuit (J_{sc}) :

La densité de courant de court-circuit correspond au courant délivré par la cellule lorsque la tension est nulle (V = 0). Elle dépend principalement de l'absorption lumineuse, de l'épaisseur de la couche active, de la génération des porteurs de charge et des pertes par recombinaison [6]

1.3.2 Tension en circuit ouvert (V_{oc})

La tension en circuit ouvert est la tension maximale obtenue lorsque le courant est nul (J = 0). Elle est influencée par les recombinaisons internes, la qualité des interfaces et les propriétés énergétiques du matériau absorbant [5]

1.3.3 Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme représente la qualité de la courbe J-V et s'exprime par la relation [6] :

$$FF = \frac{(J_{MP} \times V_{MP})}{(J_{sc} \times V_{oc})} \quad (1)$$

JMP et VMP désignent respectivement la densité de courant et la tension d'une cellule photovoltaïque au point du rendement maximale.

Une valeur élevée du FF indique de faibles pertes résistives et un bon comportement électrique global de la cellule.

1.3.4 Rendement de conversion (η)

Le rendement correspond au rapport entre la puissance électrique maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente [6]:

$$\eta = \frac{(V_{oc} \times J_{sc} \times FF)}{P_{incidente}} \quad (2)$$

$P_{incidente}$: Puissance incidente.

Il constitue le paramètre global le plus utilisé pour comparer les performances des cellules photovoltaïques.

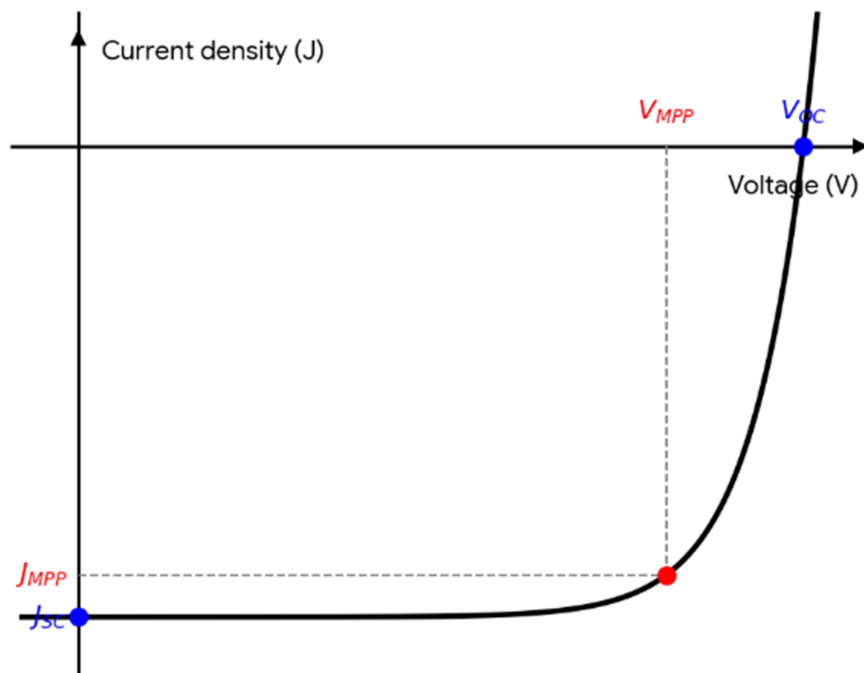


Figure 3: Courbe J-V typique d'une cellule solaire indiquant J_{sc} , V_{oc} , les points de puissance maximale (MPP) du courant et de tension. [12]

Tableau 2 : Paramètres électriques d'une cellule photovoltaïque [12].

Paramètre	Symbole	Unité	Description
Courant de court-circuit	J_{sc}	mA/cm^2	Courant maximal à $V = 0$
Tension en circuit ouvert	V_{oc}	V	Tension maximale à $J = 0$
Facteur de forme	FF	%	Qualité de la courbe J-V
Rendement	η	%	$\frac{\text{Energie lumineuse}}{\text{Energie électrique}}$

1.4 Types de cellules solaires :

Les cellules photovoltaïques sont généralement classées en trois générations principales selon les matériaux utilisés et les procédés de fabrication [6] :

- Première génération : cellules au silicium cristallin (monocristallin et polycristallin) ;
- Deuxième génération : cellules en couches minces (CdTe, CIGS, a-Si) ;
- Troisième génération : technologies émergentes (pérovskites, organiques, tandem, points quantiques) [7]

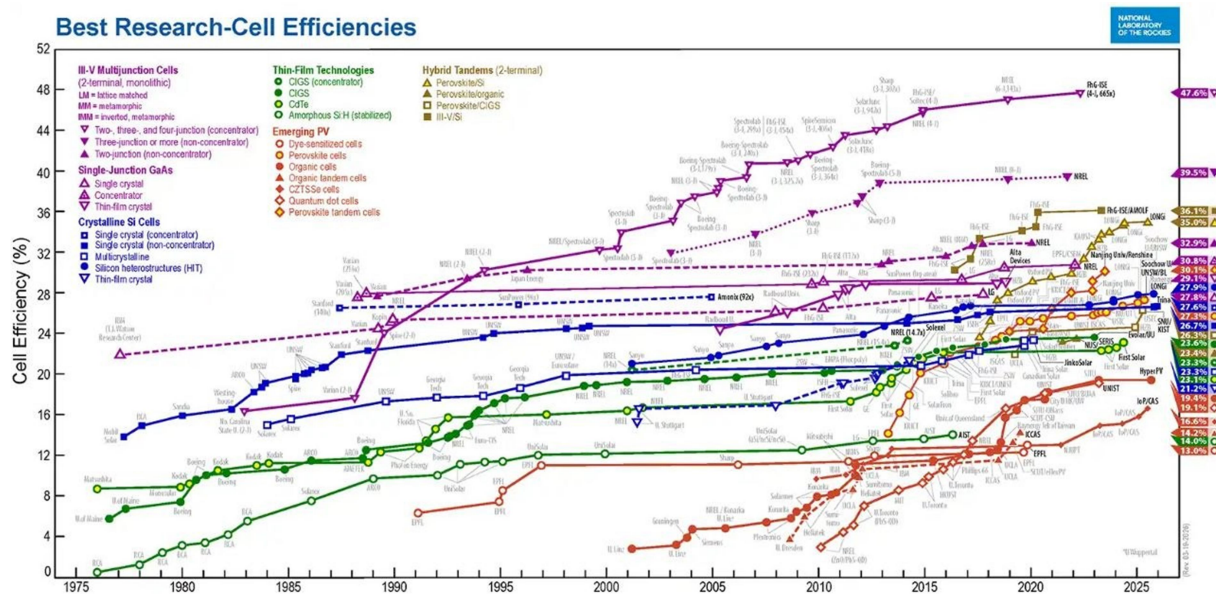


Figure 4 : Évolution des rendements des principales technologies photovoltaïques en fonction des années de développement [13].

Tableau 3 : Comparaison entre différentes technologies photovoltaïques [6,7].

Technologie	Rendement (%)	Avantages	Limites
Si monocristallin	18–26	Haute stabilité	Coût élevé
Si polycristallin	15 – 22	Coût modéré	Rendement plus faible
Couches minces	10–20	Faible consommation de matière	Durabilité variable
Pérovskites	20 – 26+	Faible coût potentiel, haut rendement	Stabilité limitée
Tandem	>30	Très haute efficacité	Complexité technologique

1.5 Cellules solaires à base de pérovskite

Les cellules solaires à pérovskite représentent une technologie émergente très prometteuse. Elles utilisent des matériaux de structure cristalline ABX_3 , parmi lesquels le MAPbI_3 ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) qui est l'un des composés les plus étudiés en photovoltaïque [6][8]

Ce matériau se distingue par [8] :

- Un fort coefficient d'absorption ;
- Un gap énergétique favorable ;
- Une bonne mobilité des porteurs de charge ;
- Des procédés de fabrication simples ;
- Un potentiel de faible coût industriel

Dans une structure standard, la couche absorbante de pérovskite est placée entre une couche de transport d'électrons (ETL) et une couche de transport de trous (HTL), assurant une extraction efficace des charges photogénérées.

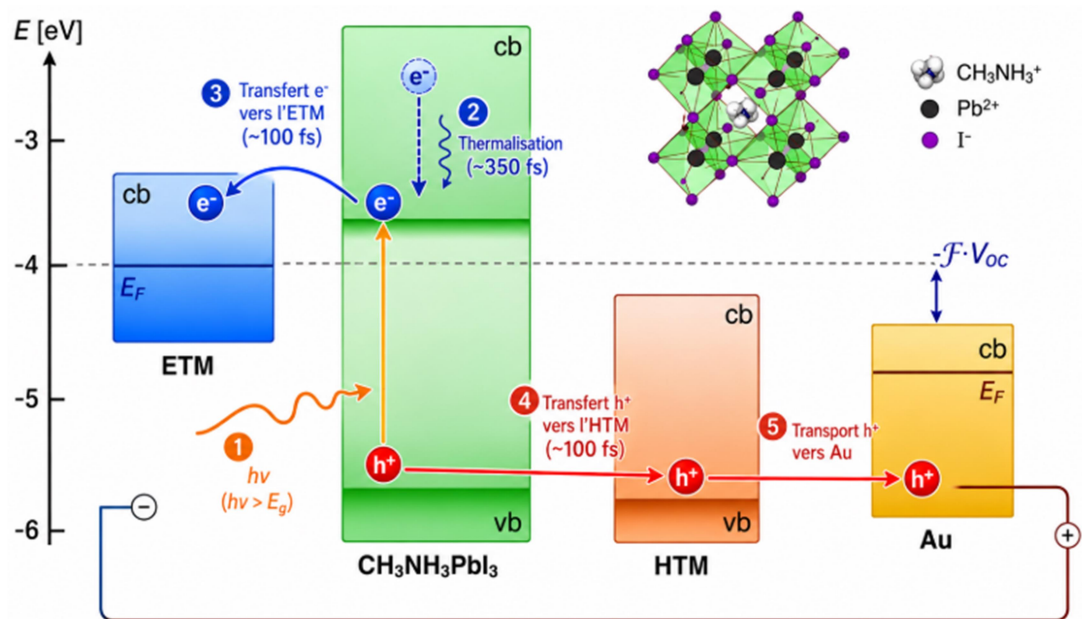


Figure 5 : Schéma des niveaux d'énergie et des mécanismes de transfert de charge dans une cellule solaire à base de MAPbI_3 [8]

Selon la figure (5), le mécanisme de transfert des charges se fait par les étapes suivantes :

Ce diagramme d'énergie détaille la dynamique ultrarapide des charges au sein d'une cellule solaire à pérovskite (MAPbI_3). Il montre comment les électrons (e^-) et les trous (h^+) sont générés, transportés et parfois perdus [8].

Un photon incident ($h\nu$) transportant une énergie supérieure au gap de la pérovskite pénètre dans le matériau, ce photon excite un électron de la bande de valence (vb) vers la bande de conduction (cb), cette transition laisse derrière elle une charge positive appelée un "trou" (h^+) dans la bande de valence.

Immédiatement après l'excitation, l'électron se trouve dans un état de haute énergie au sein de la bande de conduction, en environ 350 femto seconds (fs), l'électron perd son excès d'énergie sous forme de chaleur pour se stabiliser au niveau le plus bas de la bande de conduction. C'est la thermalisation. Pour générer un courant, les charges de signes opposés doivent être séparées très vite avant de se recombiner.

L'électron migre de la bande de conduction de la pérovskite vers celle de l'ETM (Electron Transport Materials, couche de transport d'électrons) en à peine 100 FS. En parallèle, les trous (h^+) passent de la bande de valence de la pérovskite vers l'HTM en environ 100 fs, puis rejoignent l'anode d'or (Au) pour fermer le circuit électrique.

Le diagramme montre deux mécanismes de perte qui réduisent l'efficacité de la cellule :

1- Recombinaison radiative directe : Un électron présent dans la bande de conduction peut retomber directement dans la bande de valence en réémettant un photon ($h\nu$). Ce processus prend environ 35 picosecondes (ps).

2- Recombinaison aux interfaces : C'est un processus beaucoup plus lent (10 microsecondes). Les électrons déjà transférés dans l'ETM ou les trous dans l'HTM peuvent rater leur extraction et se recombiner anormalement à travers l'interface de la pérovskite.

Alors, pour qu'une cellule solaire à pérovskite soit hautement efficace, l'injection des charges doit être beaucoup plus rapide que les mécanismes de recombinaison. Comme 100 fs est environ 350 fois plus rapide que 35 ps, la grande majorité des électrons sont extraits avec succès vers le circuit externe sous forme d'électricité avant de pouvoir se perdre.

Tableau 4 : Principaux avantages des cellules à pérovskite [8]

Avantage	Effet sur les performances
Forte absorption	Augmentation de J_{sc}
Bon gap énergétique	Rendement élevé
Bon transport des charges	Réduction des pertes
Fabrication simple	Coût réduit
Compatibilité tandem	Rendement supérieur

1.6 Conclusion

Dans cette partie, les principaux paramètres électriques des cellules photovoltaïques ont été présentés ainsi que les différentes générations de technologies solaires. Une attention particulière a été portée aux cellules solaires à base de pérovskites, en raison de leurs excellentes propriétés optoélectroniques et de leur fort potentiel pour les applications photovoltaïques de nouvelle génération [6] [13].

Chapitre 2 :

Structure étudiée TCO /TiO₂/ MAPbI₃ / CuI

Sommaire

2.1 Introduction	16
2.2 Présentation générale de la structure étudiée	16
2.3 Couche TCO (Transparent Conductive Oxide)	18
2.4 Couche TiO ₂ comme ETL	19
2.5 Couche absorbante MAPbI ₃	19
2.6 Couche CuI comme HTL	21
2.7 Alignement énergétique de la structure	22
2.8 Mécanisme de fonctionnement	24
2.9 Facteurs limitant les performances	24
2.10 Conclusion	24

2.1 Introduction

L'architecture d'une cellule solaire à base de pérovskite joue un rôle fondamental dans la détermination des performances photovoltaïques. En plus des propriétés intrinsèques du matériau absorbant, l'arrangement des couches, la qualité des interfaces et l'alignement énergétique influencent directement les paramètres électriques du dispositif tels que la tension en circuit ouvert, le facteur de forme et le rendement global [8,9].

Dans ce travail, la structure étudiée correspond à une architecture constituée des couches suivantes : TCO / TiO₂/MAPbI₃ / CuI / métal. Cette configuration repose sur une couche conductrice transparente servant d'électrode frontale, une couche de transport d'électrons : dioxyde de titane, une couche active absorbante en pérovskite MAPbI₃, une couche de transport de trous en iodure de cuivre (CuI) et une électrode arrière métallique assurant la collecte finale des charges, [6], [9], [14].

2.2 Présentation générale de la structure étudiée

Substrat / TCO /TiO₂/ MAPbI₃ / CuI / Métal

Chaque couche remplit une fonction spécifique :

- 1- TCO : contact avant permettant le passage de la lumière et la collecte des électrons ;
- 2- TiO₂ : Couche de transport des électrons (ETL) facilitant l'extraction des électrons et réduisant les recombinaisons ;
- 3- MAPbI₃ : Couche absorbante générant les paires électron-trou ;
- 4- CuI : Couche de transport des trous (HTL) assurant l'extraction des trous ;
- 5- Métal : Contact arrière collectant les trous.

Le dioxyde de titane (TiO₂) est utilisé comme couche de transport des électrons dans la structure étudiée. Grâce à sa grande transparence optique et à son alignement énergétique favorable avec la couche MAPbI₃, il facilite l'extraction des électrons vers l'électrode TCO tout en limitant les recombinaisons des porteurs de charge [15]

Sous éclairage, les charges photo générées dans la couche MAPbI₃ sont transportées vers les électrodes à travers les couches TiO₂ et CuI. [9] [15]

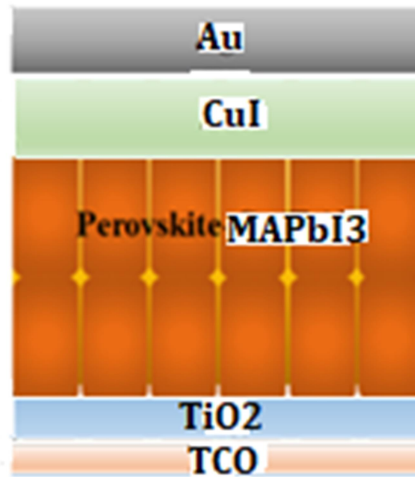


Figure 6 : Vue en coupe simulatrice d'une cellule solaire à pérovskite utilisant une couche de transport de trous (CuI), et couche de transport d'électrons (TiO₂) [15]

Tableau 5 : Fonctions des couches de la structure étudiée [9]

Couche	Fonction principale
TCO	Transmission optique + collection des électrons en absence de couche ETL.
TiO ₂	Extraction des électrons + blocage des trous
MAPbI ₃	Absorption lumineuse + génération des charges
CuI	Extraction des trous + blocage des électrons
Métal	Collecte finale des trous

2.3 Couche TCO (Transparent Conductive Oxide)

La couche TCO constitue l'interface entre la lumière incidente et la structure active. Elle doit combiner une forte transparence optique avec une bonne conductivité électrique afin de limiter les pertes résistives et de maximiser l'entrée du rayonnement lumineux [14][12]

Les matériaux les plus utilisés sont :

- FTO (fluorine-doped tin oxide);
- ITO (indium tin oxide);
- AZO (aluminum-doped zinc oxide).

Le choix du TCO influence la transmission optique, la résistance série, la rugosité de surface ainsi que la stabilité globale du dispositif. [14]

Tableau 6 : Comparaison de quelques matériaux TCO [8]

Matériau	Transparence	Conductivité	Avantages	Limites
FTO	Élevée	Bonne	Stable, économique	Surface rugueuse
ITO	Très élevée	Très bonne	Excellente performance	Coût élevé
AZO	Bonne	Moyenne	Faible coût	Sensible à l'humidité

2.4 Couche TiO₂ comme ETL :

Le dioxyde de titane (TiO₂) est largement utilisé comme couche de transport des électrons (ETL) dans les cellules solaires à pérovskite grâce à sa grande transparence optique, sa stabilité chimique et son bon alignement énergétique avec la couche absorbante MAPbI₃. Il facilite l'extraction des électrons vers l'électrode TCO tout en limitant les recombinaisons interfaciales, ce qui améliore les performances photovoltaïques de la cellule [15][13]

2.5 Couche absorbante MAPbI₃ :

Le matériau CH₃NH₃PbI₃ (MAPbI₃) appartient à la famille des pérovskites hybrides organométalliques de formule générale ABX₃. Il se compose de :

- A = CH₃NH₃⁺ ;
- B = Pb²⁺ ;
- X = I⁻.

Ce matériau présente des propriétés remarquables expliquant sa large utilisation dans les cellules photovoltaïques modernes [8] , [6] [10],

Ses caractéristiques principales sont :

- Gap énergétique optimal : 1,50–1,60 eV ;
- Coefficient d'absorption élevé ;
- Constante diélectrique élevée (~25-30) ;
- Bonne mobilité des charges ;
- Longue longueur de diffusion ;
- Faible énergie de liaison exciton.

2.5.1 Les phases cristallines du MAPbI₃ :

La pérovskite (MAPbI₃) présente trois phases cristallines principales [1, 2]

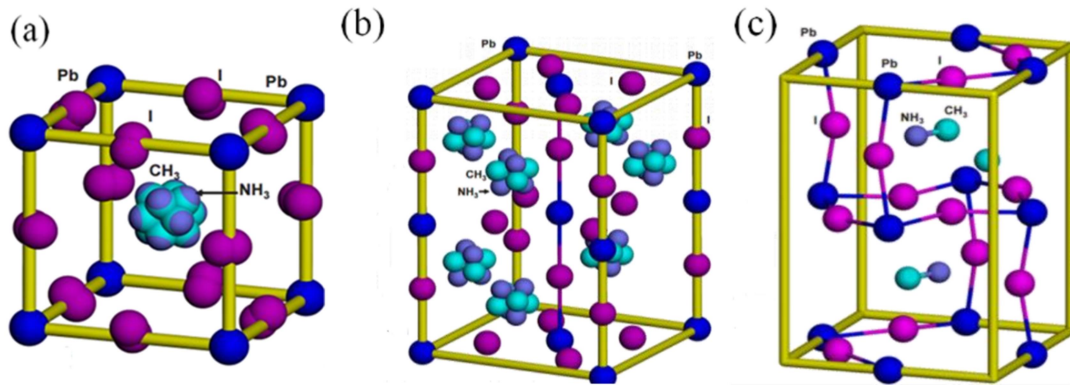


Figure 7 : Les phases thermodynamiques du MAPbI₃ : a- Cubique, b- Tétragonale, c- Orthorhombique [17]

a- La phase cubique (Phase alpha) :

- Elle est stable à haute température, au-dessus de 54 °C à 57 °C (environ 327 K - 330 K).
- Les cations MA⁺ y sont totalement désordonnés et pivotent librement au centre de la maille.

b- La phase tétragonale / quadratique (Phase beta) :

- C'est la phase stable à température ambiante (entre 160 K et 327 K).
- Elle est caractérisée par une légère inclinaison des octaèdres.

c- **La phase orthorhombique (Phase gamma):**

- Elle est stable à basse température, en dessous de -113°C (environ 160 K).
- Les cations méthyl ammonium (MA⁺) sont figés et ordonnés.

Tableau [7] : Résumé des transitions de phase [1]

Temperature (K)	Temperature (°C)	Phase cristalline	État du cation MA ⁺
< 160 K	< -113 °C	Orthorhombique	Ordonné (figé)
160 K - 327 K	-113 °C à 54 °C	Tétragonal	Partiellement désordonné
> 327 K	> 54 °C	Cubique	Totalement désordonné

Remarque : Sous très haute pression, le MAPbI₃ peut également développer d'autres phases spécifiques appelées phases IV et V [8]

Les transitions entre les trois phases cristallines du MAPbI₃ modifient directement la structure de bandes électroniques, l'absorption optique et la structure mécanique du film. Ces modifications exercent un impact majeur sur le rendement de conversion et la stabilité de la cellule solaire.

2.6 Couche CuI comme HTL

L'iodure de cuivre (CuI) est une couche de transport de trous inorganique de type p, largement étudiée comme alternative aux matériaux organiques classiques. Son rôle consiste à extraire les trous de la couche MAPbI₃ tout en bloquant les électrons, ce qui améliore la sélectivité du contact [9][12]

Les avantages de CuI sont :

- Forte transparence dans le visible ;
- Bonne conductivité p. type ;
- Mobilité élevée des trous ;

- Bonne stabilité chimique ;
- Faible coût ;
- Procédés de dépôt simples. [9][12]

Tableau 8: Avantages de CuI comme couche HTL [14]

Critère	Effet sur la cellule
Conductivité de type p	Extraction rapide des trous
Transparence	Faibles pertes optiques
Bonne interface	Réduction des recombinaisons
Faible coût	Production économique
Bonne stabilité	Longue durée de vie

2.7 Alignement énergétique de la structure

Le bon fonctionnement de la cellule dépend fortement de l'alignement des niveaux d'énergie entre les différentes couches. Les valeurs typiques rapportées dans la littérature sont :

Tableau 9 : Niveaux d'énergie des couches de la cellule perovskite [9] , [6] , [14]

Matériau :	Niveau de fermis :	CBM (Conduction Band Minimum) :	VBM (Valence Band Maximum) :
TCO	-3.5 eV	-4.3 Métal	Métal
TiO ₂	-3.2eV	-4.2 Ev	-7.4eV
MAPbI ₃	-1.6eV	-3,9 eV	-5,5 eV
CuI	-3.1eV	-2.1 eV	-5,2 eV

$$\text{CBM} = -\chi \quad (3)$$

$$\text{VBM} = \text{CBM} - E_g \quad (4)$$

On remarque que le niveau de valence de CuI est proche de celui de MAPbI₃, ce qui facilite l'extraction des trous. En revanche, la bande de conduction de CuI est située à un niveau énergétique plus élevé, formant une barrière efficace contre le passage des électrons. Cette sélectivité améliore les performances de la cellule et réduit les recombinaisons inter-faciales. [6] , [9] , [16]

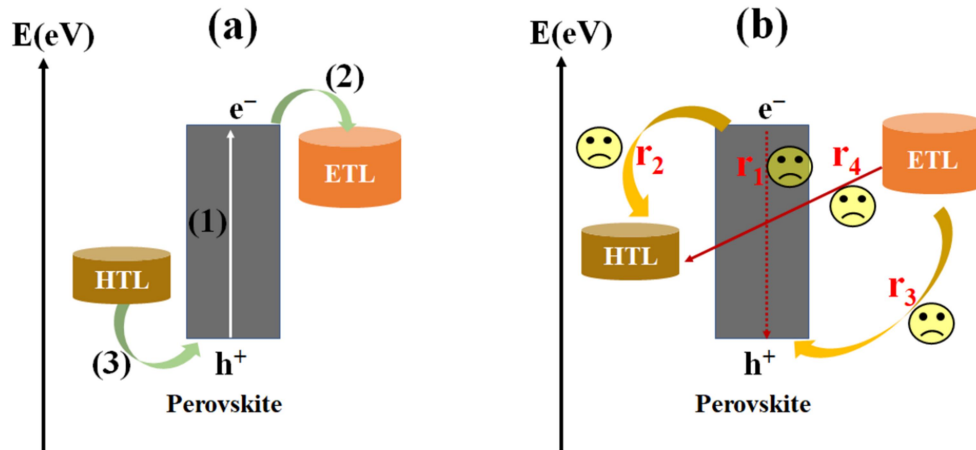


Figure 8 : Niveaux d'énergie et des processus de transfert des porteurs de charge dans une cellule solaire à pérovskite : (a) processus souhaitables d'extraction des charges ; (b) processus indésirables de recombinaison : r_1 : Recombinaison dans le volume, r_2 : Recombinaison à l'interface HTL / Pérovskite, r_3 : Recombinaison à l'interface ETL / Pérovskite, r_4 : Recombinaison interfaciale directe HTL / ETL [12]. [16]

2.8 Mécanisme de fonctionnement

Le fonctionnement global de la cellule photovoltaïque étudiée se déroule en quatre étapes principales :

1. Absorption des photons dans la couche MAPbI₃ ;
2. Génération des paires électron-trou ;
3. Séparation des charges aux interfaces ;
4. Transport des électrons vers TCO et TiO₂ des trous vers CuI puis vers le métal. [3] , [6] , [16]

Le trajet des porteurs de charge dans la structure étudiée sera comme suit :

Électrons : MAPbI₃ → TiO₂ → TCO, **Trous :** MAPbI₃ → CuI → Métal. [6] , [9] , [14].

2.9 Facteurs limitant les performances

Les performances des cellules solaires peuvent être limitées par les recombinaisons, les défauts cristallins et la qualité des interfaces [3] , [4] , [5]

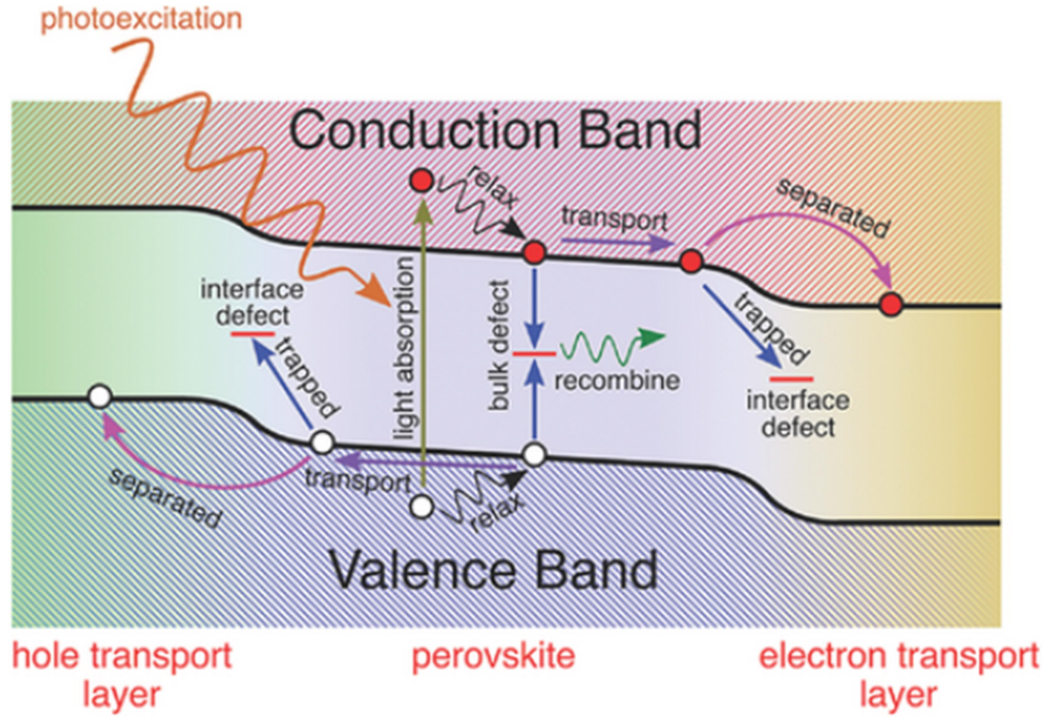


Figure 9: Illustration des porteurs dans la cellule solaire pérovskite, mettant en évidence la recombinaison des porteurs induite par les défauts de volume et d'interface (flèches bleues) possédant des états de bande interdite [18].

2.10 Conclusion

Dans ce chapitre, la structure TCO /TiO₂/ MAPbI₃ / CuI a été étudiée de manière détaillée. Le rôle de chaque couche, les propriétés physiques des matériaux, l'alignement énergétique et les mécanismes de transport ont été présentés. Les résultats théoriques montrent que l'association d'une couche absorbante performante MAPbI₃ avec une couche HTL inorganique stable telle que CuI et une couche TiO₂ comme ETL, constitue une architecture prometteuse pour les cellules solaires pérovskite.

Chapitre 3 :

Modélisation et optimisation d'une cellule

solaire TCO/TiO₂/MAPbI₃/Cul par SCAPS-1D

Sommaire

3.1 Introduction	26
3.2 Présentation du logiciel SCAPS-1D	26
3.3 Structure étudiée	27
3.4 Paramètres physiques de la simulation	28
3.5 Paramètres des défauts utilisés dans SCAPS-1D.....	29
3.6 Conditions de simulation	30
3.7 Méthodologie de simulation	30
3.8 Importance du coefficient d'absorption	31
3.9Extraction des données des coefficients d'absorption par WebPlotDigitizer.....	33
3.10 Résultats et discussion.....	34
3.10.1Comparaison des résultats.....	36
3.11 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI ₃	36
3.11.1 Configuration du mode 'Batch' dans SCAPS-1D.....	36
3.11.2Tableau récapitulatif...../.....	40
3.11.3Courbes de performances.....	42
3.11.4 Interprétation des résultats.....	44
3.11.4.1 Comparaisons.....	45
3.11.5 Conclusion.....	45

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, une modélisation numérique de la cellule solaire pérovskite TCO/TiO₂//MAPbI₃/CuI a été réalisée à l'aide du logiciel SCAPS-1D afin d'étudier l'influence du coefficient d'absorption et de l'épaisseur de la couche absorbante sur les performances photovoltaïques de la cellule.

Après l'étude des propriétés physiques et électroniques des matériaux constituant la cellule solaire proposée, la modélisation numérique représente une étape essentielle permettant de prédire le comportement du dispositif photovoltaïque en faisant varier le coefficient d'absorption du matériau pérovskite MAPbI₃ selon ses phases cristallographiques, influencées par différentes conditions, et en analysant l'impact de ces paramètres physiques sur les performances de la structure solaire pérovskite proposée, puis les optimisées pour en déduire le meilleur rendement qu'elles peuvent atteindre.

La simulation permet de réduire les coûts expérimentaux, d'optimiser la structure étudiée et d'effectuer des analyses sur les paramètres les plus influents le rendement d'une cellule solaire à pérovskite [19], [6].

3.2 Présentation du logiciel SCAPS-1D

SCAPS-1D est un logiciel de simulation unidimensionnelle développé à l'université de Gand (Belgique). Il résout numériquement les équations fondamentales des semi-conducteurs afin de modéliser les cellules solaires multicouches et de prédire leurs performances photovoltaïques [16], [19].

Le logiciel permet :

- La définition d'une structure multicouche ;
- L'introduction des propriétés physiques des matériaux ;
- La prise en compte des défauts volumiques et interfaciaux ;
- La simulation sous obscurité ou sous illumination ;
- Le calcul des courbes J-V ;
- La détermination des performances de cellule solaire : Tension en circuit ouvert (Voc), la densité de courant (Jsc), le facteur de forme (FF), et le rendement de la cellule solaire (η) ;

- Le calcul de la réponse quantique externe (QE)

Le succès de SCAPS dans la littérature scientifique s'explique par sa simplicité d'utilisation, sa rapidité de calcul, sa flexibilité paramétrique et sa bonne concordance avec de nombreux résultats expérimentaux.

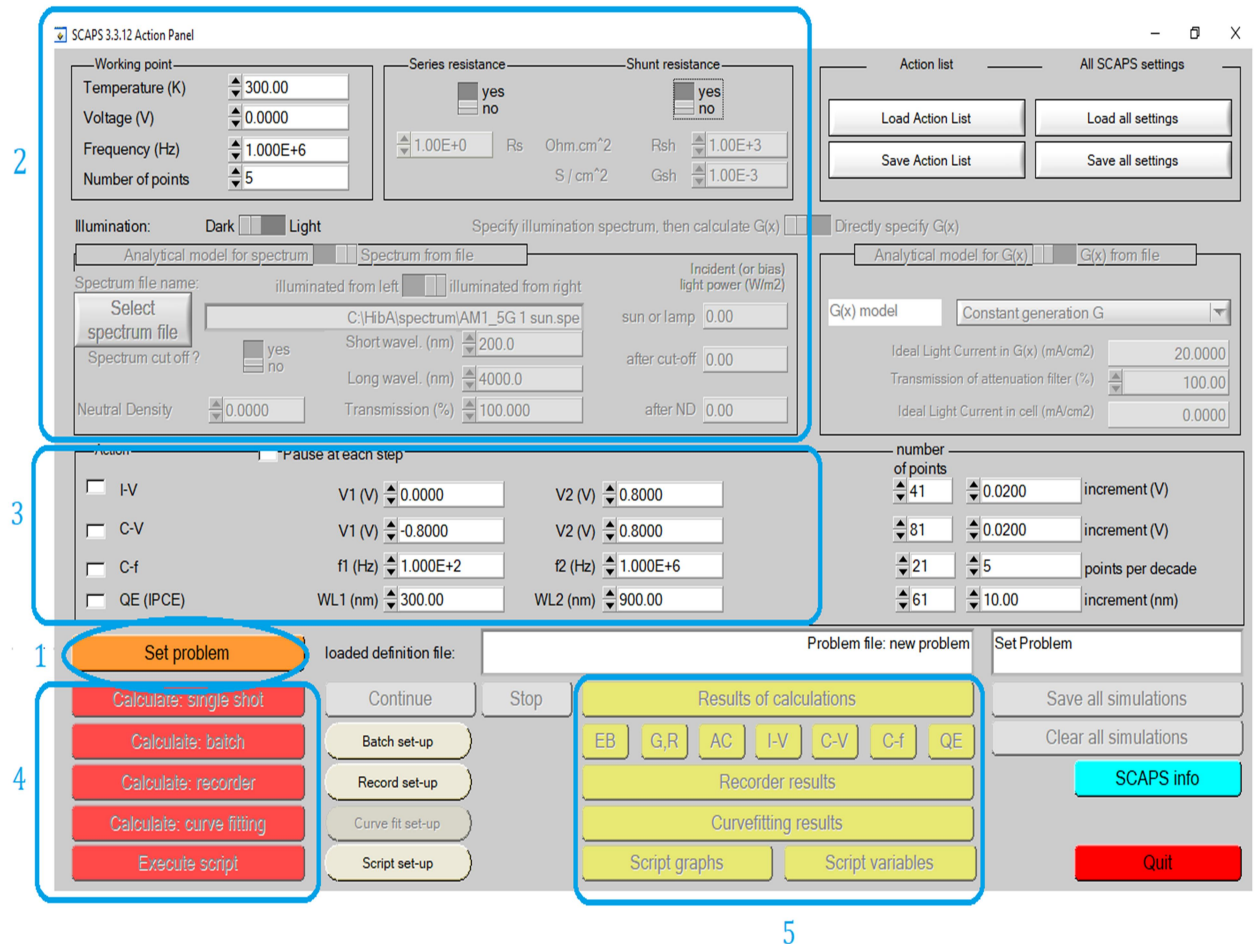


Figure 10 : Zones de paramétrage dans l'interface d'accueil du logiciel SCAPS-1D : 1- Etablir les couches et les interfaces et les propriétés des contacts, 2- Point de fonctionnement et éclairage, 3- Caractéristiques électriques, 4- Méthodes de calcul. 5- Résultats [13].

3.3 Introduction des paramètres de la cellule pérovskite

La structure étudiée est choisie selon cet empilement de couches TCO /TiO₂/ MAPbI₃ / CuI / Métal. On prend aussi en considération : les défauts de chaque couche, les défauts des interfaces, les fonctions de travail des électrodes métalliques de chaque côté de la cellule pour collecter le courant du contact avant et du contact arrière.

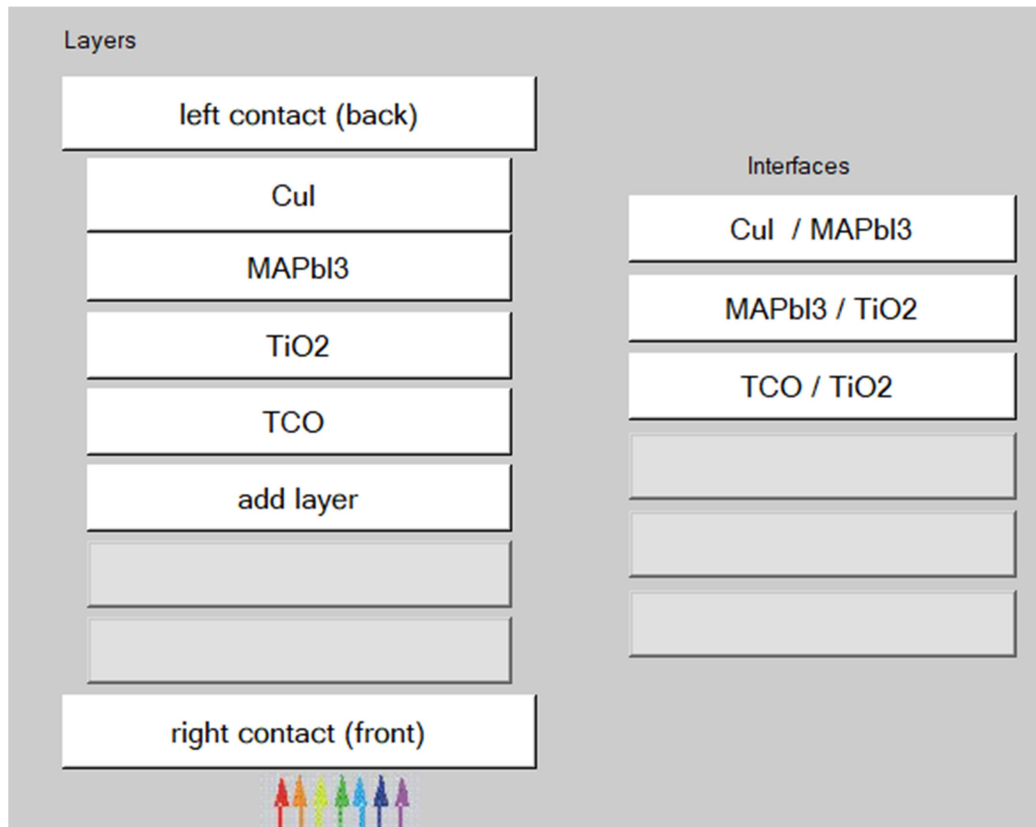


Figure11 : Structure de la cellule solaire TCO / TiO₂ / MAPbI₃ / CuI sous SCAPS-1D

La figure [11] présente la structure de la cellule solaire simulée sous SCAPS-1D. La configuration étudiée est composée d'une couche TCO, d'une couche de transport d'électrons TiO₂, d'une couche absorbante MAPbI₃ et d'une couche de transport des trous CuI, plus les interfaces de ces empilements : TCO/TiO₂, TiO₂/MAPbI₃, MAPbI₃/CuI.

3.4 Paramètres physiques de la simulation

Les paramètres physiques introduits dans la simulation sont essentiels pour garantir la fiabilité des résultats obtenus.

Tableau [10] : Paramètres physiques utilisés dans SCAPS [9], [14][16] [18] [19]

Parameters	TCO	TiO ₂	MAPbI ₃	CuI
d (nm)	150	100	700	50
E _g (eV)	3.5	3.2	1.6	3.1
χ (eV)	4.3	4.2	3.9	2.1
ε (eV)	9	80	32	6.5
N _c (cm ⁻³)	10 ¹⁹	2.5×10 ¹⁸	2×10 ¹⁸	8.2×10 ¹⁹
N _v (cm ⁻³)	10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	1×10 ¹⁸	1×10 ¹⁹
μ _e (cm ² /Vs)	20	6×10 ⁻³	11.8	20
μ _h (cm ² /Vs)	10	6×10 ⁻³	11.5	43.9
N _D (cm ⁻³)	1×10 ¹⁹	1×10 ¹⁷	0	0
N _A (cm ⁻³)	0	0	10 ¹⁵	10 ¹⁸
N _t (cm ⁻³)	1×10 ¹⁶	10 ¹⁴	10 ¹⁴	10 ¹⁴
Energetic distribution	Gauss	Gauss	Gauss	Gauss

Le métal du contact arrière choisie est l'Or : 'Au', de fonction de travail : $\Phi \approx 5.1$ eV, et la fonction de travail du contact avant est : $\Phi \approx 4.4$ eV.

3.5 Paramètres des défauts utilisés dans SCAPS-1D

Afin de se rapprocher des résultats réels et d'avoir une stabilité numérique des simulations, on a pris en compte les phénomènes de recombinaison dans les différentes couches de la cellule solaire et des défauts volumiques. Elles ont été introduites dans les couches TCO,

TiO₂, MAPbI₃ et CuI et aussi dans les interfaces dans les rubriques appropriés du SCAPS-1D, voir la figure suivante : exemple, le réglage de défaut de la couche de MAPbI₃.

Les défauts utilisés sont principalement de type « Neutral » avec des distributions énergétiques « Gaussian ».

Tableau 11 : Paramètres des défauts introduits dans les différentes couches de la structure étudiée [17, 12, 7]

Couche	Type de défaut	Distribution énergétique	Nt (cm ⁻³)	σ_n (cm ²)	σ_p (cm ²)	Niveau énergétique
TCO	Neutral	Gaussian	1×10^{13}	1×10^{-15}	1×10^{-15}	0.300 eV
TiO ₂	Neutral	Gaussian	1×10^9	1×10^{-15}	1×10^{-15}	0.300 eV
MAPbI ₃	Neutral	Gaussian	1×10^{16}	1×10^{-16}	1×10^{-15}	1.500 Ev
CuI	Neutral	Gaussian	1×10^{15}	1×10^{-16}	1×10^{-14}	0.300 Ev

SCAPS 3.3.12 Defect Properties Panel

Defect 1 of MAPbI3

defect type: Neutral

capture cross section electrons (cm²): 1.000E-14

capture cross section holes (cm²): 1.000E-14

energetic distribution: Gauß

reference for defect energy level Et: Above EV (SCAPS < 2.7)

energy level with respect to Reference (eV): 1.500

characteristic energy (eV): 0.200

no Nt grading (uniform)

Nt total (1/cm3): uniform Nt: 1.000E+16

Nt peak (1/eV/cm3): uniform Nt: 2.821E+16

Optical capture of electrons: ☐ From model ☒ From file

refractive index (n): 3.000

effective mass of electrons (rel.): 1.000E+0

effective field ratio: 1.00E+0

cut off energy (eV): 10.00

optical electron capture cross sections file:

Optical capture of holes: ☐ From model ☒ From file

refractive index (n): 3.000

effective mass of holes (rel.): 1.000E+0

effective field ratio: 1.00E+0

cut off energy (eV): 10.00

optical hole capture cross sections file:

accept cancel

Figure 12 : Paramètres des défauts introduits dans la couche MAPbI₃ sous SCAPS-1D

3.6 Conditions de simulation

Les simulations sont réalisées dans des conditions standards :

Tableau 12 : Conditions de simulation [20]

Paramètre	Valeur
Spectre solaire	AM1.5G
Irradiance	1000 W/m ²
Température	300° K

3.7 Méthodologie de simulation

La démarche suivie dans ce travail comprend les étapes successives suivantes :

1. Introduction des paramètres physiques de la structure TCO / TiO₂ / MAPbI₃ / CuI ;
3. Définition des conditions de calcul et d'illumination ;
4. Choix des coefficients d'absorption du MAPbI₃ ;
5. Lancement de la simulation sous SCAPS-1D ;
6. Enregistrement des courbes J-V et QE ;
7. Analyse comparative des performances ;
8. Détermination de la structure la plus rentable.
9. Optimisation de la structure optimale.

3.8 Importance du coefficient d'absorption

Les coefficients d'absorption des phases cristalline du MAPbI₃ sont utilisé d'après la figure ci dessous selon la référence [20]

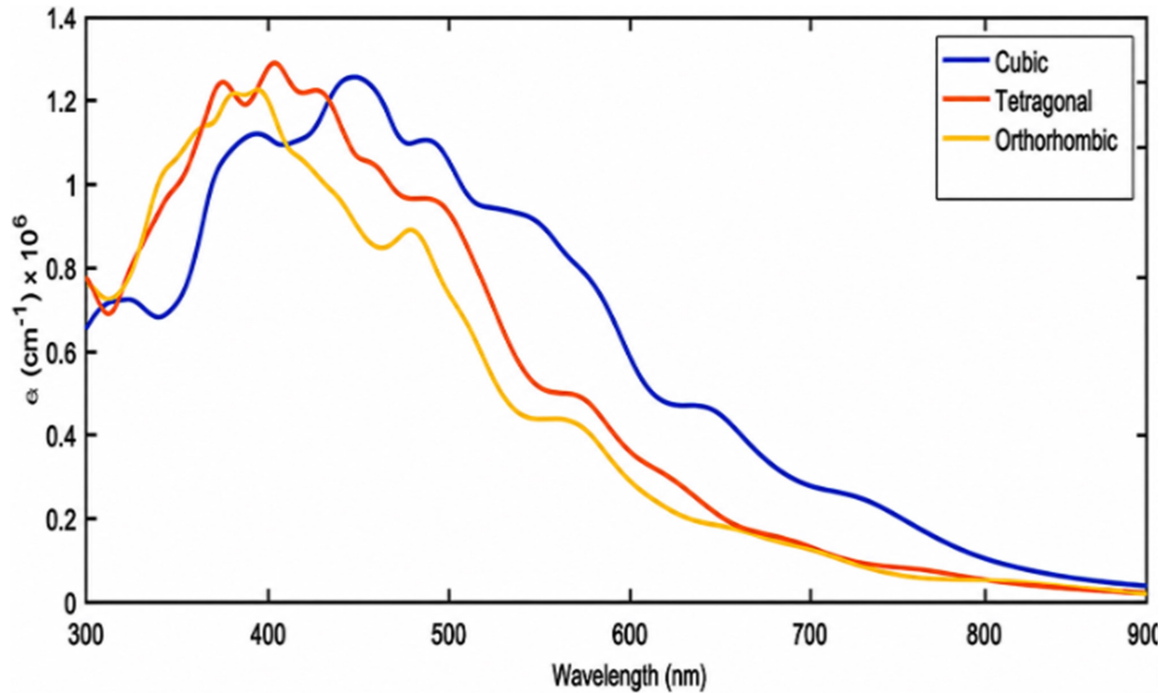


Figure 13: Spectres d'absorptions du MAPbI₃ en fonction de la longueur d'onde pour différentes phases cristallines [21] (inspirée)

Cette figure montre le comportement du coefficient d'absorption du MAPbI₃ en fonction de la longueur d'onde. On observe que le coefficient d'absorption est fort dans la région du visible, ce qui permet une absorption efficace du rayonnement solaire et favorise la génération des paires électron-trou [21].

Les fichiers numériques des coefficients d'absorption α des trois phases cristallines du MAPbI₃ ont été préparés à partir de ces courbes extraites par WebPlotDigitizer qui donne des aspects numériques d'après ces représentations graphiques. On les a convertis ensuite au format compatible avec SCAPS-1D.

Leurs valeurs sont enregistrées dans un fichier d'extension '.abs' pour être lisible par SCAPS pendant la simulation.

3.9 Extraction des données des coefficients d'absorption par WebPlotDigitizer :

Tableau13: Caractéristiques du Webplotdigitizer

Grandeur	Unité utilisée dans SCAPS-1D
Longueur d'onde λ	nm
Coefficient d'absorption α	m^{-1}
Phases cristallines	Cubique, Tétraogonale, Orthorhombique.

Les valeurs extraites initialement en cm^{-1} ont été converties en m^{-1} selon la relation :

$$\alpha(\text{m}^{-1}) = \alpha(\text{cm}^{-1}) \times 100$$

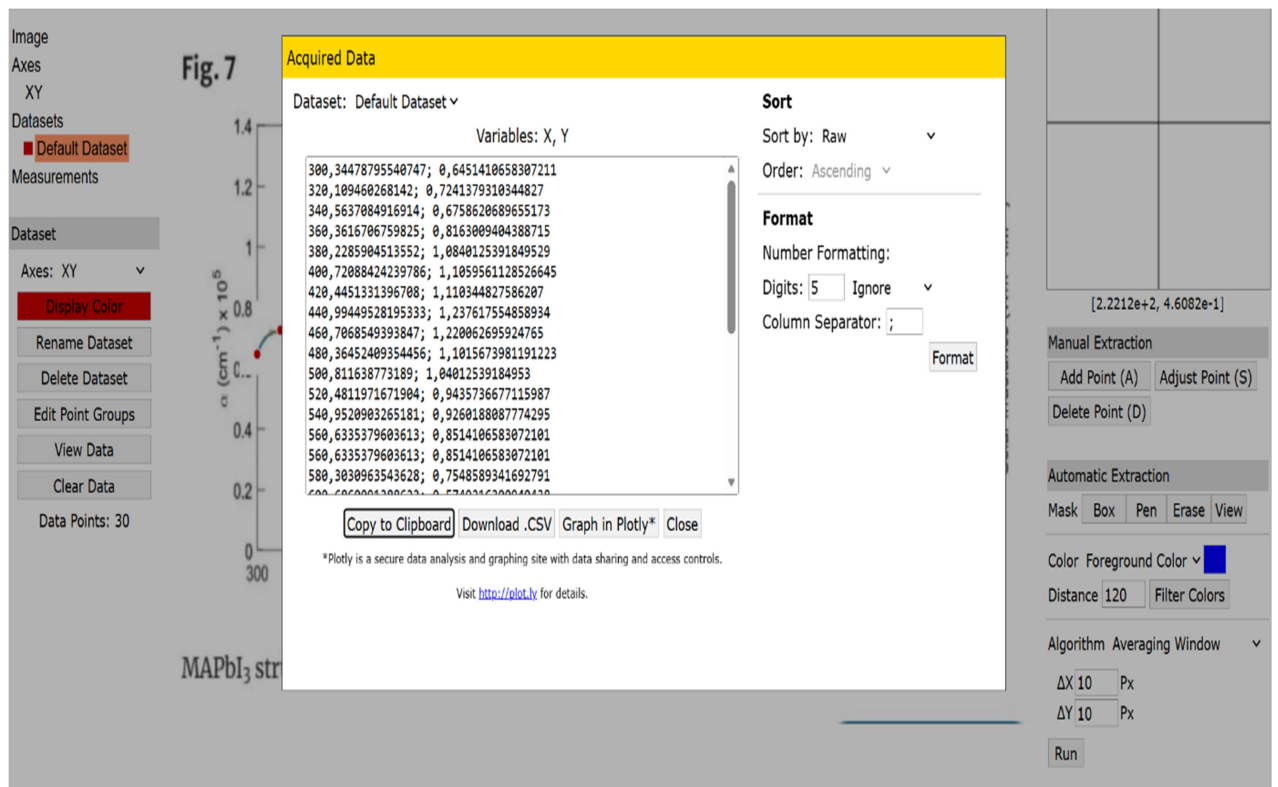


Figure 14: Extraction des valeurs du coefficient d'absorption à l'aide de WebPlotDigitizer

3.10 Résultats et discussion

Après avoir obtenu les fichiers des coefficients d'absorption de chaque phase, on entame dans cette partie le calcul des performances photovoltaïques de la cellule solaire TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI en variant les fichiers de coefficients d'absorption selon les phases du MAPbI₃ dans SCAPS-1D. Les simulations ont été réalisées sous les mêmes conditions de fonctionnement afin d'évaluer uniquement l'influence des différentes phases cristallines du matériau MAPbI₃. Les paramètres photovoltaïques obtenus sont : la tension en circuit ouvert V_{oc} , la densité de courant de court-circuit J_{sc} , le facteur de forme FF et le rendement de conversion η .

A- Performance de la structure par calcul (sans fichier d'absorption)

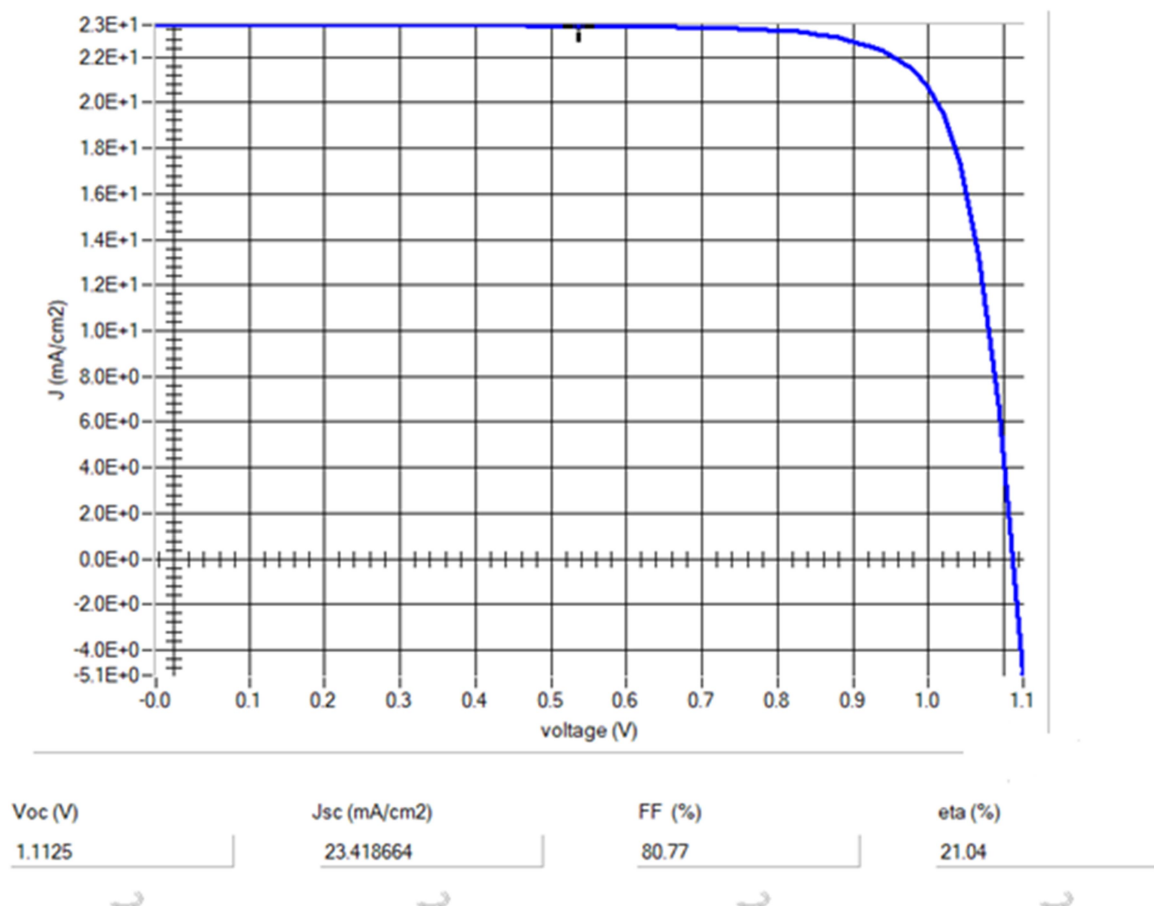


Figure 15 : Courbe J-V (coefficient d'absorption du MAPbI₃ calculé par SCAPS).

SCAPS utilise sa loi mathématique interne pour simuler un semi-conducteur à transition directe : $\alpha(h\nu) = (A + B(h\nu)) \sqrt{h\nu - E_g}$

E_g : Energie de gap.

$h\nu$: Constante de plank fois la fréquence des e-.

$A : 10^5$, $B=0$, ces valeurs sont des constants standards préconfigurés [22]

Le logiciel SCAPS crée une courbe d'absorption générique à partir de ces paramètres.

La structure proposée de la cellule solaire pérovskite avec une absorption prise par calcul, a donné un rendement de 21.04% avec une tension en circuit ouvert $V_{oc} = 1.1125$ V, une densité de courant $J_{sc} = 23,41$ mA/cm² et un facteur de forme $FF = 80.77\%$. Ces résultats représentent le cas de référence utilisé pour l'analyse comparative.

B- Résultats de la structure avec fichier d'absorption la phase tétragonale du MAPbI₃

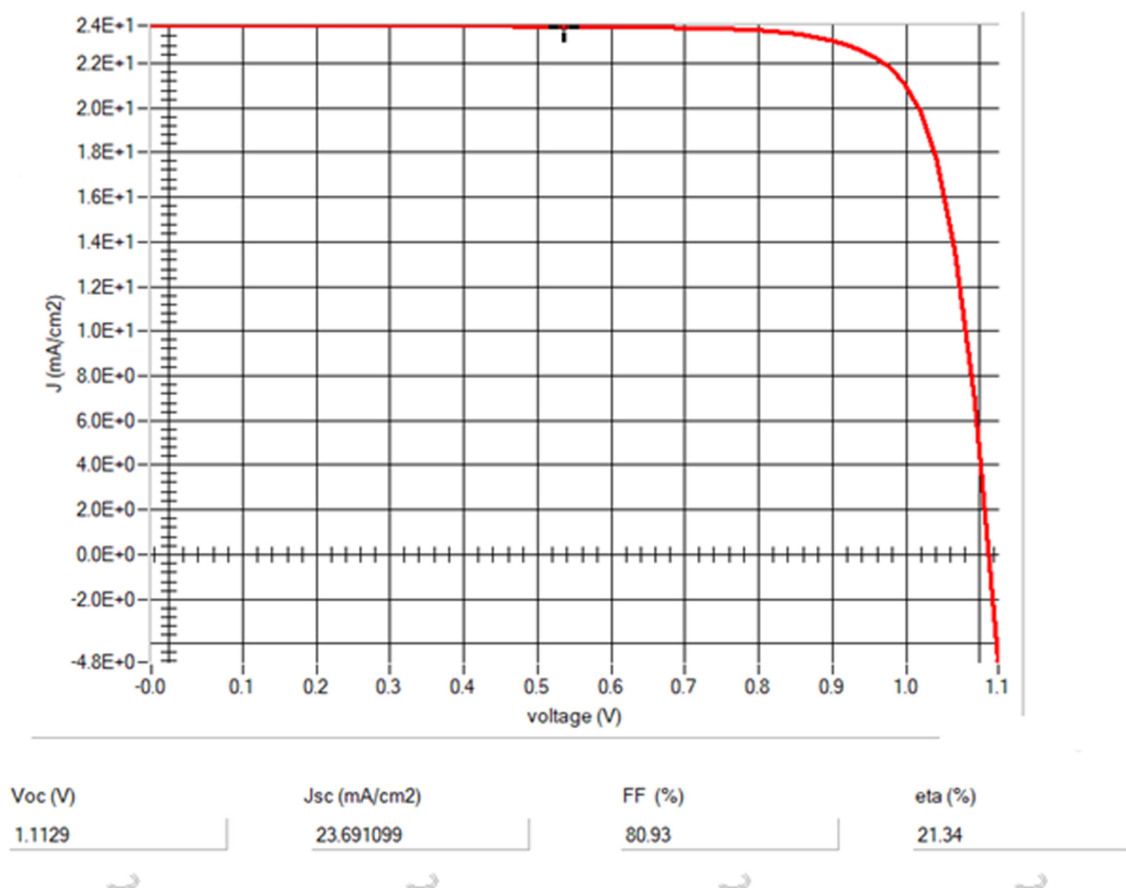


Figure16 : Courbe J-V avec coefficient d'absorption du MAPbI₃, la phase tétragonale

Les performances photovoltaïques de la cellule de la phase tétragonale se sont améliorées, le rendement a atteint 21.34%, la tension $V_{oc} = 1.1129V$, la densité de courant $J_{sc} = 23.69 \text{ mA/cm}^2$ et le facteur de forme $FF = 80.93\%$. Cette amélioration est liée au forte capacité d'absorption optique de la phase tétragonale.

C- Résultats de la structure avec fichier d'absorption la phase cubique du MAPbI₃

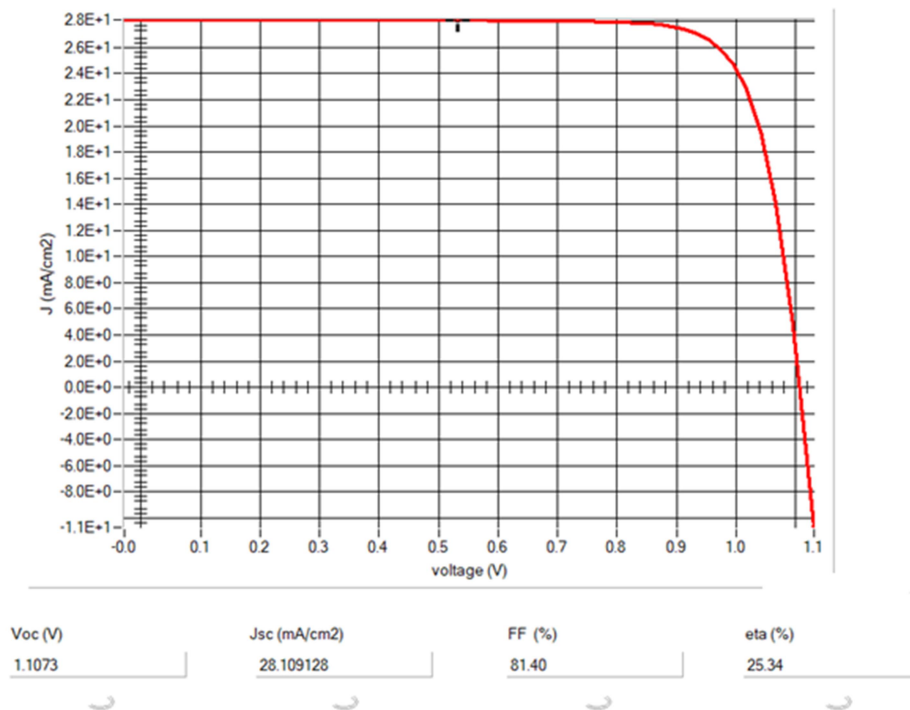


Figure 17: Courbe J-V avec le coefficient d'absorption de la phase cubique.

La phase cubique présente un rendement de 25.34 %, avec une tension de $V_{oc} = 1.1073V$, et densité de courant $J_{sc} = 28,10 \text{ mA/cm}^2$ et facteur de forme $FF = 81.40\%$. Les résultats montrent une amélioration des performances par rapport à la phase tétragonale, due à une capacité d'absorption optique plus élevée

D - Résultats de la structure avec fichier d'absorption la phase orthorhombique du MAPbI₃

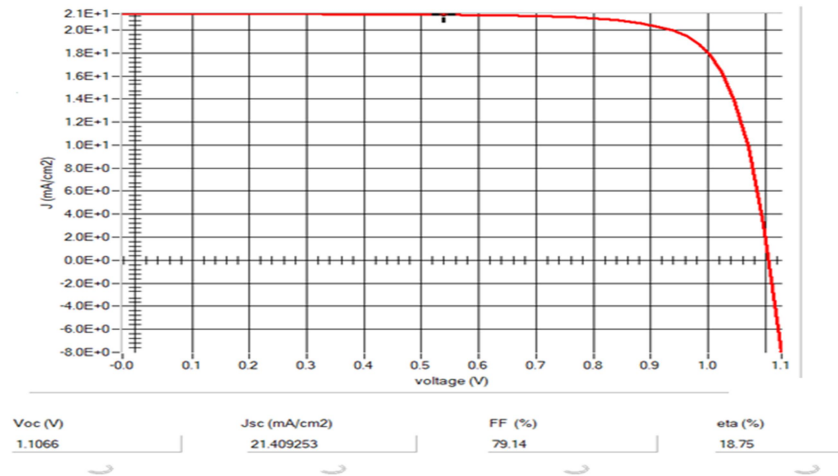


Figure 18: Courbe J-V avec le coefficient d'absorption du MAPbI₃ de la phase orthorhombique.

La phase orthorhombique présente les plus faibles performances photovoltaïques avec un rendement de 18.75%, une densité de courant $J_{sc} = 21.40 \text{ mA/cm}^2$, une tension $V_{oc} = 1,1066 \text{ V}$ et un facteur de forme $FF = 79.14 \%$. Cette diminution importante est liée à la faible absorption optique de cette phase.

3.10.1 Comparaison des résultats

Tableau 14: Comparaison des performances photovoltaïques des différentes phases cristallines du MAPbI₃.

Structure	V_{oc} (v)	J_{sc} (mA /cm ²)	FF (%)	η (%)
Tétraгонаle	1.1129	23.69	80.93	21.34
Cubique	1.1073	28 .10	81.40	25.34
Orthorhombique	1.1066	21.40	79.14	18.75

Les résultats obtenus montrent clairement l'influence du coefficient d'absorption sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire étudiée. La phase cubique présente les meilleures performances, avec une efficacité (η) de 25.34% et un courant de court-circuit (J_{sc}) de 28.10 mA/cm^2 , grâce à sa forte capacité d'absorption dans une large gamme du

spectre solaire. En revanche, la phase orthorhombique montre les performances les plus faibles

Afin d'approfondir cette étude, et d'optimiser encore mieux cette structure, une analyse de l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ avec ses trois phases, sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire a été réalisée. L'épaisseur de la couche absorbante a été variée de 200 nm à 1200 nm afin d'évaluer son effet.

Les simulations ont été effectuées sous les mêmes conditions de fonctionnement précédentes à l'aide du logiciel SCAPS-1D.

3.11 Effet de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃

L'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ a été variée de 200 nm à 1200 nm afin d'étudier son influence sur les performances photovoltaïques. Cette étude a été réalisée pour les phases cubique, tétragonale et orthorhombique.

3.11.1 Configuration du mode 'Batch' dans SCAPS-1D

La fonctionnalité 'Batch Settings' du logiciel SCAPS-1D a été utilisée pour effectuer la variation de l'épaisseur de la couche MAPbI₃ automatiquement de 200 nm jusqu'à 1200 nm.

Les simulations ont été réalisées selon les paramètres suivants :

Paramètre	Valeur
Valeur initiale	200 nm
Valeur finale	1200 nm
Nombre de Steps	6

Cette méthode a permis d'obtenir automatiquement les différentes courbes J-V ainsi que les paramètres photovoltaïques correspondant à chaque valeur d'épaisseur étudiée.

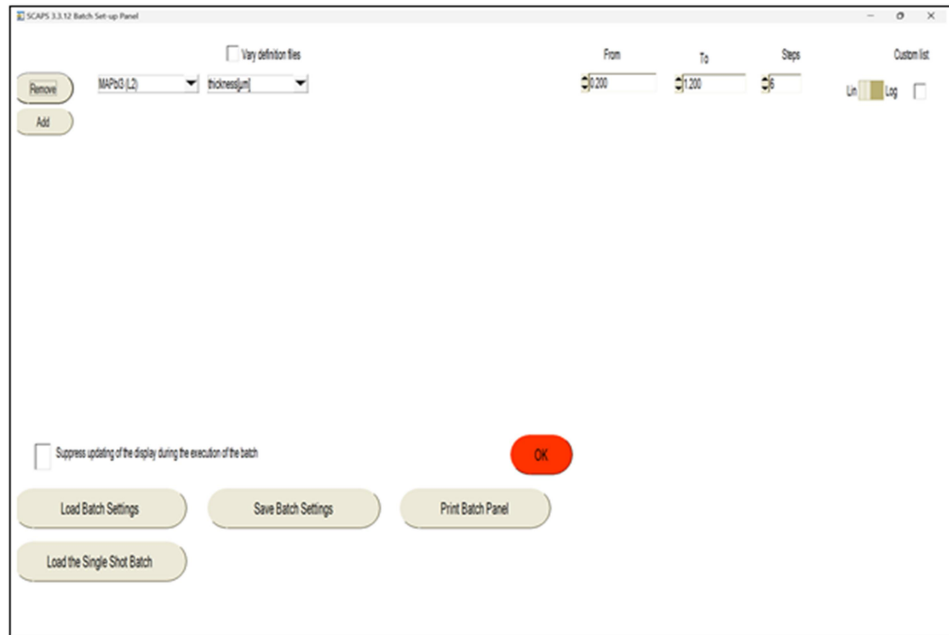


Figure 19 : Configuration du mode Batch et variation de l'épaisseur dans SCAPS-1D

Les résultats sont illustrés dans la figure suivante :

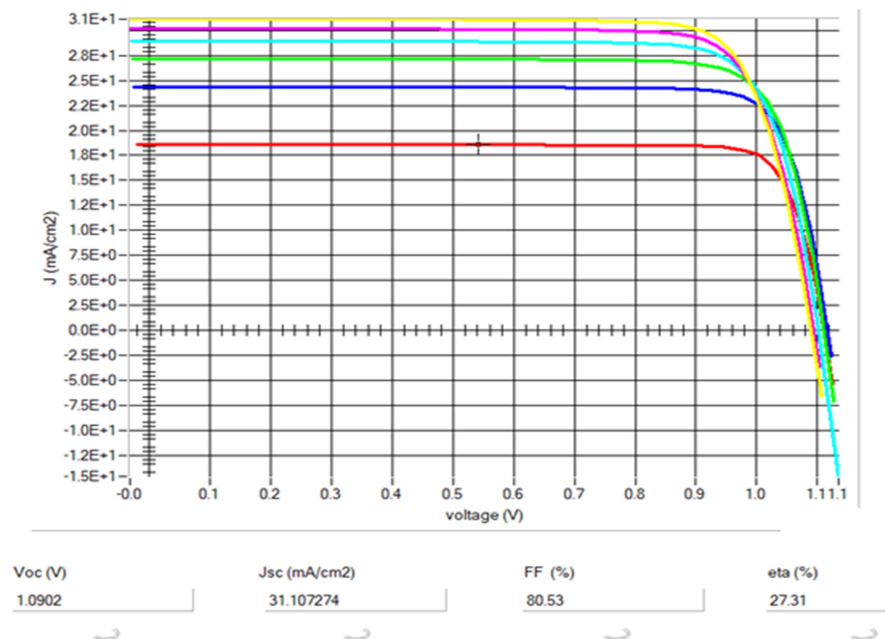


Figure 20 : Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI₃ (phase cubique).

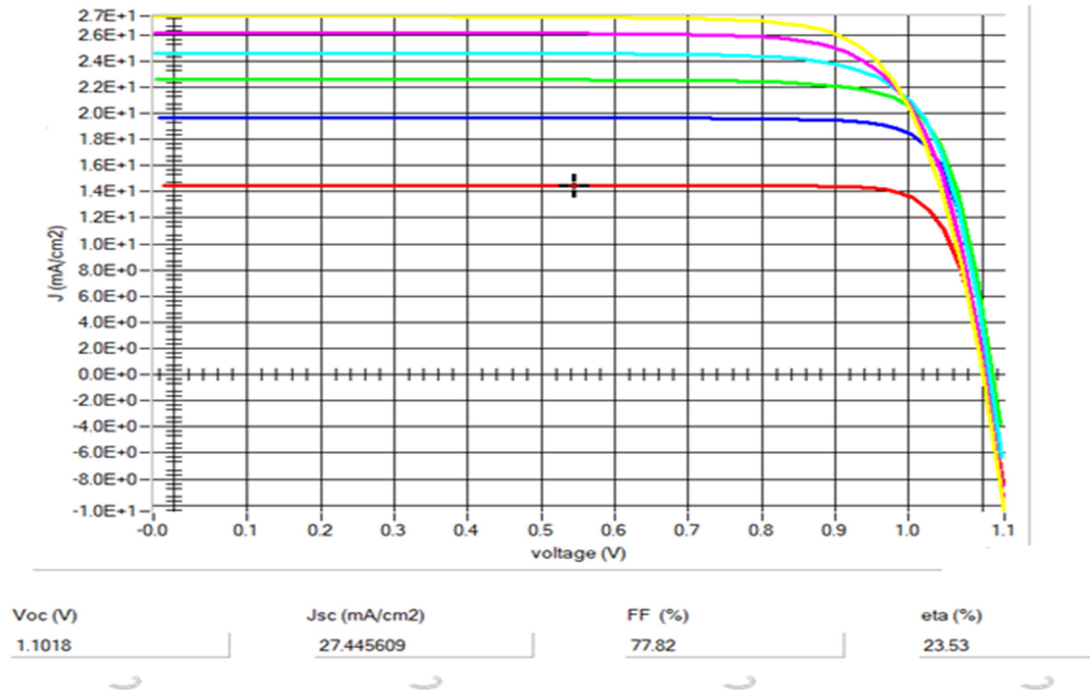


Figure 21: Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI₃ (phase tétragonale).

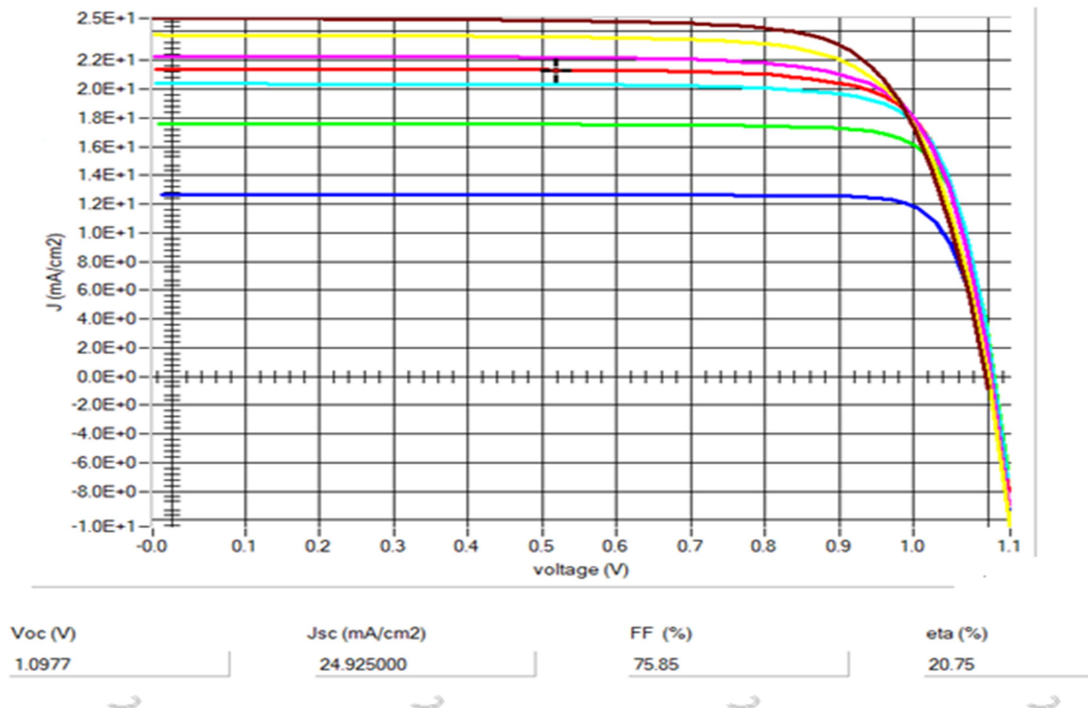


Figure 22 : Courbes J-V obtenues pour différentes épaisseurs de la couche absorbante MAPbI₃ (phase orthorhombique).

3.11.2 Tableaux récapitulatifs

Tableau 15: Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI₃
(phase cubique)

Epaisseur (nm)	Voc(v)	Jsc(mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
200	1.1114	18.56	85.58	17.66
400	1.1165	24.31	84.07	22.82
600	1.1114	27.13	82.16	24.78
800	1.1027	28.90	80.88	25.78
1000	1.0945	30.15	80.51	26.58
1200	1.0902	31.10	80.53	27.31

Tableau 16 : Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI₃
(phase tétragonale)

Epaisseur (nm)	Voc(v)	Jsc(mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
200	1.1047	14.74	86.11	13.77
400	1.1140	19.66	84.75	18.56
600	1.1144	22.59	82.37	20.74
800	1.1107	24.63	79.58	21.77
1000	1.1052	26.18	78.04	22.56
1200	1.1018	27.44	77.82	23.53

Tableau 17: Paramètres photovoltaïques obtenus pour différentes épaisseurs de MAPbI₃
(phase orthorhombique)

Epaisseur (nm)	Voc(v)	Jsc(mA/cm ²)	FF (%)	η (%)
200	1.1003	12.64	85.92	11.95
400	1.1090	17.56	83.64	16.30
600	1.1082	20.37	80.62	18.20
800	1.1045	22.29	77.76	19.15
1000	1.1002	23.75	75.97	19.86
1200	1.0977	24.92	75.85	20.75

3.11.3 Courbes de performances :

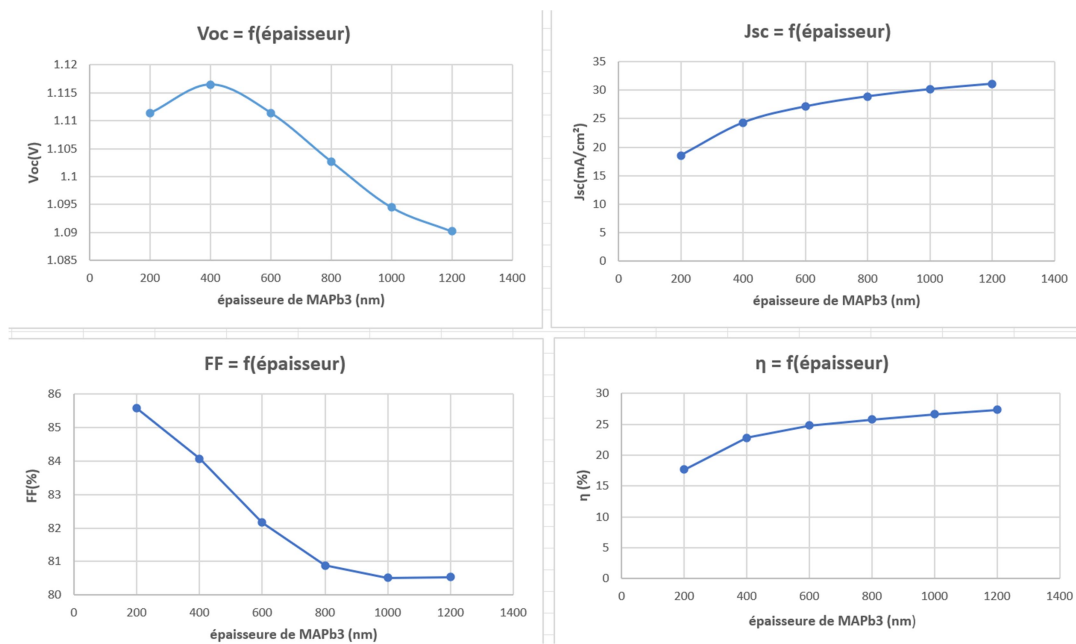


Figure 23: Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ (phase cubique) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire.

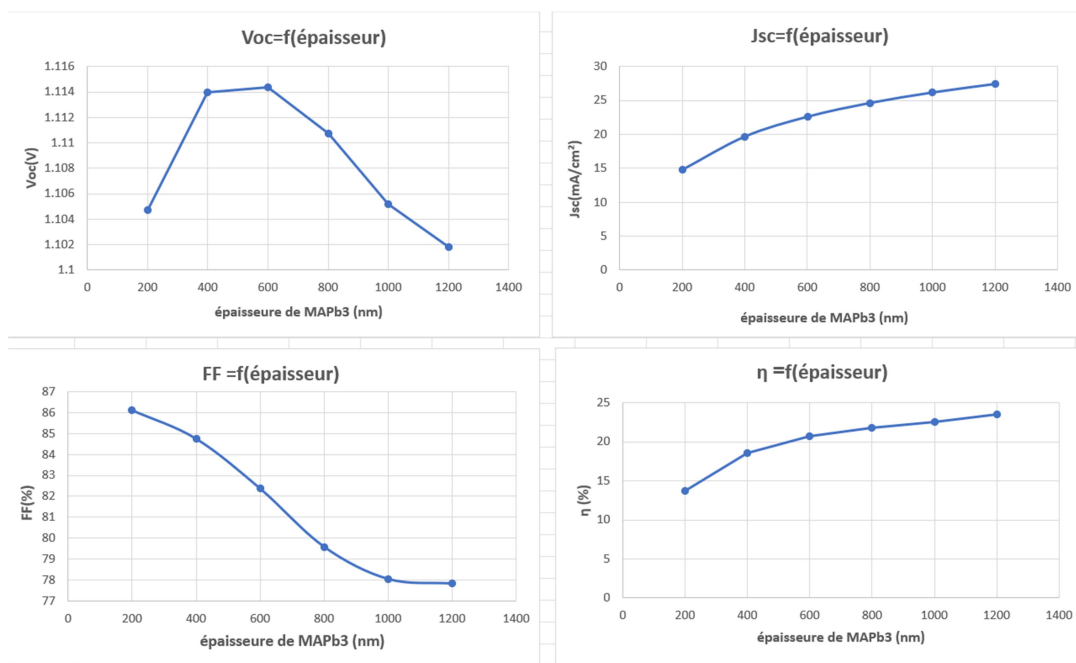


Figure 24 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ (phase tétragonale) sur les performances photovoltaïques de la cellule solaire.

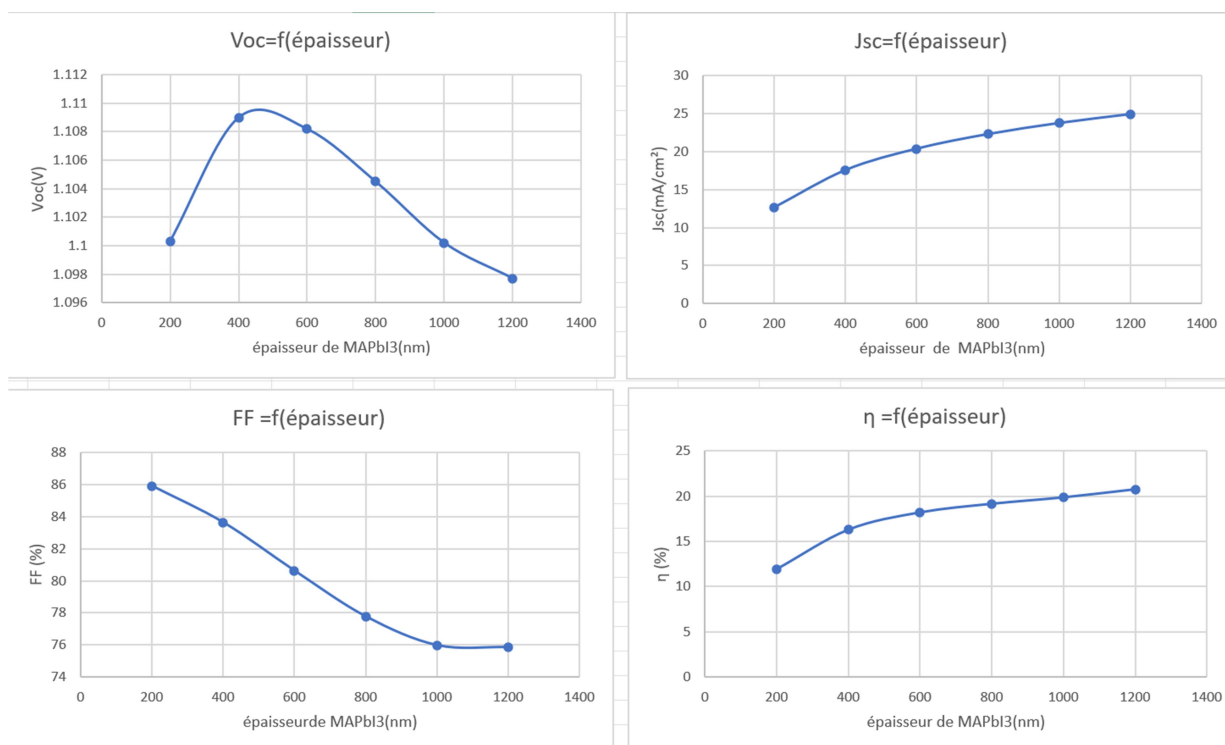


Figure 25 : Influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ (phase orthorhombique) sur les performances photovoltaïques

3.11.4 Interprétation des résultats

Les résultats des tableaux 15, 16 et 17 montrent l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante MAPbI₃ sur les paramètres photovoltaïques pour les trois phases cristallines.

- La phase cubique :

On observe une augmentation progressive du rendement η avec l'épaisseur, passant de 17.66% à 200 nm à 27.31% à 1200 nm. Cette amélioration est principalement due à l'augmentation de la densité de courant J_{sc} (18.56 à 31.10 mA/cm²), conséquence directe d'une meilleure absorption des photons dans une couche plus épaisse. La tension V_{oc} et le facteur de forme FF diminuent légèrement (V_{oc} passe de 1.1114 V à 1.0902 V, FF de 85.58% à 80.53%) en raison de l'augmentation des recombinaisons et des pertes résistives. La phase cubique, bien que théoriquement la plus rentable, n'est stable qu'au-delà de 54°C.

- La phase tétragonale

La même tendance est observée : η augmente de 13.77% (200 nm) à 23.53% (1200 nm). La valeur maximale de J_{sc} (27.44 mA/cm²) est inférieure à celle de la phase cubique, ce qui s'explique par son coefficient d'absorption plus faible. Le FF diminue de 86.11% à 77.82%, indiquant une augmentation des pertes résistives. Cette phase est la plus réaliste pour des applications à température ambiante (25°C).

- La phase orthorhombique

La même tendance aussi est observée pour cette phase : η augmente de 11.95% (200 nm) à 20.75% (1200 nm). La valeur maximale de J_{sc} (24.92 mA/cm²). C'est la moins rentable des trois phases, en raison du coefficient d'absorption plus petit. Le FF diminue de 85.92% à 75.85%. Cette phase n'est stable qu'à très basse température ($T < -113$), ce qui limite son intérêt pratique.

3.11.4.1 Comparaisons

La phase cubique offre un rendement supérieur d'environ 3-4% par rapport à la phase tétragonale, et d'environ 6-7% par rapport à la phase orthorhombique, sur toute la plage d'épaisseur. La phase tétragonale offre un rendement supérieur d'environ 2-3% par rapport à la phase orthorhombique. Cependant, seule la phase tétragonale est stable dans les conditions standards (température ambiante, 25°C). La phase cubique n'est stable qu'au-delà de 54°C, tandis que la phase orthorhombique n'est stable qu'en dessous de -113°C. L'épaisseur de 1200 nm donne les meilleurs rendements pour les trois phases :

- Phase cubique : $\eta = 27.31\%$

- Phase tétragonale : $\eta = 23.53\%$
- Phase orthorhombique : $\eta = 20.75\%$

L'augmentation du rendement au-delà de 800 nm est faible pour les trois phases, suggérant qu'un compromis entre performance et épaisseur peut être trouvé autour de 800-1000 nm. Ainsi, la phase tétragonale est la plus pertinente pour des applications réalistes.

3.11.5 Conclusion

Les résultats obtenus ont montré que les propriétés optiques de la couche MAPbI₃ jouent un rôle essentiel dans l'amélioration des performances photovoltaïques. L'étude comparative des différentes phases cristallines a révélé que la phase cubique présente les meilleures performances théoriques, mais elle n'est stable qu'à des températures supérieures à 54 °C, ce qui limite son utilisation pratique. En revanche, la phase tétragonale, stable à température ambiante, atteint un rendement de 23,53 %, ce qui en fait le choix le plus réaliste pour des applications photovoltaïques. L'étude de l'influence de l'épaisseur a montré une amélioration progressive des performances. Les meilleurs résultats ont été obtenus pour la phase cubique à 1200 nm : $V_{oc} = 1,0902$ V, $J_{sc} = 31,10$ mA/cm², $FF = 80,53$ %, $\eta = 27,31$ % ; pour la phase tétragonale, le cas réaliste : $V_{oc} = 1,1018$ V, $J_{sc} = 27,44$ mA/cm², $FF = 77,82$ %, $\eta = 23,53$ %. La phase orthorhombique a présenté les performances les plus faibles : $V_{oc} = 1,1018$ V, $J_{sc} = 24,92$ mA/cm², $FF = 75,85$ %, $\eta = 20,75$ %, et vu que sa stabilité ne se réalise qu'à -113 °C, une très basse température, elle n'attire pas l'attention des scientifiques. Ces résultats confirment l'importance de coefficient d'absorption et de l'épaisseur de la couche absorbante pour aboutir à des performances meilleures des cellules solaires pérovskites.

Conclusion générale

Dans ce travail, une étude numérique de la cellule solaire pérovskite de structure TCO/TiO₂/MAPbI₃/CuI a été réalisée à l'aide du logiciel SCAPS-1D afin d'étudier l'influence du coefficient d'absorption de la couche absorbante MAPbI₃ selon ses phases cristallographiques sur ses performances photovoltaïques.

Dans un premier temps, les propriétés générales des cellules solaires pérovskites ainsi que les principaux paramètres photovoltaïques ont été présentés. Ensuite, les propriétés physiques des différentes couches constituant la structure de cellule solaire étudiée, ont été analysées.

La partie simulation a permis d'évaluer l'effet des différentes phases cristallines de MAPbI₃ sur les performances photovoltaïques. Les résultats obtenus ont montré que la phase cubique présente les meilleures performances grâce au coefficient d'absorption plus élevé, permettant une meilleure absorption de la lumière et une augmentation significative du courant de court-circuit ainsi que du rendement de conversion.

Par la suite, une optimisation de cette structure a été effectuée pour les phases cubiques, tétragonale et orthorhombique. Les meilleurs résultats théoriques ont été obtenus pour la phase cubique avec un rendement maximal de 27.31% à 1200 nm ($J_{sc} = 31.10 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 80.53\%$, $V_{oc} = 1.0902 \text{ V}$). Pour la phase tétragonale, stable à température ambiante, le rendement maximal atteint 23.53% à 1200 nm ($J_{sc} = 27.44 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 77.82\%$, $V_{oc} = 1.1018 \text{ V}$). La phase orthorhombique a présenté les plus faibles performances par : $V_{oc} = 1.1018 \text{ V}$, $J_{sc} = 24.92 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 75.85\%$, $\eta = 20.75\%$.

La phase cubique donne les meilleures performances théoriques, mais elle n'est stable qu'au-delà de 54°C. En conditions réelles (température ambiante, 300 K), c'est la phase tétragonale qu'est la plus pertinente avec un rendement de 23.53%.

En perspective, l'inclusion d'autres phénomènes physiques complexes, tels que la dégradation thermique et les résistances série plus élevées, permettrait de rapprocher encore d'avantage ces résultats des records expérimentaux actuels.

Conclusion générale

Bien que cette étude numérique montre des performances exceptionnelles, il convient de préciser que ces valeurs sont obtenues dans un cadre de simulation 1D idéal.

En conclusion, les résultats obtenus dans ce travail confirment l'importance de l'optimisation des propriétés optiques et géométriques de la couche absorbante. L'étude des cellules pérovskite peut être approfondie dans des travaux futurs en étudiant l'influence d'autres paramètres tels que les défauts d'interface, la température, ou encore l'utilisation de nouveaux matériaux de transport de charge afin d'améliorer d'avantage leur stabilité et leur rendement.

Références

- [1] L. Beijing Perfectlight Technology Co., Understanding the Differences Between AM 0, AM 1.5, and AM 1.5G in the Solar Energy Field., Extrait du site technique officiel de Perfectlight, 2022.
- [2] <https://www.biologic.net/topics/perovskite-solar-cells-electrochemical-techniques-and-insights/>].
- [3] N. R. E. L. (NREL), Best Research-Cell Efficiencies Chart.
- [4] N. R. E. L. (NREL), “Basic Photovoltaic Principles and Methods,” p. 14.
- [5] Y. Zhao et K. Zhu, «Organic–inorganic hybrid perovskites for optoelectronic applications,» *Chemical Society Reviews*, vol. 45, n° 13, pp. 655-689, 2016.
- [6] D. S. Ginley et C. Bright, «Transparent conducting oxides,» *MRS Bulletin*, vol. 25, pp. 15-18, 2000.
- [7] J. A. Christians, «An inorganic hole conductor for perovskite solar cells: CuI,» *Journal of the American Chemical Society*, vol. 136, n° 12, pp. 758-764, 2014.
- [8] Xing, G; Mathewes , N; Sun , S, «Long-range balanced electron and hole transport lengths in CH₃NH₃PbI₃,» *Science*, vol. 342, n° 6156, pp. 344-347, 2013.
- [9] N. Kannan et M. vakeesan, «solar energy for future world: A review,» *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, pp. 1092-1105, 2016.
- [10] E. Kabir, «Solar energy: Potential and future prospects,» *Renewable and Sustainable Energy reviews*, vol. 82, pp. 894-900, 2018.
- [11] W. Shockley et Queisser, H. J, «Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells,» *Physical Review*, vol. 124, n° 12, pp. 510-519, 1961.
- [12] M. A. Green, «Silicon photovoltaic modules: A brief history of the first 50 years,» *Progress in Photovoltaics*, vol. 13, n° 15, pp. 447-455, 2005.
- [13] H. J. Snaith, «Perovskites: The emergence of a new era for low-cost, high-efficiency

- solar cells,» *Journal of Physical Chemistry Letters*, vol. 4, n° 121, pp. 3623-3630, 2013.
- [14] S. D. Stranks, «Metal-halide perovskites for photovoltaic applications,» *Nature Nanotechnology*, vol. 10, n° 15, pp. 391-402, 2015.
- [15] B. ROOSE, S. Pathak and U. Steiner, “Doping of TiO₂ for sensitized solar cells,” *chemical society reviews*, vol. 44, no. 22, pp. 8326-8349, 2015.
- [16] J. Yang, «Recent Advances in Inverted Perovskite Solar Cells,» *Energies*, vol. 15, 2022.
- [17] ASTM, «Standard Tables for Reference Solar Spectral Irradiances at Air Mass 1.5,» 2012.
- [18] M. Burgelman, «Modelling polycrystalline semiconductor solar cells,» *Thin Solid Films*, vol. 361–362, pp. 527-532, 2000.
- [19] M. Burgelman, «SCAPS-1D User Manual,» University of Gent, 2016.
- [20] K. Gamal, M. Gamal, A. Okaz, N. Shehata et I. Kandas, «Comprehensive performance analysis of perovskite solar cells based on different crystalline structures of MAPbI₃,» *Optical and Quantum Electronics*, vol. 56, p. 827, 2024.
- [21] M. A. Green, *Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications*, Prentice-Hall, 1982.
- [22] NREL, «Best Research-Cell Efficiencies Chart,» 2023. [En ligne]. Available: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.
- [23] M. G. F. R. W.-J. Z. Guo, “understanding defects in prevoskite solar cells through computation: current knowledgeand future challenge,” *adv science*, vol. 11, p. 2305799, 2024.

ANNEXES

1-Annexe : Coefficients d'absorption utilisés dans la simulation

Tableau A : Valeurs du coefficient d'absorption de la phase cubique du MAPbI₃

Longueur d'onde λ (nm)	α (m ⁻¹)
300	6.51869E+06
320	7.22168E+06
340	6.83081E+06
360	8.32119E+06
380	1.08617E+07
400	1.11271E+07
420	1.2175E+07
440	1.24016E+07
460	1.22733E+07
480	1.10074E+07
500	1.05291E+07
600	5.86249E+06
700	2.85832E+06
800	1.21041E+06
900	4.37393E+05

Tableau B : Valeurs du coefficient d'absorption de la phase tétragonale du MAPbI₃

Longueur d'onde λ (nm)	α (m ⁻¹)
300	8.0E+06
320	7.0E+06
340	9.5E+06
360	1.10E+07
380	1.24E+07
400	1.29E+07
420	1.22E+07
440	1.20E+07
460	1.05E+07
480	9.7E+06
500	9.5E+06
600	3.6E+06
700	1.4E+06
800	5.5E+05
900	2.5E+05

Tableau C : Valeurs du coefficient d'absorption de la phase Orthorombique du MAPbI₃

Longueur d'onde λ (nm)	α (m ⁻¹)
300	7.72871E+06
320	7.72266E+06
340	1.01900E+07
360	1.13764E+07
380	1.22539E+07

400	1.19831E+07
420	1.05640E+07
440	9.49801E+06
460	8.47642E+06
480	8.82368E+06
500	7.22796E+06
600	2.73806E+06
700	1.16299E+06
800	3.38479E+05
900	8.81042E+04