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 d'électronique

Mémoire

Présenté pour obtenir

LE DIPLOME DE MASTER

FILIERE : Electronique

Spécialité : Microélectronique

Par

CHOUYA Anis

Intitulé

Modélisation et Simulation des Cellules Solaires Basées sur la Pérovskite

Soutenu le : 12 / 06 /2024

Devant le Jury composé de :

Nom & Prénom	*Grade*	*Qualité*	*Etablissement*
Dr. SAIDANI Okba	*MCB*	*Président*	*Univ-BBA*
Dr. YOUSFI Abderrahim	*MCA*	*Encadreur*	*Univ-BBA*
Dr. FARES Fahima	*MCA*	*Examinateur*	*Univ-BBA*

Année Universitaire 2024/2025

DEDICACE

Je dédie ce travail, tout d'abord, à mes chers parents, pour leur amour inconditionnel, leurs sacrifices, leur patience et leur soutien indéfectible tout au long de mon parcours.

À mes frères et sœurs, pour leur présence, leurs encouragements et leur affection.

À mes amis Sofiane, Waïl et Yacine, pour leur amitié sincère, leur aide précieuse et les moments partagés qui ont marqué ces années d'études.

REMERCIEMENTS

Avant tout, je rends grâce à Dieu Tout-Puissant, source de sagesse et de persévérance, pour m'avoir guidé et soutenu tout au long de ce parcours, et pour m'avoir permis d'achever ce travail dans les meilleures conditions.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à Monsieur **YOUSFI Abderrahim**, mon encadrant, pour sa disponibilité constante, la qualité de son encadrement, ainsi que la richesse de ses conseils et de ses remarques. Son accompagnement attentif, à la fois rigoureux et bienveillant, a grandement contribué à l'aboutissement de ce mémoire.

J'adresse également mes sincères remerciements à Monsieur **SAIDANI Okba**, dont l'aide précieuse, la bienveillance et les conseils éclairés m'ont été d'un grand appui tout au long de ce travail.

Je tiens à rendre un hommage particulier à la mémoire de Monsieur **ZITOUNI Messai**, pour son aide précieuse, ses encouragements et son soutien au cours de mes études. Sa bienveillance et ses conseils resteront gravés dans ma mémoire.

Mes remerciements s'étendent à l'ensemble du corps enseignant du **Département d'Électronique** pour la qualité de l'enseignement dispensé et pour leur dévouement constant à la formation des étudiants.

Table des matières

ملخص **i**

Abstract **ii**

Résumé **iii**

Liste des symboles **iv**

Liste des abréviations **vi**

Liste des figures **vii**

Liste des tableaux **ix**

Introduction Générale **x**

1 Notions générales sur les cellules solaires **1**

1.1 Introduction 2

1.2 Historique de l'énergie photovoltaïque 2

1.3 Rayonnement solaire 3

1.3.1 Spectre solaire 4

1.3.2 Masse d'Air 6

1.4 Cellule solaire 6

1.4.1 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque 7

1.4.2 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire 9

1.4.3 Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque 10

1.5 Paramètres d'une cellule solaire 11

1.5.1 Densité de courant en court-circuit (Jsc) 11

1.5.2 Courant de court-circuit (Icc) 11

1.5.3 Tension en circuit ouvert (Voc) 12

1.5.4 Facteur de forme (FF) 12

1.5.5 Rendement photovoltaïque (η) 13

1.5.6 Puissance maximale (P_m) 13

1.6 Résistances parasites 14

1.6.1 Résistance Série . . . 14
1.6.2 Résistance shunt R_{sh} . . . 15
1.7 Conclusion . . . 16
Bibliographie Chapitre I . . . 17

2 Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite 19
2.1 Introduction . . . 20
2.2 Historique . . . 20
2.3 Matériau pérovskite . . . 21
2.3.1 Structure cristallographique de la pérovskite . . . 21
2.3.2 Propriétés opto-électroniques . . . 22
2.4 Applications des matériaux pérovskites . . . 25
2.5 Architecture des cellules solaires Pérovskites . . . 26
2.6 Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites . . . 27
2.7 Conclusion . . . 28
Bibliographie Chapitre II . . . 29

3 Résultats de simulation numérique et interprétation 31
3.1 Introduction . . . 32
3.2 Présentation du logiciel SCAPS . . . 32
3.2.1 Utilisation du logiciel SCAPS . . . 34
3.3 Description de la structure de la cellule solaire à base des pérovskites . . . 36
3.3.1 Description de la structure . . . 36
3.3.2 Modèles et paramètres de simulation . . . 37
3.3.3 Diagramme de bande d'énergie . . . 38
3.4 Résultats et discussion . . . 40
3.4.1 Effet de l'épaisseur de la couche de pérovskites . . . 40
3.4.2 Effet des défauts de la couche de pérovskites . . . 41
3.4.3 Effet de l'épaisseur de la couche ETL . . . 42
3.4.4 Effet de la température . . . 44
3.4.5 Effet de l'épaisseur de la couche HTL . . . 45
3.4.6 Effet de la résistance série et shunt . . . 46
3.5 Conclusion . . . 48
Bibliographie Chapitre III . . . 49

Conclusion Générale 50

ملخص

تتركز الجهود البحثية الحديثة على تحسين أداء الخلايا الشمسية المعتمدة على مادة $K_2CuCrCl_6$ من خلال دمج نماذج التعلم الآلي مع محاكي SCAPS-1D. تم توليد مجموعة بيانات شاملة لدراسة تأثير المعلمات الرئيسية، بما في ذلك التغيرات في طبقات نقل الإلكترونات (ETL) وطبقات نقل الثقوب (HTL)، وسُمك الممتص، بالإضافة إلى تأثيرات العيوب، والمواد المخدِّرة، والشوائب داخل مادة $K_2CuCrCl_6$. كشفت التحليلات الإحصائية الدقيقة عن وجود ارتباط قوي بين القيم المحاكاة والقيم الفعلية، مما يدل على موثوقية النموذج التنبؤي، كما يتضح من معامل ارتباط بيرسون الذي بلغ 0.950 في توقع كفاءة تحويل الطاقة (PCE). وبناءً على نتائج النموذج المحسّنة، حددت المحاكاة باستخدام SCAPS-1D تكوينًا مثاليًا للجهاز يتألف من طبقة ETL من WS_2 بسُمك 100 nm، وممتص من $K_2CuCrCl_6$ بسُمك 800 nm، وطبقة HTL من CBTS بسُمك 500 nm، محققًا كفاءة تحويل طاقة بلغت 27.99%. تُبرز هذه النتائج الإمكانيات الواعدة لمقاربات التعلم الآلي في تحسين تصميم وأداء الخلايا الشمسية المعتمدة على البيروفسكايت، مما يمهّد الطريق نحو تقنيات كهروضوئية عالية الكفاءة وقابلة للتطبيق وقائمة على تجارب مُحقَّقة.

الكلمات المفتاحية: $K_2CuCrCl_6$؛ خلية شمسية؛ SCAPS-1D؛ كفاءة تحويل الطاقة (PCE).

Abstract

Recent advances have focused on the optimization of perovskite solar cells based on $K_2CuCrCl_6$ through the integration of machine learning models with the SCAPS-1D simulator. A comprehensive dataset was generated to evaluate the influence of key parameters, including variations in electron transport layers (ETL) and hole transport layers (HTL), absorber thickness, as well as the effects of defects, doping, and impurities in the $K_2CuCrCl_6$ absorber. A thorough statistical analysis revealed a strong correlation between the simulated and real values, confirming the reliability of the predictive model, as evidenced by a Pearson correlation coefficient of 0.950 in predicting the power conversion efficiency (PCE). SCAPS-1D simulations, guided by optimized results from the model, identified an optimal device configuration consisting of a 100nm WS_2 ETL, an 800nm $K_2CuCrCl_6$ absorber, and a 500 nm CBTS HTL, achieving a PCE of 27.99 %. These findings underscore the potential of machine learning-based approaches to enhance the design and optimization of perovskite solar cells, paving the way for high-efficiency, scalable, and experimentally validated photovoltaic technologies.

Keywords: $K_2CuCrCl_6$; Solar Cell; SCAPS-1D; PCE.

Résumé

L'optimisation des performances des cellules solaires à pérovskite basées sur le composé $K_2CuCrCl_6$ a été réalisée par l'intégration de modèles d'apprentissage automatique au simulateur SCAPS-1D. Un ensemble de données exhaustif a été généré afin d'évaluer l'influence de paramètres clés, notamment les variations des couches de transport d'électrons (ETL) et de trous (HTL), l'épaisseur de l'absorbeur, ainsi que les effets liés aux défauts, au dopage et aux impuretés dans l'absorbeur $K_2CuCrCl_6$. L'analyse statistique approfondie a révélé une forte corrélation entre les valeurs simulées et les valeurs réelles, attestant de la fiabilité du modèle prédictif. Cette fiabilité a été confirmée par un coefficient de corrélation de Pearson de 0,950 dans la prédiction du rendement de conversion de puissance (PCE). Les simulations SCAPS-1D, guidées par les résultats optimisés issus du modèle, ont permis d'identifier une configuration optimale du dispositif, composée d'une couche ETL en WS_2 de 100 nm, d'un absorbeur $K_2CuCrCl_6$ de 800 nm et d'une couche HTL en CBTS de 500 nm, atteignant un rendement de conversion de puissance de 27,99 %. Ces résultats mettent en évidence le potentiel des approches basées sur l'apprentissage automatique pour améliorer la conception et l'optimisation des cellules solaires à pérovskite, ouvrant ainsi la voie à des technologies photovoltaïques à haut rendement, évolutives et validées expérimentalement.

Mots-clés : $K_2CuCrCl_6$; Cellule solaire ; SCAPS-1D ; PCE.

Liste des symboles

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

X_e	Affinité électronique	eV
μ_n	Mobilité des électrons	$cm^2/V{\cdot}s$
μ_p	Mobilité des trous	$cm^2/V{\cdot}s$
R_n	Taux de recombinaison des électrons	$cm^{-3}s^{-1}$
R_p	Taux de recombinaison des trous	$cm^{-3}s^{-1}$
EQE	Rendement quantique externe	%

Liste des abréviations

AM	Masse d'air.
AM0	Spectre solaire en dehors de l'atmosphère terrestre.
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.
(CdTe)	Le tellurure de cadmium.
(CIGS)	Le séléniure/sulfure de cuivre-indium et de gallium.
DSSC	Cellule solaire sensibilisée par colorant.
$CaTiO_3$	Titanate de calcium
AMX3	Structure d'un cristal de pérovskite générique.
LED	Diode électroluminescente
ETL	Couche de transport des électrons
HTL	Couche de transport des trous
Al	L'aluminium
Ag	L'argent
$K_2CuCrCl_6$	'K' le potassium, 'Cu' le cuivre, 'Cr' le chrome et 'Cl' le chlore.
WS_2	'W' désigne le tungstène et 'S' le soufre.
CBTS	'Cu' désigne le cuivre, 'Ba' le baryum, 'Sn' l'étain, et 'S' le soufre.

Liste des figures

Figure 1.1 Les Cellules photovoltaïque

Figure 1.2 Spectres solaires selon les conditions atmosphériques AM0, AM1 et AM1.5

Figure 1.3 Spectres solaires AM0, AM1.5G et AM1.5D

Figure 1.4 Illustration de l'Air Masse

Figure 1.5 Structure basique d'une cellule solaire

Figure 1.6 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Figure 1.7 Etapes successives impliquées dans une cellule photovoltaïque

Figure 1.8 Caractéristique I-V d'une cellule photovoltaïque

Figure 1.9 Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

Figure 1.10 Puissance maximale idéale et pratique

Figure 1.11 Effet de la résistance série sur la caractéristique J-V

Figure 1.12 Influence des résistances shunt sur la caractéristique I-V

Figure 2.1 Un type de pérovskite

Figure 2.2 Représentation de la structure de la pérovskite

Figure 2.3 Courbe d'absorption des matériaux

Figure 2.4 Coefficient d'extinction en fonction de la longueur d'onde dans le domaine du visible

Figure 2.5 Exemples d'applications des matériaux pérovskites

Figure 2.6 Les quatre architectures les plus utilisées dans les cellules solaires à pérovskite

Figure 2.7 Diagramme de transfert des électrons et processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite

Figure 3.1 Interface de saisie des paramètres dans SCAPS

Figure 3.2 Résultat SCAPS

Figure 3.3 La fenêtre du panneau d'action du logiciel SCAPS

Figure 3.4 Illustration schématique de l'architecture de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS

Figure 3.5 Diagramme de bande à base de $K_2CuCrCl_6$

Figure 3.6 Effet de l'épaisseur de la pérovskite $K_2CuCrCl_6$

Figure 3.7 Effet de la densité de défauts N_T

Figure 3.8 Effet de l'épaisseur ETL (WS_2)

Figure 3.9 Effet de la température

Figure 3.10 Effet de l'épaisseur HTL (CBTS)

Figure 3.11 Effet de la résistance série Rs

Figure 3.12 Effet de la résistance shunt Rsh

Liste des tableaux

Tableau 2.1 Caractéristiques opto-électroniques de différents matériaux

Tableau 3.1 Paramètres d'optimisation

Introduction Générale

Les principales ressources énergétiques actuellement utilisées dans le monde comprennent les combustibles fossiles (pétrole, gaz naturel et charbon), l'énergie nucléaire et les énergies renouvelables telles que l'hydroélectricité, le solaire, l'éolien et la biomasse. Comme l'illustre la figure 1, une évaluation complète de la consommation énergétique mondiale révèle une forte dépendance aux combustibles fossiles, qui dominent le mix énergétique malgré l'intérêt croissant pour les alternatives durables [1].

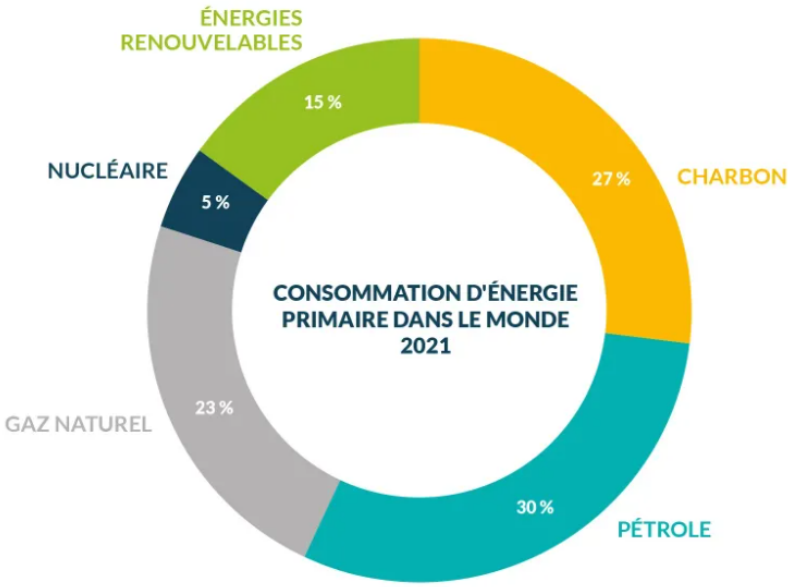


Figure 1 . Répartition par type d'énergie de la consommation mondiale d'énergie [2].

L'exploitation intensive des combustibles fossiles a eu de graves conséquences environnementales, notamment des marées noires, la pollution atmosphérique et l'accélération du réchauffement climatique, contribuant ainsi à des phénomènes tels que l'élévation du niveau de la mer et l'augmentation des inondations. Néanmoins, malgré les risques environnementaux bien documentés et l'épuisement imminent des réserves de combustibles fossiles (Figure 2),les activités d'exploration et d'extraction, notamment offshore, se poursuivent sans relâche.

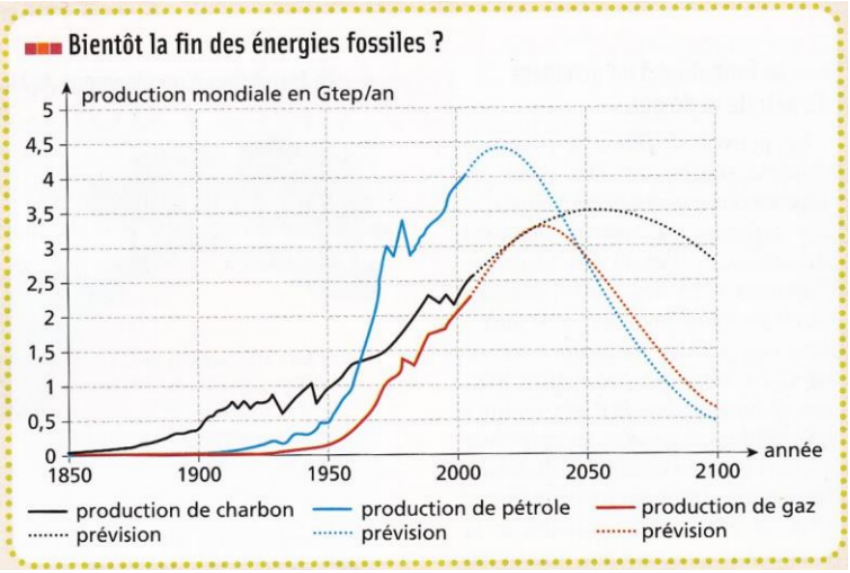


Figure 2 . Production des énergies fossiles en Gtep/an (1850-2100) dans le monde [3].

En réponse à la demande énergétique mondiale croissante (figure 3) et au besoin urgent de protéger l'environnement, d'importants efforts de recherche ont été consacrés au développement et à l'optimisation des sources d'énergie renouvelables, à savoir l'énergie solaire, éolienne, hydroélectrique, géothermique et de la biomasse.

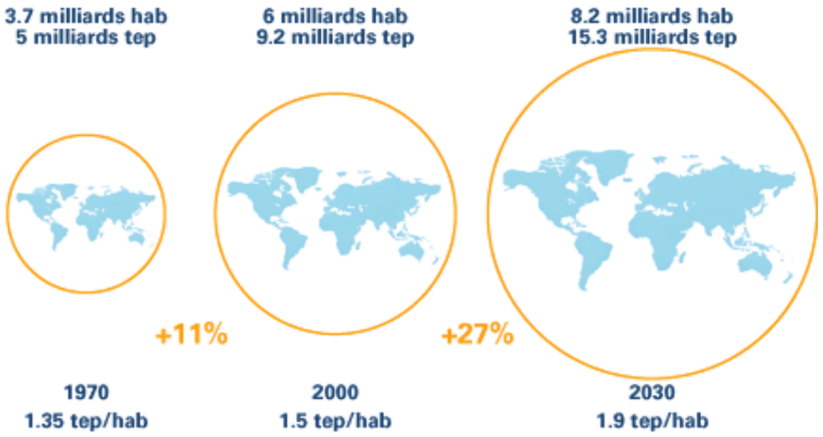


Figure 3 . Comparaison de l'évolution de la population mondiale et de la consommation énergétique mondiale, par habitant [4].

Parmi les différentes sources d'énergie renouvelables, l'énergie solaire se distingue comme une solution particulièrement prometteuse et durable pour accompagner la transition énergétique mondiale. L'énergie solaire photovoltaïque (PV), qui consiste à convertir directement la lumière du soleil en électricité grâce à des matériaux semi-conducteurs, a connu un essor considérable.

Le silicium, en particulier, domine le marché du photovoltaïque représentant environ 91 % de la production mondiale de cellules solaires (figure 4) malgré la concurrence croissante de matériaux alternatifs tels que le tellurure de cadmium, les chalcogénures et l'arséniure de gallium [1].

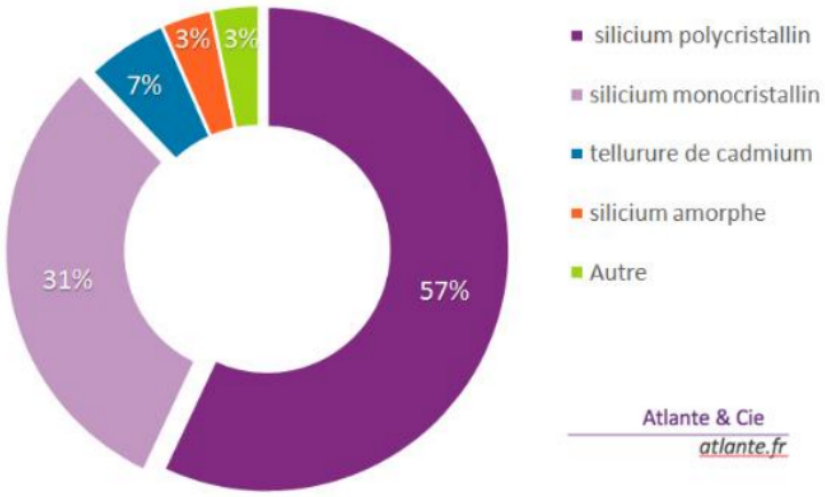


Figure 4 . Parts de marché des différentes technologies solaires 2015 [5].

Cependant, les cellules solaires conventionnelles sont confrontées à plusieurs limites, notamment en termes d'efficacité et de coût. Par exemple, même en laboratoire, les cellules à base de silicium et de pérovskite ont atteint un rendement maximal de 25,2 %, et leur coût de production élevé est largement imputable à la complexité des technologies de fabrication utilisées. Ces défis ont intensifié l'intérêt scientifique pour les matériaux alternatifs, tels que les pérovskites, qui ont enregistré des progrès remarquables, passant de 12 % à 25,2 % d'efficacité en laboratoire en seulement sept ans. Malgré ces progrès rapides, les cellules solaires à pérovskite continuent de présenter des problèmes importants, notamment en termes de stabilité opérationnelle et chimique à long terme. Par conséquent, afin d'améliorer les performances et la durabilité des cellules solaires tout en réduisant les coûts de production, cette étude se concentre sur la conception et la caractérisation de cellules solaires hybrides à base de pérovskites et de biomatériaux, en accordant une attention particulière aux technologies de fabrication employées [6].

Dans cette étude, les performances d'une cellule solaire de nouvelle génération ont été évaluées à l'aide du simulateur numérique **SCAPS-1D**, en mettant en œuvre le $\mathbf{K_2CuCrCl_6}$ comme matériau absorbant principal. La structure étudiée, composée des couches $\mathbf{WS_2}$ / $\mathbf{K_2CuCrCl_6}$ / **CBTS**, a permis d'atteindre une efficacité de conversion remarquable de **27,99 %** dans des conditions standards de température (300 K). Une analyse approfondie a été menée afin d'étudier l'impact de plusieurs paramètres critiques sur les performances de la cellule, notamment l'épaisseur des différentes couches, la densité de défauts intrinsèques du matériau absorbant, ainsi que

les résistances série et shunt. Les résultats obtenus mettent en évidence le **fort potentiel du $K_2CuCrCl_6$** en tant que matériau semi-conducteur alternatif, combinant *haut rendement, stabilité thermique et compatibilité avec des technologies à faible coût*, ce qui le positionne comme un candidat prometteur pour le développement futur de cellules solaires à hautes performances.

Ce mémoire est structuré en trois chapitres :

Chapitre I sera consacré à l'étude des bases du rayonnement solaire et de son interaction avec les matériaux semi-conducteurs. Nous y aborderons les mécanismes d'absorption de la lumière et la génération de paires électron-trou, ainsi que le principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques et les principaux paramètres électriques qui en déterminent les performances.

Chapitre II, nous retracerons l'évolution des matériaux à structure pérovskite, en mettant en lumière leur organisation cristallographique et leurs propriétés opto-électroniques distinctives. Ce chapitre traitera également de leurs principales applications, avec un focus particulier sur l'architecture des cellules solaires à pérovskites et les mécanismes fondamentaux assurant leur fonctionnement.

Le **Chapitre III** est consacré à l'outil de simulation *SCAPS-1D*, dont nous introduirons brièvement le fonctionnement et la méthode d'utilisation appliquée à la modélisation des cellules solaires. Nous détaillerons ensuite la structure de la cellule à pérovskite $K_2CuCrCl_6$, ses propriétés physiques, ainsi que les paramètres et modèles utilisés dans la simulation numérique. Enfin, une analyse approfondie des résultats de simulation sera présentée afin d'évaluer les performances électriques de la cellule étudiée.

Références

1. Diallo, A. A. (2019). Elaboration et caractérisation des cellules solaires hybrides (Pérovskite-biomatériaux).
2. www.pensermieux.com/definitions/energie-primaire-energie-finale/
3. lesenergiesfossiles.over-blog.com/2014/05/2-limitation-des-ressources.html
4. 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).
5. Diallo, A. A. (2019). Elaboration et caractérisation des cellules solaires hybrides (Pérovskite-biomatériaux).
6. Enerzine. (2018, 6 juin). Rendement record pour des cellules solaires en silicium et pérovskite. www.enerzine.com/rendement-record-pour-des-cellules-solaires-en-silicium-et-perovskite/41772-2018-06

Chapitre 1

Notions générales sur les cellules solaires

1.1 Introduction

Le rayonnement solaire, avec un flux énergétique estimé à 173 000 térawatts, constitue une source largement suffisante pour répondre aux besoins énergétiques mondiaux. Depuis la découverte de l'effet photovoltaïque en 1839, les recherches ont visé à dépasser les limitations des matériaux traditionnels. Les avancées récentes, notamment les cellules à pérovskite et les dispositifs tandem, permettent d'atteindre des rendements supérieurs à 33 %. Ce chapitre examine les fondements théoriques de la conversion photovoltaïque ainsi que les défis liés à la stabilité des matériaux, tout en soulignant leur rôle central dans la transition énergétique.

1.2 Historique de l'énergie photovoltaïque

Brièvement, l'effet PV a été découvert par le physicien français Edmond BECQUEREL en 1839, par l'étude du courant produit entre deux électrodes enrobées de platine dans un récipient avec un électrolyte illuminée par le soleil. Becquerel a constaté que l'intensité du courant a changé lorsque ces électrodes sont exposées à la lumière. En 1873, l'ingénieur britannique Willoughby Smith et son assistant Joseph May ont découvert que le semiconducteur Se (Se) a changé sa résistance lorsqu'il est exposé à la lumière. Peu après en 1876, ADAMS et DAY ont étudié l'effet de la lumière sur les courants traversant le sélénium (Se) avec des contacts en platine. Ils ont trouvé ultérieurement qu'une force électromotrice pourrait être induite à travers les échantillons lorsqu'ils sont illuminés. L'existence de cette force électromotrice fut confirmée par premièrement FRITTS, en 1883 qui fabriqua une cellule en Se avec une contre électrode en or avec un rendement de conversion de l'ordre de 1%, mais le rendement de sa cellule étant très faible empêcha à l'époque son utilisation, et puis par MINCHIN dont les cellules furent des structures Al/Electrolyte/Se/Al ayant des photo-tensions supérieures à 0,5 volt à la lumière du jour. Il semble aussi que MINCHIN soit la première personne à suggérer que les cellules PV pourraient être utilisées pour produire de l'électricité avec le rayonnement solaire.

Le principe PV a été expliqué par Albert EINSTEIN en 1905, c'est pour cette explication qu'il a reçu le prix Nobel de Physique en 1921. En 1930, on vue le jour les premières vraies cellules à base d'Oxyde Cuivreux puis au (Se). A la fin de la deuxième guerre mondiale, en 1939, l'ingénieur américain Russel OHL a découvert la jonction (pn) ceci entraina la production des cellules stables au Si avec un rendement de l'ordre de 6 % en 1954 par les trois chercheurs américains, CHAPIN, FULLER et PEARSON. En 1955 PRINCE a publié la première étude analytique du rendement PV, et suivi de LOFERSKI a montré qu'il existe une bande interdite optimale de l'ordre de 1,5 eV pour une photopile à homo jonction (pn). Ces résultats ont stimulé des études pour d'autres matériaux tels que l'arséniure de gallium, le tellurure de cadmium et le phosphure d'indium.

La force mobilisatrice derrière le développement intensif des cellules solaires jusqu'en 1970 fut les programmes spatiaux. Les premières cellules furent mises en orbite en mars 1958 pour

fournir la puissance électrique dans les missions spatiales. L'année 1973 fut celle de la crise mondiale de l'énergie (pétrole). Elle a obligé les payes dépendantes de ces énergies fossiles à mobiliser leur intelligentsia à chercher de nouvelles formes d'énergies renouvelables, propres et bon marché. Il a été admis alors que les sources d'énergies renouvelables deviendraient primordiales dans les prochaines décennies et le développement des cellules solaires pour l'utilisation terrestre serai de plus en plus répandu, ce qui explique l'augmentation spectaculaire de la réalisation des centrales PV ayant des puissances de plusieures dizaines de GW, de telle sorte qu'entre 2010 et 2017, la puissance installée du parc PV mondial est passée de (40 GW) fin 2010 à (402 GW) fin 2017 [1].



Figure 1.1 . Les Cellules photovoltaïque [2].

1.3 Rayonnement solaire

Le Soleil constitue la plus importante source d'énergie au monde. Dans l'espace, hors de l'atmosphère terrestre, l'énergie totale transportée par le rayonnement solaire sur la distance Soleil-Terre est de l'ordre de $1350\,\mathrm{W\,m^{-2}}$ (AM0) (voir Figure 1.2). Cette énergie s'étend de l'ultraviolet ($0.2\,\mu\mathrm{m}$) à l'infrarouge lointain ($2.5\,\mu\mathrm{m}$). À la surface de la Terre, le spectre solaire subit une atténuation et diffère alors de celui mesuré dans l'espace. Ce changement est dû à l'absorption et à la diffusion par les gaz, l'eau et les poussières de l'atmosphère. En effet, des gaz tels que l'ozone (O_3), la vapeur d'eau (H_2O) et le dioxyde de carbone (CO_2) absorbent certaines bandes spécifiques de fréquences, notamment dans l'infrarouge. La diffusion par les molécules et les particules atmosphériques provoque une atténuation plus uniforme du spectre, notamment dans le domaine visible. Par ailleurs, les conditions climatiques et la latitude du lieu d'observation influencent également le spectre solaire transmis [3]. La notion d'Air Mass (AM) a été introduite pour permettre une comparaison universelle des performances des cellules solaires et caractériser le spectre solaire en fonction de l'angle θ du Soleil par rapport au zénith. On distingue :

- **AM0** : Irradiance hors atmosphère, utilisée pour simuler le comportement des cellules en conditions spatiales, $P \approx 1350\,\mathrm{W\,m^{-2}}$;
- **AM1** : Irradiance directe reçue sur Terre lorsque le Soleil est au zénith ($\theta = 0°$), $P \approx 1000\,\mathrm{W\,m^{-2}}$;
- **AM1.5** : Spectre le plus couramment utilisé, correspondant à un angle solaire de $45°$. Deux variantes existent :
  - **AM1.5D** : Rayonnement direct uniquement, $P \approx 833\,\mathrm{W\,m^{-2}}$;
  - **AM1.5G** : Rayonnement global (direct + diffus), $P \approx 1000\,\mathrm{W\,m^{-2}}$.

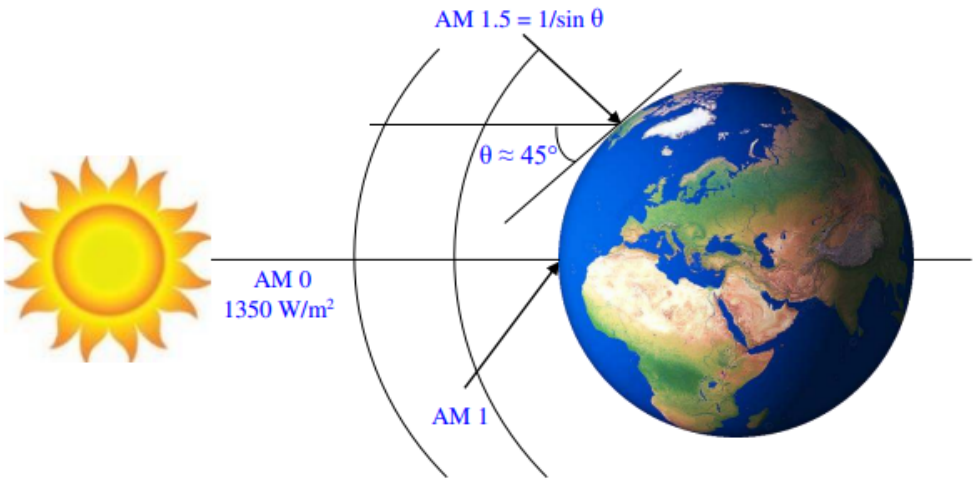


Figure 1.2 . Spectres solaires selon les conditions atmosphériques : AM0, AM1 et AM1.5 [4].

1.3.1 Spectre solaire

Le Soleil est une source primaire de lumière, composée d'un ensemble de rayonnements électromagnétiques se propageant à une vitesse estimée à $c \approx 3 \times 10^8\,\mathrm{m\,s^{-1}}$. La lumière solaire contient principalement trois types de rayonnement : le visible, l'ultraviolet et l'infrarouge, chacun caractérisé par une longueur d'onde différente. Les photons, particules élémentaires de la lumière, transportent l'énergie lumineuse sous forme de rayonnement électromagnétique. Cette lumière peut être analysée à la fois par la théorie ondulatoire et la théorie corpusculaire [5]. L'énergie d'un photon est donnée par :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} = \frac{1.24}{\lambda} \tag{1.1}$$

où :

- ν : fréquence de l'onde électromagnétique [Hz],

- h : constante de Planck, $h = 6.626 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$,
- c : vitesse de la lumière, $c \approx 3 \times 10^{8}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$,
- λ : longueur d'onde $[\mathrm{nm}]$.

L'angle d'incidence du rayonnement solaire est représenté par l'indice d'air mass (AM), défini par la formule suivante :

$$AM = \frac{1}{\cos\theta} \tag{1.2}$$

Où θ est l'angle entre le Soleil et le zénith.

La portion la plus significative du spectre solaire se trouve dans les plages visible et infrarouge. Bien que la Terre connaisse des variations d'irradiation en fonction des lieux et des conditions climatiques, le paramètre AM ne tient pas compte de cette diversité. Le spectre AM1.5G, couramment utilisé pour les tests normalisés, donne une irradiance de $970\,\mathrm{W\,m^{-2}}$, généralement arrondie à $1\,\mathrm{kW\,m^{-2}}$.

L'intensité I_d reçue à la surface terrestre peut être estimée par la formule empirique suivante :

$$I_d = 1.33\,(0.7\,\mathrm{AM})^{0.67} \tag{1.3}$$

avec I_d en $\mathrm{kW\,m^{-2}}$ [5].

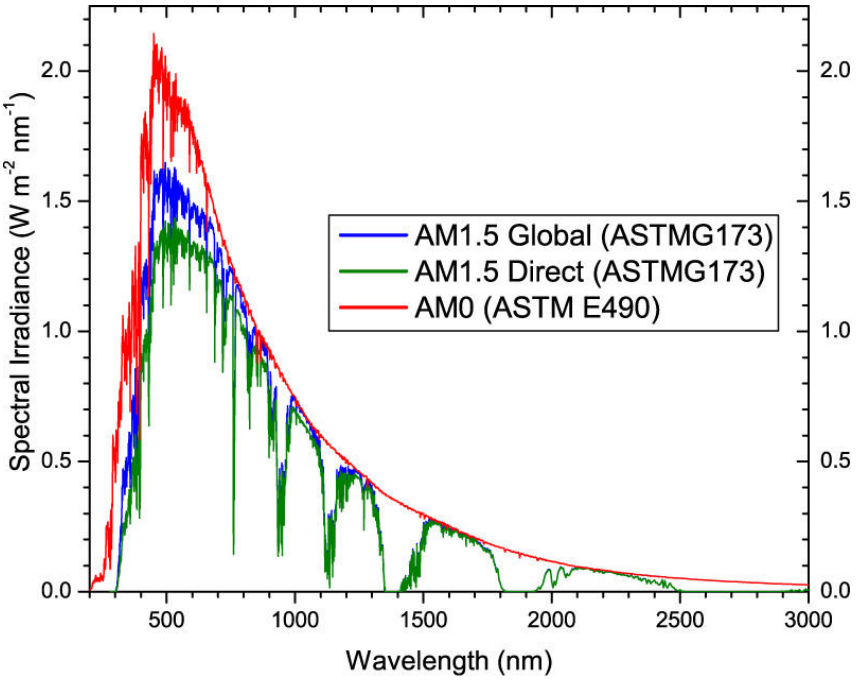


Figure 1.3 . Spectres solaires AM0 (rouge), AM1.5G (bleu) et AM1.5D (vert) [6].

1.3.2 Masse d'Air

L'intensité lumineuse issue du soleil normalement incidente sur la surface de la terre est appelée la constante solaire. Ce constant est approximativement d'une valeur de $1.4\,\mathrm{kW\,m^{-2}}$ au-dessus de la couche atmosphérique et est réduite sur Terre à $1\,\mathrm{kW\,m^{-2}}$ 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.4 [7]. De manière générale, l'indice m associée a la masse d'air (AMm) est calculé comme suit :

$$AMm = \frac{1}{\sin A} \tag{1.4}$$

A : étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre

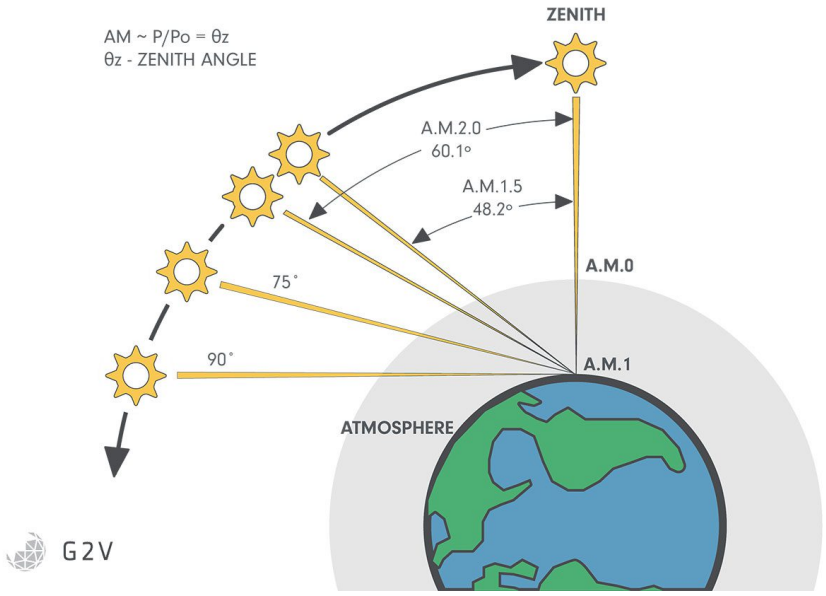


Figure 1.4 . Illustration de l'Air Masse [8].

1.4 Cellule solaire

Une cellule photovoltaïque est un dispositif permettant de transformer l'énergie solaire en énergie électrique grâce à trois mécanismes fondamentaux : l'absorption des photons dont l'énergie est supérieure au gap par le matériau semi-conducteur, la conversion de cette énergie en énergie électrique via la création de paires électron/trou, et enfin la collecte de ces porteurs de charge générés. Le matériau utilisé doit donc posséder deux niveaux d'énergie distincts et une

conductivité suffisante pour permettre le passage du courant électrique, ce qui justifie l'utilisation des semi-conducteurs dans cette technologie [9]. Afin de séparer efficacement les paires électron/trou générées, un champ électrique est requis, généralement fourni par une jonction P-N, élément central dans la conception des cellules. Le fonctionnement repose sur l'effet photovoltaïque, un phénomène physique par lequel une force électromotrice est induite lorsqu'une surface semi-conductrice est exposée à la lumière. La tension obtenue varie typiquement entre $0.3\,\mathrm{V}$ et $0.7\,\mathrm{V}$ selon le matériau, son agencement, la température ambiante et le vieillissement de la cellule. D'un point de vue structurel, une cellule photovoltaïque comprend une fine couche semi-conductrice (généralement du silicium), une couche antireflet pour maximiser la pénétration lumineuse, une grille conductrice sur la face avant (cathode) et un métal conducteur au dos (anode). Les modèles les plus récents intègrent en plus une combinaison de multicouches réfléchissantes sous le semi-conducteur, permettant un piégeage prolongé de la lumière afin d'améliorer le rendement global du dispositif. [9]

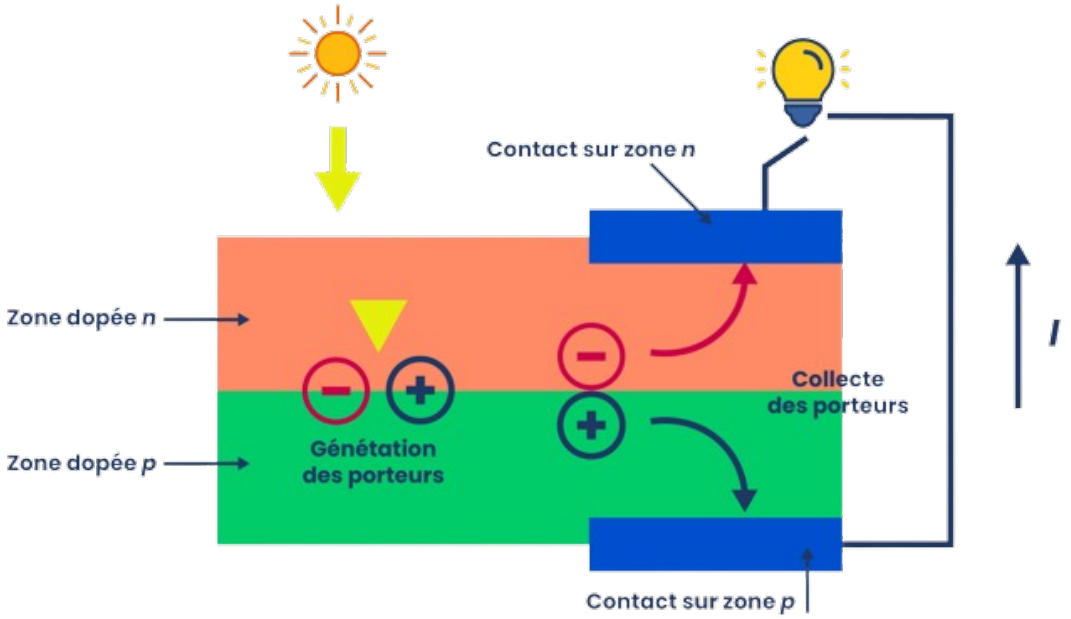


Figure 1.5 . Structure basique d'une cellule solaire [10].

1.4.1 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le fonctionnement de la cellule photovoltaïque est basé sur les propriétés des matériaux semi-conducteurs. La figure 1.6 montre le principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque avec les principales régions (Emetteur, Zone de Charge d'espace et Base) dans lesquelles les photons incidents peuvent créer des porteurs libres. Le comportement de ces porteurs libres diffère suivant la région de leur création [11]. Dans les zones électriquement neutres (p) et (n), les porteurs minoritaires générés par les photons, diffusent ceux qui atteignent la zone de charge d'espace (ZCE) sont propulsés par le champ électrique $\vec{\varepsilon}$ vers la région ou ils deviennent majoritaires. Ces porteurs de charges contribuent donc au courant de la cellule photovoltaïque par

leurs diffusions, cette composante est appelée courant de diffusion. Dans la zone de charge d'espace, les paires électrons-trous créées par les photons sont dissociées par le champ électrique, l'électron est propulsé vers la région de type n et le trou vers la région de type p, donnant naissance à un courant de génération. Il convient donc de noter que la conversion de l'énergie solaire en électricité est possible si et seulement si trois phénomènes physiques de base ont lieu quasi-simultanément :

- L'absorption d'un maximum de photons possible.
- La transformation de l'énergie ainsi absorbée en charges électriques.
- La collecte sans perte de ces derniers vers un circuit électrique extérieur [11].

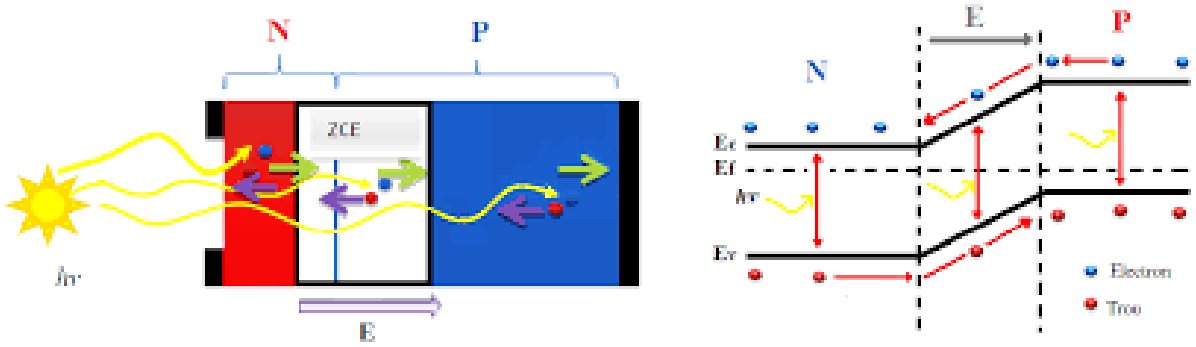


Figure 1.6 . Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque [12].

Le premier phénomène est l'absorption optique de photons par un matériau semi-conducteur approprié dans la plus intense du spectre solaire (figure 1.7). Si l'on prend un semi-conducteur à grand gap, l'absorption sera limitée aux petites longueurs d'onde, dans l'ultra-violet, alors que la partie la plus importante du spectre solaire se situe dans le visible et le proche infrarouge. Pour absorber un maximum de photons, il faudrait donc un semi-conducteur possédant un petit gap. Le second, c'est la séparation rapide des électrons et des trous avant leur recombinaison. Quant au troisième, l'entrainement des électrons et des trous vers les électrodes collectrices (collecte des porteurs) [11].

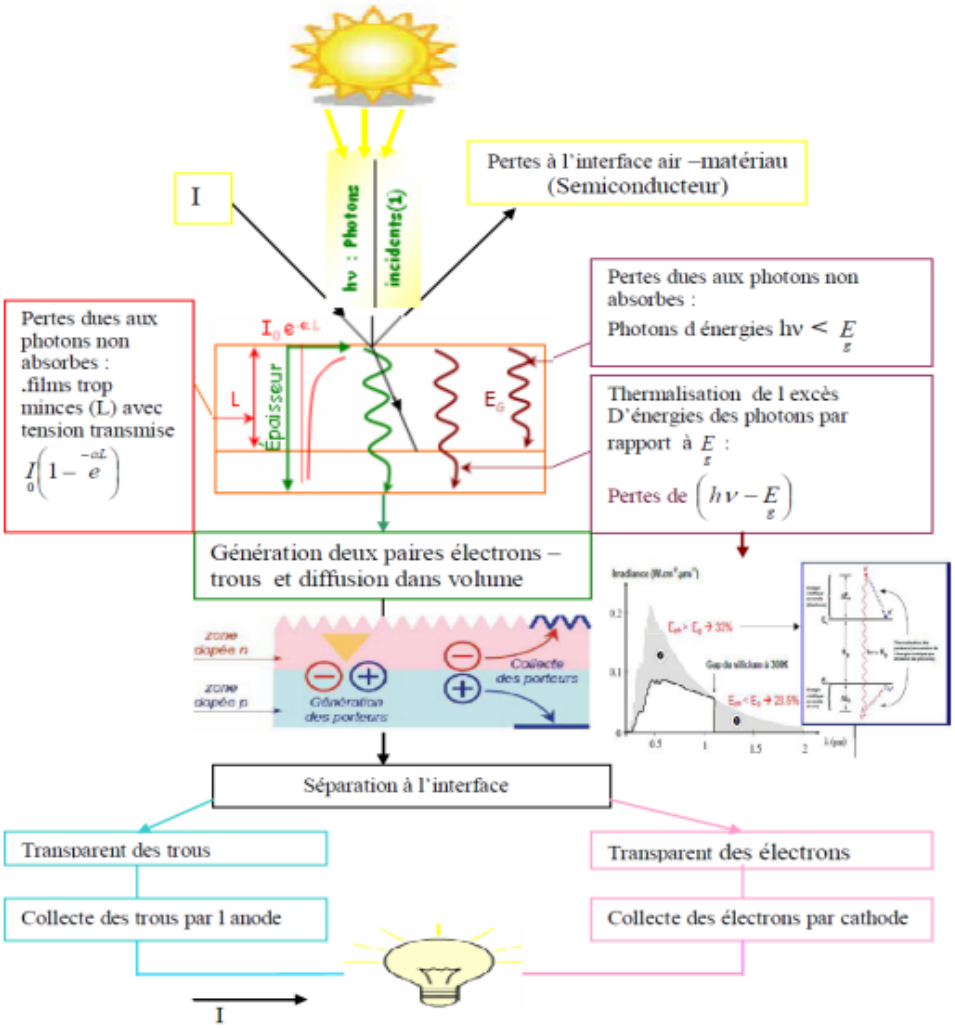


Figure 1.7 . Etapes successives impliquées dans une cellule photovoltaïque [13].

1.4.2 Caractéristiques électriques d'une cellule solaire

La Figure 1.8 montre la caractéristique I-V 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 comporte comme une source de tension qui est presque égale à la tension de fonctionnement à vide [14].

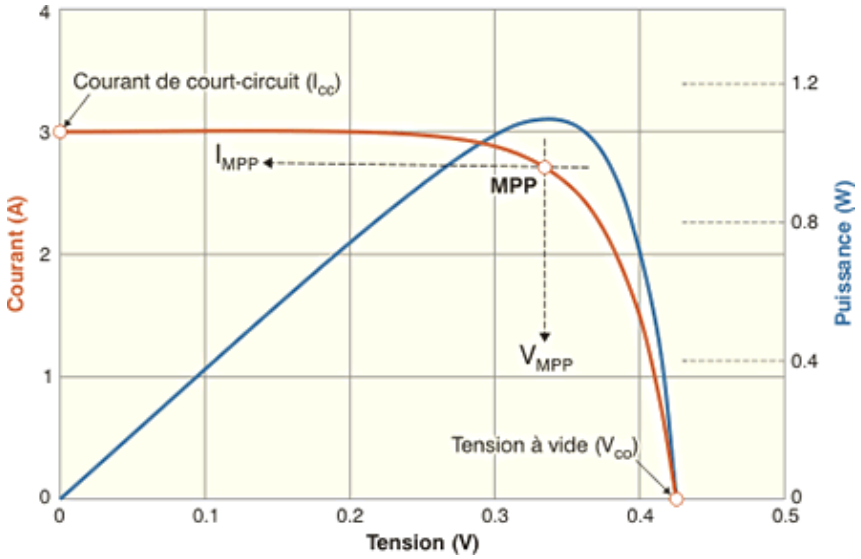


Figure 1.8 . Caractéristique I-V d'une cellule photovoltaïque [15].

1.4.3 Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque

Une cellule idéale à jonction soumise à un flux lumineux, fonctionne comme un générateur de courant. Sa caractéristique est comparable à celle d'une jonction. Le schéma équivalent de la cellule solaire est alors représenté par une diode idéale montée en parallèle avec une source de courant. Les résistances séries Rs et shunt Rsh modélisent les pertes engendrées par la résistivité des couches et la présence de courants de fuite. La première est la résistance série Rs, cette résistance est liée à l'impédance des électrodes, il en résulte que la tension V aux bornes de la cellule est différente de la tension aux bornes de la jonction. La deuxième est la résistance shunt Rp qui corresponde aux pertes dans la surface et aux pertes dues aux défauts dans le matériau, il en résulte qu'une partie du courant Iph sera drivée par cette résistance [16].

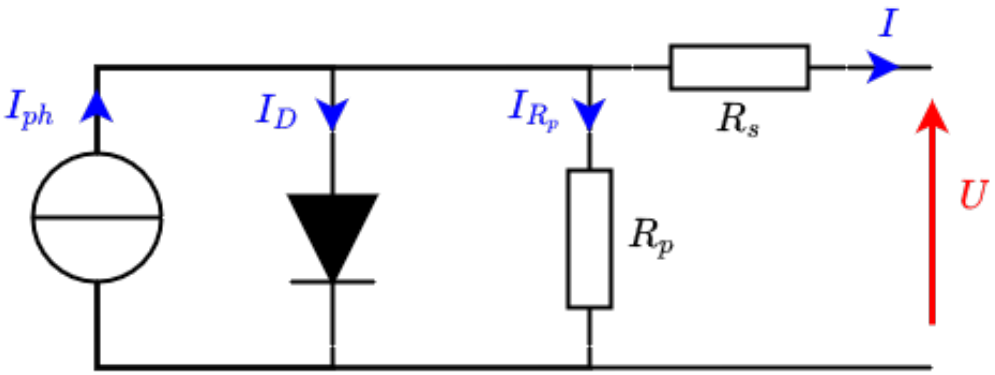


Figure 1.9 . Schéma électrique équivalent d'une cellule photovoltaïque [17].

1.5 Paramètres d'une cellule solaire

1.5.1 Densité de courant en court-circuit (Jsc)

La densité de courant en court-circuit, J_{sc} (mA.cm^{-2}) correspond à la densité de courant que délivrerait la cellule PV sous illumination lorsqu'elle serait soumise à une tension nulle à ses bornes. Cette grandeur est directement liée à la photo-génération. Plus l'intensité du rayonnement lumineux est forte, plus la J_{sc} est grande, car plus de paires d'électron-trou peuvent se former. La J_{sc} dépend donc du spectre lumineux incident (typiquement le spectre solaire AM1.5 et noté $\phi_{AM1.5}$ (photons.m^{-2}.s^{-2}.nm^{-1})) mais également de l'efficacité à convertir un photon en électron et ce pour chaque longueur d'onde (appelé *EQE* pour efficacité quantique externe), comme selon l'équation suivante :

$$J_{sc} = -q \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} \mathrm{EQE}(\lambda)\, \phi_{AM1.5}(\lambda)\, d\lambda \tag{1.5}$$

Où :

- q =1,602 $\times$ 10^{-19} C est la charge élémentaire.
- λ_1 et λ_2 sont les longueurs d'onde correspondant à l'intervalle d'absorption de la cellule PV.

L'EQE fait intervenir deux critères d'efficacité. Le premier est un critère optique correspondant à la proportion de photons qui ont pu être absorbés au sein de la couche active par rapport à un nombre de photons incidents donnés. Et le second est un critère électrique, correspondant à la proportion d'électrons qui ont pu être collectés aux bornes de la cellule PV par rapport au nombre de ces photons préalablement absorbés. Cette dernière efficacité est également appelée *IQE* pour efficacité quantique interne ; l'IQE est donc toujours supérieure ou égale à l'EQE [18].

1.5.2 Courant de court-circuit (Icc)

Si les deux électrodes sont en court-circuit à travers un ampèremètre, les électrons drainés par le champ interne de la jonction vont donner naissance à un *courant de court-circuit* I_{CC} qui correspond au photocourant I_{ph} généré par le rayonnement. Pour une distribution spectrale donnée, ce photocourant est proportionnel à l'irradiance du rayonnement incident et à la surface active de captation [19]. Il définit la quantité de paires électron-trou générée G qui traverse la jonction sans recombinaison entre les longueurs de diffusion L_n et L_p, donnée par la relation suivante [19] :

$$I_{CC} = I_{ph} = q \cdot G \cdot (L_n + L_p) \tag{1.6}$$

Où :

- L_n : Longueur de diffusion des électrons dans la région **p**.
- L_p : Longueur de diffusion des trous dans la région **n**.
- q : Charge électrique.

Ces longueurs de diffusion dépendent de la durée de vie τ des porteurs minoritaires et de leur coefficient de diffusion D, selon les relations suivantes :

$$L_n = \sqrt{D_n \cdot \tau_n} \quad \text{et} \quad L_p = \sqrt{D_p \cdot \tau_p} \tag{1.7}$$

avec :

- D_n : coefficient de diffusion des électrons (porteurs minoritaires dans la région p).
- D_p : coefficient de diffusion des trous (porteurs minoritaires dans la région n).
- τ_n et τ_p : durées de vie moyennes des électrons et des trous, respectivement.

1.5.3 Tension en circuit ouvert (Voc)

Il s'agit de la tension aux bornes de la cellule lorsque celle-ci est en circuit ouvert, c'est-à-dire lorsque le + et l'électrode sont isolés électriquement de tout autre circuit (le courant traversant lequel est nul). Dans ce cas, l'énergie fournie par la cellule $P = V \times I$ est nulle.

Dans le cas idéal, elle est déterminée à partir de l'équation de la caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque par l'expression [20] :

$$V_{oc} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{I_{cc}}{I_0} + 1\right) \tag{1.8}$$

Avec :

- q : Charge de l'électron = $1{,}602 \times 10^{-19}$ C.
- k : Constante de Boltzmann = $1{,}38 \times 10^{-23}$ J·K^{-1}.
- T : Température effective de la cellule [K].
- I_0 : Courant de saturation.

1.5.4 Facteur de forme (FF)

La notation FF vient de fill factor (facteur de remplissage). Il s'agit d'un rapport qui rend compte de la qualité de la forme de la caractéristique courant-tension. Il est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{V_{\text{max}} \times I_{\text{max}}}{V_{\text{oc}} \times I_{\text{sc}}} = \frac{P_{\text{max}}}{V_{\text{oc}} \times I_{\text{sc}}} \tag{1.9}$$

Où :

- P_{max} : Puissance maximale délivrée par la cellule [W].
- V_{max} : Tension correspondant au maximum de la puissance [V].
- I_{max} : Courant correspondant au maximum de la puissance [A].

Il représente donc l'écart entre la cellule réelle et une cellule pour laquelle $R_s = 0$ et $R_p = \infty$ (cellule idéale). Plus il est proche de 1, plus la cellule est proche de l'idéale. Le facteur de forme théorique est compris entre 0,25 et 1. Il peut aussi donner des informations sur la qualité des interfaces matériau-électrode. Lorsque sa valeur descend en dessous de 25%, cela traduit généralement la présence d'un contact non-ohmique ou d'une couche oxydée et/ou isolante à l'interface matériau-électrode [21].

1.5.5 Rendement photovoltaïque (η)

Le rendement de conversion en puissance (PCE), noté aussi η, est le paramètre principal des cellules photovoltaïques [22]. Il est défini de la manière suivante :

$$\eta = \frac{P_{\text{max}}}{P_{\text{inc}}} \times 100\% \tag{1.10}$$

Où :

- P_{max} : Puissance délivrée par la cellule [W].
- P_{inc} : Puissance incidente (puissance de la lumière reçue par la cellule) [W].

En introduisant les paramètres photovoltaïques dans cette relation, on obtient :

$$\eta = \frac{FF \times V_{\text{oc}} \times I_{\text{sc}}}{P_{\text{inc}}} \times 100\% \tag{1.11}$$

Cette expression montre que les valeurs du facteur de remplissage (FF), de la tension de circuit ouvert (V_{oc}) et du courant de court-circuit (I_{sc}) déterminent le rendement [22].

1.5.6 Puissance maximale (P_m)

Le point de fonctionnement de la cellule est imposé par la résistance de charge. Un choix judicieux de la résistance de charge permettra d'obtenir la puissance maximale [23].

$$P_m = V_m \times I_m \tag{1.12}$$

Où :

- V_{m} : Tension correspondante à la puissance maximale fournie.
- I_{m} : Courant correspondant à la puissance maximale fournie.

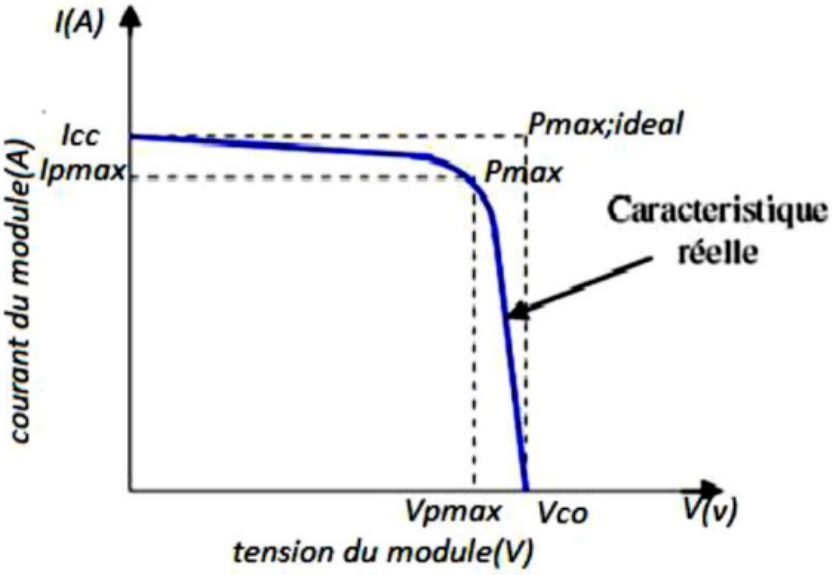


Figure 1.10 . Puissance maximale idéale et pratique [24].

1.6 Résistances parasites

Le rendement de la cellule solaire est affecté par la présence des résistances parasites, ces dernières dissipent la puissance produite par la cellule solaire sous forme de pertes électriques, leur effet dépend de la géométrie de la cellule solaire et de la technologie de fabrication [25].

1.6.1 Résistance Série

La résistance série R_s est causée par l'impédance des électrodes (métallisation de grille et de la face arrière) et le dopage insuffisant dans les régions quasiment neutre (Emetteur-Base). La faible valeur de la résistance série n'influe pas sur J_{cc} et V_{co} mais elle diminue la valeur du facteur de forme. Pour une cellule de bonne qualité, R_s doit être inférieure à $1\,\Omega$. La figure 1.11 illustre l'impact de la résistance série R_s sur la caractéristique J-V, mettant en évidence une diminution du courant de court-circuit sans affecter la tension en circuit ouvert. On note ici que l'émetteur et la grille supérieure de la cellule solaire représentent les facteurs majeurs de perte de la résistance série. Ceci peut être réalisé par l'optimisation de l'épaisseur de l'émetteur et la surface de contact métal-semiconducteur et en réduisant la résistivité des matériaux utilisés [26].

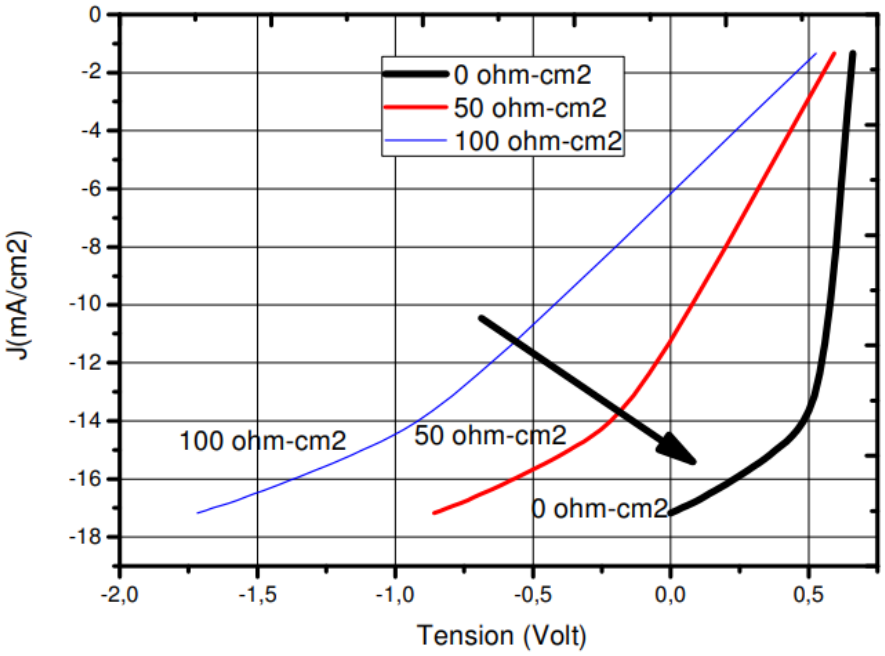


Figure 1.11 . Effet de la résistance série sur la caractéristique J-V [27].

1.6.2 Résistance shunt R_{sh}

La résistance parallèle Rsh (également connue sous le nom de résistance shunt) représente le courant de fuite qui est perdu en grande partie dans l'interface p-n de la diode et le long des fils. Leur valeur devra être la plus élevée possible. La figure 1.12 montre que, lorsque la résistance shunt diminue, la tension de circuit ouvert et le courant de court-circuit sont diminués aussi. En outre, l'influence sur la puissance maximale du module photovoltaïque à des valeurs très petites est très remarquable [28].

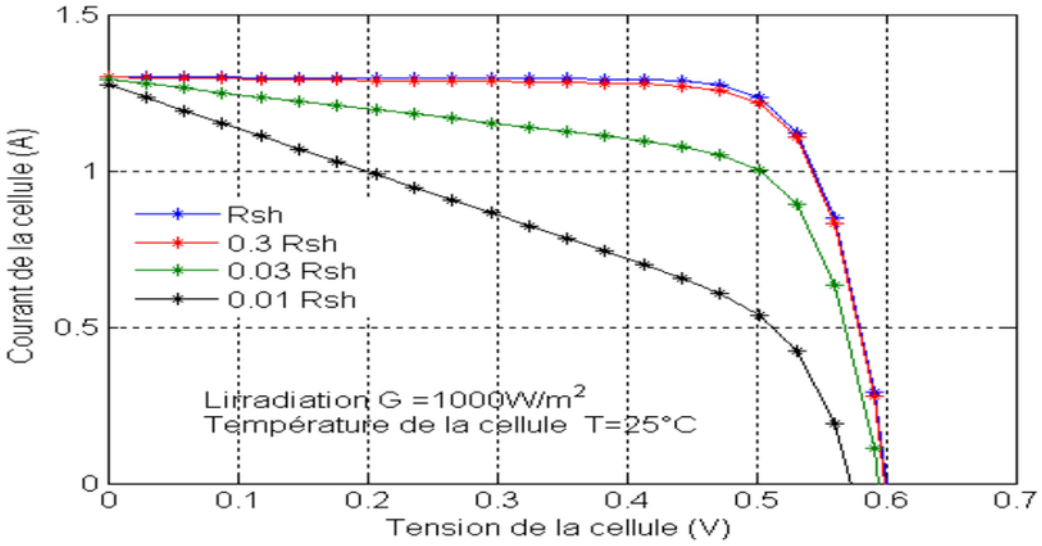


Figure 1.12 . Influence des résistances shunt sur la caractéristique I-V [29].

1.7 Conclusion

L'analyse détaillée des fondements théoriques et des paramètres caractéristiques des cellules photovoltaïques présentée dans ce chapitre permet d'appréhender les facteurs limitant leurs performances. Les résistances parasites, les mécanismes de pertes optiques et électriques, ainsi que les contraintes thermodynamiques définissent le cadre dans lequel s'inscrivent les efforts d'optimisation technologique actuels. L'amélioration continue des rendements de conversion énergétique, notamment grâce aux architectures multijonctions et aux nouveaux matériaux comme les pérovskites, ouvre des perspectives prometteuses pour atteindre la parité réseau et confirmer le rôle central du photovoltaïque dans la transition énergétique mondiale.

Bibliographie Chapitre I

1. BELLIL, W. (2020). *Université de Blida*.
2. Vecteur Énergie. (s.d.). *Attention : voici les pièges à éviter avant d'installer des panneaux solaires !* Vecteur Énergie.
3. Guesmi, H. (2022). *Modélisation et simulation de cellules solaires à base de nanostructures* [Thèse de doctorat, Université de Blida 1, Faculté de Technologie, Département d'électronique].
4. Asma, H. A. M. Z. A. *Simulation numérique d'une cellule solaire Tandem empilée mécaniquement Pérovskite/CIGS*.
5. Gueymard, C. A. (2020). *Spectre solaire AM0, AM1.5G et AM1.5D* [Image]. ResearchGate.
6. Sarra Maalla, M. M. *Simulation numérique des caractéristiques électriques d'une cellule solaire à double jonction en AlGaAs/InP*.
7. G2V Optics. (n.d.). *Solar energy and air mass*. G2V Optics.
8. Zenata, T., & Azzouz, A. A. (2021). *Étude et simulation d'un système photovoltaïque* [Mémoire de licence, Université Badji Mokhtar Annaba]. Faculté des sciences de l'ingéniorat, Département d'Électrotechnique.
9. Futura Sciences. (s.d.). *Structure basique d'une cellule solaire*. Futura.
10. Yousfi, A., Bencherif, H., Dehimi, L., Pezzimenti, F., Saidi, L., Abdi, M. A., ... & Khezzar, D. (2019, December). *Possible efficiency boosting of tandem solar cell by using single antireflection coating and BSF layer*. In *2019 1st International Conference on Sustainable Renewable Energy Systems and Applications (ICSRESA)* (pp. 1--4). IEEE.
11. Saidani, O., Yousfi, A., Samajdar, D. P., Xu, X., Zemene, T. B., Bhattarai, S., ... & Sahoo, G. S. (2024). *Revealing the secrets of high performance lead-free $CsSnCl_3$ based perovskite solar cell : A dive into DFT and SCAPS-1D numerical insights*. Solar Energy Materials and Solar Cells, **277**, 113122.
12. Ikram, T. *Simulation numérique d'une cellule solaire Tandem (4T) Pérovskite/Si*.
13. Energie Plus. (s.d.). *Caractéristiques électriques des cellules et des modules photovoltaïques*.
14. 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.

15. 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.

16. Yousfi, A., Bencherif, H., Dehimi, L., Pezzimenti, F., Saidi, L., Abdi, M. A., ... & Khezzar, D. (2019, December). *Possible efficiency boosting of tandem solar cell by using single antireflection coating and BSF layer*. In *2019 1st International Conference on Sustainable Renewable Energy Systems and Applications (ICSRESA)* (pp. 1--4). IEEE.

17. Saidani, O., Abderrahim, Y., Zitouni, M., Sahoo, G. S., Zouache, R., Mohammad, M.R., ... & Hossain, M. K. (2024). Numerical study of high□performance lead□free CsSnCl3□based perovskite solar cells. *Journal of Optics*, 1-19.

18. Lemercier, T. (2020). *Développement de cellules solaires pérovskites semi-transparentes de type PIN dans la perspective d'une application tandem* [Thèse de doctorat, Université Savoie Mont Blanc].

19. Yousfi, A., Saidani, O., Bennia, R., Saoud, F. S., Saidi, L., Bhattarai, S., ... & Sahoo, G. S. (2025). Numerical Simulation of High-Efficiency Double-Absorber Layer Perovskite Solar Cells Using SCAPS-1D and MATLAB PV Models. *Transactions on Electrical and Electronic Materials*, 1-14.

20. 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.

21. Saidani, O., Yousfi, A., Bhattarai, S., Islame, M. R., & Sahoo, G. S. (2025). Simulation insights into high-efficiency Rb2AlAgI6 hybrid perovskite solar cells : performance metrics and optimization strategies. *Journal of Optics*, 1-10.

22. *Influence des résistances shunt sur la caractéristique I-V* [Image]. ResearchGate.

Chapitre 2

Les cellules solaires à base de matériaux pérovskite

2.1 Introduction

La transition énergétique mondiale impose le développement de technologies capables de répondre à l'augmentation de la demande en énergie tout en limitant les émissions de gaz à effet de serre. Grâce à son abondance et à son potentiel quasi illimité, l'énergie solaire s'impose comme une solution incontournable. Dans ce contexte, les cellules solaires à pérovskites (PSC) émergent comme une alternative prometteuse aux semi-conducteurs traditionnels, en raison de leur haute efficacité, de leur légèreté et de leur faible coût de fabrication. Ce chapitre s'attache à explorer les fondements scientifiques des PSC, leur évolution technologique, leur architecture, ainsi que les défis majeurs liés à leur stabilité, dans le but de mieux comprendre leur comportement à travers la simulation numérique.

2.2 Historique

L'origine de la « pérovskite » remonte aux années 1830, lorsque Gustav Rose (Gustav Rose) découvrit pour la première fois le titanate de calcium ($CaTiO_3$) et le standardisa en l'honneur du minéralogiste russe L.A. Perovski. Depuis lors, la définition de la pérovskite a été étendue pour inclure des composés avec une structure cristalline similaire à $CaTiO_3$. Parmi ces composés, une famille de pérovskites hybrides organiques-inorganiques apparaît, qui comprend principalement deux sous-familles : la pérovskite 2D et la pérovskite 3D. Depuis les années 1990, le cristal de pérovskite hybride bidimensionnel a suscité l'intérêt des chercheurs en raison de ses caractéristiques d'émission très intéressantes, et est devenu un candidat prometteur pour la réalisation de divers dispositifs optoélectroniques (comme l'OLED (Organic Light Emitting Diodes) et OFETs (Organic Field Effect Transistors)). Ces dernières années, la mobilité des porteurs de chaque couche dans les OFETs a fortement augmenté de 10^{-4} à 1 cm^2 / V-s (par rapport aux cellules de silicium amorphe). Depuis 2012, les pérovskites hybrides 3D, en particulier les composés de formule chimique $CH_3NH_3PbI_3$, sont devenus des absorbants très prometteurs pour les cellules solaires, et ils ont montré des performances exceptionnelles en peu de temps. Par conséquent, les cellules à base de pérovskite hybrides aux halogénures ont été introduites dans la charte d'efficacité des cellules solaires du NREL (National Renewable Energy Laboratory) en tant qu'industrie photovoltaïque émergente : plusieurs points qu'elles représentent sont liés par rapport à cela, elle a un taux de croissance très rapide. Le dernier point montre que la meilleure efficacité de la certification récente est de 22,1%. Ce progrès impressionnant de courte durée est un phénomène sans précédent et révolutionne la recherche sur les cellules solaires. [1]



Figure 2.1 . Un type de pérovskite [2].

2.3 Matériau pérovskite

2.3.1 Structure cristallographique de la pérovskite

Une pérovskite est un matériau de formule chimique générale ABX_3 et le même type de structure cristalline que l'oxyde de titane et de calcium ($CaTiO_3$). Les pérovskites standards ABX_3 ont une structure cristalline (Figure 2.2), composée de cinq atomes par cellule unitaire, avec le cation métallique B au centre, le cation A aux coins et six anions X formant les coins d'un octaèdre et placé au centre de six plans de la cellule unitaire. Les sites A sont généralement du césium (Cs) ou des cations organiques, le site B est un cation métallique divalent (soit Pb soit Sn) et sont entouré par l'anion X dans un cadre octaédrique BX_6. Les sites X sont généralement des halogénures. Chacun des sites A, B et X peut contenir un ou plusieurs éléments, permettant une flexibilité dans l'ajustement des propriétés de la pérovskite [3]. Le rapport le plus couramment utilisé pour prédire la formation de pérovskite est le facteur de tolérance de Goldschmidt (t), défini comme :

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \tag{2.1}$$

Où r_A et r_B sont les rayons ioniques des cations A et B respectivement et, r_X est le rayon ionique de l'anion. Le facteur de tolérance est utilisé pour évaluer si le cation du site A s'inscrit dans les cavités de la structure BX_3. Les pérovskites se forment pour t entre 0,8 et 1, tandis que les pérovskites cubiques se forment dans la plage 0.9-1.0, les pérovskites déformées peuvent être trouvées entre 0.8-0.9 en raison de l'inclinaison des octaèdres BX_6 et de l'abaissement de la

symétrie. Si nous sortons de la plage disons inférieure à 0.8, la pérovskite peut être trop déformée, si on fait le tour d'un facteur de tolérance de 1.1, le cation du site A est trop grand et donc la pérovskite ne peut pas être formée. Un deuxième paramètre utilisé avec le facteur de tolérance est le facteur octaédrique μ donné par :

$$\mu = \frac{r_B}{r_X} \tag{2.2}$$

Ce facteur prédit la stabilité du BX_6, le facteur octaédrique (μ est normalement compris entre 0.4 et 0.9) peut être utilisé pour évaluer empiriquement si un atome du site B préfère une coordination octaédrique de l'atome du site X (par opposition à d'autres nombres de coordination) [3].

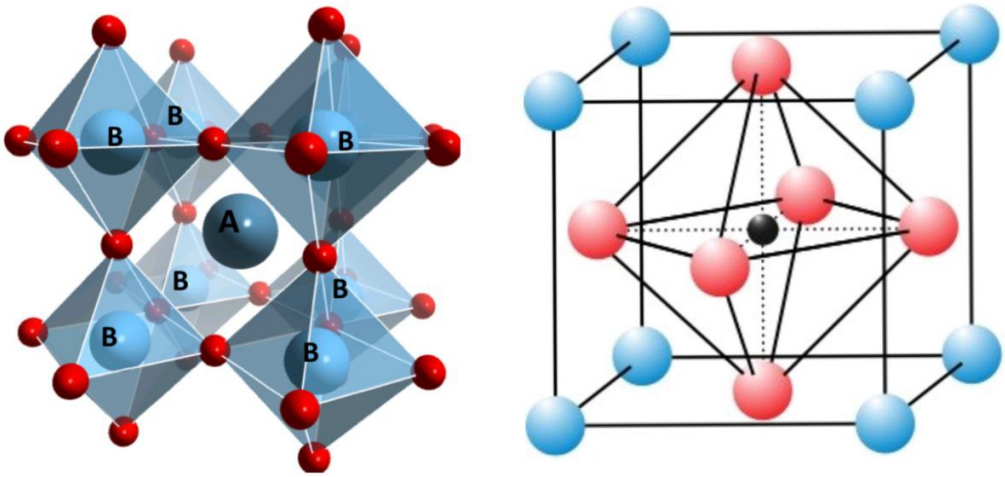


Figure 2.2 . Représentation de la structure de la pérovskite [4-5].

2.3.2 Propriétés opto-électroniques

2.3.2.1 Propriétés optiques

La pérovskite est un matériau à bande interdite directe et par conséquent, elle a une force d'absorption optique élevée et une plage plus large pour absorber suffisamment d'énergie solaire pour atteindre une valeur élevée d'efficacité de conversion de puissance. De la figure 2.3 on peut voir qu'à la longueur d'onde visible le coefficient d'absorption de la pérovskite est plus élevé. De sorte que la pérovskite peut absorber plus de photons. Cette grande absorption, comparée à celle du silicium cristallin permet de réduire l'épaisseur de la couche pérovskite à environ 500 nm pour une absorption quasi complète. Les porteurs de charges photo générées sont alors plus facilement collectés du fait de la plus faible distance à parcourir [6].

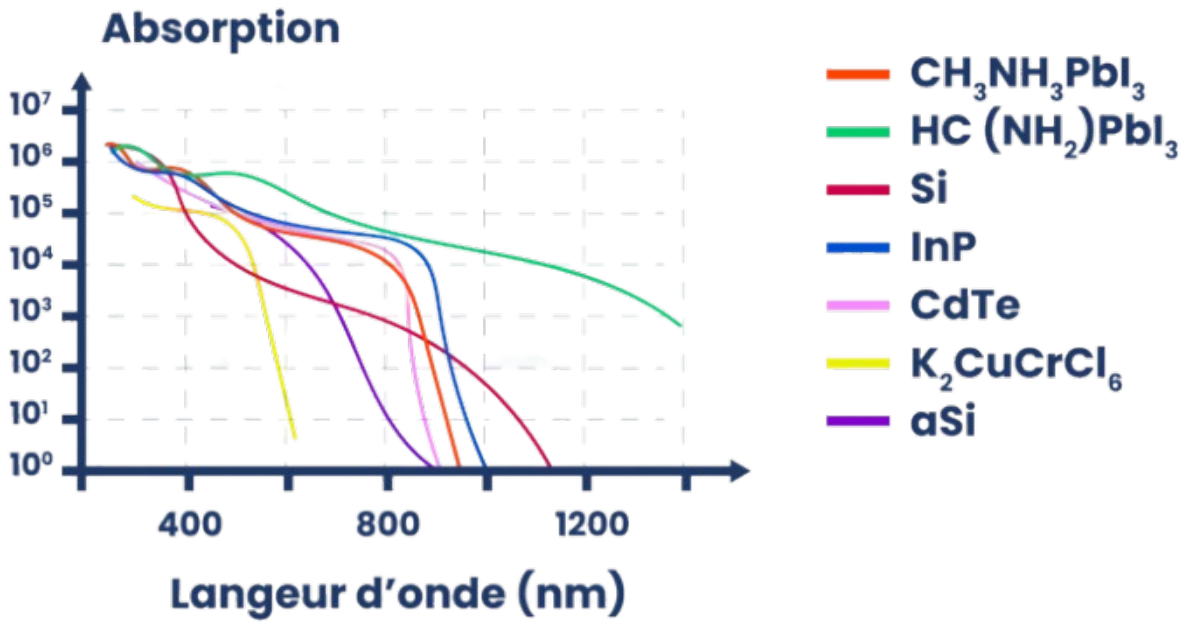


Figure 2.3 . Courbe d'absorption des matériaux [7].

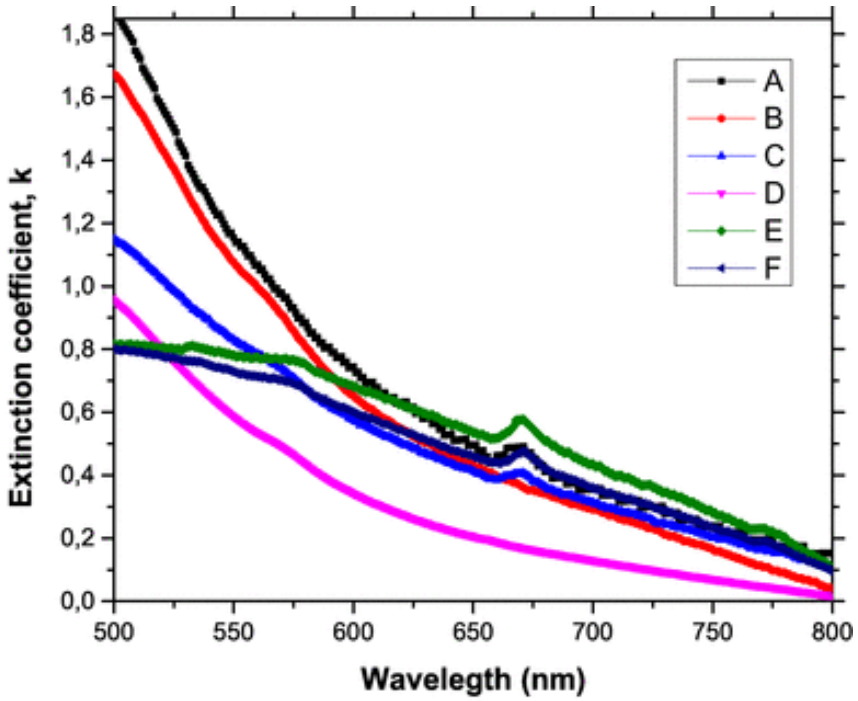


Figure 2.4 . Coefficient d'extinction en fonction de la longueur d'onde dans le domaine du visible [8].

2.3.2.2 Propriétés électroniques

Comme pour les propriétés optiques, il est possible de modifier les propriétés électriques de la pérovskite en changeant sa composition. Concernant la longueur de diffusion, on la définit comme étant la relation entre le coefficient de diffusion D et le temps de vie des porteurs τ :

$$L_D = \sqrt{D\tau} \tag{2.3}$$

La longueur de diffusion des électrons et des trous est une caractéristique importante dans le domaine du photovoltaïque puisqu'elle va entrer en jeu dans le choix de l'épaisseur de la couche active. Dans le cas du silicium, la longueur de diffusion est de quelques centaines de micromètres. Pour la pérovskite, les longueurs de diffusion des porteurs sont très inférieures à celles du silicium. Des longueurs de diffusion de l'ordre de 100 nm pour les trous et les électrons ont été mesurées par photoluminescence sur une couche de MAPI d'épaisseur 180 nm, mais jusqu'à 1 µm pour des couches minces de $MAPI_{3-x}Cl_x$ d'épaisseur 270 nm. Il est donc préférable d'avoir des couches de pérovskite de l'ordre de la centaine de nanomètre pour optimiser les propriétés électriques. Expérimentalement, la mobilité des électrons varie autour de 10 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$, Celle des trous se situe aux alentours de 8 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$. Ces valeurs de mobilités se situent dans le haut de la gamme des matériaux organiques qui oscillent entre 10^{-4} et 10 $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$. Cela s'explique par le fait que les porteurs libres ont de faibles masses effectives ($m_e^* = 0.23m_0$, $m_h^* = 0.29m_0$). De plus, les excitons générés après photo-excitation se dissocient en porteurs libres en seulement 2 ps grâce à leurs faibles énergies de liaison (aux alentours de 16 meV). Toutefois, les valeurs de mobilités de la pérovskite restent très éloignées de celles du silicium ($1.43.10^3$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$ pour les électrons et $4.27.10^2$ $cm^2.V^{-1}.s^{-1}$ pour les trous). Par ailleurs, comme les valeurs de mobilités des électrons et des trous sont proches, les pérovskites peuvent être utilisées comme transporteurs de trous ou d'électrons. Ce caractère ambipolaire leur donne un avantage dans le domaine du solaire puisqu'avec ces valeurs de mobilités assez élevées, il est possible de réaliser des cellules de structure planaire. Pour les matériaux pérovskite les porteurs ont relativement une bonne mobilité et longueur de diffusion par rapport aux semi-conducteurs organiques ce qui permet une meilleure récupération des charges. Le Tableau 2.1 compare les différentes propriétés optiques et électriques pertinentes pour la conversion photovoltaïque des matériaux les plus communément utilisés [9].

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

Tab. 2.1 : Caractéristiques opto-électroniques de différents matériaux [10].

2.4 Applications des matériaux pérovskites

Les cellules pérovskites, ou les soi-disant *caméléons chimiques*, font partie des composés présentant des propriétés importantes. En 2009, les scientifiques des matériaux ont commencé à démontrer le potentiel photovoltaïque élevé des pérovskites. Les cellules photovoltaïques, ou les piles à combustibles, sont utilisées dans les mémoires, les condensateurs, les appareils à micro-ondes, les manomètres, l'électronique ultrarapide, la piézoélectricité, ainsi que pour accélérer les réactions chimiques en tant que catalyseurs. Ces matériaux très prometteurs trouvent de plus en plus d'applications dans les céramiques transparentes, les colorants non polluants et les générateurs d'énergie [11].

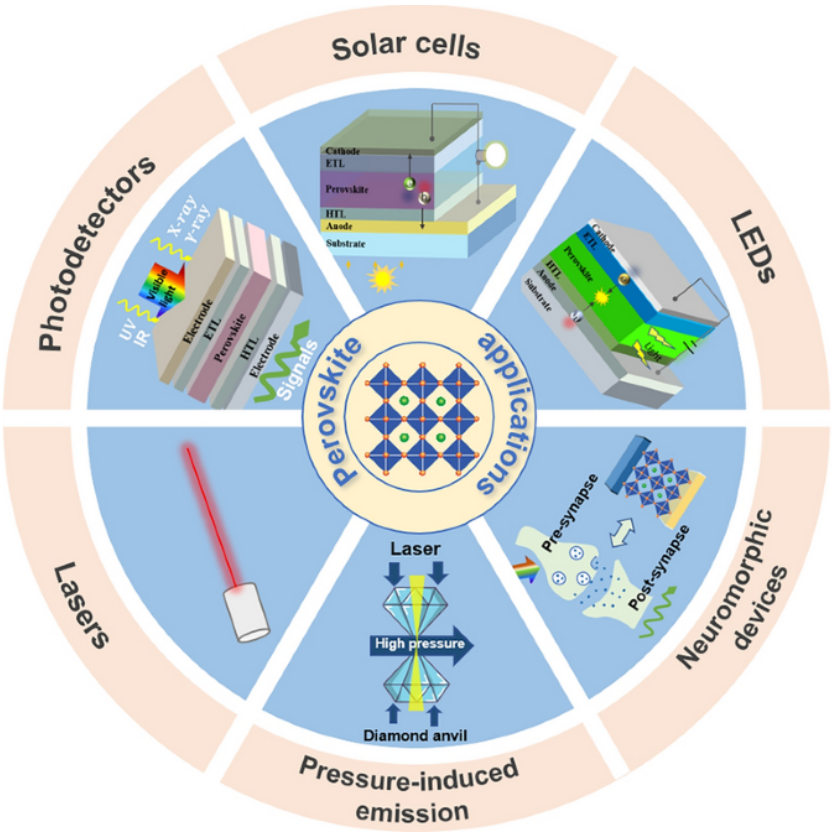


Figure 2.5 . Exemples d'applications des matériaux pérovskites [12].

2.5 Architecture des cellules solaires Pérovskites

Il existe quatre architectures principales utilisées dans la conception et la fabrication de cellules solaires à base de pérovskite avec des performances différentes. Ces architectures sont appelées mésoporeux, couche de recouvrement, n-i-p planaire et p-in planaire, comme illustrée sur la Figure 2.6. Pour la modélisation et la simulation numérique, il sera préférable d'utiliser la configuration d'une cellule solaire à couche mince type p-i-n ou n-i-p planaire à hétérojonction. La Figure 2.6 (a) présente une structure mésoporeuse, dans cette architecture une couche compacte de transport d'électrons (ETL) généralement du TiO_2 est déposée sur un substrat de verre et sur l'électrode transparente. Cette structure mésoscopique poreuse est ensuite remplie de la couche active de pérovskite sur laquelle repose la couche de transport de trous solides (HTL), et un contact arrière opaque (généralement de l'or (Au)). Dans cette configuration, la pérovskite n'a pas besoin de l'interface ETL/pérovskite pour séparer les excitons photo-générés en charges libres. Le matériau à base de pérovskite est donc capable de transporter efficacement les charges ambipolaires [13]. Pour l'architecture mésoporeux à couche de recouvrement, l'épaisseur de la structure méso-scopique est réduite de manière significative et une couche de recouvrement (copping-layer) de pérovskite pure est créé sur le dessus Figure 2.6 (b). En excluant complètement la structure mésoporeuse, une structure n-i-p planaire se forme sans nécessité d'étape de frittage à haute température (Figure 2.6 (c)). L'architecture p-i-n planaire est réalisée en déposant

la couche HTL sur le substrat en verre transparent recouvert par l'électrode. Ensuite, la couche de pérovskite est déposée, suivie du dépôt de l'ETL et d'un contact arrière opaque (de l'aluminium (Al) ou de l'argent (Ag)) (Figure 2.6 (d)) [13].

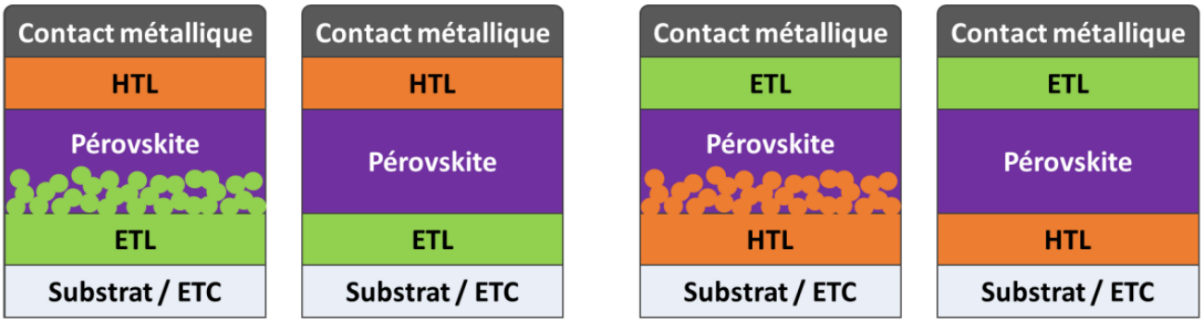


Figure 2.6 . Les quatre architectures les plus utilisées dans les cellules solaires à pérovskite, (a) mésoporeux, (b) couche de recouvrement, (c) n-i-p planaire et (d) p-i-n planaire [14].

2.6 Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites

Généralement, la structure d'une cellule en pérovskite est constituée de plusieurs couches déposées sur du verre : l'absorbeur en pérovskite est pris en sandwich entre une couche de transport des trous (HTL) et une couche de type *n*, appelée couche de transport des électrons (ETL), formant ainsi une configuration *p-i-n*. Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque en pérovskite consiste en l'absorption des photons de la lumière par la couche active. Cette absorption entraîne la génération de charges libres, où les électrons passent de la bande de valence à la bande de conduction, laissant derrière eux des trous. Les électrons sont ensuite transférés vers la couche ETL et collectés par le verre conducteur (généralement du FTO, pour *fluorine-doped tin oxide*). De leur côté, les trous sont transférés vers la couche HTL et collectés par l'électrode métallique. Finalement, le verre et l'électrode métallique sont connectés, ce qui permet la génération d'un photo-courant à l'extérieur du dispositif. Le fonctionnement de ce type de cellule est illustré dans la Figure 2.7 [15].

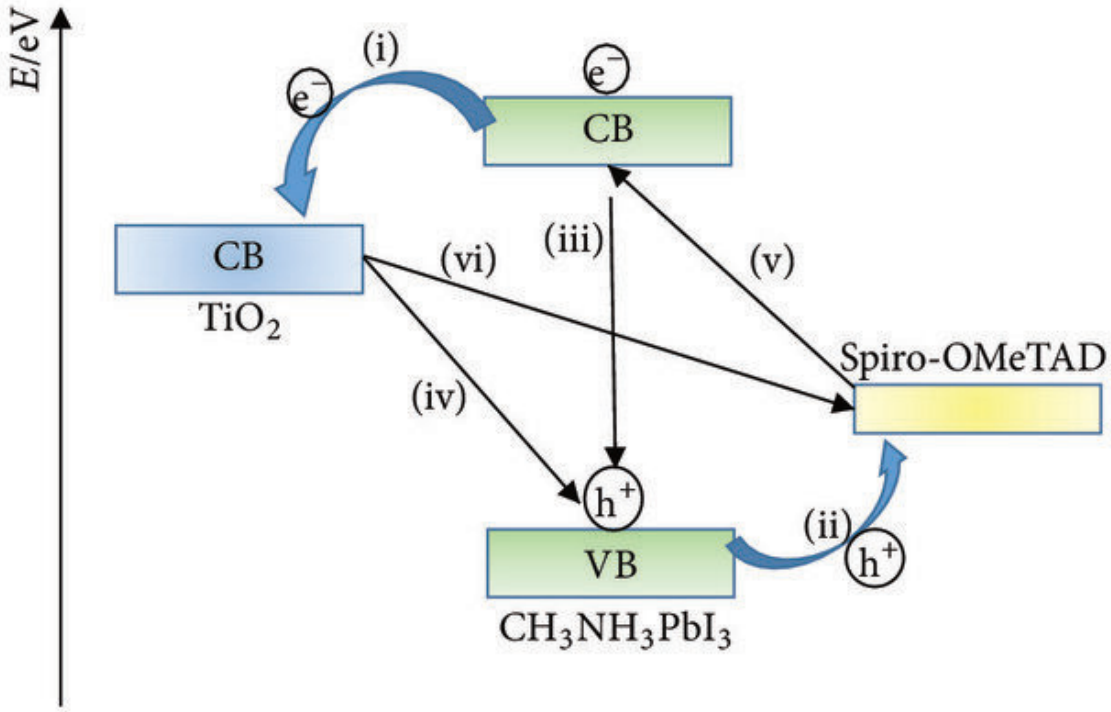


Figure 2.7 . Diagramme de transfert des électrons et processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite [16].

2.7 Conclusion

Ce chapitre a analysé en profondeur les matériaux pérovskites, retraçant leur évolution historique, leurs caractéristiques structurelles uniques et leurs remarquables propriétés optoélectroniques qui les positionnent comme des candidats prometteurs pour les technologies de cellules solaires de nouvelle génération. La discussion a mis en lumière les mécanismes fondamentaux régissant leur efficacité de conversion photonique, ainsi qu'un aperçu des architectures et stratégies photovoltaïques émergentes visant à optimiser l'ingénierie des interfaces et la dynamique du transport de charge. Si les pérovskites offrent de grandes perspectives pour dépasser les normes d'efficacité actuelles, des défis majeurs persistent, notamment en ce qui concerne la stabilité à long terme, la dégradation des composants et la mise en œuvre industrielle à grande échelle. Surmonter ces obstacles nécessitera un effort interdisciplinaire alliant chimie avancée, science des matériaux et analyse systémique afin de trouver un équilibre entre hautes performances, durabilité environnementale et faisabilité économique. Grâce à une innovation continue fondée sur la responsabilité écologique et technologique, les pérovskites ont le potentiel de jouer un rôle essentiel pour un avenir énergétique mondial plus propre et plus accessible.

Bibliographie Chapitre II

1. Benramdane, I. (2021). *Conception et simulation numérique des cellules solaires à base de matériaux hybrides organiques-inorganiques pérovskites* [Mémoire de master, Université Abou-Bekr Belkaïd – Tlemcen, Faculté des Sciences, Département de Physique].

2. Wikipédia. (s.d.). *Un type de pérovskite* [Image]. Wikipédia.

3. Bouguima, S. (2024). *Étude par la méthode du premier principe des propriétés physico-chimiques des composés hybrides* [Thèse de doctorat, Université Abou-Bekr Belkaïd – Tlemcen, Faculté des sciences, Département de physique]. Laboratoire de Physique Théorique (LPT).

4. DSN Solar. (n.d.). *Introduction to perovskite solar cell*. DSN Solar.

5. Scott, R. (2020, January 13). *Perovskites : Best material you've never heard of*. The Gist.

6. Meriem, G., Badr, H., & Manel, B. (2021). *Etude et Simulation D'une Cellule Photovoltaïque à Pérovskite*.

7. DigiSchool. (s.d.). *Les semi-conducteurs et le silicium – Absorption des semi-conducteurs en fonction de la longueur d'onde*.

8. Auteur inconnu. (s.d.). *The variation of extinction coefficient with wavelength for thin films* [Image]. ResearchGate.

9. Bhattarai, S., Jayan, D., Yousfi, A., Chowdhury, M., Rahman, M. F., Pandey, R., ... & Hossain, M. K. (2023). Novel double graded perovskite materials for performance increment of perovskite solar cell using extensive numerical analysis. *Physica Scripta*, 98(9), 095507.

10. Meriem, G., Badr, H., & Manel, B. (2021). *Etude et Simulation D'une Cellule Photovoltaïque à Pérovskite*.

11. Reggam, R. (2023). *Pérovskites bidimensionnelles*.

12. Zouache, R., Saidani, O., Yousfi, A., Alsubaie, A. S., Soulef, B. A., Feriel, L., & Islam, R. (2025). Numerical Investigation of Enhanced Efficiency in CIGS Solar Cells with 3C-SiC and PEDOT : PSS Integration. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, 69(1), 26-34.

13. Belhenniche, A., & Mellouk, A. (2022). Étude et simulation d'une cellule solaire à base des matériaux pérovskite hybride (CH 3 NH 3 PbI 3-x Cl x) [Mémoire de licence, Université Saâd Dahleb, Blida-1]. Département des Énergies Renouvelables, Faculté de Technologie.

14. Lemercier, T. (2020). *Développement de cellules solaires pérovskites semi-transparentes de type PIN dans la perspective d'une application tandem* [Thèse de doctorat, Université Savoie Mont Blanc].

15. 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.

16. ResearchGate. (n.d.). *Diagramme de transfert des électrons et processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite* [Image]. ResearchGate.

Chapitre 3

Résultats de simulation numérique et interprétation

3.1 Introduction

Ce chapitre présente une étude approfondie de la modélisation numérique des cellules solaires à pérovskite basées sur le $K_2CuCrCl_6$, réalisée à l'aide du logiciel SCAPS (Solar Cell Capacitance Simulator). Après un aperçu détaillé de la méthodologie de simulation et des paramètres physiques utilisés, le chapitre explore l'architecture du dispositif ainsi que les propriétés optoélectroniques des matériaux constitutifs. Les résultats de la simulation sont analysés de manière critique afin d'évaluer les performances photovoltaïques et d'identifier les stratégies clés pour améliorer l'efficacité du dispositif par l'optimisation de sa structure et de ses matériaux.

3.2 Présentation du logiciel SCAPS

La simulation des cellules solaires en couches minces s'est largement démocratisée ces dernières années. De nombreux logiciels de calcul et de simulation ont ainsi été développés par la communauté scientifique spécialisée dans ce domaine. Parmi les plus utilisés, on peut citer : *AMPS-1D*, *PC-1D*, *ASA*, *SCAPS-1D* et *SILVACO*. SCAPS (*Solar Cell Capacitance Simulator*) est un logiciel de simulation numérique dédié à l'étude des cellules solaires en couches minces à hétérojonction. Il a été développé à l'Université de Gand (Gent), en Belgique, avec l'environnement de développement *LabWindows/CVI* de *National Instruments*, par Marc Burgelman et ses collaborateurs [1]. Il a été mis à disposition de la communauté universitaire spécialisée en photovoltaïque après la deuxième Conférence mondiale sur l'énergie photovoltaïque, tenue à Vienne en 1998. Le programme SCAPS-1D permet de résoudre les équations physiques régissant des structures composées de plusieurs couches de matériaux semi-conducteurs. Ces couches peuvent avoir un profil de dopage arbitraire (fonction de la position) ainsi qu'une distribution énergétique complexe de niveaux profonds (donneurs ou accepteurs), et ce, sous différents types d'éclairement. Les équations sont résolues de manière itérative jusqu'à la convergence de l'algorithme. SCAPS-1D a été introduit dans la littérature scientifique dans les travaux. À l'origine, SCAPS a été conçu pour modéliser les structures de cellules solaires de la famille *$CuInSe_2$* et *CdTe*. Cependant, des extensions successives ont permis d'élargir ses capacités de simulation, le rendant désormais applicable à des cellules solaires à base de silicium cristallin (Si, GaAs) ou amorphe (a-Si, Si micromorphe). Les applications du logiciel SCAPS dans la recherche photovoltaïque sont détaillées dans les références [2].

La plupart des dispositifs à semi-conducteurs sont étudiés à partir de la résolution simultanée des équations fondamentales suivantes :

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{e}{\varepsilon_0\varepsilon_r}\left(p(x) - n(x) + N_D - N_A + \rho_p - \rho_n\right) \tag{3.1}$$

$$\frac{d}{dx}J_n(x) - e\frac{\partial n(x)}{\partial t} - e\frac{\partial p_n}{\partial t} = G(x) - R(x) \tag{3.2}$$

$$\frac{d}{dx}J_p(x) + e\frac{\partial p(x)}{\partial t} + e\frac{\partial p_p}{\partial t} = G(x) - R(x) \tag{3.3}$$

où :

ψ : Potentiel électrique.

q : Charge élémentaire.

ε_0 et ε_r : Permittivités du vide et relative.

p et n : Concentrations de trous et d'électrons.

N_D^+ et N_A^- : Concentrations de dopants donneurs et accepteurs.

J_n et J_p : Densités de courant pour les électrons et les trous.

$G(x)$ et $R(x)$: Taux de génération et de recombinaison des porteurs de charge.

L'utilisation de SCAPS est très pratique : il permet de simuler n'importe quelle structure photovoltaïque à partir des matériaux disponibles dans les fichiers `.data`, en ajustant différents paramètres tels que l'épaisseur, la surface, ou encore le niveau de dopage. L'interface du logiciel, permettant la saisie de ces paramètres, est illustrée à la figure 3.1. Les résultats de simulation obtenus sont très proches des données expérimentales, ce qui constitue un gain significatif de temps et de ressources. Les principales sorties proposées par SCAPS sont les courbes I-V, C-V, C-f, la charge Q, ainsi que des profils tels que le diagramme de bande, la densité de porteurs et la densité de courant. Un exemple de résultat est présenté à la figure 3.2 [2].

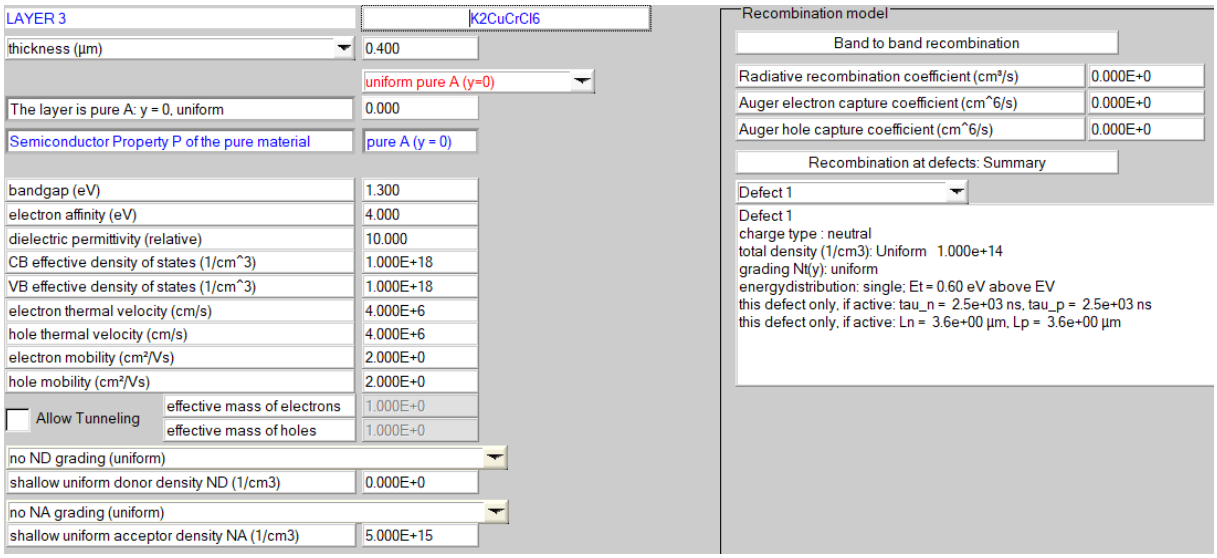


Figure 3.1 . nterface de saisie des paramètres dans SCAPS.

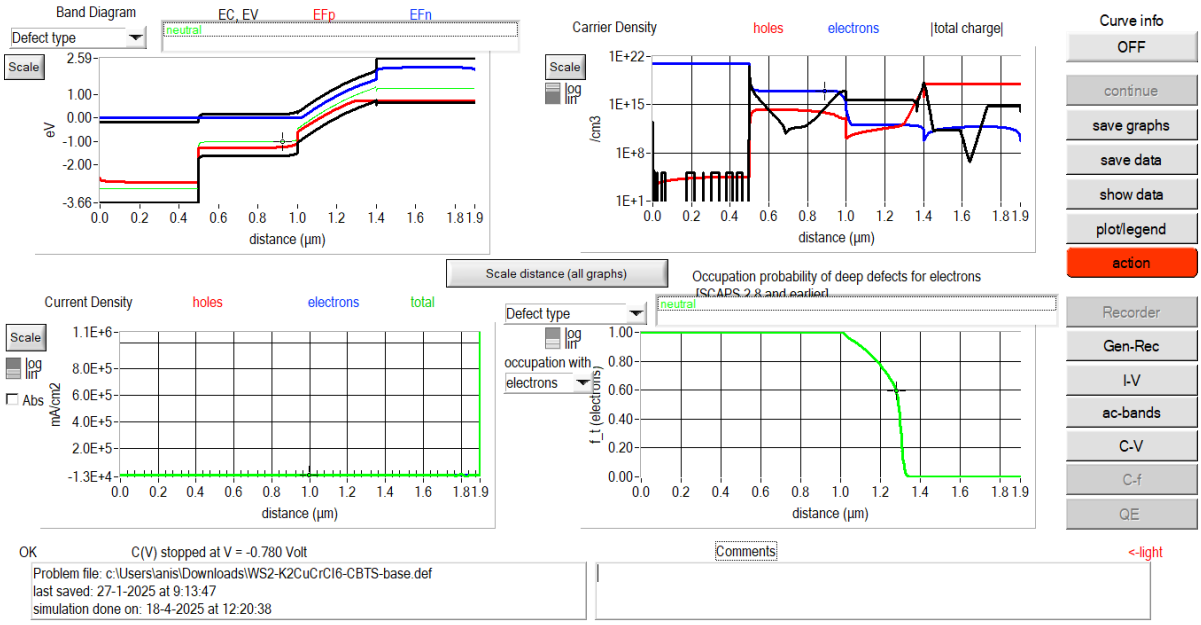


Figure 3.2 . Résultat SCAPS.

3.2.1 Utilisation du logiciel SCAPS

Afin d'assurer une simulation complète et un contrôle précis de l'ensemble des paramètres d'un dispositif photovoltaïque à l'aide du logiciel **SCAPS** (*Solar Cell Capacitance Simulator*), l'utilisateur interagit principalement avec trois interfaces essentielles :

- Le panneau d'action (*Action Panel*),
- Le panneau de définition du dispositif et des conditions du problème (*Definition Panel*),
- La fenêtre d'affichage des résultats.

Dès le lancement du programme, l'interface principale, illustrée à la figure 3.3, s'affiche automatiquement, révélant le *panneau d'action*, point d'entrée central des opérations de simulation.

Cette interface permet notamment :

1. **Définir les conditions expérimentales** : l'utilisateur peut configurer la température de fonctionnement, la fréquence d'analyse, le spectre de l'éclairement (par exemple AM1.5G), ainsi que le niveau d'irradiation. Ces paramètres sont essentiels pour garantir une simulation réaliste et représentative des conditions réelles d'exploitation.
2. **Choisir la caractéristique à simuler** : SCAPS permet de simuler différents types de mesures électriques, telles que la courbe courant-tension (I-V), la capacité-tension (C-V), la capacité-fréquence (C-f), ou encore les réponses en charge (Q). Ces caractéristiques sont indispensables pour évaluer les performances globales du dispositif.

3. **Configurer le problème physique à étudier** : cette étape consiste à modéliser la cellule solaire en définissant la structure géométrique, les matériaux utilisés, les états de pièges (dans le volume et aux interfaces), les mécanismes de recombinaison (notamment de type SRH), ainsi que les conditions aux limites. Toutes ces données sont saisies dans le *Definition Panel* via l'option *Set Problem*.

4. **Lancer les calculs numériques** : une fois tous les paramètres renseignés, l'utilisateur initie la simulation à l'aide de l'option dédiée. Le logiciel procède alors à la résolution des équations différentielles fondamentales régissant le comportement du dispositif (équation de Poisson, équations de continuité des porteurs de charges), par le biais d'algorithmes numériques itératifs jusqu'à obtention de la convergence.

5. **Afficher les courbes de simulation** : après la convergence du calcul, SCAPS permet l'affichage graphique des résultats. L'utilisateur peut visualiser les courbes caractéristiques issues de la simulation (I-V, C-V, C-f, Q), ainsi que des profils internes tels que le diagramme de bandes, les densités de porteurs ou de courant. Ces courbes facilitent l'interprétation des performances du dispositif et permettent une comparaison directe avec les données expérimentales.

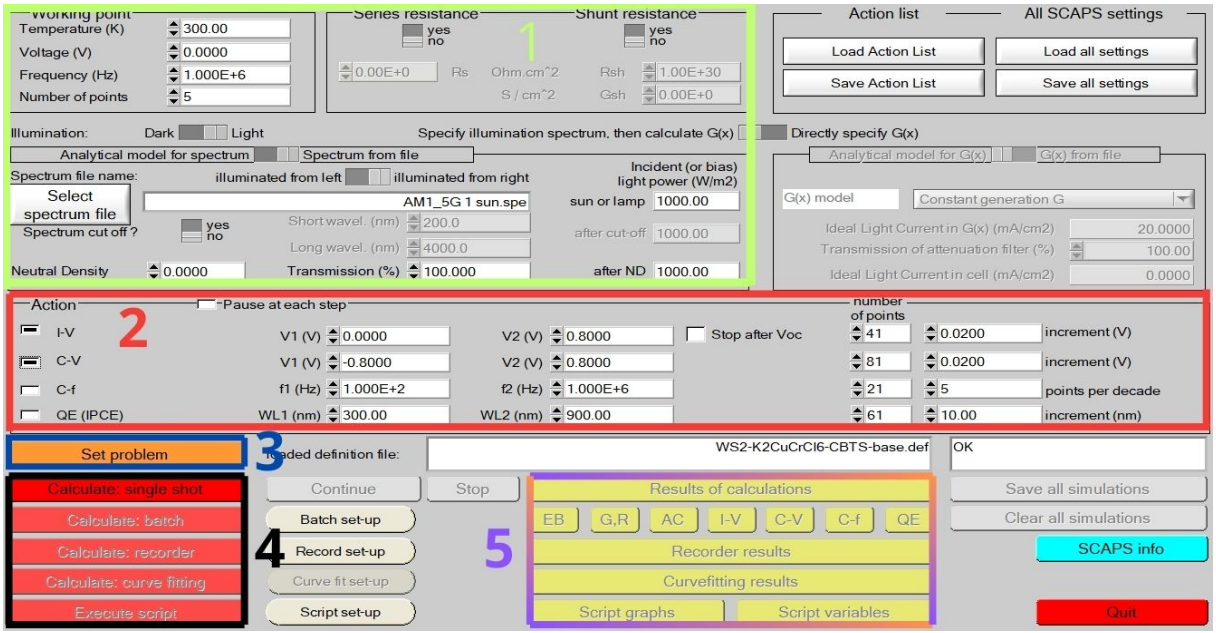


Figure 3.3 . La fenêtre du panneau d'action du logiciel SCAPS.

3.3 Description de la structure de la cellule solaire à base des pérovskites

3.3.1 Description de la structure

La structure proposée de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6/$ illustre une architecture multi-couche conçue pour optimiser les performances photovoltaïques. L'intégration du WS_2 en tant que couche interfaciale est susceptible de favoriser un transport efficace des charges, en raison de sa haute conductivité électrique et de sa stabilité remarquable. La couche absorbante $K_2CuCrCl_6$, intercalée entre le WS_2 et le CBTS, joue un rôle fondamental dans l'absorption du rayonnement lumineux et la génération de porteurs de charge, tirant parti de ses propriétés électroniques spécifiques. Le CBTS, en tant que couche de contact inférieur, assure une extraction efficace des charges tout en réduisant les pertes dues à la recombinaison. Enfin, l'électrode supérieure en oxyde d'indium-étain (ITO) permet une transmission optimale de la lumière incidente tout en maintenant une conductivité électrique adéquate. Cette configuration innovante vise à améliorer l'efficacité de conversion énergétique en exploitant les propriétés complémentaires des matériaux utilisés, ce qui pourrait conduire à une amélioration notable du rendement et de la stabilité des cellules solaires.

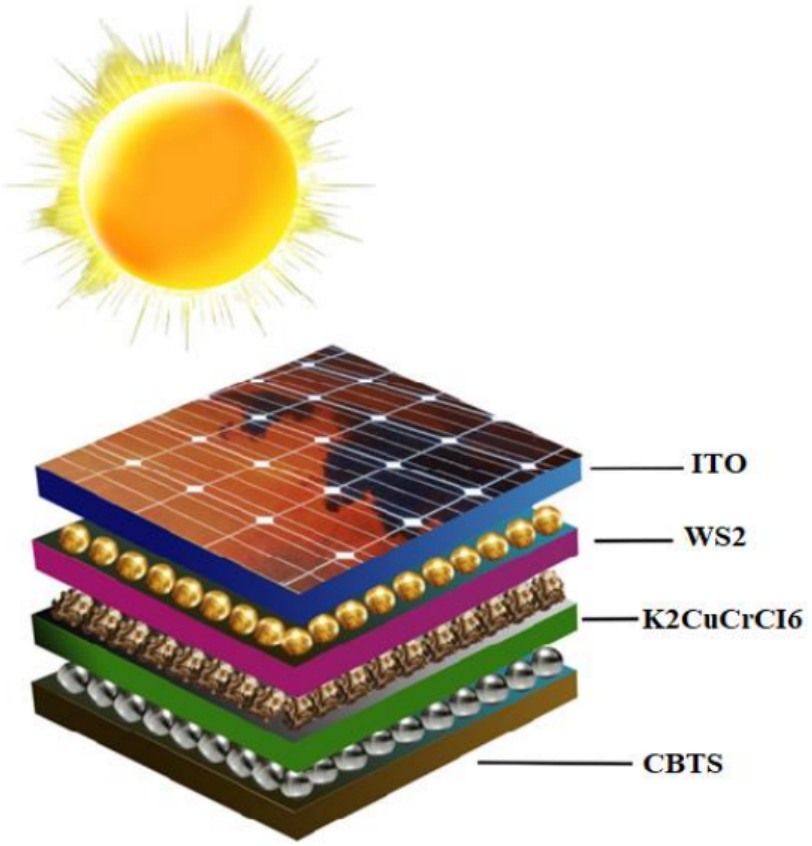


Figure 3.4. Illustration schématique de l'architecture de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6/CBTS$.

3.3.2 Modèles et paramètres de simulation

Les simulations ont été réalisées dans des conditions standards, en particulier sous un éclairement de type AM1.5G et à une température de 300 K. Les paramètres de simulation ont été soigneusement sélectionnés pour chacun des composants du dispositif, notamment les couches de transport d'électrons (WS_2), la couche absorbante ($K_2CuCrCl_6$) ainsi que les couches de transport de trous (CBTS), comme le présente le tableau 3.1 [3].

Paramètres	**$K_2CuCrCl_6$**	**WS_2**	**CBTS**
Épaisseur d (μm)	0.4	0.5	0.5
Affinité électronique χ (eV)	4	3.95	3.6
Gap énergétique E_g (eV)	1.3	1.8	1.9
Permittivité relative ϵ_r	10	13.6	5.4
Densité effective d'états (BC) N_C $(1/\mathrm{m}^3)$	1×10^{18}	8×10^{19}	2.8×10^{18}
Densité effective d'états (BV) N_V $(1/\mathrm{m}^3)$	1×10^{19}	8×10^{19}	1.8×10^{19}
Mobilité électronique μ_n $(\mathrm{cm}^2/\mathrm{V\,s})$	2	100	30
Mobilité des trous μ_p $(\mathrm{cm}^2/\mathrm{V\,s})$	2	3.5×10^{-3}	10
Densité d'accepteurs N_A $(1/\mathrm{cm}^3)$	1×10^{15}	0	1×10^{18}
Densité de donneurs N_D $(1/\mathrm{cm}^3)$	0	1×10^{17}	0
Densité de défauts N_t $(1/\mathrm{cm}^3)$	1×10^{14}	1×10^{14}	1×10^{14}

Tab. 3.1 : Paramètres d'optimisation.

Dans le cadre de la simulation des dispositifs solaires, le logiciel SCAPS-1D permet de résoudre efficacement les équations fondamentales régissant le comportement des semi-conducteurs, à savoir : l'équation de Poisson, les équations de continuité et celles décrivant le transport par dérive-diffusion. L'expression de l'équation (1) constitue une base essentielle pour la compréhension de l'électrostatique et de la répartition des charges électriques dans les matériaux semi-conducteurs [3] :

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

où Ψ représente le potentiel électrostatique, ϵ_s est la permittivité relative statique, q est la charge élémentaire, n et p désignent respectivement les concentrations d'électrons et de trous.

N_d^+ correspond à la densité des donneurs, N_a^- à la densité des accepteurs, et N_{def} représente la densité des défauts, incluant à la fois les donneurs et les accepteurs.

Les équations de continuité des porteurs dans le dispositif peuvent être exprimées comme suit [4] :

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

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

Ici, j_p et j_n représentent respectivement les densités de courant des trous et des électrons, G désigne le taux de génération des porteurs, tandis que $U_n(n,p)$ et $U_p(n,p)$ correspondent aux taux de recombinaison des électrons et des trous, respectivement. En outre, la densité de courant des porteurs peut également être déterminée à partir des expressions suivantes [5] :

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

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

Ici, q représente la charge électrique, μ_p et μ_n sont les mobilités des porteurs de charge (respectivement pour les trous et les électrons), et D_p, D_n désignent les coefficients de diffusion correspondants, tels que déterminés à travers les simulations réalisées à l'aide du logiciel SCAPS-1D [6-7].

3.3.3 Diagramme de bande d'énergie

La figure 3.5 illustre l'alignement des bandes d'énergie au sein d'une hétérostructure complexe, mettant en évidence les niveaux de l'énergie de conduction (E_c), des quasi-niveaux de Fermi pour les électrons (F_n) et pour les trous (F_p), ainsi que de l'énergie de valence (E_v), en fonction de la distance à travers les différentes couches du dispositif. L'architecture étudiée se compose successivement d'une couche d'oxyde d'indium-étain (ITO), d'un matériau de transport d'électrons (ETL) à base de WS_2, d'une couche active absorbante constituée de $K_2CuCrCl_6$, et enfin d'un matériau de transport de trous (HTL), désigné sous l'acronyme CBTS. L'analyse de l'alignement des bandes met en évidence la présence de barrières énergétiques et de puits de potentiel qui influencent significativement le transport des porteurs de charge aux interfaces entre les différentes couches. À l'interface ITO/WS_2, on observe une discontinuité marquée des bandes de conduction et de valence, susceptible d'entraver l'extraction efficace des électrons depuis la couche WS_2 vers l'électrode ITO. La couche de WS_2 possède une bande interdite propre, dont le positionnement relatif par rapport à celui de la couche active de $K_2CuCrCl_6$ est un facteur critique pour l'injection efficace des électrons. L'alignement énergétique à cette interface détermine en grande partie le transfert des électrons photogénérés vers l'ETL. La couche active

de $K_2CuCrCl_6$, absorbante, joue un rôle central dans la génération de paires électron-trou sous l'effet de l'irradiation lumineuse. Son alignement énergétique vis-à-vis du WS_2 et du CBTS est fondamental pour une séparation efficace des porteurs de charge. Des marches d'énergie bien ajustées favorisent la migration des électrons vers l'ETL, tandis que les trous sont dirigés vers le HTL, réduisant ainsi les recombinaisons dans la couche active. Enfin, l'interface entre $K_2CuCrCl_6$ et le CBTS est déterminante pour l'extraction des trous vers le contact supérieur. L'alignement des bandes doit permettre le transport sélectif des trous tout en bloquant le reflux des électrons, assurant ainsi une collection optimale des charges et contribuant à la performance globale du dispositif. L'étude approfondie de cet alignement des bandes s'avère donc essentielle pour la compréhension fine des mécanismes de transport de charge dans cette hétérostructure spécifique. L'optimisation des matériaux utilisés et de leurs niveaux d'énergie respectifs constitue une étape clé dans la conception de dispositifs optoélectroniques à haut rendement, en particulier ceux reposant sur les pérovskites de type $K_2CuCrCl_6$.

Le diagramme de bande d'énergie joue un rôle central dans la performance des cellules solaires à pérovskites. Un bon alignement des niveaux d'énergie entre les différentes couches fonctionnelles – notamment la couche de pérovskite, la couche de transport des électrons (ETL) et la couche de transport des trous (HTL) – est essentiel pour assurer une séparation efficace des porteurs de charge ainsi qu'un transport sans obstacle vers les électrodes. Un désalignement des bandes peut créer des barrières énergétiques, favorisant la recombinaison des porteurs et réduisant ainsi la tension de sortie (Voc), le courant et donc le rendement global de la cellule.

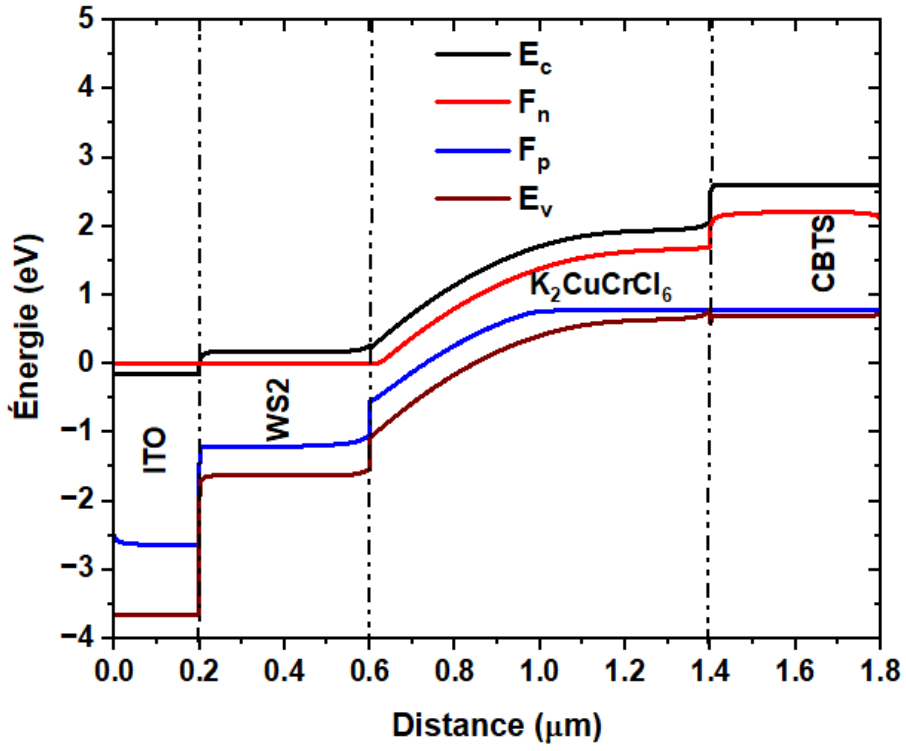


Figure 3.5 . Diagramme de bande à base de $K_2CuCrCl_6$.

3.4 Résultats et discussion

3.4.1 Effet de l'épaisseur de la couche de pérovskites

Dans la figure 3.6 on observe que l'augmentation de l'épaisseur de l'absorbeur améliore, dans un premier temps, l'efficacité de conversion de puissance (PCE), en raison d'une augmentation de la densité de courant de court-circuit (JSC). En effet, une plus grande quantité de lumière est absorbée, ce qui génère davantage de porteurs de charge. Cependant, au-delà d'environ 0.8 μm, l'efficacité se stabilise, et toute augmentation supplémentaire de l'épaisseur entraîne des rendements décroissants, en raison de pertes par recombinaison accrues. Le facteur de remplissage (FF) s'améliore initialement, mais diminue légèrement pour les épaisseurs plus importantes, probablement à cause d'une résistance série accrue. Parallèlement, la tension en circuit ouvert (VOC) décline continuellement, indiquant un taux de recombinaison plus élevé. Ces observations suggèrent l'existence d'une épaisseur optimale autour de 0.8 μm, permettant un équilibre entre absorption et recombinaison, pour une efficacité maximale.

L'épaisseur de la couche absorbante en pérovskite influence directement la quantité de lumière absorbée ainsi que l'efficacité de la conversion photovoltaïque. Une couche trop fine limite l'absorption des photons, réduisant le courant généré, tandis qu'une couche trop épaisse peut ralentir le transport des charges, augmentant la probabilité de recombinaison avant leur collecte. Il est donc nécessaire de trouver un compromis entre absorption lumineuse et transport des charges, en optimisant l'épaisseur de la couche pour maximiser le rendement sans compromettre la stabilité de la cellule.

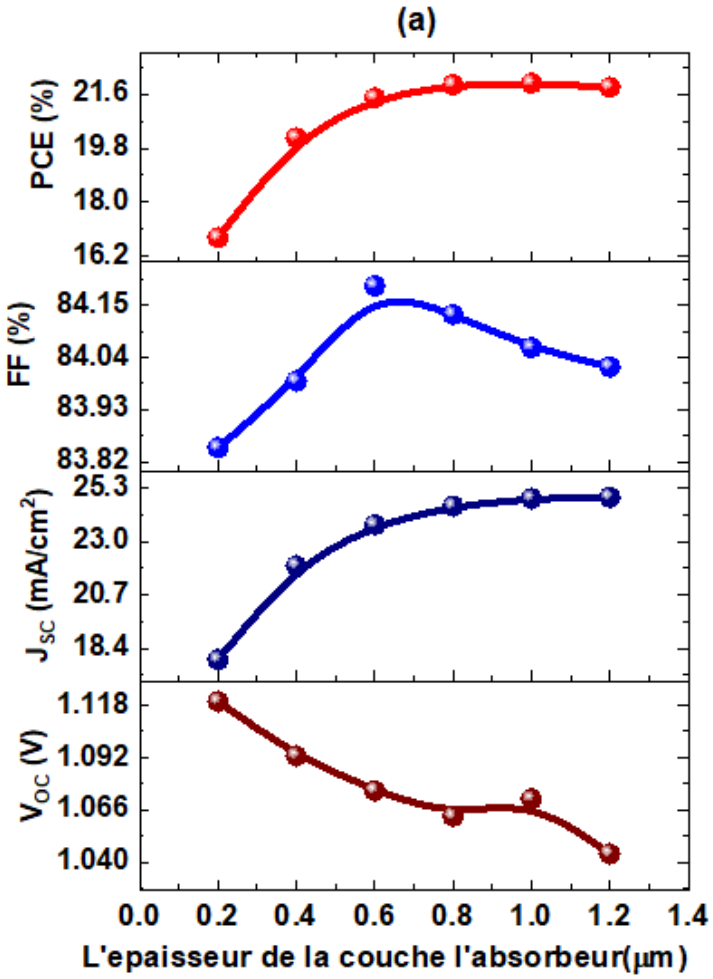


Figure 3.6 . Effet de l'épaisseur de la pérovskite $K_2CuCrCl_6$.

3.4.2 Effet des défauts de la couche de pérovskites

Dans la figure 3.7, on constate que la densité de défauts dans la couche de $K_2CuCrCl_6$ influence de manière significative les performances du dispositif. Lorsque cette densité augmente de 10^{12} à 10^{18} cm^{-3}, l'ensemble des paramètres clés à savoir l'efficacité de conversion de puissance (PCE), le facteur de remplissage (FF), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}) ainsi que la tension en circuit ouvert (V_{OC}) subit une diminution marquée. La chute du (J_{SC}) et du (V_{OC}) suggère que des densités élevées de défauts introduisent des centres de recombinaison non radiative, ce qui réduit la durée de vie des porteurs de charge et le potentiel interne du dispositif. Par ailleurs, le FF diminue sensiblement, traduisant un piégeage des charges et une intensification des barrières à l'extraction avec l'augmentation de la densité de défauts. En définitive, une concentration élevée de défauts dans le $K_2CuCrCl_6$ dégrade fortement les performances de la cellule solaire, soulignant la nécessité d'employer des matériaux à faible densité de défauts pour optimiser l'efficacité. Ces résultats mettent en évidence le rôle déterminant du contrôle de l'épaisseur de l'absorbeur et de la qualité cristalline dans la conception de cellules solaires $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS à haut rendement.

La présence de défauts cristallins dans la couche de pérovskite constitue un facteur limitant majeur pour les performances des cellules. Ces défauts agissent comme des pièges à électrons ou à trous, favorisant les recombinaisons non radiatives qui diminuent le courant de court-circuit (Jsc), la tension en circuit ouvert (Voc) et le facteur de forme (FF). Une densité de défauts élevée peut également affecter la stabilité du dispositif. Ainsi, l'amélioration de la qualité cristalline de la couche absorbante ou l'application de techniques de passivation est indispensable pour atteindre un rendement élevé.

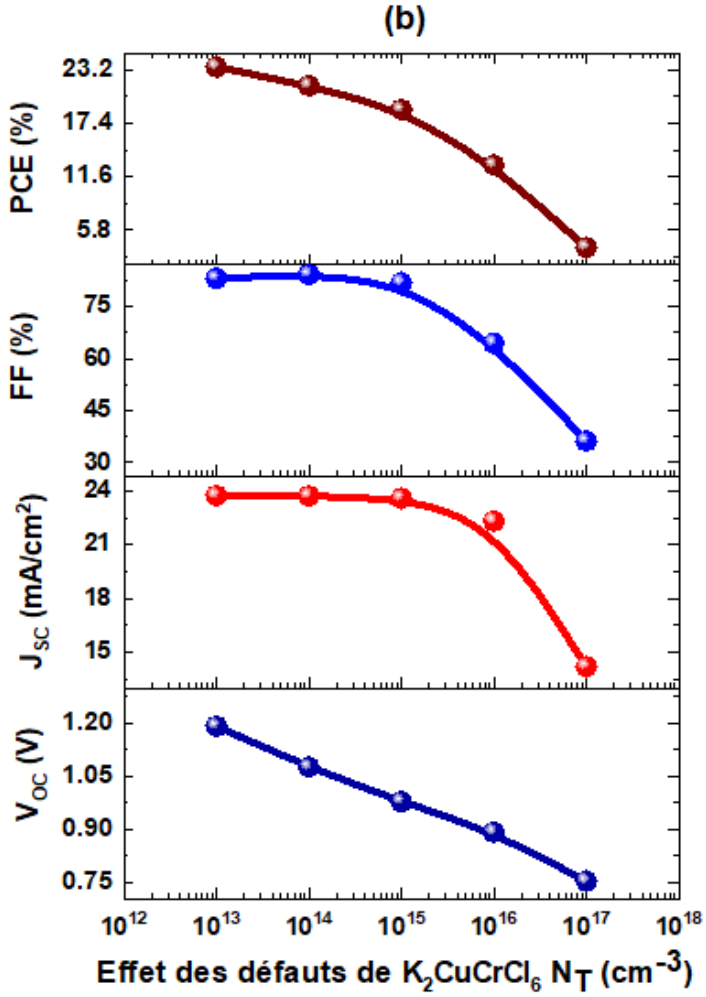


Figure 3.7 . Effet de la densité de défauts N_T (cm^{-3}).

3.4.3 Effet de l'épaisseur de la couche ETL

La figure 3.8 illustre l'effet de l'épaisseur de la couche de WS_2 sur les paramètres de performance de la cellule solaire WS_2/$K_2CuCrCl_6$/CBTS, notamment le rendement de conversion (PCE), le facteur de remplissage (FF), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}) et la tension en circuit ouvert (V_{OC}). À mesure que l'épaisseur du WS_2 augmente de 0.1 μm à 0.5 μm, le PCE présente une augmentation progressive, principalement attribuée à une élévation des valeurs de J_{SC} et de V_{OC}. L'amélioration du J_{SC} suggère qu'une couche de WS_2 plus épaisse favorise le trans-

port des charges et réduit la recombinaison, probablement en raison d'une passivation améliorée et d'un champ électrique intégré optimisé. De même, l'augmentation de la V_{OC} témoigne d'une diminution des pertes par recombinaison non radiative aux interfaces. Fait intéressant, le FF demeure pratiquement constant pour toutes les épaisseurs, ce qui indique que la résistance série et l'efficacité d'extraction des charges ne sont pas influencées par les variations d'épaisseur du WS_2. Dans l'ensemble, ces résultats mettent en évidence le rôle bénéfique d'une couche interfaciale de WS_2 optimisée dans l'amélioration de l'efficacité des cellules solaires $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS, l'augmentation de l'épaisseur influençant positivement la dynamique des porteurs de charge ainsi que la performance globale du dispositif.

La couche de transport des électrons (ETL) a pour rôle de collecter sélectivement les électrons tout en bloquant les trous. L'épaisseur de cette couche doit être finement contrôlée : si elle est trop mince, elle peut laisser passer des charges indésirables, provoquant des recombinaisons ; si elle est trop épaisse, elle augmente la résistance série et réduit l'efficacité du transport des électrons. Une épaisseur optimisée permet donc d'améliorer à la fois la sélectivité des porteurs et la stabilité de la cellule.

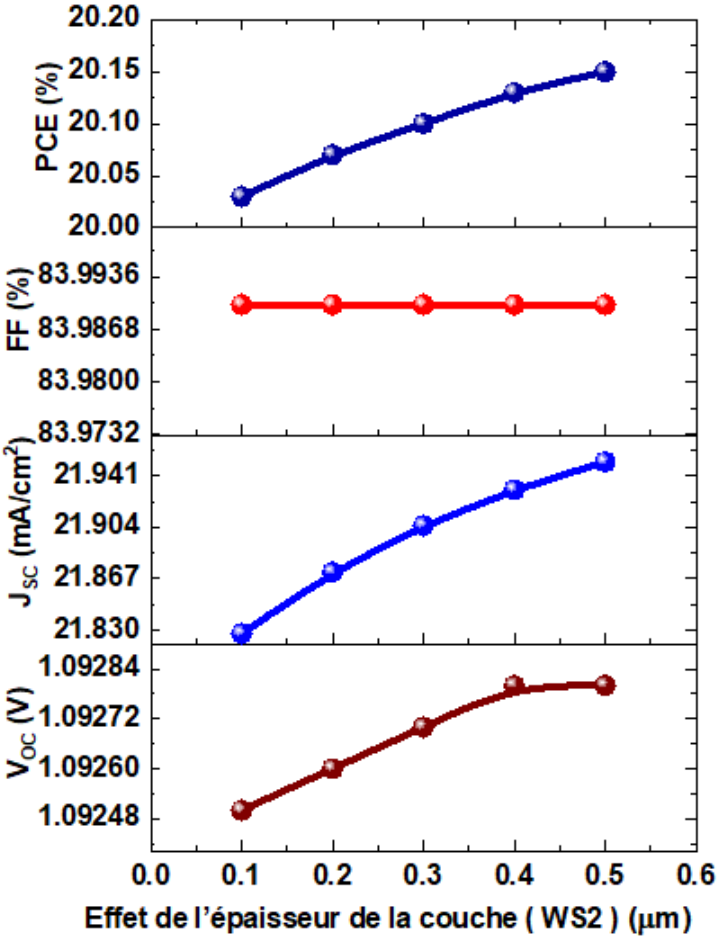


Figure 3.8 . Effet de l'épaisseur ETL (WS_2).

3.4.4 Effet de la température

La figure 3.9 présente l'effet de la variation de la température sur les paramètres de performance clés de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS, notamment la tension en circuit ouvert (V_{OC}), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}), le facteur de remplissage (FF) et le rendement de conversion (PCE). Lorsque la température augmente de 240 K à 360 K, le FF demeure relativement stable, ce qui indique un impact minime de la température sur l'efficacité d'extraction des charges. En revanche, le PCE et le J_{SC} présentent de légères variations sur l'ensemble de l'intervalle de température, ce qui suggère une dépendance thermique modérée en ce qui concerne la génération et la collecte des charges. Le comportement globalement stable de ces paramètres met en évidence que la structure $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS conserve de bonnes performances sous différentes conditions thermiques. Cette stabilité thermique revêt une importance capitale pour les applications pratiques, dans la mesure où elle garantit un fonctionnement constant de la cellule solaire malgré les variations de température environnementale.

La température ambiante influence fortement les performances des cellules solaires à pérovskites. Une augmentation de température entraîne généralement une diminution de la tension en circuit ouvert (Voc), en raison de l'augmentation des recombinaisons thermiques. Par ailleurs, les matériaux à base de pérovskite peuvent être sensibles à la chaleur, ce qui peut conduire à une dégradation de leur structure cristalline et de leurs interfaces, affectant la stabilité et la durée de vie de la cellule. La gestion thermique devient donc un enjeu clé dans les applications réelles.

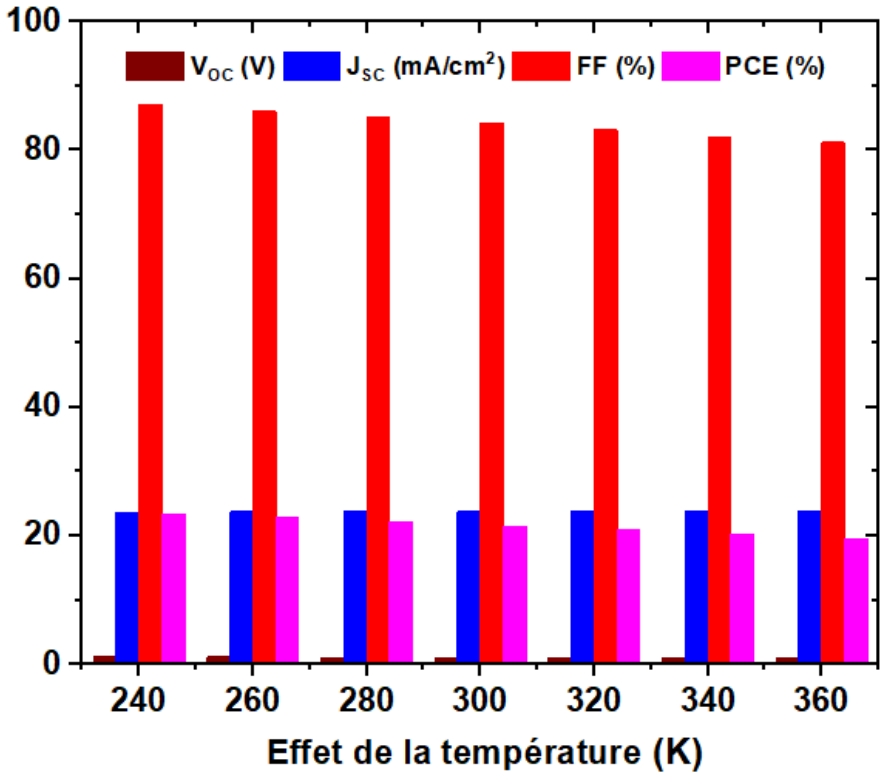


Figure 3.9 . Effet de la température.

3.4.5 Effet de l'épaisseur de la couche HTL

La figure 3.10 illustre l'influence de l'épaisseur de la couche absorbante de CBTS sur les paramètres de performance de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS, notamment le rendement de conversion (PCE), le facteur de remplissage (FF), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}) et la tension en circuit ouvert (V_{OC}). À mesure que l'épaisseur du CBTS augmente de 0.1 μm à 0.5 μm, le PCE diminue progressivement, principalement en raison de la baisse simultanée des valeurs de J_{SC} et de V_{OC}. La diminution de J_{SC} suggère qu'une épaisseur excessive de la couche de CBTS engendre des pertes accrues par recombinaison dans le volume, limitant ainsi l'extraction des porteurs photogénérés. De même, la diminution de V_{OC} reflète une recombinaison non radiative accrue, probablement due à une plus grande distance de diffusion des porteurs et à leur recombinaison sur des sites de défauts. En revanche, le FF présente une légère amélioration avec l'augmentation de l'épaisseur du CBTS, ce qui suggère une meilleure efficacité de collecte des charges, en dépit de la baisse de J_{SC} et de V_{OC}. Ces résultats mettent en évidence qu'une épaisseur optimale de la couche de CBTS est cruciale pour assurer un équilibre entre la génération, le transport et la recombinaison des charges, en vue d'optimiser les performances des cellules solaires $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS.

La couche de transport des trous (HTL) permet l'extraction sélective des trous et bloque le passage des électrons. L'épaisseur de cette couche influence le transport des charges et la qualité de l'interface avec la couche pérovskite. Une épaisseur trop faible peut entraîner une collecte incomplète des charges, tandis qu'une épaisseur excessive accroît la résistance électrique et limite la performance globale. Le choix du matériau HTL et l'optimisation de son épaisseur sont donc essentiels pour assurer une bonne sélectivité, une faible recombinaison et une efficacité élevée.

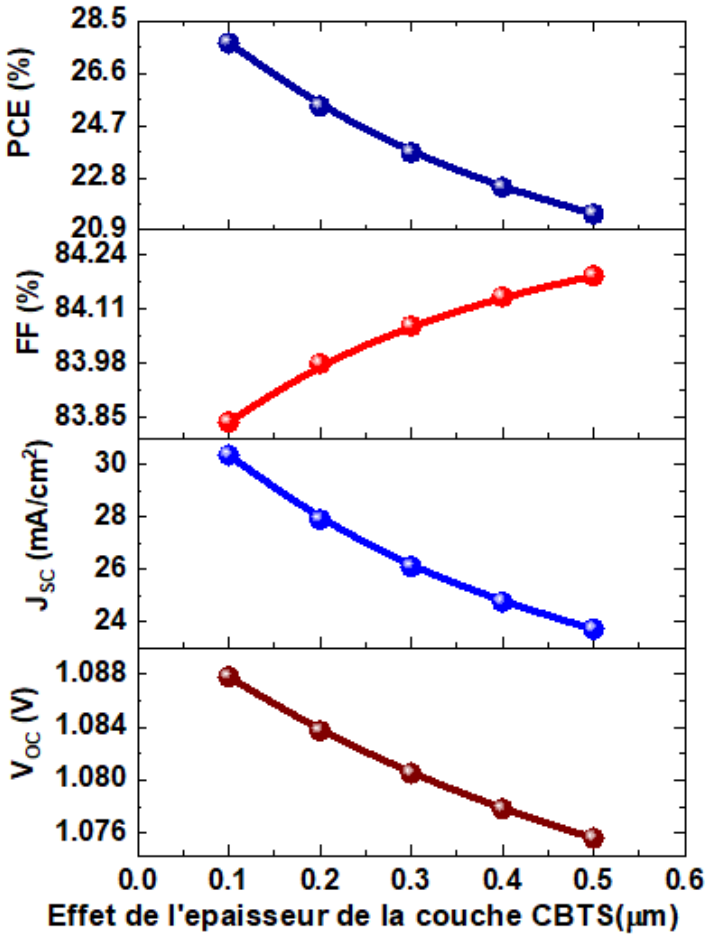


Figure 3.10 . Effet de l'épaisseur HTL (CBTS).

3.4.6 Effet de la résistance série et shunt

Les diagrammes en radar illustrés dans la figure 3.11 et la figure 3.12 présentent les paramètres de performance de la cellule solaire $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS, incluant la tension en circuit ouvert (V_{OC}), la densité de courant de court-circuit (J_{SC}), le facteur de remplissage (FF) et le rendement de conversion (PCE), sous différentes conditions. Le graphique (a) présente les données selon une échelle linéaire, tandis que le graphique (b) utilise une échelle logarithmique afin de mieux visualiser les différences relatives au FF. Les valeurs relativement constantes de V_{OC} et J_{SC} indiquent une dynamique des porteurs de charge stable au sein de la structure. En revanche, le FF affiche une amplitude nettement supérieure par rapport aux autres paramètres, mettant en évidence sa contribution dominante à l'efficacité du dispositif. Le PCE demeure modéré, traduisant l'influence combinée des autres facteurs. La représentation logarithmique accentue davantage les différences d'ordre de grandeur, en particulier pour le FF, confirmant son impact prépondérant sur les performances globales du dispositif. Ces résultats suggèrent que la structure $WS_2/K_2CuCrCl_6$/CBTS maintient des performances stables malgré les variations des conditions de fonctionnement, le FF constituant un facteur clé dans l'optimisation de l'efficacité.

Les résistances parasites, série et shunt, influencent directement le rendement des cellules

solaires. Une résistance série élevée engendre des pertes de puissance par effet Joule, réduisant le courant de sortie et le facteur de forme. À l'inverse, une résistance de shunt trop faible permet à une partie du courant de dériver, créant des fuites qui diminuent la tension et peuvent entraîner un effondrement du point de puissance maximale. Pour obtenir un bon rendement, il est crucial de minimiser la résistance série tout en maximisant la résistance de shunt.

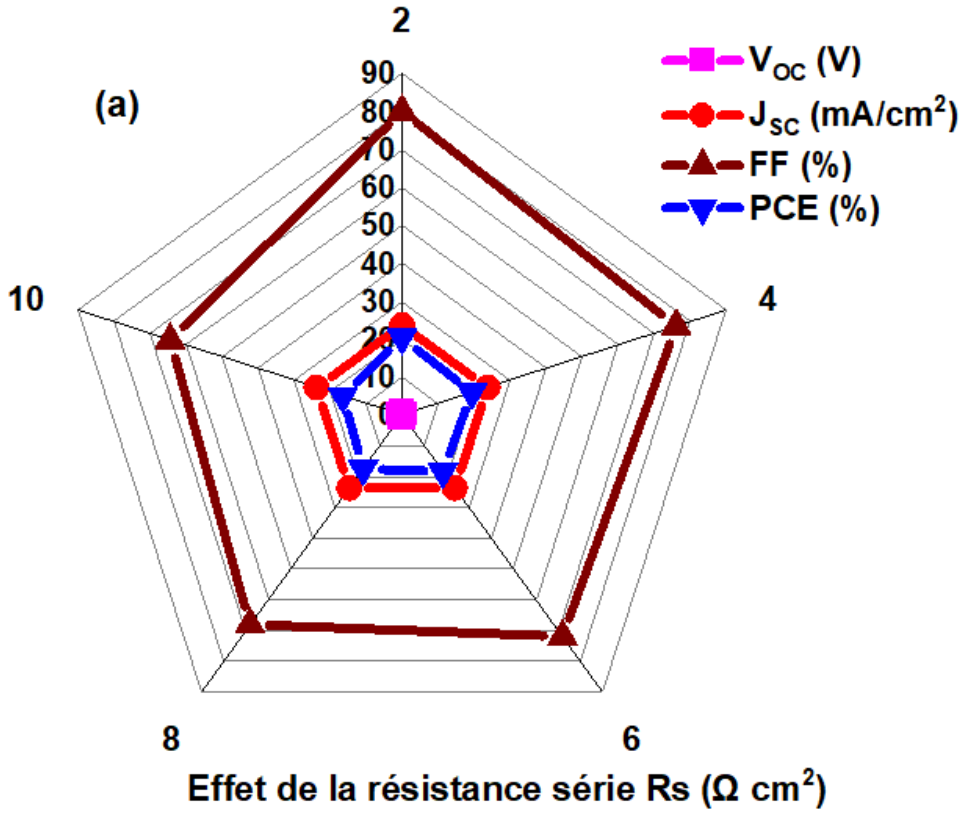


Figure 3.11 . Effet de la résistance série Rs.

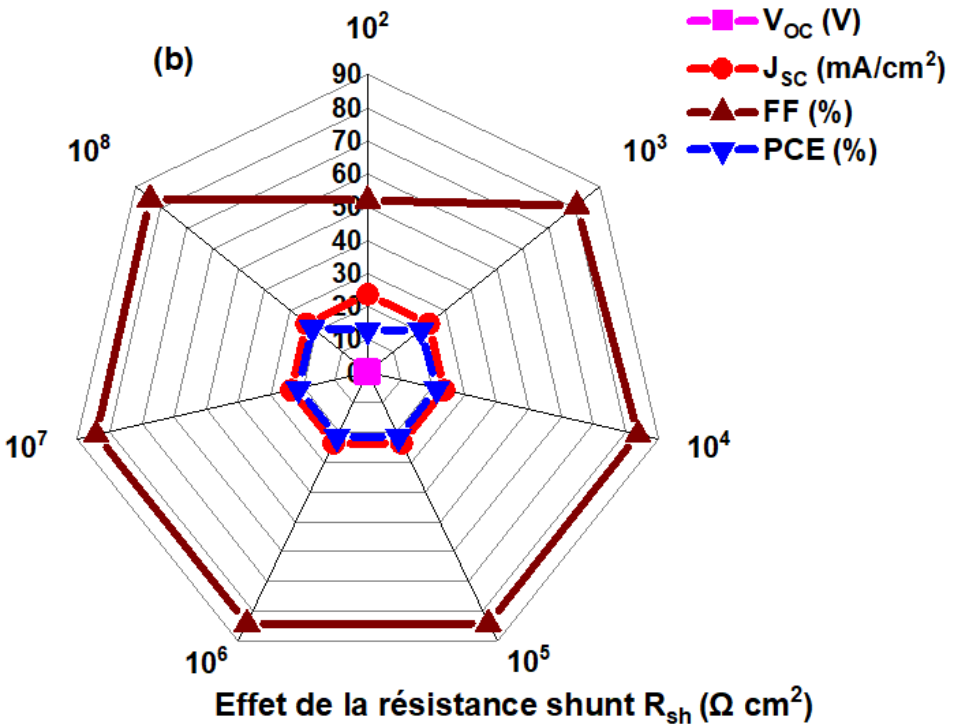


Figure 3.12 . Effet de la résistance shunt Rsh.

3.5 Conclusion

Ce chapitre présente une analyse numérique détaillée des performances électriques de la structure photovoltaïque ITO/WS_2/$K_2CuCrCl_6$/CBTS à l'aide de l'outil de simulation SCAPS-1D. L'étude a systématiquement examiné l'influence des principaux paramètres physico-structurels sur les caractéristiques courant-tension (I-V) du dispositif. Plus précisément, les effets de l'épaisseur de la couche absorbante, des couches de transport d'électrons et de trous (ETL et HTL), de la densité de défauts dans la couche de pérovskite, de la température de fonctionnement, de la résistance série et de la résistance shunt ont été examinés en profondeur. Les analyses paramétriques ont permis de mieux comprendre leur impact sur les indicateurs photovoltaïques critiques, notamment la tension à vide (Voc), la densité de courant de court-circuit (Jsc), le facteur de remplissage (FF) et le rendement de conversion de puissance (PCE). Dans des conditions de simulation optimisées, le dispositif a démontré des performances impressionnantes, atteignant une tension de 1,99 V, un courant de 30,37 mA/cm², un facteur de remplissage de 87,01 % et un rendement global de 27,7 %. Ces résultats soulignent le fort potentiel de l'architecture hybride proposée pour les technologies de conversion d'énergie solaire à haut rendement de nouvelle génération.

Bibliographie Chapitre III

1. Burgelman, M., Decock, K., Niemegeers, A., Verschraegen, J., & Degrave, S. (2016). *SCAPS manual*. University of Ghent : Ghent, Belgium.

2. Chadel, A. *Optimisation et simulation numérique du profil de la couche absorbante et des différentes couches des cellules photovoltaïques à base de CIGS*. Thèse de doctorat, Université de Tlemcen-Abou Bekr Belkaid.

3. 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 TiO_2 and Cu_2O charge transport layers harnessing over 25% efficiency*. *Journal of Optics*, **53**(4), 3726–3742.

4. Zouache, R., Saidani, O., Yousfi, A., Alsubaie, A. S., Soulef, B. A., Feriel, L., & Islam, R. (2025). *Numerical Investigation of Enhanced Efficiency in CIGS Solar Cells with 3C-SiC and PEDOT :PSS Integration*. *Periodica Polytechnica Chemical Engineering*.

5. Yousfi, A., & Feneniche, W. (2023). *Effect of Graded Double Perovskite for Boosting up the Photovoltaic Output Parameters of Solar Cell : A Numerical Modelling Using SCAPS-1D*.

6. Chakraborty, R., et al. (2019). *Colloidal synthesis, optical properties, and hole transport layer applications of Cu_2BaSnS_4 (CBTS) nanocrystals*. *ACS Applied Energy Materials*, **2**, 3049–3055.

7. Uddin, M. S., Al Mashud, M. A., Toki, G. F., Pandey, R., Zulfiqar, M., Saidani, O., & Hossain, M. K. (2023). *Lead-free Ge-based perovskite solar cell incorporating TiO_2 and Cu_2O charge transport layers harnessing over 25% efficiency*. *Journal of Optics*, 1–17.

Conclusion Générale

Ce travail présente une étude de simulation numérique avancée de cellules solaires à base de $K_2CuCrCl_6$ à l'aide du logiciel SCAPS-1D. L'architecture du dispositif proposée intègre une couche absorbante en $K_2CuCrCl_6$ avec du disulfure de tungstène (WS_2) comme couche de transport d'électrons (ETL) et du sulfure de cuivre, de baryum et d'étain (CBTS) comme couche de transport de trous (HTL). Cette configuration, modélisée comme une structure WS_2 / $K_2CuCrCl_6$/CBTS, démontre des performances de photoconversion remarquables et présente un fort potentiel pour les applications photovoltaïques de nouvelle génération. Notre étude va au-delà de la caractérisation de base en analysant systématiquement l'impact de plusieurs paramètres physico-structurels critiques sur les performances du dispositif. Ceux-ci incluent l'épaisseur des couches, la température de fonctionnement, la densité de défauts dans l'absorbeur et les résistances série et shunt. Grâce à cette étude paramétrique approfondie, nous avons acquis de précieuses connaissances sur les interdépendances complexes entre les composants structurels et leurs effets sur la stabilité du dispositif, le transport de charge et le rendement global. La simulation a débuté par la définition détaillée de la structure du dispositif dans SCAPS-1D, incluant les couches fonctionnelles et les contacts électriques. Des paramètres spécifiques au matériau, tels que l'épaisseur, la concentration de dopage, la bande interdite et l'affinité électronique, ont ensuite été intégrés, ainsi que des modèles physiques décrivant la dynamique des porteurs de charge et les processus de recombinaison. L'optimisation de ces paramètres a donné des résultats remarquables :

Avec un absorbeur $K_2CuCrCl_6$ de 800 nm d'épaisseur, le dispositif a atteint Jsc = 34,75 mA/cm², Voc = 1,09 V, FF = 74,26 % et PCE = 27,99 %.

Un ETL (WS_2) de 100 nm a assuré un transport électronique efficace tout en minimisant les pertes optiques et la recombinaison.

Un HTL (CBTS) de 500 nm a amélioré l'extraction des trous et la sélectivité des contacts, contribuant ainsi à un facteur de remplissage et à une efficacité globale plus élevés.

Le maintien du dispositif à une température de fonctionnement de 300 K a permis d'obtenir un équilibre optimal entre stabilité thermique et performances électriques. L'optimisation des résistances série et shunt a permis de réduire les pertes parasites et d'améliorer la qualité du point de puissance maximale. Ces résultats soulignent le rôle crucial de chaque couche de matériau et de chaque paramètre dans la détermination des performances photovoltaïques du dispositif. Ils confirment la viabilité du $K_2CuCrCl_6$ comme absorbeur prometteur pour les cellules solaires

à haut rendement et économiques, et constituent une base solide pour la poursuite des travaux expérimentaux et théoriques sur le photovoltaïque hybride à pérovskite.