



République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère de l'Enseignement Supérieur
et de la Recherche Scientifique
Université de Tissemsilt



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences et de la Technologie

Mémoire de fin d'études pour l'obtention du diplôme
de Master académique en

Filière : Electronique
Spécialité : Instrumentation

Présentée par : *Hallali Madjid*
Oussar Mohamed

Thème

Simulation et optimisation d'une cellule solaire pérovskite avec SCAPS-1D

Soutenu le : 30/06/2026

Devant le jury

Meharrar Aoued	Président	M.C.B.	Univ-Tissemsilt
Hamri Yazid Zakaria	Encadreur	M.C.B.	Univ-Tissemsilt
Belkassa Missoum	Co-encadreur	M.C.B.	Univ-Tissemsilt
Salim Karim	Examineur	M.C.B.	Univ-Tissemsilt

Année universitaire : 2025-2026



Remerciements

Je remercie Allah le tout puissant pour m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail. Je remercie tout particulièrement ma famille, pour leur soutien Inconditionnel au cours de mes années d'études. Je tiens à remercier mon encadreur, docteur Hamri Yazid Zakaria, pour m'avoir proposé ce sujet, pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et de sa constante disponibilité.

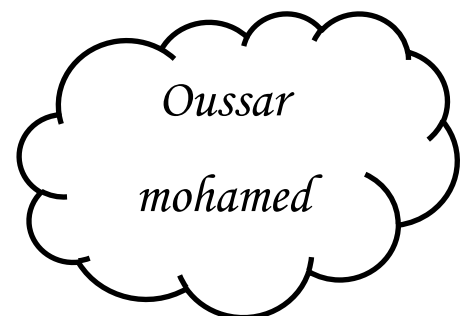
Egalement, je tiens à remercier mon co-encadreur Mr BELKASSA Missoum de leur soutien pour réaliser ce modeste travail. Je désire aussi remercier les enseignants de la filière électronique, qui m'ont fourni les outils nécessaires à la réussite de mes études universitaires. Je tiens également à remercier vivement les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce travail. Enfin, je tiens à remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.



Remerciements

Je remercie Allah le tout puissant pour m'avoir donné le courage, la volonté et la patience de mener à terme ce présent travail. Je remercie tout particulièrement ma famille, pour leur soutien Inconditionnel au cours de mes années d'études. Je tiens à remercier mon encadreur, docteur Hamri Yazid Zakaria, pour m'avoir proposé ce sujet, pour m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et de sa constante disponibilité.

Egalement, je tiens à remercier mon co-encadreur Mr BELKASSA Missoum de leur soutien pour réaliser ce modeste travail. Je désire aussi remercier les enseignants de la filière électronique, qui m'ont fourni les outils nécessaires à la réussite de mes études universitaires. Je tiens également à remercier vivement les membres du jury pour avoir accepté d'évaluer ce travail. Enfin, je tiens à remercier toute personne qui a contribué de près ou de loin à la réussite de ce travail.



Dédicace

Je dédie cet ouvrage à mes chers parents, qui ont toujours prié pour ma réussite et m'ont toujours apporté leur soutien moral.

*Je les remercie de m'avoir encouragé et aidé à devenir ce que
je suis aujourd'hui.*

*Je dédie également cet ouvrage à ma petite famille : Ritadje – Ines- Djawad.
et à tous mes frères et sœurs.*

Et à tous mes amis.



Dédicace

*Je dédie cet ouvrage à mes cher père, qui et toujours prié pour ma réussite et
ma toujours apporté leur soutien moral.*

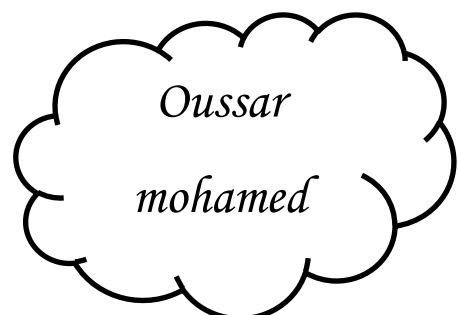
Je les remercie de m'avoir encouragé et aidé à devenir ce que

Je suis aujourd'hui.

Je dédie également cet ouvrage à ma grande famille

Et tous mes enfants et ma petits (Mayar djinan) .

Et à tous mes amis.



Résumé:

Dans le contexte global de la diversification de l'utilisation des ressources naturelles, le recours aux énergies renouvelables et en particulier le solaire photovoltaïque se fait de plus en plus fort. À ce titre, le développement d'une nouvelle génération de cellules photovoltaïques à base de pérovskite semble prometteur. Dans ce travail, nous avons étudié par simulation numérique unidimensionnelle les performances photovoltaïques d'une cellule solaire basée sur le matériau hybride pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (structure $\text{ZnO}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuI}$) en utilisant le logiciel SCAPS-1D.

L'objectif principal est d'améliorer les performances de la cellule solaire en déterminant les paramètres optimaux pour son fonctionnement. Dans ce cadre, l'influence de plusieurs paramètres physiques sur les caractéristiques électriques du dispositif a été analysée. Nous nous sommes intéressés plus particulièrement à l'effet de l'épaisseur de la couche pérovskite (absorbeur), à l'impact de l'épaisseur et du dopage des couches de transport d'électrons (ETL en ZnO) et de trous (HTL en CuI). Les résultats mettent en évidence un compromis physique optimal pour l'absorbeur permettant d'atteindre une efficacité de conversion maximale de l'ordre de **17,1 %**. Ce travail confirme l'importance des outils de simulation pour la conception et l'optimisation des cellules solaires de nouvelle génération.

ملخص :

في السياق العالمي لتنويع استخدام الموارد الطبيعية، يتزايد الإقبال على الطاقات المتجددة، ولا سيما الطاقة الشمسية الكهروضوئية بشكل مطرد. وفي هذا الصدد، يبدو تطوير جيل جديد من الخلايا الكهروضوئية القائمة على مادة البيروفسكيت واعداً. في هذا العمل، قمنا بدراسة الأداء الكهروضوئي لخلية شمسية تعتمد على مادة البيروفسكيت الهجينة ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) بنية ($\text{ZnO}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuI}$) عن طريق المحاكاة الرقمية أحادية البعد باستخدام برنامج SCAPS-1D.

يتمثل الهدف الرئيسي في تحسين أداء الخلية الشمسية من خلال تحديد المعاملات المثلى لتشغيلها. وفي هذا الإطار، تم تحليل تأثير العديد من المعاملات الفيزيائية على الخصائص الكهربائية للجهاز. وقد ركزنا بشكل خاص على تأثير سمك طبقة البيروفسكيت (الممتص)، بالإضافة إلى تأثير سُمك وتطعيم (Doping) طبقات نقل الإلكترونات (ETL) من مادة (ZnO) وطبقات نقل الفجوات (HTL) من مادة (CuI). وتسلط النتائج الضوء على توافق فيزيائي أمثل لطبقة الممتص يتيح الوصول إلى كفاءة تحويل قصوى تقارب 17.1% ويؤكد هذا العمل أهمية أدوات المحاكاة في تصميم وتحسين الخلايا الشمسية من الجيل الجديد.

In the global context of diversifying the use of natural resources, the reliance on renewable energies, and particularly solar photovoltaics, is growing stronger. In this regard, the development of a new generation of perovskite-based photovoltaic cells appears promising. In this work, we studied, through one-dimensional numerical simulation, the photovoltaic performance of a solar cell based on the

hybrid perovskite material $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (with a $\text{ZnO}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3/\text{CuI}$ structure) using the SCAPS-1D software.

The main objective is to improve the solar cell's performance by determining the optimal parameters for its operation. Within this framework, the influence of several physical parameters on the electrical characteristics of the device was analyzed. We focused more particularly on the effect of the perovskite (absorber) layer thickness, as well as the impact of the thickness and doping of the electron transport layer (ETL made of ZnO) and the hole transport layer (HTL made of CuI). The results highlight an optimal physical trade-off for the absorber, allowing for a maximum conversion efficiency of around 17.1%. This work confirms the importance of simulation tools for the design and optimization of next-generation solar cells.

Table des matières

Table des matières

Introduction

générale.....	1
---------------	---

Chapitre I :Technologie du solaire

Introduction.....	5
-------------------	---

I.1 Historique des cellules photovoltaïques :	5
I.2 Soleil :	6
I.2.1 Mouvements de la Terre autour de soleil	7
I.3. Spectre solaire	7
I.4 Masse d'air :	9
I.5. Le rayonnement solaire :	10
I.6 Effet photovoltaïque :	12
I.6.1 Notions générales sur les semi-conducteurs :	12
I.6 .2 . La constante solaire :	13
I.6.3 Jonction PN :	14
I.6.4 L'interaction photon/semi-conducteur :	15
I.7. La structure d'une cellule photovoltaïque :	18
I.7.1 La Couche Antireflet:	19
I .7.2 Les Contacts:	19
I.7.3 Texturisation:	19
I.7.4 Fenêtre:	20
I.7.5 L'émetteur et la base:	21
I.7.6 BSF (Back Surface Field):	21
I.8. Technologies des cellules solaires :	22
I.8.1 Matériaux cristallins à base de silicium (1 ^{er} génération) :	22
I.8.2 Les couches minces (2ème génération) :	24
I.8.3 Les couches minces avancées (3ème génération) :	25

I.9 Circuit équivalent de la cellule photovoltaïque :	25
I.10. Paramètre photovoltaïque :	26
I. 10.1 Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire :	26
Conclusion :	30

Chapitre II :Cellules solaire pérovskite

Introduction.....	32
II.1 Historique.....	33
II .2. Matériau pérovskite.....	34
II .2.1. Structure cristallographique de la pérovskite.....	35
II.3 Propriétés des matériaux pérovskites.....	35
II.3.1 Propriétés électriques :.....	36
II.3.2 Propriétés optiques.....	40
II .4. Architecture des cellules solaires Pérovskites	41
II.5. Les cellules solaires à base de pérovskites.....	42
II .6. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites	42
II.7 Extraction de la charge :	44
II.8 Matériaux de transport :	45
II.8.1 Matériaux de transport d'électrons	45
II.8.2 Matériaux de transport de trous :	45
II.9. Comparaison des performances de quelques cellules à pérovskites :	46
Conclusion.....	47

Chapitre III :logiciel de simulation SCAPS

Introduction.....	49
III.1 Logiciel SCAPS.....	50
III.2 Principe de la simulation numérique	50
III.3 Notions de base :	51
III.3.1 Lancement de SCAPS.....	52
III.3.2 Définition du problème.....	52

III.3.3 Définir le point de fonctionnement.	54
III.3.4 Lancer le calcul 55	55
III.3.5 Afficher les courbes simulées 55	55
III.3.6 La courbe I-V 56	56
II.4 Définition d'une cellule solaire : 57	57
III.4.1 Édition de la structure d'une cellule solaire : 58	58
III.4.2 Contact..... 59	59
III.4.3 Définition des couches : 59	59
III.5 Limites d'utilisation du SCAPS 63	63
<i>Conclusion</i> 64	64
<i>Chapitre IV:Discussion des résultats</i>	
Introduction : 66	66
IV. 1 Présentation de la cellule solaire photovoltaïque étudier : 67	67
IV. 2 Le Procéder de la simulation de la cellule solaire perovskite : 69	69
IV.3 Résultats et discussion : 69	69
IV.3.1 L'effet de l'épaisseur de la couche ETL en ZnO : 69	69
IV.3.2 L'effet de la concentration du dopage (ZnO) :.....71	71
IV.3. 3 L'effet de l'épaisseur de la couche HTL en CuI :.....72	72
IV.3.4 L'effet de la concentration du dopage HTL (CuI) :.....74	74
IV.3.5 L'effet de l'épaisseur de la couche pérovskite (CH ₃ NH ₃ PbI ₃) :.....76	76
Conclusion :.....78	78
Conclusion Générale 80	80
Reference 83	83

Liste des Figures

Liste des figure

Chapitre I :technologie solaire

Figure- I.1 : Mouvement de la terre autour du soleil.....	7
Figure- I.2 : Spectre solaire hors atmosphère (AM0) et au niveau du sol (AM1.5G).....	8
Figure I.3 : Définition de la masse d'air.....	10
Figure-I.4: Rayonnement solaire transmis à la terre.....	11
Figure-I.5 : représentation des couches d'électrons de valence et d'électrons de conduction [14.....	13
Figure I.6 : Définition de la masse d'air [14].....	14
Figure I-7 : Jonction PN et Formation de la zone de déplétion [15]	15
Figure I-8 : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semiconducteur.....	16
Figure I-9 : Coefficient d'absorption du silicium et profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde, d'après [17].....	17
Figure I-10 : Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. [17].....	18
Figure I-11 : La réflexion de la lumière sur un surface lisse et texturé [18].....	20
Figure I-12 :Composition d'une cellule photovoltaïque[20].....	22
Figure I-13 Matériaux solides cristallisés : Monocristallin et Poly cristallin.....	23
Figure I-14 : Cellule de silicium amorphe[20]	24
Figure I-15 Couches minces avancées[20]	25
Figure I-16 : Schéma équivalent électrique de la cellule PV à une diode	26
Figure I-17 : Caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule solaire [22].....	27

chapitre II : cellules solaire pérovskite

Figure II.1 : Un type de pérovskite [24].....	33
Figure II.2 : Représentation de la structure de la pérovskite [25].....	34
Figure II.3 : Courbe d'absorption des matériaux : c-Si, CdTe : CuInSe ₂ , CuGaSe ₂ et CH ₃ NH ₃ PbI ₃ [28].....	37

Figure II.4 : a) Courbes d'absorption de différentes pérovskites (MAPI, FAPI, CsPI) ; b) d'absorption de FAPbIyBr _{3-y} en fonction du ratio y [28].	37
Figure II.5 : Exemples d'applications des matériaux pérovskites [29].	39
Figure II.6 : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires [30].	40
Figure II.7: Schéma montrant la structure en couches quatre typique des cellules solaires à pérovskite (a) n-i-p mésoscopique, (b) n-i-p planaire, (c) p-i-n planaire, et (d) p-i-n mésoscopique [31].	41
Figure II.8 : L'évolution du rendement de conversion des cellules solaires à pérovskite (PSC) de 2008 à 2020 [32].	42
Figure II.9: (a) Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique, (b) Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite [41].	43
Figure II. 10: Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite).	44

Chapitre III : logiciel de simulation SCAPS

Figure III.1 : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.	51
Figure III.2Panneau de définition d'une cellule solaire.	53
Figure III.3 : Panneau d'ajout et de définition d'une couche.	53
Figure III.4: Le point de fonctionnement.	54
Figure III.5: Les paramètres d'illumination.	55
Figure III.6 : Panneau des bandes d'énergie.	56
Figure III.7 : Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.	57
Figure III.8 : Définition de la structure d'une cellule solaire.	58
Figure III.9: Panneau des propriétés des contacts.	60
Figure III.10 : Propriétés de la couche ajoutée.	61
Figure III.11 : Propriétés des dopages définis.	61
Figure III.12 : Modèle de l'absorption.	62
Figure III.13 : Définition des types de recombinaison et des défauts.	63

Chapitre VI: Discussion et résultat

Figure IV- 1 : Architecteur de la cellule solaire perovskite simulée avec le SCAPS-1D.....	67
<i>Figure IV-2 : Caractéristiques de la cellule solaire à base perovskite : V_{co} , I_{cc} , FF et EFF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche ETL (ZnO) EFF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche ETL (ZnO).....</i>	70
Figure IV-3 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire à pérovskite en fonction de la concentration du dopage de la couche de ZnO	71
Figure IV-4 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de la couche de HTL (CuI).....	73
Figure IV-5 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire pérovskite en fonction du dopage de la couche de HTL.....	74
Figure IV-6 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire pérovskite en fonction de l'épaisseur de la couche pérovskite.....	76

Liste des tableaux

Liste des tableaux

Chapitre II : Chapitre II : Cellules solaire pérovskite

Tableau II.1 : *Propriétés physiques et électriques des matériaux pérovskites* 38

Tableau II.2: Comparai sondes performances des cellules à base de matériauxpérovskites Cellules à base de matériaux pérovskites.....46

Chapitre IV : Résultats et discussions

Tableau VI-1 : *Paramètres de la cellule solaire utilisés dans le logiciel SCAP-1D*.....68

Tableau IV-2 : Paramètres de sortie photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire pérovskite en fonction de l'épaisseur de la couche ETL enZnO.....70

Tableau IV-3 : Influence de la concentration du dopage du ZnOsur V_{co} , I_{cc} , FF et EFF.....72

Tableau IV-4 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire..... 73

Tableau IV-5 : Présente les caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire photovoltaïque.....75

Tableau IV-6 : Les caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire photovoltaïque suivant la variation de l'épaisseur de la couche perovskite.....76

Liste des abréviations

Liste des abréviations

Abréviation	Signification
PV	Photovoltaïque
PSC	Cellule solaire à pérovskite (Perovskite Solar Cell)
DSSC	Cellule solaire sensibilisée par colorant (Dye Sensitized Solar Cell)
SCAPS-1D	Solar Cell Capacitance Simulator One Dimension
AM	Masse d'air (Air Mass)
AM0	Masse d'air nulle
AM1	Masse d'air égale à 1
AM1.5G	Masse d'air 1,5 globale
BSF	Champ arrière de surface (Back Surface Field)
PN	Jonction P-N
ZCE	Zone de Charge d'Espace
MPP	Point de puissance maximale (Maximum Power Point)
ETL	Couche de transport des électrons (Electron Transport Layer)
HTL	Couche de transport des trous (Hole Transport Layer)
TCO	Oxyde conducteur transparent (Transparent Conductive Oxide)
ZnO	Oxyde de zinc
CuI	Iodure de cuivre
MAPI	Iodure de plomb méthylammonium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$)

FAPbI ₃	Iodure de plomb formamidinium (HC(NH ₂) ₂ PbI ₃)
MA	Méthylammonium
FA	Formamidinium
GTF	Facteur de tolérance de Goldschmidt (Goldschmidt Tolerance Factor)
QE	Rendement quantique (Quantum Efficiency)
CIGS	Sélénure de cuivre, d'indium et de gallium
(CH ₃ NH ₃)PbI ₃	Pérovskite (or Hybrid pérovskite)

Introduction Général

Introduction générale

Les énergies renouvelables constituent désormais un pilier central des stratégies de développement durable et de préservation de l'environnement à l'échelle globale. Dans ce contexte, l'accès à une énergie fiable, qu'elle soit électrique ou thermique, demeure une problématique majeure et pressante pour de nombreux pays en développement. Les populations les plus durement touchées résident principalement en milieu rural, où la dispersion géographique et l'éloignement des réseaux de distribution d'électricité conventionnels rendent l'extension des lignes électriques économiquement prohibitive et techniquement complexe.

Afin de pallier cette carence énergétique et de désenclaver ces régions isolées, les systèmes solaires s'imposent comme une alternative performante et écoresponsable. Ils répondent efficacement à des besoins vitaux tels que l'irrigation agricole, l'adduction d'eau potable et le chauffage, tout en offrant une grande autonomie. Les systèmes solaires photovoltaïques (PV) se distinguent particulièrement par l'absence de pièces mobiles, ce qui leur confère une excellente fiabilité, une maintenance réduite, un fonctionnement silencieux et une absence totale d'émissions polluantes en phase d'exploitation.

Le principe physique sous-jacent, à savoir la conversion directe de la lumière en électricité par l'effet photovoltaïque, a été mis en évidence pour la première fois par le physicien français Alexandre Edmond Becquerel en 1839 [1]. Cette conversion est opérée par les cellules solaires, qui sont des dispositifs semi-conducteurs. Les avancées technologiques majeures dans la fabrication des modules ont grandement favorisé la démocratisation des systèmes PV. Ces derniers se caractérisent par leur modularité : les modules de base sont disponibles dans une large gamme de puissances, allant de fractions de watt (pour les applications microélectroniques comme les montres ou les calculatrices) à plus de 300 watts. L'association en série et en parallèle de plusieurs modules permet d'ajuster précisément la puissance globale à l'application visée. Bien que des centrales photovoltaïques de démonstration ou de production industrielle à grande échelle atteignent aujourd'hui plusieurs mégawatts, la majorité des installations autonomes restent de taille plus modeste [2].

Face à l'urgence climatique et à la demande énergétique mondiale sans cesse croissante, la recherche scientifique s'est intensifiée ces dernières années pour concevoir des cellules photovoltaïques de nouvelle génération. Pour s'imposer sur le marché mondial, la technologie photovoltaïque doit impérativement satisfaire à un triptyque d'exigences : une haute efficacité de conversion, une stabilité à long terme et un coût de production réduit.

Introduction générale

Parmi les technologies émergentes de troisième génération, les cellules solaires à pérovskite (PSC) captivent l'attention de la communauté scientifique en raison de leur potentiel exceptionnel et d'une progression d'efficacité inédite dans l'histoire du photovoltaïque. Les pérovskites, caractérisées par une structure cristalline de formule chimique générale ABX_3 , possèdent des propriétés optoélectroniques remarquables, notamment un fort coefficient d'absorption et une excellente mobilité des porteurs de charge. L'intégration de ces matériaux comme couche absorbante a permis d'accomplir des bonds technologiques prodigieux. Depuis la première cellule à pérovskite rapportée en 2009, le rendement de conversion de puissance (PCE) est monté en flèche de manière spectaculaire, passant de 3,8 % à plus de 25,2 % en laboratoire [3] .

Parallèlement aux investigations expérimentales, la modélisation et la simulation numérique des dispositifs à couches minces ont pris une importance capitale. L'utilisation d'outils de simulation s'avère indispensable pour concevoir, analyser et optimiser l'architecture des cellules avant leur fabrication matérielle. Cette approche permet de comprendre les phénomènes physiques internes et d'identifier les verrous technologiques, tout en réduisant considérablement les coûts et les délais de recherche et développement.

L'objectif principal de ce travail de fin d'études s'inscrit dans cette démarche d'optimisation numérique. Il vise à modéliser et à maximiser le rendement de conversion d'une cellule solaire à base de pérovskite à l'aide du logiciel de simulation unidimensionnel SCAPS-1D. À travers cette étude, nous analyserons rigoureusement les mécanismes de transport de charge et l'impact de différents paramètres géométriques et physiques sur les performances globales de la cellule, tels que l'épaisseur de la couche absorbante, la densité de défauts ainsi que le niveau de dopage.

Pour mener à bien cette étude, notre mémoire est structuré en trois chapitres principaux :

- Le Chapitre I pose les fondements théoriques de la conversion photovoltaïque. Il expose les caractéristiques de la ressource solaire (spectre AM1.5G, rayonnement direct et diffus, masse d'air), détaille la physique des semi-conducteurs et de la jonction PN, et présente le circuit électrique équivalent ainsi que les paramètres de caractérisation d'une cellule solaire réelle. Une revue de l'évolution des différentes générations de cellules y est également présentée.
- Le Chapitre II est entièrement consacré à l'étude du matériau pérovskite et des dispositifs associés. Nous y décrivons l'historique de cette technologie, sa structure cristallographique régie par le facteur de tolérance de Goldschmidt, ainsi que ses propriétés optiques et électriques uniques. Les différentes architectures de cellules (mésoscopiques et planaires) et

- les mécanismes d'extraction et de transport de charges aux interfaces ETL/absorbeur/HTL y sont analysés
- Le Chapitre III introduit l'outil de simulation numérique SCAPS-1D. Ce chapitre détaille le principe de fonctionnement du logiciel, basé sur la résolution discrète des équations différentielles fondamentales de l'électronique (équations de Poisson et de continuité des porteurs). Les modalités de configuration des couches, des contacts ohmiques et des défauts volumiques y sont expliquées, tout en posant les limites théoriques du simulateur
- Le Chapitre IV (Discussion des résultats) expose le cœur de notre contribution scientifique. Après avoir défini la structure de la cellule simulée et les paramètres physiques de départ issus de la littérature, nous présentons et analysons les résultats des simulations. L'impact de l'épaisseur et du dopage de chaque couche fonctionnelle y est discuté afin de dégager la géométrie optimale offrant les meilleures performances énergétiques

Enfin, une Conclusion Générale résumera les principaux enseignements de cette étude théorique et ouvrira des perspectives concrètes pour les futurs travaux de recherche et de développement expérimental dans le domaine des cellules solaires pérovskites de troisième génération.

Chapitre I : technologie solaire

Introduction

L'augmentation de la demande énergétique mondiale, exacerbée par la révolution industrielle et la croissance démographique, a historiquement été satisfaite principalement par les sources d'énergie fossiles. Dans les années 1970, l'énergie nucléaire s'est affirmée comme une alternative significative. Cependant, le contexte actuel est marqué par des défis environnementaux majeurs. Bien que ces sources conventionnelles répondent à une part substantielle de la demande énergétique mondiale, leur impact polluant est considérable. Cette problématique a stimulé un intérêt croissant de la part des chercheurs pour les sources d'énergie renouvelables, telles que l'énergie éolienne, l'énergie solaire thermique et, plus particulièrement, l'énergie solaire photovoltaïque.

L'énergie solaire photovoltaïque, considérée comme l'une des technologies renouvelables les plus prometteuses, constitue l'objet de la première partie de ce travail. Sa maturité technologique est le fruit de multiples contributions. Nous en présenterons un historique détaillé, soulignant les étapes clés de son évolution. Seront également abordées les notions essentielles relatives au fonctionnement des cellules solaires. Une revue de l'état de l'art sera ensuite consacrée à la source de cette énergie, à savoir le soleil, son rayonnement et son interaction avec la matière. Finalement, les paramètres utilisés pour la caractérisation des performances des cellules solaires seront exposés.

I.1 Historique des cellules photovoltaïques :

Longtemps perçue comme l'expression d'une divinité chez certains peuples antiques, la lumière solaire devient, grâce à la science moderne, une gigantesque source d'énergie propre qu'il nous appartient désormais de maîtriser. Au cœur de cette épopée scientifique se trouve un phénomène fondamental : l'effet photovoltaïque, mot composé du grec *photos* (« lumière ») et du *volt*, unité de mesure électrique, désignant la conversion directe de la lumière en électricité. C'est en 1839, en qu'Antoine Becquerel, physicien français, s'intéresse aux effets électriques de la lumière solaire, résultats d'expériences menées par son fils Edmond. Selon ce dernier, une pile constituée d'électrodes de platine et de cuivre oxydé, immergée dans une solution acide, génère un courant électrique dès qu'elle est exposée à une impulsion lumineuse. Révélation modeste, mais inaugurale [4,5].

Les décennies suivantes voient des avancées déterminantes. En 1873, l'ingénieur américain Willoughby Smith découvre que le sélénium est sensible à la lumière. Quatre ans plus tard, les expériences d'Adams et Day confirment l'effet photovoltaïque propre à cet élément, conduisant à la construction [04], par Charles Fritts, du tout premier panneau photovoltaïque composé de cellules de sélénium. En 1875, Werner von Siemens présente à l'Académie des Sciences de Berlin ses travaux sur ce

phénomène appliqué aux semi-conducteurs, stabilisant ainsi les fondements théoriques du domaine [4]. L'élément décisif sur le plan intellectuel survient en 1905, lorsqu'Albert Einstein publie son article sur l'effet photoélectrique [5].

Ces travaux lui vaudront le prix Nobel en 1921. Cependant, il faut attendre 1954 pour que la recherche franchisse une étape industrielle décisive : dans les laboratoires de Bell Telephone, Chapin, [06] Fuller et Pearson construisent la première cellule photovoltaïque en silicium, atteignant un rendement de 6 %. Produire de l'électricité à partir du soleil devient dès lors une option viable. L'industrie spatiale, alors en plein essor et désireuse de s'éloigner du nucléaire pour alimenter ses satellites, tapie dans l'ombre, est saisie par cette avancée [7].

Désormais, les progrès constants dans le domaine des semi-conducteurs permettent d'affiner les matériaux et les architectures photovoltaïques, offrant ainsi à cette technologie un essor qui dépasse largement le cadre expérimental dans lequel elle était confinée. Ce qui n'était jadis qu'un phénomène marginal occupe aujourd'hui une place centrale au sein des aspirations énergétiques les plus ambitieuses à l'échelle mondiale.

I.2 Soleil :

Le Soleil constitue l'étoile centrale de notre système solaire, exerçant une influence prépondérante due à sa masse et à son rayonnement. Situé à environ 150 millions de kilomètres de la Terre, son rayonnement atteint notre planète en un temps relativement bref, compte tenu de la vitesse de propagation de la lumière. Observé depuis la Terre, le Soleil se présente comme une sphère gazeuse massive. Son rayon est estimé à 696 000 km, soit 109 fois celui de la Terre, et sa masse équivaut à 333 000 fois celle de notre planète. Le diamètre total, approchant 1 390 000 km, en fait un astre d'une dimension considérable. Sa composition est constituée à 80 % d'hydrogène et à 19 % d'hélium, le 1 % restant regroupant une centaine d'éléments chimiques variés. Il convient de noter que, bien que la Lune soit 400 fois plus petite que le Soleil, elle est également 400 fois plus proche de la Terre. Cette configuration explique la similarité de la taille angulaire apparente des deux corps célestes observés depuis la Terre, une illusion optique mise en évidence lors des éclipses solaires. Le cœur de cet astre est le siège d'une activité thermonucléaire intense et continue. Chaque seconde, 564 millions de tonnes d'hydrogène y sont converties en 560 millions de tonnes d'hélium, au sein d'un noyau où la température atteint environ 25 millions de degrés Celsius. Cette réaction libère une quantité d'énergie considérable : près de 4 millions de tonnes de matière sont transformées en rayonnement à chaque seconde, lequel traverse l'espace pour parvenir à notre planète et y permettre l'existence de la vie.[8]

I.2.1 Mouvements de la Terre autour de soleil:

Conformément à la théorie de l'ellipse, la Terre décrit une orbite elliptique autour du Soleil, ce dernier occupant l'un des foyers de cette ellipse. Le plan défini par cette orbite est désigné sous le terme de plan de l'écliptique [9,10]. La faible excentricité de cette trajectoire induit une variation de la distance Terre-Soleil d'environ 1,7 % par rapport à la distance moyenne, laquelle est estimée à $149,675 \times 10^6$ km.

Par ailleurs, la Terre effectue une rotation sur elle-même autour de l'axe des pôles, lequel traverse son centre. Cet axe n'est pas perpendiculaire au plan de l'écliptique, mais présente une inclinaison d'environ $23^\circ 27'$ par rapport à ce dernier, angle désigné comme l'inclinaison axiale de la Terre (voir Figure I-1).

Il en résulte que la quantité de rayonnement solaire incidente sur la Terre est fonction de la localisation géographique, du moment de la journée et des variations saisonnières annuelles [10].

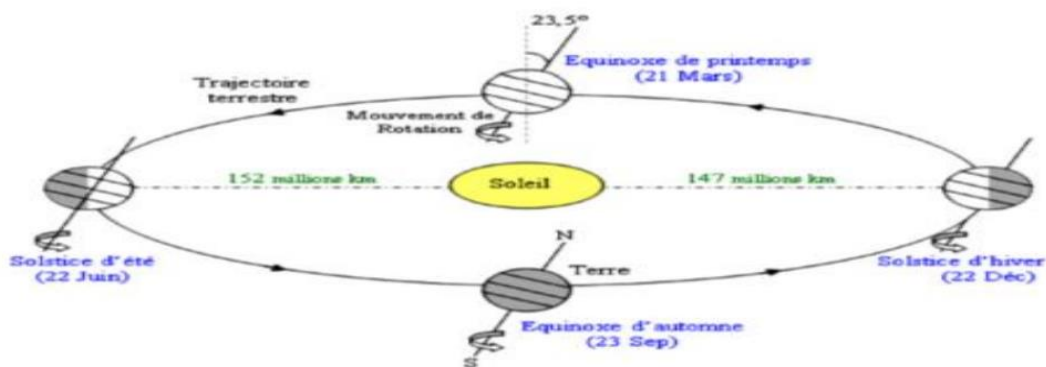


Figure- I.1 : Mouvement de la terre autour du soleil

I.3. Spectre solaire

Une compréhension approfondie des mécanismes solaires est fondamentale pour le développement et l'optimisation des performances des cellules photovoltaïques, dont le fonctionnement est intrinsèquement lié à l'apport énergétique solaire. Le Soleil, l'étoile la plus proche de la Terre, se trouve à une distance d'environ 150 millions de kilomètres. Il est principalement composé d'hydrogène (environ 70 %) et d'hélium (près de 28 %). Au sein de son noyau, des réactions de fusion thermonucléaire génèrent une quantité considérable d'énergie, émise sous forme de rayonnements électromagnétiques. Sa masse est approximativement 333 000 fois celle de la Terre, et son volume est environ un million de fois supérieur. Le Soleil présente une période de rotation synodique d'environ 27 jours. La température à la

surface, dans la photosphère, avoisine les 6 000 °C, tandis qu'au centre, elle excède 15 millions de degrés, milieu où les photons sont produits.

La puissance radiante totale émise par le Soleil est estimée à $1,8 \times 10^4$ kilowatts. Néanmoins, en raison de l'angle solide restreint, approximativement $0,68 \times 10^4$ stéradian, intercepté par la Terre, notre planète ne reçoit qu'environ deux milliardièmes de cette énergie totale. Malgré sa faible proportion, cette fraction du rayonnement solaire est suffisante pour soutenir l'ensemble des processus biologiques terrestres.

Le rayonnement solaire est constitué de photons, particules élémentaires caractérisées par une dualité onde-corpuscule, concept formalisé par Louis de Broglie en 1924. Chaque photon se propage comme une onde, définie par une fréquence et une longueur d'onde spécifiques. La diversité de ces longueurs d'onde détermine les différentes composantes chromatiques du spectre lumineux.

Le rayonnement émis par le Soleil peut être modélisé comme celui d'un corps noir dont la température de surface est d'environ 6 000 °C. Au-delà de l'atmosphère terrestre, son intensité moyenne est de 1,35 kW/m², avec un pic spectral situé autour de 0,48 µm. Cependant, lors de sa traversée de l'atmosphère, ce rayonnement est sujet à une atténuation. Il est partiellement absorbé par des constituants tels que l'ozone, la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone, ce qui réduit son irradiance à environ 0,9 kW/m² à la surface terrestre. Cette interaction altère également son spectre, qui, bien que continu dans l'espace, présente des bandes d'absorption distinctes après filtration atmosphérique.

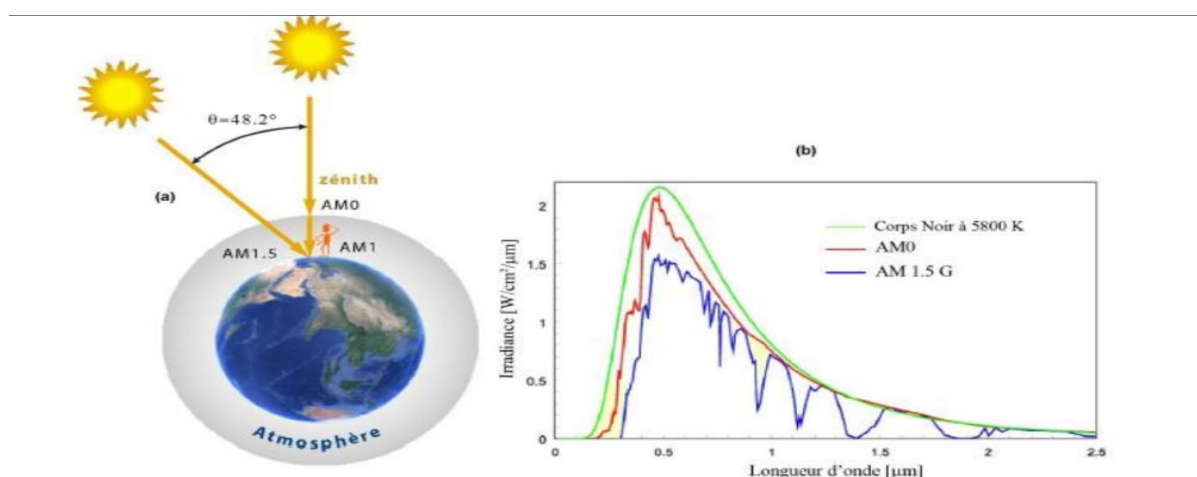


Figure- I.2 : Spectre solaire hors atmosphère (AM0) et au niveau du sol (AM1.5G).

I.4 Masse d'air :

Lorsque le rayonnement solaire pénètre l'atmosphère terrestre, l'épaisseur de la couche d'air traversée augmente à mesure que le Soleil s'approche de l'horizon, ce qui induit une modification significative de l'énergie atteignant la surface.

Pour caractériser ce phénomène, la notion de masse d'air (AM, de l'anglais Air Mass) a été introduite. Elle est définie comme le rapport entre l'épaisseur effective de l'atmosphère traversée par le rayonnement solaire et l'épaisseur minimale lorsque le Soleil est au zénith. Ce rapport est directement fonction de la hauteur angulaire du Soleil, et par conséquent de l'angle zénithal θ_z , selon l'expression : $AM = 1/\cos(\theta_z)$.

Trois conditions de référence sont couramment employées dans ce cadre. La condition AM0 décrit l'environnement spatial, où l'absence d'atmosphère signifie qu'aucun air n'est traversé. Au niveau de la mer, lorsque le Soleil est au zénith, le trajet atmosphérique est le plus court et est normalisé à AM1. Pour toute autre orientation solaire, la masse d'air croît, ce qui indique un trajet optique plus long et, corrélativement, des pertes énergétiques accrues dues à l'absorption et à la diffusion atmosphérique. Ces conditions de référence sont primordiales pour une comparaison objective des performances des dispositifs photovoltaïques, qu'il s'agisse de cellules ou de modules,

Dans des contextes standardisés Malgré les progrès technologiques substantiels réalisés au cours des dernières décennies, l'énergie solaire effectivement exploitable est actuellement estimée à environ 1 482 EJ. Ce volume représente seulement 0,13 % du potentiel énergétique solaire total. Bien que cette proportion soit faible en valeur absolue, elle est néanmoins suffisante pour répondre à une part substantielle des besoins énergétiques mondiaux, sous réserve d'une optimisation continue des technologies de captation [11].

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta)} \quad \text{I.1}$$

Avec θ l'angle que fait le soleil avec le zénith (position verticale).

- AM1 = correspond au soleil au zénith ($\theta = 0$)
- AM2 = correspond à l'angle $\theta = 60^\circ$
- AM1.5 = correspond à l'angle $\theta = 48,19^\circ$

- AM0 est utilisé pour préciser les conditions en dehors de l'atmosphère.

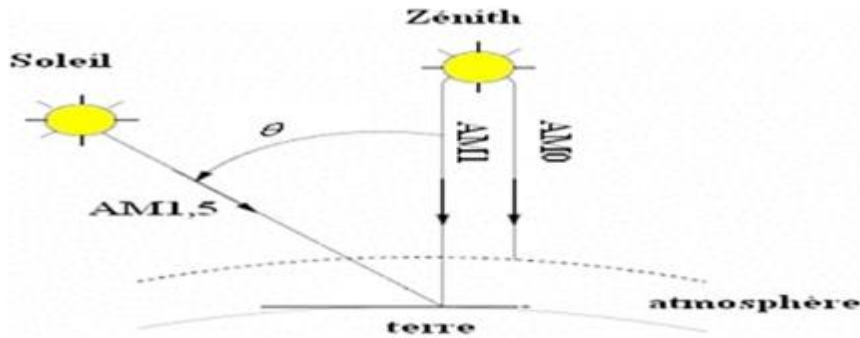


Figure I.3 : Définition de la masse d'air

Si le soleil est au zénith du lieu d'observation, $\theta = 0^\circ$, $AM=1$: la notation utilisée est AM1.

AM0 correspond à l'irradiance hors atmosphère, et est surtout utilisée pour prédire le comportement des cellules pour applications spatiales. Le spectre standard le plus étudié est AM1.5G, G signifiant global car il tient compte à la fois des radiations directes et diffuses, par opposition à AM1.5D qui ne tient compte que des directes. AM1.5G donne une irradiance de 970 W/m^2 , mais a été arrondi à 1 kW/m^2 [11].

I.5. Le rayonnement solaire :

Le rayonnement solaire se présente comme un flux de photons émis par le Soleil, dont le spectre de longueurs d'onde s'étend de l'ultraviolet ($0,2 \mu\text{m}$) à l'infrarouge lointain ($2,5 \mu\text{m}$). Hors de l'atmosphère terrestre, son intensité atteint environ 1350 W/m^2 , une valeur désignée par la condition AM0. Lors de sa traversée de l'atmosphère terrestre, ce rayonnement subit une atténuation progressive due aux phénomènes d'absorption et de diffusion par les gaz, la vapeur d'eau et les aérosols. La couche d'ozone, par exemple, filtre une partie des ultraviolets les plus énergétiques. Au niveau du sol, lorsque le Soleil est au zénith, l'intensité est réduite à 1000 W/m^2 , ce qui correspond à la condition AM1. Une diminution de l'angle d'incidence entraîne un allongement du trajet atmosphérique et, par conséquent, une augmentation des pertes énergétiques. À titre d'exemple, pour une inclinaison de 48° , l'énergie reçue n'est que de 833 W/m^2 , ce qui définit la condition AM1.5. En complément du rayonnement direct, le rayonnement diffus provient de la dispersion et de la réflexion du rayonnement initial par l'atmosphère et le sol. La somme de ces deux composantes constitue le rayonnement global. La condition standard AM1.5, avec une intensité

de $1\,000\text{ W/m}^2$, est mondialement adoptée pour la caractérisation et la comparaison des performances des cellules solaires (voir figure I.3.). [12]

L'énergie de ce rayonnement est donnée par la formule suivante :

$$E = h \cdot \sigma = \frac{h \cdot c}{\lambda}$$

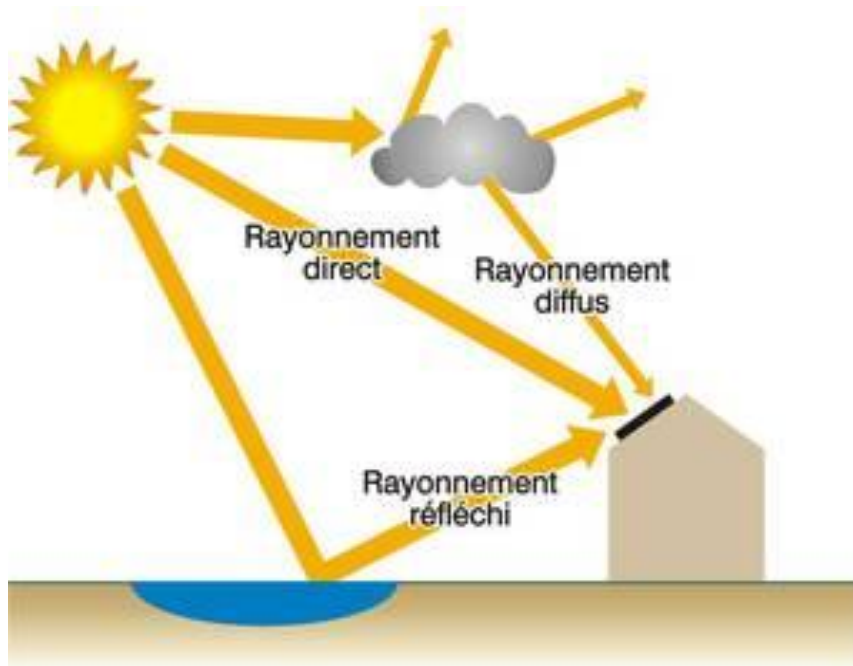


Figure-I.4: Rayonnement solaire transmis à la terre.

Le rayonnement direct (D) :

Représente la composante du rayonnement solaire qui parvient à la surface terrestre sans subir de déviation atmosphérique. Ses rayons, caractérisés par leur parallélisme, sont particulièrement adaptés aux systèmes optiques à concentration [12].

le rayonnement diffus (S) :

le rayonnement diffus est généré par la dispersion des rayons solaires. Ce phénomène résulte de l'interaction avec des éléments atmosphériques tels que les nuages, les molécules d'air, la vapeur d'eau et les particules de poussière, transformant ainsi un faisceau initialement parallèle en une multitude de faisceaux orientés dans diverses directions [12].

Le rayonnement réfléchi :

Le rayonnement réfléchi également désigné sous le terme d'albédo, correspond à la portion du rayonnement solaire renvoyée par la surface terrestre. L'intensité de cette réflexion est fonction de la nature du revêtement : la neige, par exemple, présente une capacité de réflexion élevée, tandis qu'un matériau sombre comme l'asphalte en absorbe la quasi-totalité. La sommation de ces trois composantes constitue

le rayonnement global (G) :

Ce dernier peut atteindre approximativement $1\,000\text{ W/m}^2$ en conditions de ciel clair et sa mesure est réalisable au moyen d'un pyromètre. Ce paramètre global sert de référence pour l'évaluation des performances des cellules photovoltaïques. Celles-ci convertissent les photons en énergie électrique par l'exploitation de l'effet photovoltaïque, impliquant la génération, la séparation et la collecte de paires électron-trou au sein du semi-conducteur [13].

I.6 Effet photovoltaïque :

L'effet photovoltaïque constitue le mécanisme fondamental de conversion directe de l'énergie solaire, acheminée par les photons, en énergie électrique utilisable. Ce phénomène s'appuie sur les propriétés électroniques intrinsèques des matériaux semi-conducteurs et se décompose en deux étapes cruciales et interdépendantes. La première étape est la génération de paires électron-trou. Lorsqu'un photon dont l'énergie excède celle de la bande interdite du semi-conducteur interagit avec le matériau, il induit l'excitation d'un électron hors de sa liaison atomique. Ce processus aboutit à la création d'une paire électron-trou par photo-ionisation.

Lorsque le rayonnement lumineux incident possède une énergie supérieure à la bande interdite du semi-conducteur, il induit l'excitation des électrons, conduisant à

1. La formation de paires électron-trou par photo-ionisation.
2. La génération d'un courant électrique repose sur la séparation et la collecte des électrons et des trous photo-générés, suivie de leur recombinaison.

I.6.1 Notions générales sur les semi-conducteurs :

Un semi-conducteur est un matériau dont la conductivité électrique se situe entre celle d'un conducteur et celle d'un isolant. Sa propriété distinctive réside dans sa capacité à moduler son comportement sous l'influence de conditions externes telles que la température, la lumière ou le dopage

évoluant ainsi d'un état quasi-isolant à un état conducteur. Cette flexibilité est intrinsèquement liée à la structure atomique du matériau. Chaque élément chimique est caractérisé par un nombre spécifique d'électrons, organisés en couches concentriques autour du noyau, et cette organisation détermine les propriétés électriques du matériau. Au sein de cette structure atomique, les électrons sont classifiés selon leurs fonctions :

.les électrons de cœur : situés près du noyau, n'interagissent que faiblement avec les atomes voisins .

.les électrons de valence : occupant les couches externes, participent activement à la formation des liaisons chimiques interatomiques ; enfin,

.les électrons de conduction : assurent la circulation du courant électrique à travers le matériau [14].

L'équilibre entre ces catégories d'électrons confère aux semi-conducteurs leurs propriétés spécifiques et justifie leur rôle central dans les technologies photovoltaïques modernes. Ces arrangements électroniques peuvent être visualisés, la Figure I-5 présentant notamment la répartition des électrons de valence et des électrons de conduction.

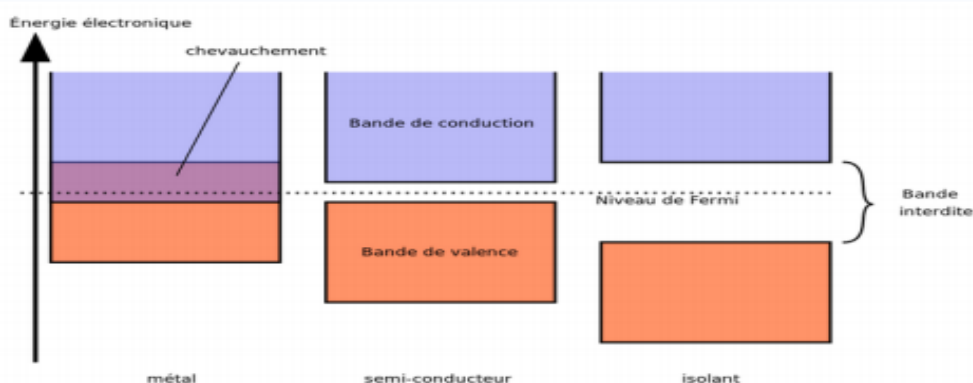


Figure-I.5 : représentation des couches d'électrons de valence et d'électrons de conduction [14]

I.6 .2 . La constante solaire :

À mesure que le Soleil s'approche de l'horizon, ses rayons traversent une épaisseur d'atmosphère plus importante, intensifiant ainsi les processus d'atténuation du rayonnement avant qu'il n'atteigne le sol. Pour quantifier cet effet, la notion de masse d'air est employée ; elle correspond au rapport entre la longueur du trajet atmosphérique du rayonnement solaire direct et la longueur de ce trajet lorsque le Soleil est au zénith. Un angle d'élévation solaire réduit prolonge le trajet atmosphérique et accroît ainsi les pertes énergétiques. À la limite supérieure de l'atmosphère, en l'absence de toute atténuation, l'irradiance solaire

est définie par la constante solaire. Sa valeur conventionnelle est de $1\,360\text{ W/m}^2$, mais elle présente des variations saisonnières mineures dues aux changements de la distance entre la Terre et le Soleil. Lors de sa traversée atmosphérique, ce rayonnement est partiellement absorbé par les gaz atmosphériques et la vapeur d'eau, ce qui induit une réduction significative du flux énergétique parvenant au sol. Par conséquent, le rayonnement solaire effectivement disponible à la surface terrestre est systématiquement inférieur à la constante solaire. Sa valeur dépend directement de l'épaisseur atmosphérique traversée, laquelle est fonction de la position du Soleil dans le ciel. [14]

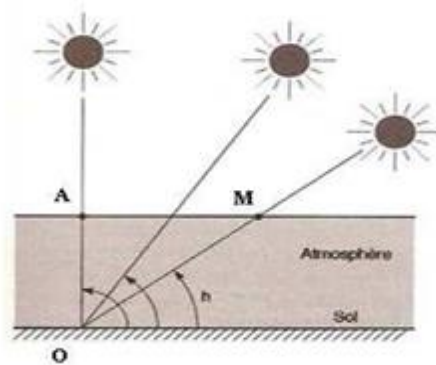


Figure I.6 : Définition de la masse d'air [14].

I.6.3 Jonction PN :

La jonction PN est constituée par le contact direct entre un semi-conducteur de type N et un semi-conducteur de type P. Ce contact initie un phénomène de diffusion, durant lequel les porteurs de charge majoritaires – les électrons du côté N et les trous du côté P – migrent vers la région opposée. Cette migration entraîne la formation de sites ioniques fixes et non neutralisés. La redistribution de ces charges induit la création d'une région dépourvue de porteurs libres, désignée sous le terme de zone de déplétion ou zone de charge d'espace (ZCE). La présence d'ions fixes de part et d'autre de cette zone établit une différence de potentiel intrinsèque V_0 , laquelle génère un champ électrique interne orienté de la région N vers la région P. Ce champ électrique s'oppose à la poursuite de la diffusion des porteurs majoritaires, permettant ainsi d'établir un équilibre dynamique entre les forces de diffusion et les forces électriques. Cette propriété du champ électrique interne permet à la jonction PN de séparer les paires électron-trou générées par illumination, la constituant ainsi en élément actif des cellules photovoltaïques, comme illustré par la figure I-6 [15].

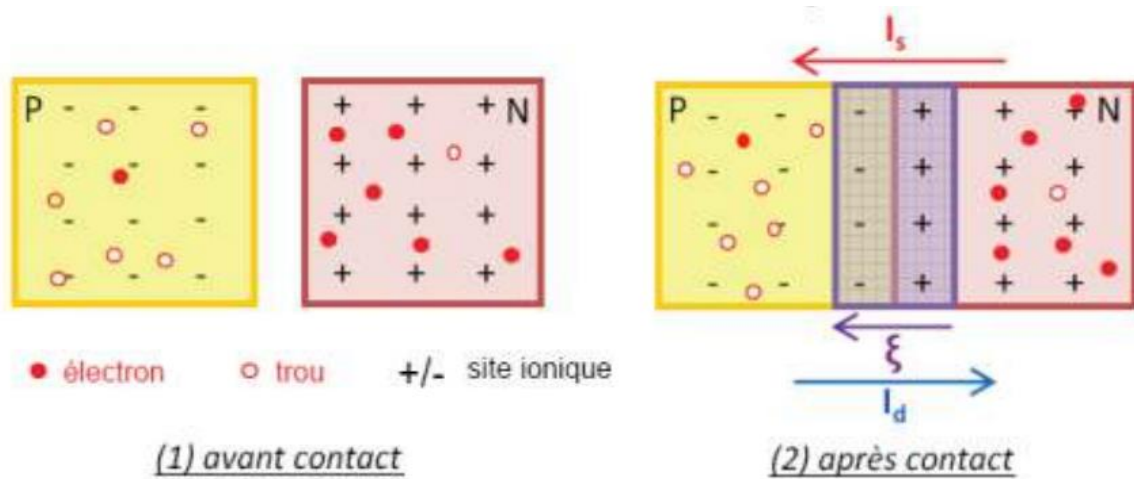


Figure I-7 : Jonction PN et Formation de la zone de déplétion [15]

Dans les métaux, le recouvrement de la bande de valence et de la bande de conduction permet une occupation électronique simultanée, ce qui facilite une conduction électrique intrinsèque. En revanche, les isolants se caractérisent par une bande interdite large séparant ces deux bandes, ce qui empêche le transfert d'électrons vers la bande de conduction et confère au matériau des propriétés isolantes. Les semi-conducteurs occupent une position intermédiaire, définie par une bande interdite étroite. L'apport d'une énergie externe, telle que l'élévation de température, l'illumination ou l'application d'une tension électrique, permet aux électrons de la bande de valence de franchir cette bande interdite et d'accéder à la bande de conduction, rendant ainsi le matériau conducteur. À titre d'exemple, une cellule photovoltaïque, lorsqu'exposée à la lumière, devient conductrice et génère un courant électrique, illustrant l'effet photoélectrique.

I.6.4L'interaction photon/semi-conducteur :

La conductivité électrique d'un matériau dépend intrinsèquement de la structure de ses bandes d'énergie, spécifiquement de l'écart énergétique, nommé gap, entre la bande de valence et la bande de conduction. Dans les métaux, ces bandes se chevauchent, assurant une circulation libre des électrons sans apport d'énergie externe. Inversement, les isolants se caractérisent par un gap d'une largeur telle que les électrons ne peuvent franchir cette barrière dans des conditions usuelles. Les semi-conducteurs représentent un cas intermédiaire : leur bande interdite est suffisamment étroite pour qu'un apport d'énergie externe (lumineux, thermique ou électrique) permette aux électrons de valence d'accéder à la bande de conduction, conférant ainsi une conductivité au matériau.

La nature du gap joue également un rôle prépondérant. Pour un gap direct, tel que celui du GaAs, les transitions électroniques sont verticales et radiatives, propriété les rendant particulièrement adaptées aux applications optoélectroniques. En revanche, dans un gap indirect, comme celui du silicium, les transitions sont obliques et requièrent l'intervention d'un phonon pour la conservation du vecteur d'onde. À 300 K, le gap indirect du silicium est de 1,12 eV. Cette caractéristique en fait un matériau privilégié pour les cellules photovoltaïques, où l'absorption de lumière est suffisante pour générer un courant électrique par excitation des électrons vers la bande de conduction. Les différentes transitions électroniques, en fonction de la nature de cet écart énergétique, sont illustrées dans la Figure I-8 (se référer également à la Figure I-7 (b)) [16].

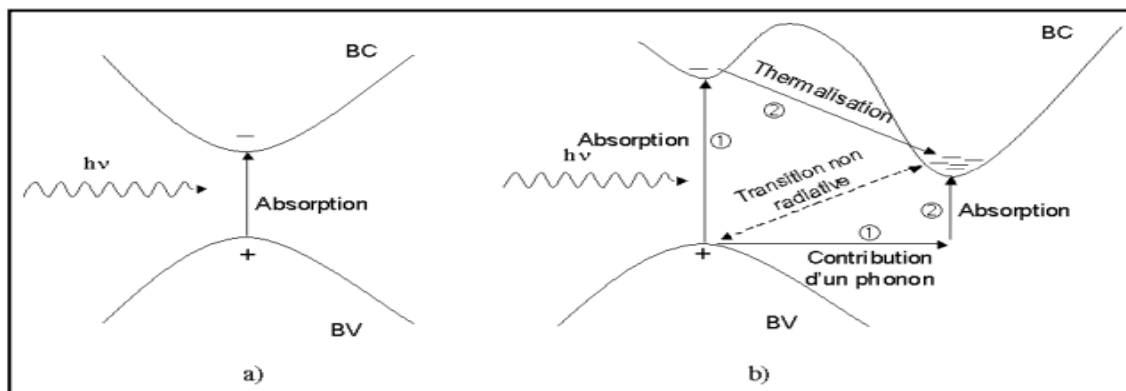


Figure I-8 : Transitions inter-bandes d'électrons dans un semi-conducteur. a) correspond à un semi-conducteur à gap direct, b) à un gap indirect [16].

L'efficacité de l'interaction entre les photons et un semi-conducteur, essentielle au domaine photovoltaïque, est déterminée par une propriété fondamentale : le coefficient d'absorption. Ce dernier quantifie l'absorption des photons par unité d'épaisseur du matériau en fonction de leur longueur d'onde. La Figure I-8 illustre cette caractéristique pour le silicium [16]. Pour des longueurs d'onde inférieures à 365 nm, la majorité des photons incidents sont absorbés dans les 100 premiers angströms du matériau. Toutefois, comme évoqué précédemment, au-delà de cette limite d'énergie, les transitions directes ne sont plus possibles. Dans ces conditions, un phonon est nécessaire pour permettre à un électron de franchir la bande interdite et d'atteindre la bande de conduction, ce qui diminue la probabilité de transition. Ainsi, une augmentation de la longueur d'onde des photons entraîne une diminution du coefficient d'absorption. Lorsque l'énergie d'un photon devient inférieure à l'énergie de la bande interdite du matériau (à une énergie de phonon près), la transition électronique ne peut plus se produire et le photon traverse le matériau sans être absorbé.

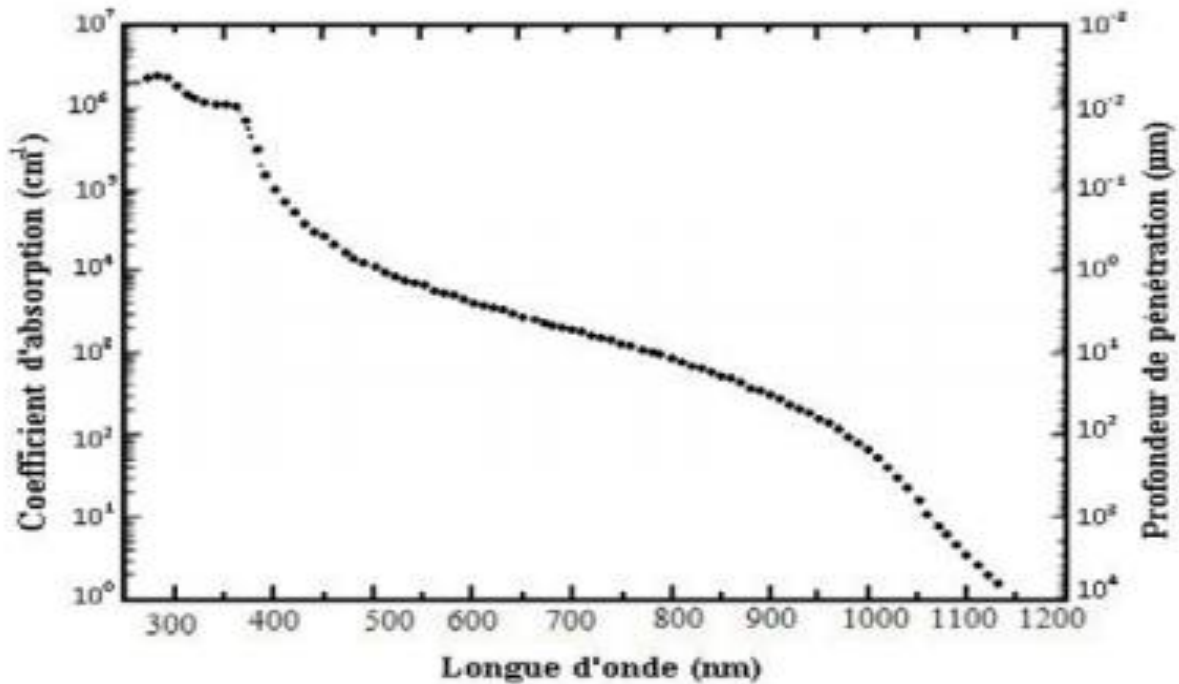


Figure I-9 : Coefficient d'absorption du silicium et profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde, d'après [17]

L'efficacité de conversion photovoltaïque est significativement déterminée par la capacité d'un semi-conducteur à absorber les photons incidents. Cette propriété est quantifiée par le coefficient d'absorption. Ce paramètre caractérise la proportion de photons absorbés par unité d'épaisseur du matériau en fonction de la longueur d'onde, présentant une variabilité notable en fonction de l'énergie des photons. Pour le silicium, les longueurs d'onde inférieures à 365 nm induisent une absorption quasi-totale des photons au sein des 100 premiers angströms du matériau, ce phénomène étant attribué aux transitions directes. Au-delà de cette limite spectrale, les transitions directes sont inhibées, nécessitant l'intervention d'un phonon pour faciliter le franchissement de la bande interdite par un électron et son accès à la bande de conduction. Cette contrainte additionnelle diminue significativement la probabilité de transition, ce qui entraîne une réduction progressive du coefficient d'absorption à mesure que la longueur d'onde croît. Lorsque l'énergie du photon est inférieure à l'énergie de bande interdite (gap) du matériau, les transitions électroniques deviennent impossibles. Dans ce cas, le photon traverse le semi-conducteur sans absorption, ce qui représente une perte irréductible pour le rendement de la cellule photovoltaïque.

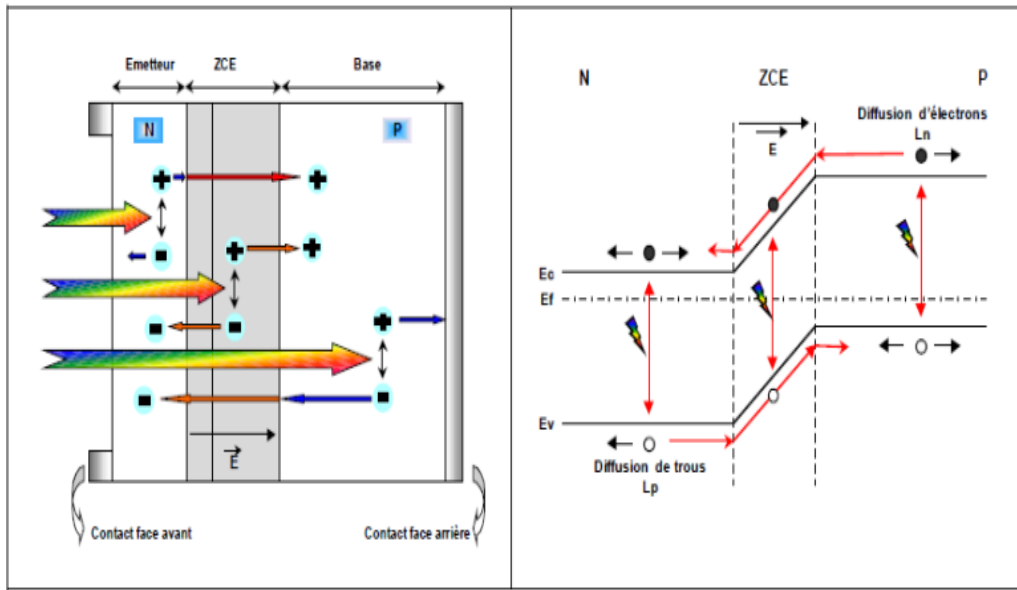


Figure I-10 : Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque. [17]

L'absorption d'un photon par un semi-conducteur induit le transfert d'énergie à un électron, générant ainsi une paire électron-trou. Ce phénomène entraîne une modification locale de la conductivité du matériau. Le comportement de ces porteurs de charge varie en fonction de leur point de génération au sein du matériau. Dans les régions n et p, les porteurs minoritaires (trous dans la région n, électrons dans la région p) qui diffusent jusqu'à la zone de charge d'espace sont soumis à l'action du champ électrique interne. Ce champ les dirige vers la région où ils deviennent majoritaires, conduisant à la formation d'un courant photo-diffusif. Au sein de la zone de charge d'espace, les paires électron-trou sont instantanément dissociées après leur génération. Les électrons sont alors orientés vers la région n, et les trous vers la région p, ce qui constitue un photo-courant de génération. Ces deux contributions s'additionnent pour constituer le courant photoélectrique total I_{ph} . La valeur de ce courant est directement proportionnelle à l'intensité lumineuse incidente. L'exploitabilité de ce courant requiert d'inhiber la recombinaison des porteurs et d'assurer leur acheminement efficace vers un circuit externe. Cette fonction est assurée par le champ électrique interne, typiquement généré par une jonction p-n. Néanmoins, des structures alternatives telles que les hétérojonctions ou les jonctions Schottky peuvent également remplir ce rôle [18].

I.7. La structure d'une cellule photovoltaïque :

Une cellule solaire photovoltaïque standard est constituée de six compositions essentielles.

I.7.1 La Couche Antireflet :

Chaque cellule photovoltaïque intègre deux contacts métalliques essentiels à son fonctionnement, positionnés respectivement sur les faces avant et arrière. Le contact avant est conçu pour optimiser la transmission lumineuse vers les couches actives de la cellule, tout en assurant une collecte efficace des porteurs de charge générés par l'absorption photonique. Simultanément, le contact arrière est responsable de la collecte des porteurs majoritaires et de la fermeture du circuit électrique, ce qui permet l'acheminement du courant produit vers un circuit externe. La conception de ces contacts implique un compromis critique : une couverture excessive de la surface avant diminue la zone exposée à la lumière, tandis qu'une couverture insuffisante accroît la résistance de contact et altère les performances électriques. Les matériaux de fabrication sont sélectionnés en fonction de leurs propriétés conductrices et de leur compatibilité avec le semi-conducteur. Les éléments couramment employés comprennent l'argent (Ag), l'aluminium (Al), le nickel (Ni), le cuivre (Cu), le fer (Fe) et le potassium (K), chacun adapté à des architectures spécifiques de cellules solaires [18].

I.7.2 Les Contacts :

Le fonctionnement de toute cellule photovoltaïque requiert la présence de deux contacts métalliques, un sur sa face avant et un sur sa face arrière. Ces contacts remplissent une double fonction complémentaire. D'une part, le contact de la face avant doit optimiser la transmission de la lumière incidente vers les couches actives de la cellule, tout en garantissant une collecte efficace des porteurs de charge photogénérés. D'autre part, le contact arrière est responsable de la collecte des porteurs majoritaires et de la fermeture du circuit électrique, facilitant ainsi l'acheminement du courant produit vers un circuit externe. La conception de ces contacts implique un compromis critique : une couverture excessive de la face avant diminue la surface utile pour l'absorption lumineuse, tandis qu'une couverture inadéquate accroît la résistance de contact, dégradant ainsi les performances électriques de la cellule. Les matériaux sélectionnés pour ces contacts sont choisis en fonction de leurs propriétés conductrices et de leur compatibilité avec le semi-conducteur. Parmi les plus couramment utilisés figurent l'argent (Ag), l'aluminium (Al), le nickel (Ni), le cuivre (Cu), le fer (Fe) et le potassium (K), chacun présentant des caractéristiques spécifiques adaptées à des configurations variées de cellules solaires [18].

I.7.3 Texturisation :

La texturation est une technique de traitement de surface qui consiste à structurer la face des cellules photovoltaïques en motifs pyramidaux ou triangulaires. Son objectif principal est d'optimiser

l'absorption des rayonnements solaires, ce qui contribue à l'amélioration du rendement global de la cellule. Lorsqu'appliquée sur la face arrière, cette structuration induit un mécanisme optique spécifique : un rayon lumineux, après avoir atteint la surface avant de la cellule, subit une réflexion successive entre deux pyramides adjacentes avant de pénétrer le matériau. Ce processus de double réflexion entraîne une réduction du coefficient de réflexion de la surface, passant de R à R^2 . Cette réduction se traduit par une augmentation significative de la quantité de lumière absorbée par la cellule. De plus, les rayonnements ainsi réfléchis ne pénètrent pas le matériau perpendiculairement.

Ils y entrent selon un angle non nul, ce qui allonge leur trajet optique au sein du semi-conducteur et accroît corrélativement la probabilité d'absorption. Cette conjonction d'effets – la réduction de la réflexion et l'allongement du chemin optique – confère à la texturation son statut de technique majeure et couramment employée pour l'amélioration des performances des cellules solaires.

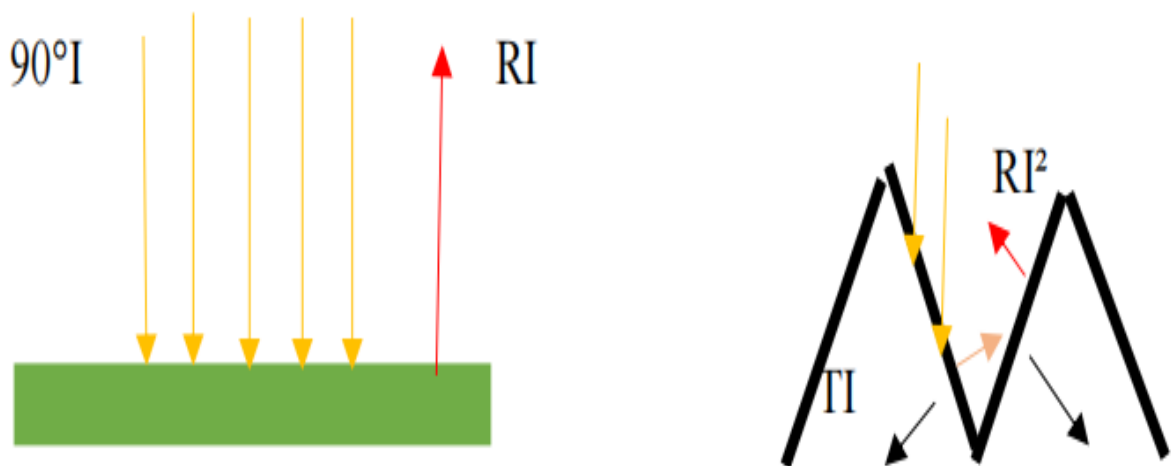


Figure I-11 : La réflexion de la lumière sur une surface lisse et texturée [18]

I.7.4 Fenêtre:

La couche fenêtre constitue un élément fondamental de la cellule photovoltaïque, assumant des fonctions à la fois optiques et électriques. Optiquement, elle est composée de matériaux caractérisés par une large bande interdite, ce qui lui confère une transparence élevée sur une large portion du spectre solaire. Cette propriété permet aux photons incidents de traverser cette couche sans absorption significative, atteignant ainsi les couches actives sous-jacentes. L'absence d'absorption parasite dans cette région est cruciale, car une telle absorption se traduirait par une réduction directe du nombre de photons disponibles pour le processus de conversion photovoltaïque. Électriquement, la couche fenêtre est

également déterminante. Elle assure le transport des électrons générés vers les contacts métalliques, garantissant ainsi une collecte efficace des porteurs de charge. La synergie de ces deux fonctions – une transparence optique maximale et une conductivité électrique efficace – positionne la couche fenêtre comme un constituant essentiel dans la conception des cellules photovoltaïques à haut rendement. Dans ces systèmes, l'optimisation de chaque composant est impérative afin de minimiser les pertes et de maximiser l'efficacité de la conversion de l'énergie solaire en énergie électrique [18].

I.7.5 L'émetteur et la base:

Chaque cellule photovoltaïque intègre un semi-conducteur composé de deux couches minces aux propriétés complémentaires. Leur association forme la jonction p-n, essentielle à la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique.

L'émetteur constitue la première couche, une zone de type n fortement dopée. Cette région présente une concentration élevée d'électrons libres et assure la collecte des porteurs de charge générés par l'absorption des photons.

La seconde couche, appelée base, est une zone de type p. Son niveau de dopage est inférieur à celui de l'émetteur. Cette couche représente la région principale d'absorption de la lumière et génère la majorité des paires électron-trou. La réduction du dopage dans la base est intentionnelle : elle prolonge la durée de vie des porteurs minoritaires, augmentant ainsi leur probabilité d'atteindre la jonction avant recombinaison. Cette configuration contribue directement à l'amélioration du rendement global de la cellule. Les performances du dispositif photovoltaïque dépendent donc de l'équilibre précis entre ces deux couches [19].

I.7.6 BSF (Back Surface Field):

Le champ électrique de surface arrière, désigné par l'acronyme BSF (Back Surface Field), est une couche semi-conductrice fortement dopée, de type p⁺ ou n⁺ positionnée sur la face arrière de la cellule photovoltaïque, juste avant le substrat. Sa présence instaure une différence de dopage marquée entre cette couche et la base adjacente, ce qui génère une barrière de potentiel interne. Cette barrière est orientée de manière à repousser les porteurs minoritaires loin de la surface arrière. Sans cette barrière, ces porteurs seraient attirés vers les contacts métalliques arrière, où ils se recombineraient de façon non radiative, occasionnant ainsi des pertes énergétiques significatives. Le BSF remplit une double fonction : d'une part, il assure la passivation de la surface arrière en réduisant la recombinaison de surface, et d'autre part, il améliore la répartition de la tension au sein des jonctions de la cellule. Ces deux effets combinés contribuent à un meilleur confinement des porteurs de charge dans les

zones actives de la cellule et à une augmentation notable du rendement de conversion global. Le BSF constitue un composant essentiel dans la conception des cellules photovoltaïques à haute performance [19].

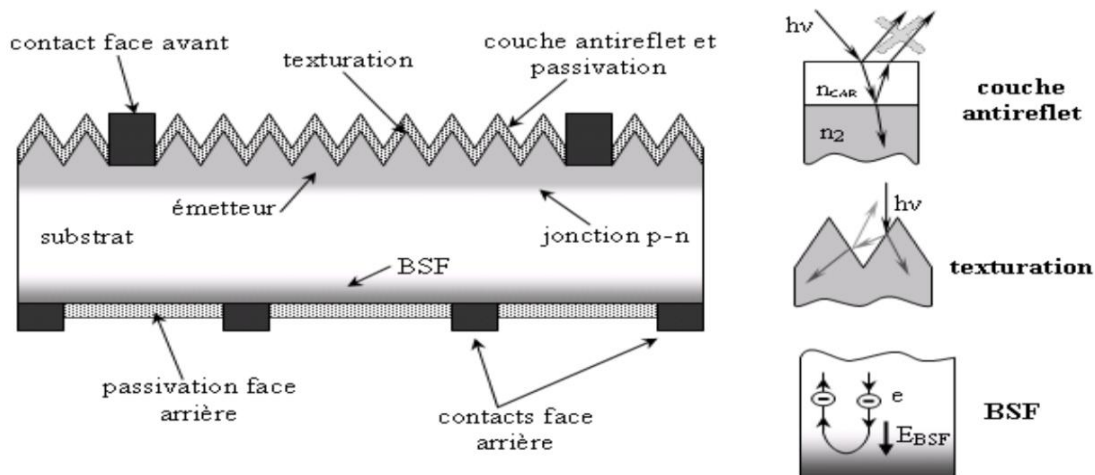


Figure I-12 :Composition d'une cellule photovoltaïque[20].

I.8. Technologies des cellules solaires :

Il existe plusieurs technologies des cellules solaires photovoltaïques réparties en trois générations

I.8.1 Matériaux cristallins à base de silicium (1^{er} génération) :

Les matériaux cristallins à base de silicium de première génération représentent la catégorie prédominante dans la production mondiale de cellules photovoltaïques, en raison de leurs propriétés électroniques avantageuses et de leur maturité technologique. Ces structures, d'une épaisseur généralement comprise entre 0,15 et 0,4 mm, se caractérisent par un agencement atomique ordonné selon une configuration tétraédrique, conférant ainsi une régularité structurale propice à la conduction électrique. Les cellules à base de silicium cristallin sont généralement fabriquées sous forme de plaquettes de géométries diverses (rondes, carrées ou pseudo-carrées), obtenues par des procédés de découpe spécifiques. Cette catégorie se subdivise en deux principales familles. Le silicium monocristallin, caractérisé par une structure cristalline unique et parfaitement orientée, offre les rendements de conversion les plus élevés, bien que son processus de fabrication soit plus onéreux. En revanche, le silicium poly cristallin se compose de multiples grains cristallins présentant des orientations diverses. Bien que ses performances soient légèrement moindres, son coût de production plus faible en fait un matériau largement répandu au sein de l'industrie photovoltaïque mondiale.

A. Silicium monocristallin :

Le silicium monocristallin se caractérise par une structure cristalline unique, conférant au matériau un aspect homogène, typiquement gris bleuté ou noir. Il est produit à partir d'un bloc de silicium de haute pureté. Bien que son procédé de fabrication soit complexe et onéreux, il permet d'atteindre les rendements les plus élevés parmi les technologies photovoltaïques commerciales, avoisinant les 20 %. Ceci se traduit par une exigence surfacique d'environ 7 m² pour générer 1 kilowatt-crête (kWc). L'optimisation de la surface d'installation représente ainsi son avantage principal, contrebalançant partiellement son coût de production élevé.. [19]

B. Silicium poly-cristallin :

Le silicium poly cristallin est constitué d'une agglomération de cristaux multiples, formant une structure en mosaïque de grains bleutés dont la taille varie de quelques millimètres à quelques centimètres. Les joints de grains présents dans ce matériau sont des zones propices à la recombinaison des porteurs, aux liaisons pendantes et à une concentration accrue d'impuretés métalliques, ce qui a pour effet de réduire la durée de vie des porteurs de charge. Comparativement au silicium monocristallin, ses méthodes de production sont plus simples et économiques. Cependant, la pureté moindre du matériau limite son rendement à environ 15 %. Le silicium poly cristallin représente ainsi un compromis judicieux entre coût de fabrication et efficacité énergétique. .[19].

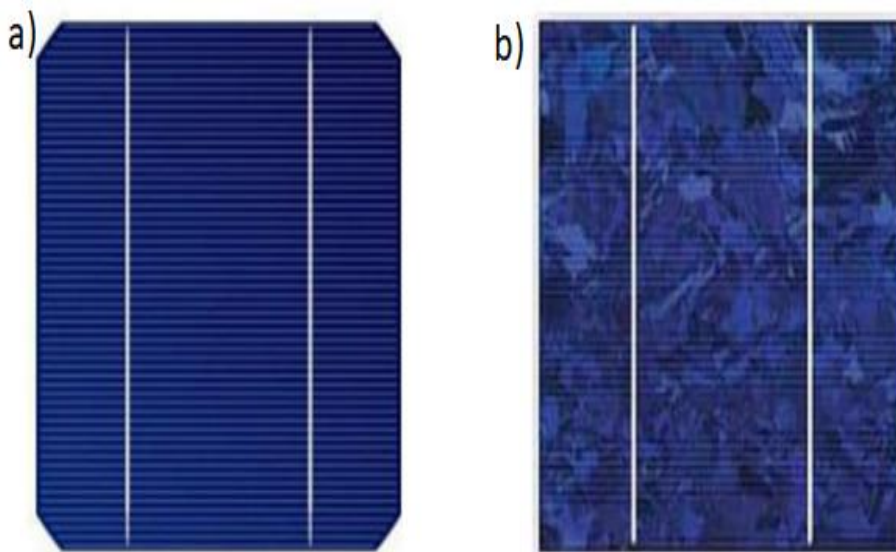


Figure I-13 Matériaux solides cristallisés : Monocristallin et Poly cristallin

I.8.2 Les couches minces (2ème génération) :

Le silicium amorphe (a-Si), utilisé en couches minces d'une épaisseur de l'ordre du micron, présente une organisation atomique désordonnée (Figure I-14). Bien que cette structure favorise une absorption lumineuse supérieure à celle du silicium cristallin, elle entraîne des difficultés dans le déplacement des porteurs de charge et un rendement de conversion limité. Cette désorganisation induit également l'apparition de liaisons pendantes, susceptibles d'altérer les propriétés électroniques du matériau. Pour pallier ce phénomène, une passivation régulière à l'hydrogène (a-Si:H) est nécessaire. Parmi les autres matériaux employés dans la fabrication des photopiles en couches minces de cette deuxième génération, on trouve des composés III-V, tels que l'arséniure de gallium (GaAs), et le tellure de cadmium (CdTe). [20].



Figure I-14 : Cellule de silicium amorphe[20]

Contrairement aux matériaux cristallins, les matériaux amorphes se distinguent par une structure atomique désordonnée, parsemée de défauts structuraux qui contribuent à leur fragilisation et à une dégradation temporelle accélérée. Dans le cas spécifique du silicium amorphe obtenu à partir du silane (SiH_4), l'hydrogène joue un rôle de passivation crucial en saturant ces défauts, ce qui améliore la collecte des porteurs de charge et facilite le dopage du matériau. L'alliage silicium-hydrogène (a-Si:H) ainsi constitué présente une bande interdite d'environ 1,77 eV et une capacité d'absorption lumineuse élevée. L'objectif principal de cette deuxième génération de matériaux photovoltaïques est économique : réduire la masse et le coût des cellules, sans pour autant viser des rendements comparables à ceux des structures cristallines. Les technologies matures de cette catégorie incluent le tellure de cadmium (CdTe), les cellules CIGS, le silicium amorphe et le silicium micro-morphe, toutes déposées en couches minces sur des substrats légers et économiques, tels que le verre ou la céramique [20].

I.8.3 Les couches minces avancées (3ème génération) :

Les avancées dans le domaine des couches minces ont permis à la troisième génération de cellules photovoltaïques de combiner haute performance et coût réduit, tout en se distinguant par leur flexibilité, atout majeur qui élargit considérablement leurs champs d'application. Elles peuvent ainsi être intégrées sur une grande variété de supports, tels que les toitures, les véhicules, les façades extérieures, les tentes et même certains vêtements, leur permettant de s'adapter à des environnements des plus variés..[20].

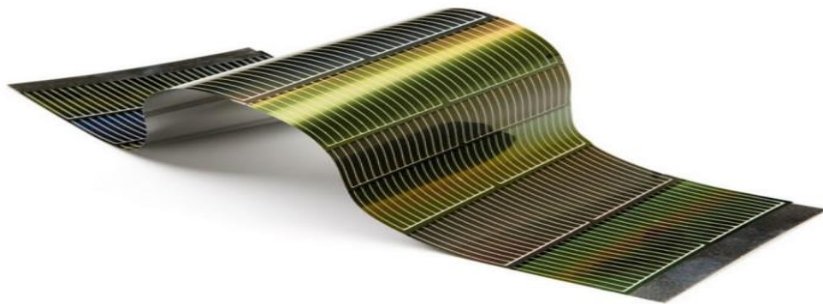


Figure I-15 Couches minces avancées[20]

I.9 Circuit équivalent de la cellule photovoltaïque :

Le modèle de circuit équivalent d'une cellule photovoltaïque est utilisé pour caractériser son comportement électrique à l'aide de composants fondamentaux tels que des sources, des résistances, des diodes, des inductances ou des condensateurs. Dans l'obscurité, une cellule solaire présente un comportement analogue à celui d'une diode conventionnelle, débutant sa conduction lorsque la tension appliquée excède sa tension de seuil (V_s). Pour une cellule idéale, la caractéristique courant-tension (I-V) est décrite par la relation suivante :

$$I_{obs} = I_s \left(\exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) - 1 \right) \quad \text{I-2}$$

Où

I_s : le courant de saturation en Ampère (A) ;

n : le facteur d'idéalité de la diode; sans dimension.

K : la constante de Boltzmann (1.38066×10^{-23} J/K= 8.61400×10^{-5} eV/K).

T : la température absolue en Kelvin (K).

q : la charge d'un électron en Coulomb (1.60281×10^{-19} C).

Dans le cas d'une cellule photovoltaïque réelle, d'autres paramètres tenant compte des effets résistifs et des fuites vers les bords; sont pris en considération et l'équation de la caractéristique I-V devient alors :

$$I = I_{ph} - I_s \left(\exp\left(\frac{q(V + I.R_s)}{nkT}\right) - 1 \right) - \left(\frac{V + I.R_s}{R_{sh}} \right)$$

Et par conséquent le schéma équivalent d'une cellule solaire réelle est représenté sur la figure suivante (figure-I.6) par un générateur de courant (I_{ph}), une diode et deux résistances (R_s) et (R_{sh}) [21].

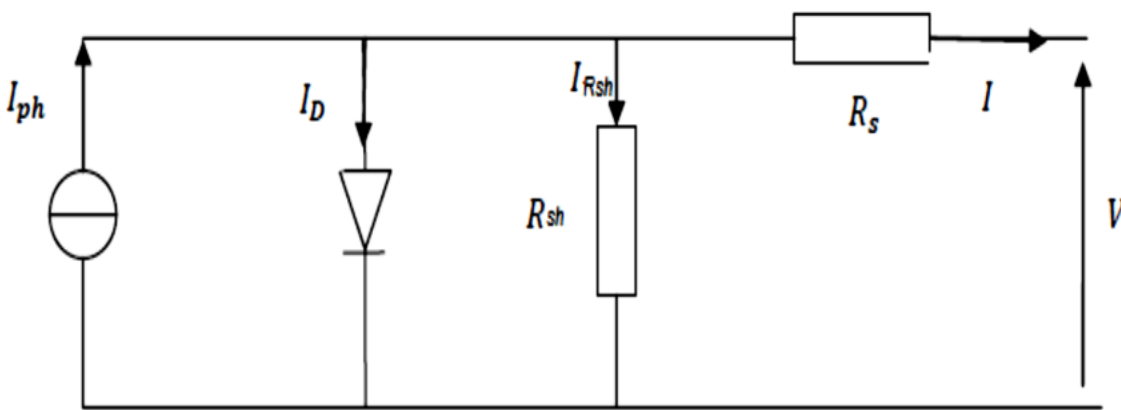


Figure I-16 : Schéma équivalent électrique de la cellule PV à une diode

- Le générateur du courant (I_{ph}) : il délivre le courant I_{ph} correspondant au courant photo-généré.
- La diode (D) : modélise la jonction P-N.
- La résistance série R_s : modélise les pertes résistives au sein de la photopile.
- La résistance parallèle R_{sh} (résistance shunt) : correspond à la présence de courants de fuite dus aux recombinaisons.

I.10.Paramètre photovoltaïque :

I. 10.1Caractéristique courant-tension d'une cellule solaire : La caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque, présentée en Figure I-16, définit son comportement sous différentes

charges dans des conditions d'irradiance et de température spécifiées. L'examen de cette courbe révèle trois points distinctifs :

1. **Le courant de court-circuit (I_{cc})** : représente le courant maximal que la cellule peut fournir lorsque la tension est nulle.
2. **La tension en circuit ouvert (V_{oc})** : correspond à la tension maximale que la cellule atteint lorsqu'aucune charge n'est connectée.
3. **Le point de puissance maximale (MPP)** : indique l'état de fonctionnement où la cellule génère sa puissance de sortie optimale [22].

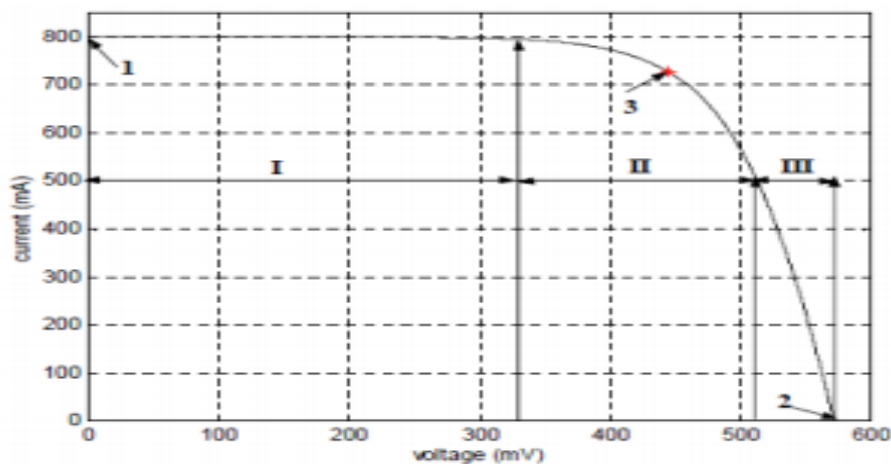


Figure I-17 : Caractéristique courant-tension ($I-V$) d'une cellule solaire [22].

La courbe $I-V$ d'une cellule photovoltaïque se divise en trois zones distinctes :

1. **zone I** : où la cellule se comporte comme une source de courant constant à tension variable
2. **zone II** : qui constitue une transition entre les deux modes sans qu'aucun paramètre ne soit dominant.
3. **zone III** : où la cellule agit comme une source de tension variable à courant constant. Lorsqu'elle est connectée à une charge résistive constante, le point de fonctionnement se positionne sur cette courbe, se déplaçant vers la droite en cas d'augmentation de la charge et remontant vers la gauche lors d'une diminution de celle-ci.

La courbe $I-V$ peut être divisée en trois zones distinctes

1. **Zone I** : La cellule fonctionne comme une source de courant, où le courant reste constant tandis que la tension varie.

2. **Zone II** : Transition entre le mode source de courant et source de tension, où aucun des deux paramètres n'est dominant.
3. **Zone III** : La cellule agit comme une source de tension, où la tension est variable et le courant reste constant.

La caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque décrit son comportement sous différentes charges appliquées, dans des conditions spécifiques d'éclairement solaire et de température. Les principaux paramètres qui caractérisent une cellule solaire sont les suivants :

Courant de court-circuit (I_{cc}) :

L' I_{cc} représente l'intensité du courant lorsque la tension est nulle ($V = 0$). Sa valeur dépend directement de l'intensité du rayonnement solaire incident, de la température ambiante et de la surface active de la cellule photovoltaïque [23].

a. Tension de circuit ouvert (V_{co}) :

La V_{co} correspond à la tension mesurée lorsque le courant est nul ($I = 0$). Elle est déterminée par les propriétés intrinsèques de la jonction électronique ainsi que par les matériaux constitutifs de la cellule photovoltaïque [23].

b. Puissance maximale (P_m) :

La P_m désigne la puissance de sortie maximale que la cellule peut produire, atteinte à un point de fonctionnement où la tension et le courant sont optimisés [23].

La caractéristique courant-tension (I-V) d'une cellule photovoltaïque décrit son comportement en fonction des charges appliquées, et ce, sous des conditions spécifiques d'ensoleillement et de température. la droite, tandis qu'une diminution

Voici les paramètres essentiels caractérisant une cellule solaire :

$$P_m = I_m \times V_m$$

a. Facteur de forme (FF) :

Le facteur de forme (FF) représente le rapport entre la puissance maximale réellement délivrée par la cellule et la puissance maximale théorique, cette dernière étant définie comme le produit du courant de court-circuit (I_{cc}) et de la tension de circuit ouvert (V_{co}). [23] .

b. Rendement de la cellule (η) : Le coefficient de rendement (η) est l'un des paramètres les plus déterminants pour évaluer une cellule photovoltaïque. Il s'agit du rapport entre la puissance électrique maximale fournie par la cellule et la puissance solaire incidente à une température donnée. Il se calcule comme suit : [23]

$$\eta = \frac{P_m}{P_{in}}$$

P_{inc} : la puissance incidente de la lumière est égale à la puissance solaire $P_{solaire}$ ($P_{solaire} = 100 \text{ mW/cm}^2$).

Conclusion :

La technologie photovoltaïque repose sur des principes physiques fondamentaux et une compréhension approfondie des matériaux semi-conducteurs. Depuis la découverte de l'effet photovoltaïque au XIXe siècle jusqu'aux innovations récentes dans le domaine des couches minces, ce secteur a connu un développement significatif. L'exploitation de l'énergie solaire et les avancées continues en science des matériaux ont permis de développer des cellules solaires dont la performance et la fiabilité se sont accrues. Leur fonctionnement repose sur la conversion de l'énergie lumineuse en électricité, processus réalisé par des jonctions PN et les propriétés optoélectroniques de semi-conducteurs comme le silicium. Les différentes générations de cellules, notamment cristallines, amorphes et flexibles, offrent une adaptabilité à des applications variées, allant du secteur résidentiel et industriel aux dispositifs mobiles. Bien que certaines limitations subsistent, particulièrement en termes de rendement et de coût initial, les bénéfices écologiques et économiques associés à l'énergie photovoltaïque en font une option pertinente pour la résolution des enjeux énergétiques mondiaux. Cette introduction théorique établit le cadre des explorations plus techniques et pratiques qui seront menées dans les chapitres suivants de ce mémoire..

Chapitre II :

Cellules solaire pérovskite

Introduction

La demande énergétique mondiale croissante impose des contraintes significatives sur les infrastructures de production et de distribution, nécessitant le développement de technologies de conversion énergétique efficaces et économiquement viables afin de réduire les émissions de gaz à effet de serre. Les technologies photovoltaïques conventionnelles s'appuient sur des semi-conducteurs inorganiques cristallins tels que le silicium (Si), le tellure de cadmium (CdTe) et le sélénure/sulfure de cuivre-indium-gallium (CIGS) comme matériaux absorbeurs. Cependant, leur fabrication exige des températures élevées et des conditions sous vide, ce qui induit une consommation énergétique considérable. En réponse à ces limitations, les cellules solaires à pérovskites (PSC) constituent une alternative prometteuse, partageant avec les cellules solaires organiques et les cellules solaires à colorant (DSSC) la possibilité d'être fabriquées sous forme de dispositifs légers et flexibles. Dans ces dispositifs, un matériau de structure pérovskite hybride inorganique-organique agit comme couche absorbante. Depuis leur introduction en 2009, ces matériaux ont connu une progression rapide. Un rendement de conversion de puissance (PCE) de 15 % a été atteint en 2013, suivi d'un rendement certifié de 22,1 % en 2017, avec des valeurs rapportées atteignant 27,3 %. Ces performances dépassent celles des DSSC et des cellules solaires organiques. Leur faible coût et la simplicité de leur mise en œuvre les positionnent comme des candidats pertinents pour l'industrialisation des technologies photovoltaïques. Le présent travail propose une synthèse des avancées récentes concernant les compositions, les structures cristallines, les méthodes de fabrication, les architectures de dispositifs, les mécanismes de transfert de charge et les propriétés optoélectroniques des PSC.

II.1 Historique

La pérovskite CaTiO_3 a été découverte en 1839 par le minéralogiste allemand Gustav Rose et A. B. Kemmerer dans la mine Akhmatov, située dans les montagnes de l'Oural, en Russie. Elle a été nommée en l'honneur du minéralogiste russe Lev Alekseevich von Perovski, dont les travaux ont notablement contribué à la géologie et à la minéralogie. Depuis lors, le terme « pérovskite » désigne l'ensemble des structures cristallines qui présentent une analogie avec ce composé. Ces oxydes, caractérisés par la formule chimique générale AMO_3 , se distinguent par trois sites cristallographiques : le site A, occupé par un cation de grande taille ; le site M, accueillant un cation de plus petite taille ; et les atomes d'oxygène, qui forment un octaèdre autour du site M. La diversité des atomes susceptibles d'occuper chacun de ces sites confère à cette famille une grande richesse structurale. Les pérovskites halogénées, dont la formule générale est AMX_3 , représentent une sous-famille qui a fait l'objet d'études intensives depuis 2012. Dans cette structure, le site A est occupé par un cation monovalent alcalin, le site M par un cation métallique divalent (par exemple, Pb^{2+}), et le site X par un halogénure (principalement Cl, Br ou I). L'historique de cette famille remonte à 1958, avec les travaux sur les composés CsPbX_3 qui ont mis en évidence des propriétés de photoconductivité. Ces recherches ont été suivies dans les années 1980 par la synthèse de la famille MAPbX_3 et les premières investigations sur leur conductivité ionique. En 2009, ces matériaux ont été intégrés pour la première fois comme couche active dans une cellule solaire. Le rendement alors obtenu était inférieur à 4 %, et des problèmes de stabilité ont restreint l'intérêt scientifique pour ces composés. C'est en 2012 que l'intérêt pour les pérovskites a connu une recrudescence significative, suite à des publications simultanées rapportant des efficacités de l'ordre de 10 %. Depuis lors, cette dynamique s'est amplifiée de manière continue, avec des rendements certifiés atteignant près de 25 % en 2021 pour des cellules en couches minces poly cristallines. Ces performances positionnent les pérovskites halogénées parmi les matériaux les plus prometteurs pour le développement de cellules solaires de nouvelle génération [24]

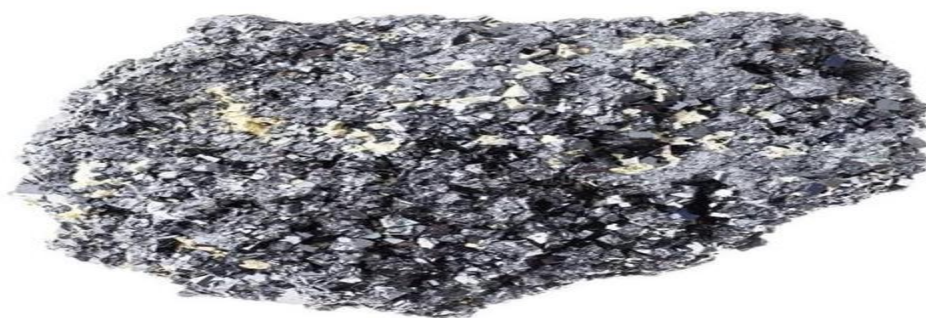


Figure II.1 : Un type de pérovskite [24]

II .2. Matériau pérovskite

Le matériau pérovskite, sous sa forme initiale CaTiO_3 , un minéral composé d'oxyde de calcium et de titane, a été identifié en 1839 et décrit par le minéralogiste russe L. A. Perovski, d'où son appellation. Actuellement, le terme « pérovskite » s'applique à une catégorie de matériaux partageant une structure cristalline de formule générale ABX_3 , couvrant ainsi une diversité de composés. Leur intégration dans un dispositif photovoltaïque ne s'est cependant concrétisée qu'au début des années 2000. Kojima et al. ont employé le composé $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$, déposé sur un substrat de TiO_3 nanoporeux, en s'inspirant du principe des cellules de Grätzel, également connues sous le nom de cellules solaires à pigment photosensible. Cette approche a permis d'atteindre un rendement de conversion de 2,2 %. Cette première démonstration a marqué le début d'un intérêt scientifique notable pour les pérovskites dans le domaine photovoltaïque. [25]

En 2012, il a été observé que certaines pérovskites présentaient des propriétés particulièrement propices à la conversion photovoltaïque, incluant une séparation efficace et une mobilité élevée des charges électriques, ainsi qu'une absorption remarquable du rayonnement solaire. À ces qualités s'ajoutent d'autres avantages significatifs : d'excellentes propriétés optoélectroniques, un faible coût des matières premières, une bande interdite ajustable et une compatibilité avec un large éventail de techniques de dépôt. [25] Une attention accrue est dirigée vers les pérovskites hybrides inorganiques-organiques, telles que le $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, qui combinent les attributs des composés organiques et inorganiques. Ces matériaux représentent aujourd'hui une des voies les plus compétitives pour le développement de cellules solaires de nouvelle génération. [26]. Figure II.2 : Représentation de la structure de la pérovskite [25].

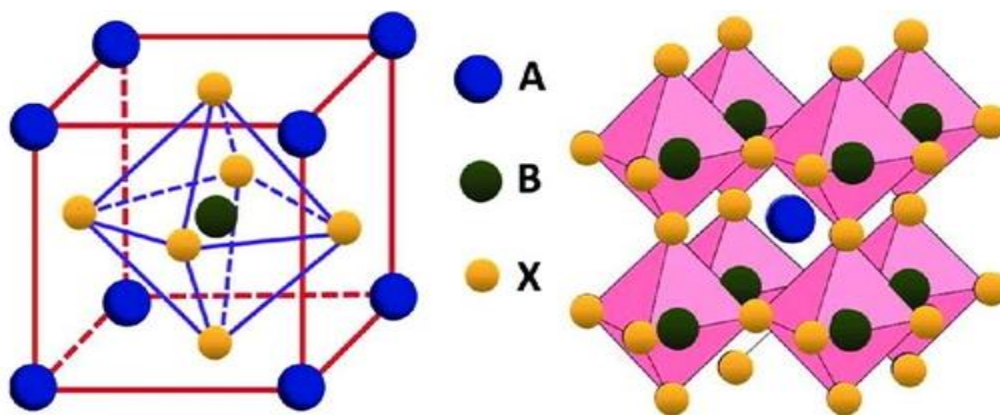


Figure II.2 : Représentation de la structure de la pérovskite [25].

Avec les éléments A, B et X peuvent être :

A : cation (Cs^+ , Rb^+ , MA^+ , FA^+ , ...)

B : cation (Pb^{2+} , Sn^{2+} , Ge^{2+} , ...)

X : anion (halogénures (I^- , Br^- , Cl^- , ...)) [26].

Afin de garantir la stabilité structurale des matériaux pérovskite, il est essentiel que la formation des composants de site A, B et X respecte le facteur de tolérance de Goldschmidt (GTF ou t). Pour ce faire, il faut utiliser la formule suivante :

$$t = \frac{r_A + r_X}{\sqrt{2}(r_B + r_X)} \quad \text{II.1}$$

Où r_A , r_B , r_X et sont les rayons ioniques effectifs des sites A, B et X, respectivement [26].

II.2.1. Structure cristallographique de la pérovskite

Les pérovskites adoptent une structure cristalline similaire à celle du titanate de calcium (CaTiO_3), caractérisée par la formule chimique générale ABX_3 . Cette structure est formée de quatre octaèdres BX_3 qui entourent un cation A. Cette configuration structurale détermine les propriétés physiques et chimiques spécifiques de ces matériaux (voir figure II.2).

Deux familles principales de pérovskites sont identifiées : les pérovskites inorganiques, généralement sous forme d'oxydes, et les pérovskites halogénées, qui peuvent être inorganiques ou hybrides, intégrant des composés organiques et inorganiques dans leur structure cristalline [27, 28].

II.3 Propriétés des matériaux pérovskites

Les matériaux pérovskites présentent un intérêt significatif pour les applications photovoltaïques, en raison de plusieurs propriétés physiques avantageuses. Premièrement, leur bande interdite directe et la présence minimale de défauts dans cette bande favorisent une conversion photonique efficace. De plus, ils affichent un coefficient d'absorption élevé, de l'ordre de 10^4 cm^{-1} à 550 nm, ce qui est nettement supérieur à celui du silicium cristallin (voir figure II.3).

Cette absorption élevée constitue un avantage technologique significatif, puisqu'elle permet de diminuer l'épaisseur de la couche active de pérovskite tout en assurant une absorption quasi totale du rayonnement incident à 500 nm. De ce fait, la distance de diffusion des porteurs de charges photogénérés vers les électrodes de collecte est réduite. Cela minimise les probabilités de

recombinaison et facilite une collecte plus efficace des charges, contribuant ainsi directement à l'optimisation des performances des cellules photovoltaïques.

Le matériau pérovskite présente une structure cristalline analogue à celle du titanate de calcium (CaTiO_3), composée de quatre octaèdres BX_3 entourant un cation A, ce qui lui confère la formule chimique générale ABX_3 . Cette architecture particulière est à l'origine des propriétés physiques et chimiques remarquables de ces matériaux (voir la figure II.2).

Deux grandes familles sont distinguées au sein des pérovskites : les pérovskites inorganiques, qui se présentent sous forme d'oxydes, et les pérovskites halogénées, qui peuvent être soit purement inorganiques, soit hybrides, combinant des composés organiques et inorganiques au sein d'une même structure cristalline.[27], [28].

II.3.1 Propriétés électriques :

Ces matériaux présentent des propriétés fonctionnelles remarquables : supraconductivité à des températures relativement élevées, conversion des contraintes mécaniques ou de la chaleur en électricité (effet piézoélectrique), capacité à accélérer des réactions chimiques (catalyse), et variation brutale de leur résistance électrique sous l'effet d'un champ magnétique (magnétorésistance). Dans ce contexte, de nombreuses études électrochimiques ont été menées en milieu aqueux sur des électrodes à base de ces oxydes [10]. Ces travaux ont mis en évidence un rôle électro catalytique significatif de ces matériaux dans la réaction de réduction de l'oxygène à température ambiante.

Par ailleurs, la pérovskite se distingue par un caractère électronique mixte, à la fois ionique et covalent. Les données expérimentales disponibles indiquent une grande variabilité de la largeur de bande interdite (*band gap*) selon les composés considérés. Celle-ci dépend étroitement des conditions de synthèse, de la nature et de la taille du cation organique ou inorganique, ainsi que des ions métalliques présents ; l'influence de l'ion halogénure s'avère en revanche plus limitée. À titre d'exemple, les valeurs du *band gap* rapportées pour $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbCl}_3$ et $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}_3$ sont respectivement de 1,49 eV, 1,26 eV, 1,95 eV et 2,46 eV [11, 12]. Toutefois, la valeur la plus couramment admise pour $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ est de 1,57 eV [28].

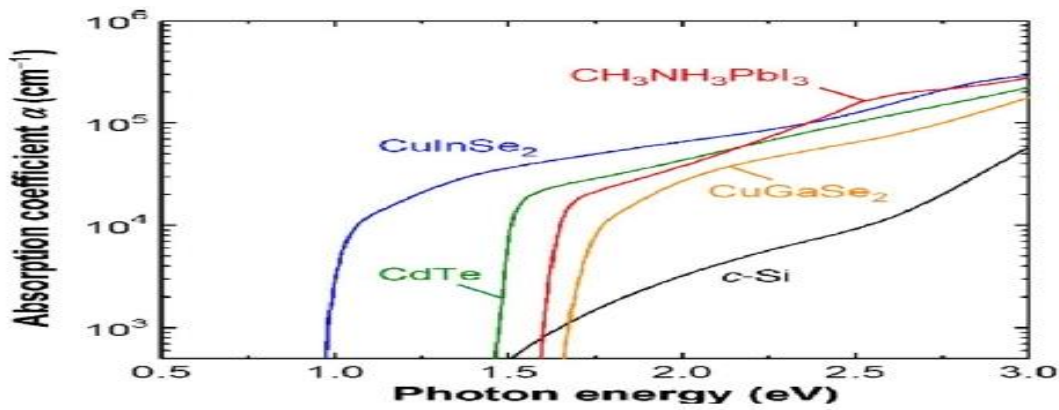


Figure II.3 : Courbe d'absorption des matériaux : c-Si, CdTe : CuInSe₂, CuGaSe₂ et CH₃NH₃PbI₃ [28]..

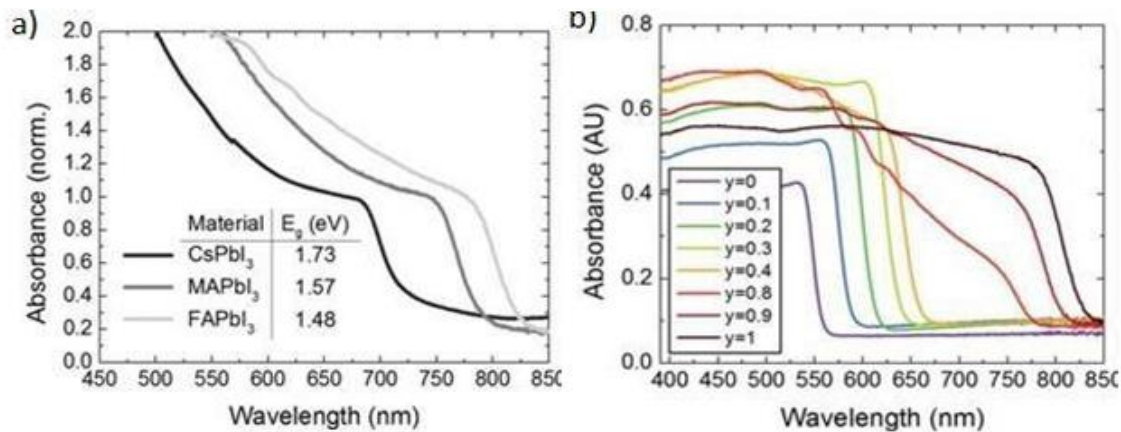


Figure II.4 : a) Courbes d'absorption de différentes pérovskites (MAPI, FAPI, CsPI) ; b) d'absorption de FAPbI_yBr_{3-y} en fonction du ratio y [28].

La flexibilité du gap énergétique constitue une caractéristique essentielle des matériaux pérovskites, sa valeur étant directement déterminée par la composition cationique et anionique. Par exemple, le composé MAPI présente un gap de 1,57 eV, lequel est réduit à 1,48 eV lors de la substitution du méthyl ammonium par le forma midinium. Une modulation continue du gap est également réalisable par l'incorporation de deux anions selon un rapport molaire (y) contrôlé. Eperon et al. ont ainsi démontré, pour le composé FAPBI_(1-y)Bry, une variation du gap de 1,48 eV à 2,23 eV (cf. figure II.4 b), ce qui confère à ces matériaux une grande adaptabilité pour l'ingénierie de leurs propriétés optoélectroniques.

Les propriétés électriques et optiques des matériaux pérovskites sont modulables par l'ajustement de leur composition chimique. Elles sont également influencées de manière significative par la méthode de synthèse ainsi que par le procédé de fabrication de la couche mince. Cette dépendance explique la

variabilité des valeurs de mobilité et de longueur de diffusion observées dans la littérature. La longueur de diffusion, un paramètre fondamental du transport des porteurs de charges, est définie comme la racine carrée du produit du coefficient de diffusion (D) par le temps de vie des porteurs (τ), selon l'équation (1).

Dans le contexte photovoltaïque, la longueur de diffusion des porteurs de charges (électrons et trous) représente un paramètre critique, car elle détermine directement l'épaisseur optimale de la couche active du dispositif. Les matériaux pérovskites présentent des longueurs de diffusion de l'ordre de quelques centaines de nanomètres, comparativement plus courtes que celles du silicium cristallin. Cependant, l'intégration d'ions chlorure dans la structure pérovskite peut accroître significativement ces longueurs, grâce à une amélioration de la qualité cristalline et de l'homogénéité de la couche. La mobilité des porteurs dans les pérovskites, bien qu'inférieure à celle du silicium, surpasse celle des matériaux organiques conventionnels. Le caractère ambipolaire de ces matériaux, permettant leur emploi indifférencié comme couche de transport d'électrons ou de trous, constitue un avantage technologique significatif, simplifiant notamment la conception de cellules solaires à architecture planaire.

En somme, les matériaux pérovskites possèdent une combinaison de propriétés propices à la conversion photovoltaïque : une absorption optique élevée, un gap énergétique ajustable par la composition et une mobilité des porteurs adéquate. Une comparaison détaillée des propriétés optiques et électriques des matériaux photovoltaïques les plus couramment employés est exposée dans le Tableau 1. [28].

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

Tableau II.1. Propriétés physiques des matériaux les plus communs pour le photovoltaïque [29].

Les investigations initiales sur les matériaux pérovskites ont principalement examiné leurs propriétés optiques biaxiales, qui régissent leur interaction anisotrope avec la lumière, et leurs propriétés ferroélectriques, lesquelles permettent le stockage de charges électriques sous l'influence d'un champ électrique externe. Par la suite, l'intérêt s'est focalisé sur les pérovskites à halogénures, dont la structure électronique confère des propriétés optoélectroniques distinctives. Ces matériaux présentent une bande interdite directe et ajustable, un coefficient d'absorption élevé, des masses effectives d'électrons et de trous faibles et équilibrées, ainsi qu'une tolérance aux défauts structuraux. Ces attributs favorisent une amélioration du rendement quantique de photoluminescence. La flexibilité compositionnelle élevée de ces pérovskites représente un avantage significatif, autorisant l'intégration de composants organiques ou inorganiques dotés de fonctionnalités optiques ou électroniques spécifiques. Un autre avantage réside dans la relative facilité d'élaboration de cristaux et de films minces présentant une qualité cristalline élevée. Ceci permet d'étudier les corrélations structure-propriétés et d'optimiser les prototypes de dispositifs. L'ensemble de ces caractéristiques positionne les semi-conducteurs pérovskites à halogénures comme des matériaux de grand intérêt pour diverses applications technologiques, incluant le photovoltaïque, les diodes électroluminescentes (LED), les photo détecteurs, les mémristors et les lasers, ainsi que le montre la figure II.5.

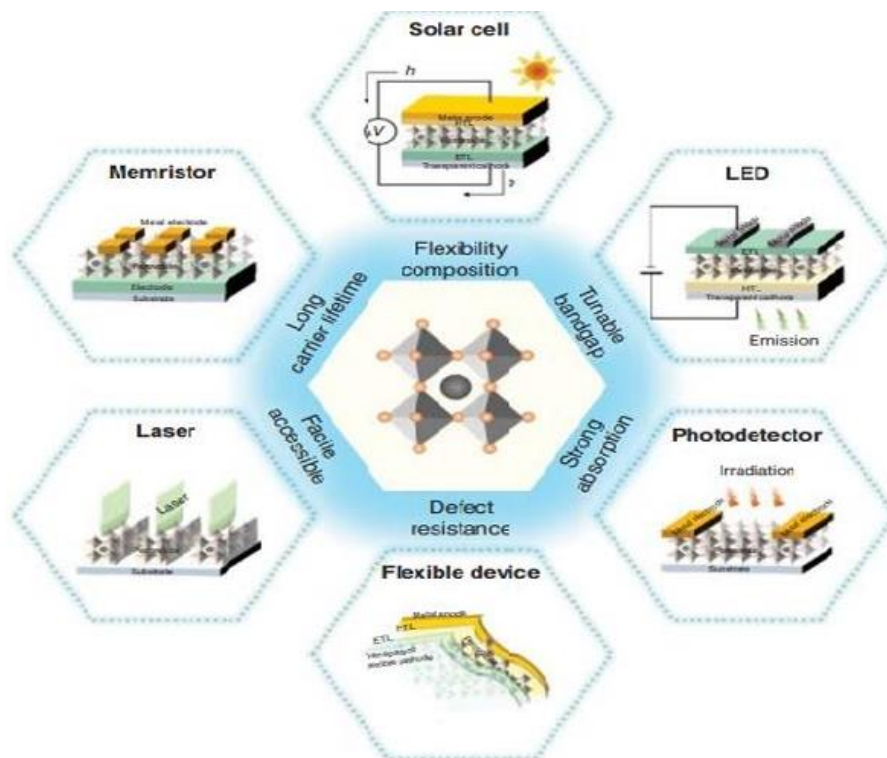


Figure II.5 : Exemples d'applications des matériaux pérovskites [29].

II.3.2 Propriétés optiques

Dans l'architecture des cellules solaires, la couche absorbante est un composant critique qui affecte de manière significative les performances globales du dispositif. Le coefficient d'absorption optique est donc un paramètre déterminant pour la sélection des matériaux de cette couche active. Dans ce contexte, la pérovskite se caractérise comme un matériau à bande interdite directe, dotée d'un coefficient d'absorption optique élevé et d'une large bande d'absorption solaire, ce qui favorise l'obtention d'efficacités de conversion de puissance élevées.

Dans les cellules solaires à pérovskites, la pérovskite est intégrée comme couche intrinsèque, formant ainsi une jonction p-i-n. Le fonctionnement de cette jonction est comparable à celui d'une cellule solaire classique à jonction p-n, avec la distinction que la région de déplétion est significativement élargie par la couche intrinsèque de pérovskite. Cette configuration accroît le volume actif d'absorption lumineuse du dispositif, ce qui favorise une collecte améliorée des porteurs de charges photo générés et contribue à l'optimisation du rendement de conversion. Une comparaison du coefficient d'absorption de la pérovskite avec celui d'autres matériaux photovoltaïques d'usage courant, en fonction de la longueur d'onde, est illustrée à la figure II.6.

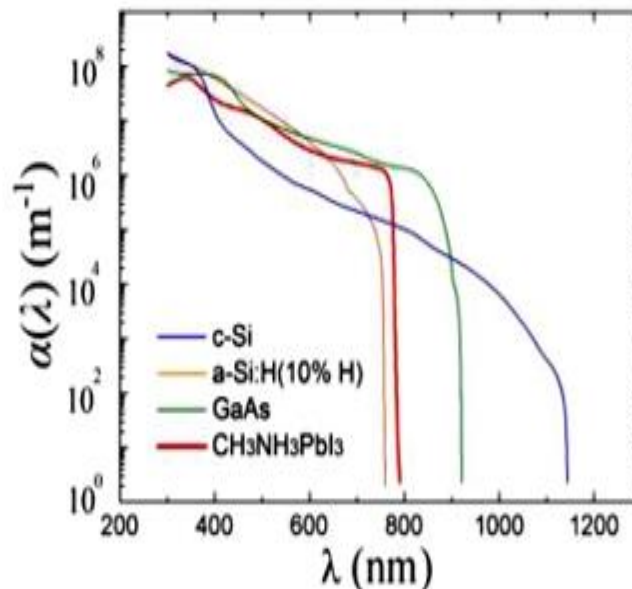


Figure II.6 : Coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différents matériaux de cellules solaires [30].

La figure II.6 met en évidence que le coefficient d'absorption de la pérovskite est parLa Figure II.6 révèle que le coefficient d'absorption de la pérovskite est élevé dans le spectre visible, ce qui lui confère

une capacité d'absorption photonique supérieure à celle de nombreux autres matériaux photovoltaïques. Cette propriété en fait un matériau approprié pour les applications de conversion photovoltaïque.

Dans une cellule solaire, la couche de pérovskite est déposée sous forme de film mince entre les matériaux de type n et de type p. Elle remplit une double fonction : celle de couche absorbante et celle de couche de transport des porteurs de charge. L'absorption d'un photon du rayonnement solaire par la couche de pérovskite génère une paire électron-trou. Les électrons photo générés sont dirigés vers le matériau de type n, et les trous vers le matériau de type p. Ce processus assure la séparation et la collecte efficace des porteurs de charge, une condition indispensable à l'obtention de performances photovoltaïques élevées [30].

II .4. Architecture des cellules solaires Pérovskites

La conception et la fabrication de cellules solaires à base de pérovskite reposent sur quatre architectures principales, chacune présentant des performances distinctes. Ces architectures sont : n-i-p mésoscopique, n-i-p planaire, p-i-n planaire et p-i-n mésoscopique (Figure II-7). Pour les besoins de la modélisation et de la simulation numérique, la configuration d'une cellule solaire à couche mince de type p-i-n ou n-i-p à hétérojonction planaire est généralement privilégiée [31].

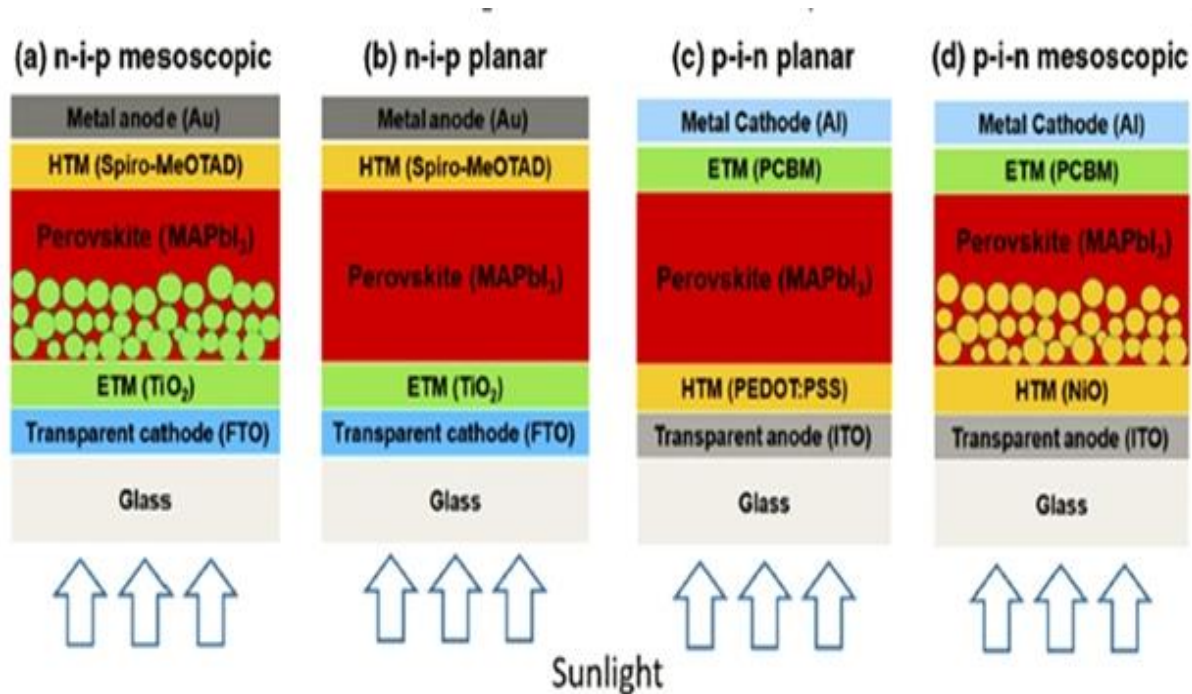


Figure II.7: Schéma montrant la structure en couches quatre typique des cellules solaires à pérovskite (a) n-i-p mésoscopique, (b) n-i-p planaire, (c) p-i-n planaire, et (d) p-i-n mésoscopique [31].

II.5. Les cellules solaires à base de pérovskites

Les pérovskites hybrides ont suscité un intérêt notable au sein de la communauté scientifique spécialisée dans le photovoltaïque, en raison des performances qu'elles ont démontrées et de l'amélioration rapide de leurs rendements au cours de la dernière décennie. Ces matériaux ont notamment permis d'atteindre des efficacités de conversion de puissance (PCE) supérieures à 20 % pour les dispositifs photovoltaïques, ce qui constitue une avancée significative [32]

Depuis leur première intégration dans une cellule solaire en 2009, les cellules solaires à pérovskites hybrides organiques-inorganiques (PSC) ont connu une progression rapide de leurs performances, comme l'illustre la figure II.8. Leur rendement de conversion de puissance est passé de 3,8 % en 2011 à environ 23,3 % en 2016, pour atteindre 25,2 % en 2021, soit une augmentation de plus de vingt points de pourcentage en une décennie. Cette évolution rapide des performances positionne les PSC hybrides parmi les technologies candidates pour les futures générations de cellules solaires. (PSC) de 2008 à 2020 [20].

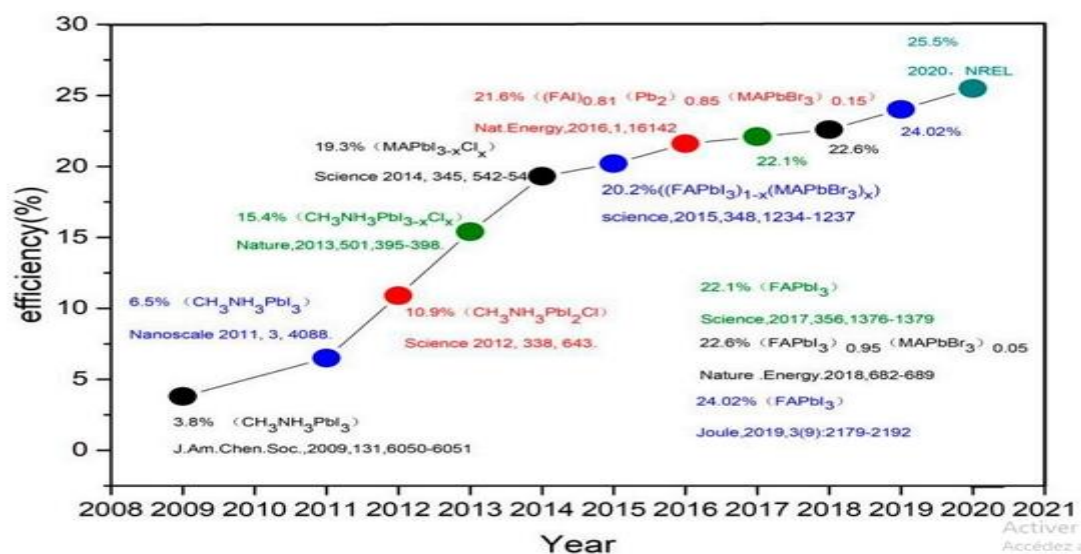


Figure II.8 : L'évolution du rendement de conversion des cellules solaires à pérovskite (PSC) de 2008 à 2020 [32].

II .6. Principes de fonctionnement des cellules solaires pérovskites

Le fonctionnement des cellules solaires à pérovskite présente une complexité inhérente, découlant de leur architecture multicouche et des variations structurales possibles. Il est néanmoins établi que sous illumination, la couche de pérovskite absorbe les photons incidents, générant des paires électron-trou. Ces porteurs de charges photogénérés diffusent ensuite vers les interfaces, où les électrons sont injectés dans la bande de conduction (BC) de la couche de transport d'électrons

(ETL), tandis que les trous sont transférés vers la bande de valence (BV) de la couche de transport de trous (HTL). La collection des porteurs par les électrodes conductrices finalise ce processus, comme schématisé dans la figure II.7 (a). Ce transfert de charges est thermodynamiquement favorisé par un alignement adéquat des niveaux énergétiques des bandes de conduction et de valence des différentes couches, ce qui assure un transport des électrons vers des niveaux d'énergie décroissants et des trous vers des niveaux d'énergie croissants [33].

La capacité d'absorption et de conversion de l'énergie solaire par la couche de pérovskite est principalement conditionnée par trois propriétés physiques fondamentales : une longueur de diffusion élevée des porteurs de charges, leur mobilité au sein de la couche, et l'épaisseur de cette dernière. La longueur de diffusion des électrons et des trous peut atteindre 1 μm , une valeur largement suffisante pour permettre aux porteurs photogénérés d'atteindre les interfaces et les électrodes sans subir de recombinaison, en fonction de la morphologie de la couche de pérovskite.

Par ailleurs, les performances des cellules solaires à pérovskite sont limitées par plusieurs mécanismes de recombinaison. À titre d'exemple, les électrons injectés dans la bande de conduction de l'ETL peuvent être recapturés par la bande de valence de la couche de pérovskite ou de la HTL. L'ensemble de ces processus de transfert de charges et de recombinaison est illustré dans la figure II.9 (b).

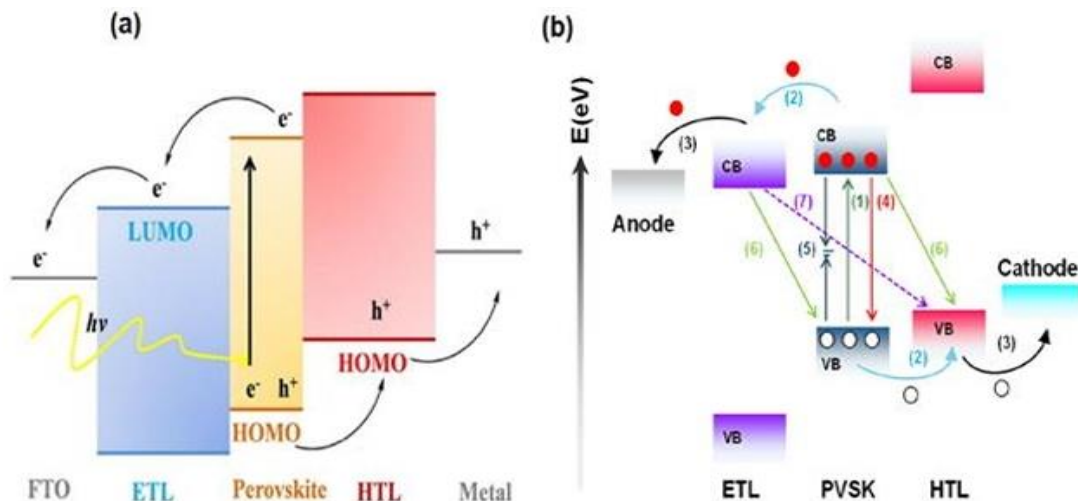


Figure II.9: (a) Mécanisme opérationnel d'une cellule pérovskite typique, (b) Processus de transfert de charge/recombinaison dans les cellules à pérovskite [41].

Les processus de transfert de charges et de recombinaison au sein des cellules solaires à pérovskite sont illustrés à la figure II.9 (b).

La génération de charges représente l'étape initiale de ce processus. Pour les films de pérovskite caractérisés par une bande interdite plus étroite, le domaine spectral d'absorption s'élargit, favorisant une conversion accrue des photons incidents en photocourant. Cependant, cette amélioration s'observe conjointement à une réduction de la phototension, ce qui indique un compromis intrinsèque à l'ajustement de la bande interdite.

Après l'absorption des photons, des excitons se forment au sein de la couche de pérovskite et doivent se dissocier en porteurs de charges libres. Ce processus de dissociation est notablement favorisé dans ces matériaux, en raison de la faible énergie de liaison des excitons (EB), typiquement inférieure à 50 meV. Cette caractéristique facilite leur séparation thermique à température ambiante. Les porteurs de charges libres ainsi générés sont ensuite séparés et acheminés vers la couche de transport d'électrons (ETL) et la couche de transport de trous (HTL) respectivement, ce qui assure leur collecte efficace par les électrodes et contribue directement aux performances globales du dispositif photovoltaïque [34].

II.7 Extraction de la charge :

Pour garantir une extraction efficace des porteurs de charges au sein des cellules solaires à pérovskite, le choix des matériaux de la couche de transport d'électrons (ETL) et de la couche de transport de trous (HTL) est primordial. Il est en effet essentiel que les alignements des bandes de conduction et de valence de ces couches soient optimalement compatibles avec ceux de la couche active de pérovskite, assurant ainsi un transfert sélectif et directionnel des porteurs vers les électrodes correspondantes.

Par ailleurs, un transfert de charges équilibré aux interfaces ETL/pérovskite et HTL/pérovskite est une condition essentielle pour l'optimisation des performances globales du dispositif photovoltaïque [35].

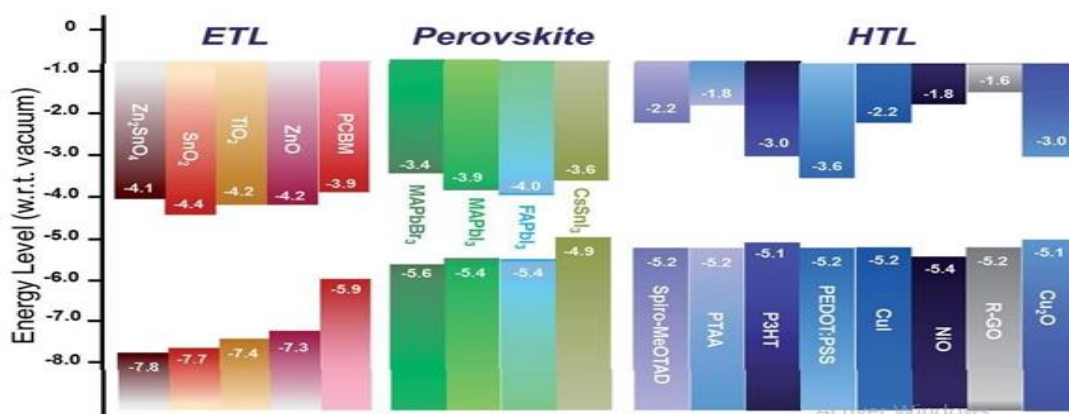


Figure II. 10: Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite)

II.8 Matériaux de transport :

Dans une cellule solaire à pérovskite, les porteurs de charge photogénérés suivent une trajectoire spécifique à travers les couches fonctionnelles du dispositif, comprenant la couche absorbante de pérovskite, la couche de transport d'électrons (ETL) et la couche de transport de trous (HTL), avant d'être collectés aux électrodes. Une compréhension approfondie du rôle et de l'influence de chaque couche sur les performances électriques du dispositif est donc essentielle pour optimiser l'efficacité globale de la cellule solaire et diriger les efforts de recherche vers des améliorations ciblées.

II.8.1 Matériaux de transport d'électrons

Les matériaux utilisés comme couches de transport d'électrons (ETL) dans les cellules solaires à pérovskite doivent présenter une mobilité électronique élevée et une largeur de bande interdite suffisante [36]. Ces propriétés sont essentielles pour le transport efficace des électrons photo générés depuis la couche de pérovskite vers l'électrode collectrice. Ces exigences expliquent l'emploi fréquent de matériaux hybrides organiques-inorganiques dans cette fonction, ce qui contribue à l'amélioration des performances du dispositif.

II.8.2 Matériaux de transport de trous :

L'intégration d'une couche de transport de trous (HTL) est essentielle au fonctionnement des cellules solaires à pérovskite [37]. Cette couche assure plusieurs fonctions cruciales : elle crée une barrière énergétique physique entre l'anode et la pérovskite, ce qui bloque le transfert indésirable des électrons vers l'anode tout en facilitant le transfert des trous. De plus, la HTL améliore la couverture de surface du dispositif par rapport à une configuration sans cette couche.

Pour une extraction efficace des trous à l'interface pérovskite/HTL, le matériau doit satisfaire des critères physiques et chimiques spécifiques. Premièrement, une mobilité élevée des trous est nécessaire pour minimiser les pertes de charge durant leur transport vers le contact collecteur. Deuxièmement, le potentiel d'ionisation du matériau HTL doit être compatible avec celui de la pérovskite, ce qui signifie que le niveau HOMO du HTL doit être légèrement supérieur à la bande de valence de la pérovskite pour réduire les pertes par injection à l'interface. Enfin, une stabilité thermique élevée et une résistance aux facteurs de dégradation externes, tels que l'humidité et l'oxygène, sont indispensables pour assurer la durabilité et la fiabilité du dispositif.

II.9. Comparaison des performances de quelques cellules à pérovskites :

Les performances des cellules photovoltaïques à pérovskite sont influencées par un ensemble de paramètres interdépendants. Ces paramètres incluent l'architecture de la cellule, la nature et la qualité des matériaux de la couche active, les propriétés des couches interfaciales (ETL et HTL), le type d'électrodes, ainsi que les techniques et conditions de fabrication. L'optimisation simultanée de ces éléments est cruciale pour l'obtention de rendements de conversion photovoltaïque élevés et reproductibles

Le tableau II.3 présente les performances de quelques cellules de la nouvelle génération à base de matériaux pérovskites.

Structure de la cellule	J _{cc}	V _{co}	FF	η	Réf
FTO/TiO ₂ / CH ₃ NH ₃ PbI ₃ -xXCl _x /spiro OMeTAD/Au	15.3	0.8	55	6.7	[32]
FTO/SnO ₂ /TiO ₂ /MAPbI ₃ -x(Ac)x/Au	23.68	1.06	68	17.07	[33]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /Po-spiro OmeTAD/Au	22.3	0.98	68.02	15.04	[34]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ :ITIC/Po-spiro OmeTAD/Au	23.74	1	72.8	17.59	[34]
FTO/TBD-TiO ₂ /MAPbI ₃ /spiro OMeTAD/Au	20.5	1.05	63.1	13.9	[35]
FTO/TT-TiO ₂ /MAPbI ₃ /spiro-OMeTAD/Au	23.2	1.1	68	17.4	[35]
ITO/SnO ₂ /MAPbI ₃ /spiro-OMeTAD/Au	22.01	1.05	69	15.98	[36]
ITO/SnO ₂ /MAPbI ₃ (Gua1-xMAx)PbI ₃ /spiro-OMeTAD	22.46	1.1	75	18.54	[36]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ / rGO /FTO(rGO _{pur})	15.68	0.71	45	5.10	[37]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /B-rGO/FTO (10% de bore)	15.91	0.71	56	7.09	[37]
FTO/TiO ₂ /CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /B-rGO/FTO (20% de Bore)	16.74	0.88	60	8.96	[37]
ITO/PEDOT :PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ (MAPbI ₃)/PCBM/BCP/Al	18.94	1.01	74.01	14.6	[38]
ITO/AuCl ₃ -GR/PEDOT :PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ (MAPbI ₃)/PCBM/BCP/Al	20.13	1.01	77.53	15.77	[38]

Tableau II.2: Comparaison des performances des cellules à base de matériaux Pérovskites Cellules à base de matériaux pérovskites

Conclusion

Le présent chapitre retrace l'évolution historique des matériaux pérovskites. Il examine successivement leur structure cristallographique, leurs propriétés optoélectroniques et leurs applications dans le domaine du photovoltaïque. L'architecture des cellules solaires à pérovskite est également abordée, de même que les principes physiques fondamentaux régissant leur fonctionnement. Ces éléments constituent la base théorique nécessaire à la compréhension des travaux expérimentaux présentés dans les chapitres suivants.

Chapitre III :

Logiciel de simulation SCAPS

Introduction

Après avoir exposé les concepts fondamentaux relatifs aux cellules photovoltaïques à couches minces, cette section se propose de caractériser ces dispositifs. Cette analyse s'appuiera sur l'examen d'un type de structure particulier.

La modélisation de ces cellules a connu un développement considérable au cours des dernières années. De nombreux algorithmes et logiciels ont été élaborés pour simuler, analyser, prédire et optimiser le comportement des dispositifs à semi-conducteurs. Ces approches reposent sur la résolution d'équations différentielles fondamentales établies dans la littérature, notamment l'équation de Poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous. Ces équations décrivent les phénomènes de conduction tant dans le volume du semi-conducteur que dans les régions de charge d'espace. Étant donné leur nature non linéaire, une résolution analytique de ces équations est impraticable, ce qui rend l'emploi de méthodes numériques impératif.

III.1 Logiciel SCAPS

SCAPS (SolarCell Capacitance Simulator one Dimension) est un logiciel de simulation unidimensionnelle dédié aux cellules solaires, développé à l'Université de Gand en Belgique. Initialement conçu pour la modélisation de systèmes photovoltaïques à base de semi-conducteurs tels que le CuInSe_2 et le CdTe , son application a été étendue aux cellules cristallines à base de Si et GaAs, aux cellules amorphes, ainsi qu'aux cellules solaires à gradient. [38, 39] Le logiciel permet de simuler des architectures de cellules comportant jusqu'à sept couches distinctes, pour lesquelles des propriétés telles que le profil de dopage, l'épaisseur, la distribution énergétique des niveaux donneurs ou accepteurs et l'absorption optique peuvent être définies. Il effectue le calcul des bandes d'énergie, des concentrations et des courants, des caractéristiques courant-tension (I-V), des caractéristiques en régime alternatif, et de la réponse spectrale (QE). Ces capacités en font un instrument pertinent pour l'analyse et l'optimisation des dispositifs photoniques à couches minces. [39, 40, 41]

III.2 Principe de la simulation numérique

L'analyse des dispositifs à semi-conducteurs s'appuie généralement sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. Cette approche permet de déterminer, par une méthode aux éléments finis, la concentration des électrons et des trous ainsi que le potentiel électrostatique en tout point de l'espace et à chaque instant. L'équation de Poisson établit la relation entre le potentiel et la densité des porteurs de charge, où ϵ représente la constante diélectrique, V le potentiel, q la charge élémentaire des électrons, N_d et N_a les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisés, et n et p les densités des porteurs de charge. Quant à l'équation de continuité, elle met en jeu n et p comme concentrations d'électrons et de trous, J_n et J_p comme densités de courant d'électrons et de trous, G_n et G_p comme taux de génération d'électrons et de trous, et R_n et R_p comme taux de recombinaison des électrons et des trous. Il convient de noter que les termes de génération et de recombinaison peuvent posséder des expressions complexes, souvent influencées par des facteurs tels que l'éclairement [41].

Le mouvement des porteurs de charge est induit par deux mécanismes principaux : un champ électrique ou un gradient de concentration. Lorsque les porteurs sont soumis à un champ électrique, il en résulte un courant de dérive (ou courant de conduction), dont l'intensité est proportionnelle à celle du champ électrique. Ce phénomène est décrit par les équations de transport [41] : où E représente le champ électrique, et μ_n et μ_p désignent les mobilités des électrons et des trous, respectivement. Par ailleurs, sous l'influence

d'un gradient spatial de la densité des porteurs, ceux-ci se déplacent naturellement des zones de forte concentration vers celles de faible concentration, générant ainsi un courant de diffusion [41] : où D_n et D_p sont les constantes de diffusion pour les électrons et les trous, respectivement. Ces constantes sont liées à la mobilité par la relation d'Einstein [40] : où KB est la constante de Boltzmann et T la température. La densité de courant totale pour les électrons et les trous est obtenue en additionnant ces deux composantes (courant de dérive et courant de diffusion) [41] :

III.3 Notions de base :

Le logiciel SCAPS-1D est structuré en plusieurs modules. Le « panneau d'action » en est l'interface centrale ; il permet aux utilisateurs de définir les paramètres du problème, de choisir et d'initier les calculs, de naviguer entre les différents modules, et d'enregistrer et de visualiser graphiquement les résultats. Des informations complémentaires sur ses fonctionnalités sont disponibles dans le manuel du logiciel [42].

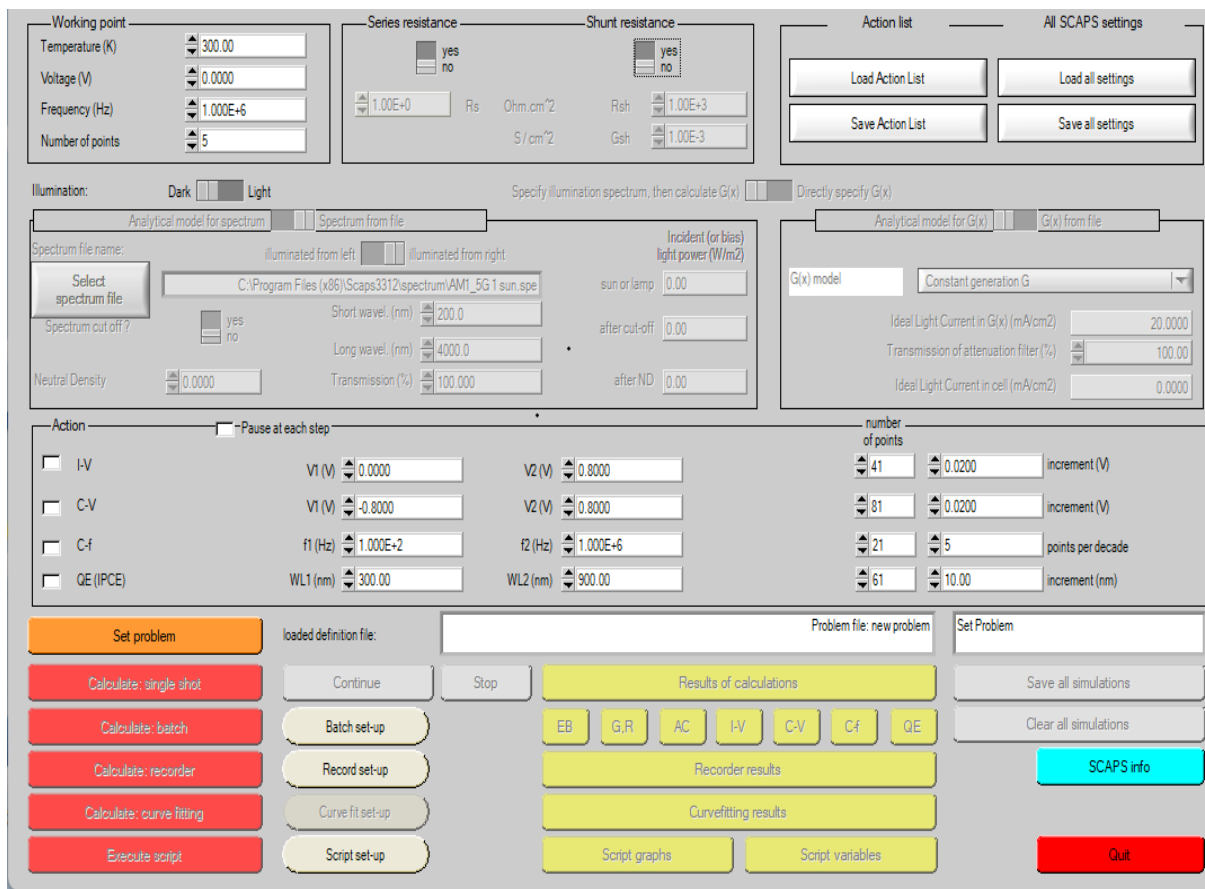


Figure III.1 : Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal

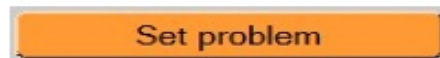
Voici la signification des blocs de 1 à 6 :

1. Lancer SCAPS.
2. Définir le problème, ainsi que la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire étudiée.
3. Indiquer les circonstances dans lesquelles la simulation est effectuée (spécifier le point de fonctionnement).
4. Indiquer la mesure (la caractéristique) à simuler.
5. Commencer le ou les calculs. 6. Afficher les courbes de simulation. Ces étapes sont détaillées ci-dessous.

III.3.1 Lancement de SCAPS

Deux méthodes principales permettent l'initialisation du logiciel SCAPS : l'activation de l'icône de raccourci sur le bureau, ou l'exécution du fichier « SCAPS3310.EXE » (ou d'une version équivalente du programme) directement depuis le gestionnaire de fichiers. Cette opération lance le logiciel et affiche son panneau d'action principal.

III.3.2 Définition du problème :



L'activation du bouton « Set Problem » au sein du panneau d'action ouvre l'interface de définition du problème, désignée comme le Solarcelldefinition panel. Cette interface offre la possibilité de créer une nouvelle configuration de cellule, de sauvegarder les paramètres définis, ou de charger un modèle précédemment enregistré. Le fichier « NUMOS CIGS Baseline.def », par exemple, fournit une configuration standard pour une cellule solaire CIGS. Au sein de ce panneau, toutes les propriétés de la cellule peuvent être ajustées.

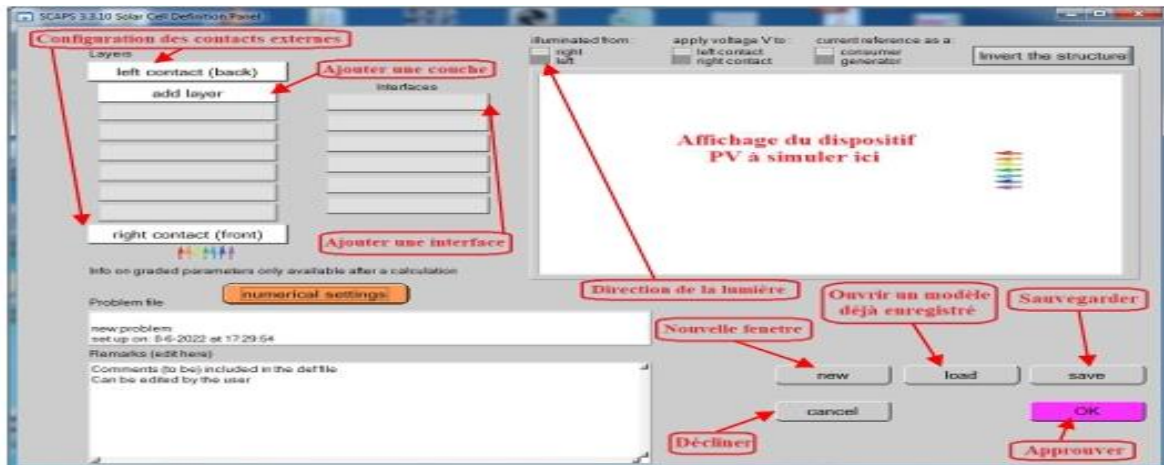


Figure III.2 Panneau de définition d'une cellule solaire.

1. New : afin crée un nouveau dispositif photovoltaïque.
2. Add layer : une fenêtre s'ouvre qui contient des cases à remplir avec des paramètres qui caractérise la couche à étudier, à savoir : le nom de la couche, l'épaisseur, l'énergie de la bande interdite, l'affinité électronique, la permittivité électrique, la mobilité, le type de dopage,... Pour finir on clique sur « Add ».

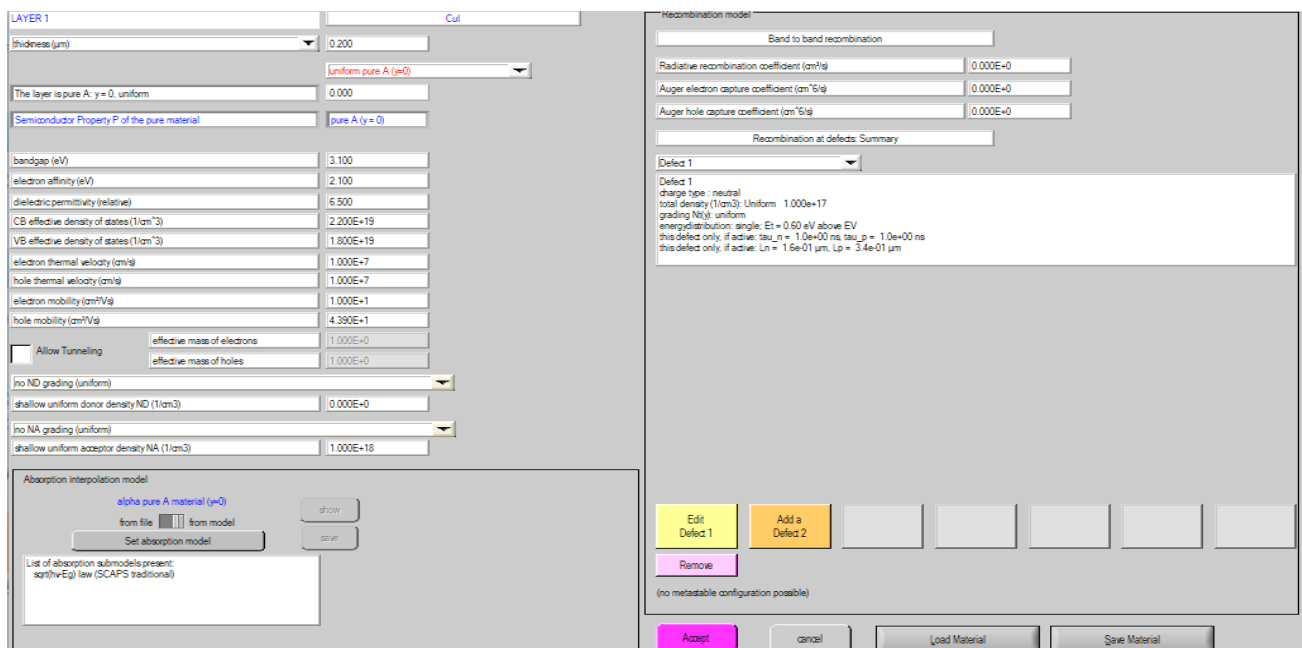


Figure III.3 : Panneau d'ajout et de définition d'une couche

3. Save : afin de sauvegarder la cellule à étudier.
4. Load : afin de sélectionner une cellule déjà sauvegarder.

5. Ok : approuver la cellule construite et revenir au panneau d'action pour finir le travail.
6. Right et left contact : afin de modifier les paramètres des surfaces extérieurs gauche et droite de la cellule.
7. Cancel : décliner le panneau de définition et revenir au panneau d'action.

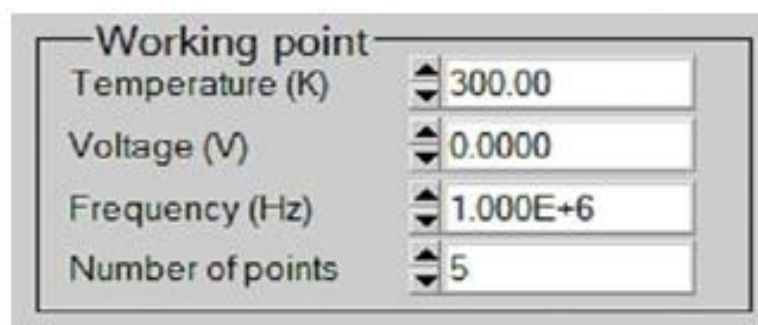
III.3.3 Définir le point de fonctionnement.

Le point de fonctionnement, dans le cadre des simulations, désigne l'ensemble des paramètres non variables qui caractérisent les conditions opératoires d'une mesure.

Parmi ces paramètres figure la température (T), un facteur déterminant pour l'ensemble des mesures. Il convient de noter que dans le logiciel SCAPS, les seules variables présentant une dépendance thermique explicite sont $N_c(T)$, $N_v(T)$, les vitesses thermiques, la tension thermique kT , ainsi que leurs dérivés. L'utilisateur est tenu de renseigner manuellement les paramètres matériels correspondant à chaque valeur de T .

La tension (V) est un autre paramètre du point de fonctionnement. Elle n'est pas pertinente pour les simulations de type courant-tension (I - V) et capacité-tension (C - V). En revanche, elle représente la tension de polarisation continue (DC) employée dans les simulations de capacité en fonction de la fréquence (C - f) et d'efficacité quantique ($QE(\lambda)$). Le processus de simulation SCAPS débute systématiquement à 0 V et progresse jusqu'à la tension du point de fonctionnement, selon un nombre d'étapes à spécifier.

Enfin, la fréquence (f) constitue un paramètre clé. Elle n'intervient pas dans les simulations I - V , $QE(\lambda)$ ou dans les balayages en fréquence (C - f). Son rôle est de définir la fréquence à laquelle une caractéristique capacité-tension (C - V) est simulée.



Working point	
Temperature (K)	300.00
Voltage (V)	0.0000
Frequency (Hz)	1.000E+6
Number of points	5

Figure III.4: Le point de fonctionnement.

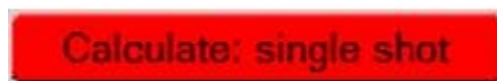
L'illumination constitue un paramètre fondamental pour l'ensemble des mesures. Spécifiquement pour $EQ(\lambda)$, elle est déterminante pour les conditions de polarisation de la lumière. Les paramètres essentiels qui définissent l'illumination comprennent la présence ou l'absence de lumière, le choix de la surface à éclairer, et la spécification du spectre. Par défaut, le spectre d'illumination est un spectre solaire d'une intensité de $1\,000\text{ W/m}^2$, caractérisé par une masse d'air de type 1,5 global. Toutefois, une gamme étendue de lumières monochromatiques et de spectres est également disponible afin de permettre des simulations plus personnalisées. En présence d'un simulateur optique, il devient possible d'intégrer directement un profil de génération préétabli, offrant ainsi une alternative à l'utilisation d'un spectre.

Figure III.5: Les paramètres d'illumination.

III.3.4 Lancer le calcul



III.3.5 Afficher les courbes simulées



Une fois les calculs effectués, le logiciel SCAPS affiche le panneau des diagrammes de bandes énergétiques, comme illustré en Figure 3.6. Ce panneau présente les diagrammes de bandes, ainsi que les densités de porteurs libres et de courant correspondant au dernier point de polarisation simulé. Afin

d'examiner les résultats pour des tensions intermédiaires, il est nécessaire d'activer le bouton "Pause" situé dans le panneau d'action. Les résultats peuvent être affichés via les commandes "SAVE DATA", "SAVE GRAPHS", "SHOW DATA" et "PLOT" (cette dernière étant destinée à l'impression). Les données s'affichent alors à l'écran. Ces valeurs peuvent être copiées et collées dans une application tierce telle qu'Excel, ou sauvegardées dans un fichier de données dédié. Il est également possible de basculer vers un panneau personnalisé défini par l'utilisateur, à condition qu'au moins une opération de mesure ait été simulée préalablement.

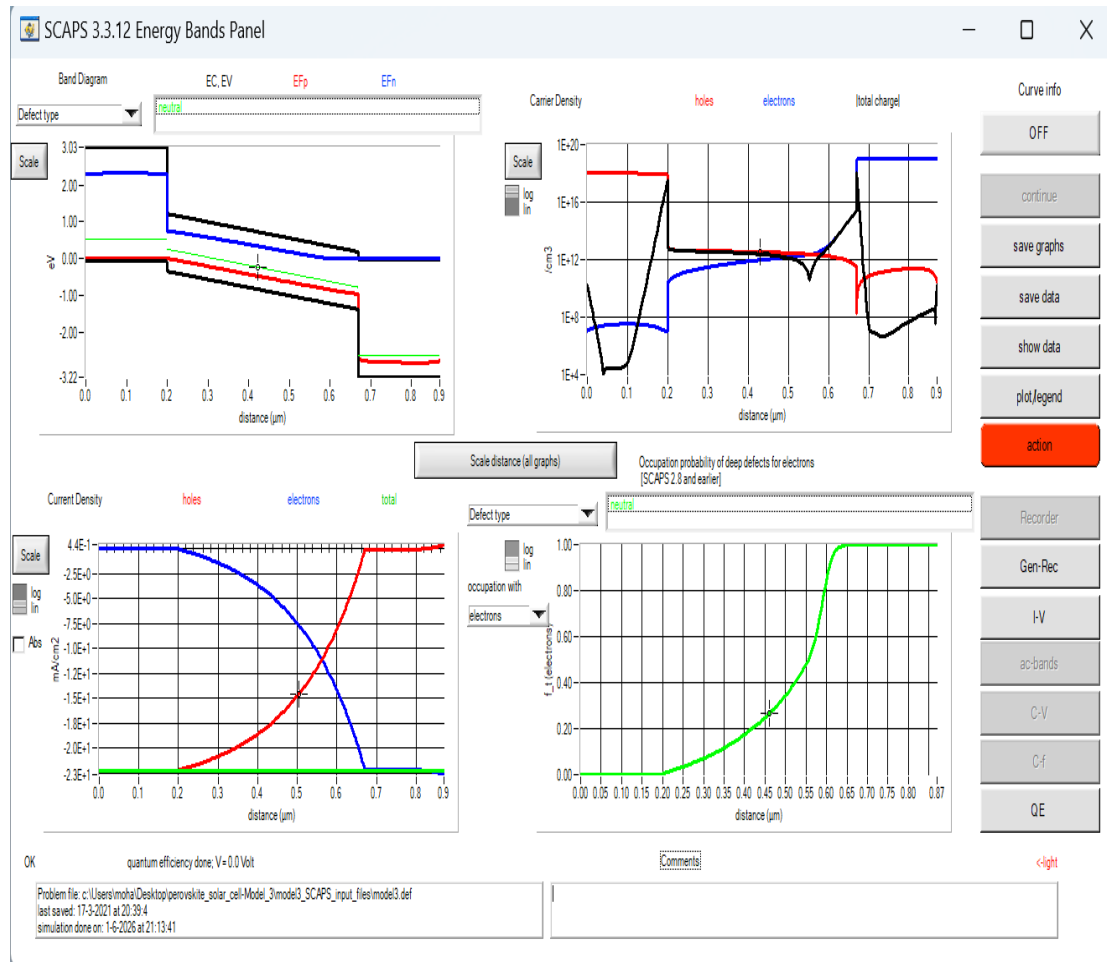


Figure III.6 : Panneau des bandes d'énergie.

III.3.6 La courbe I-V

La courbe 3.6 présente le module d'affichage des courbes courant-tension (I-V), générées tant sous éclairage qu'en obscurité. La couleur associée à la courbe la plus récemment calculée est spécifiée. La

fonction 'CLEAR ALL GRAPHS', accessible depuis le panneau d'action, permet de réinitialiser l'affichage graphique en cas de surcharge. Les courbes des taux de recombinaison sont exclusivement présentées pour la simulation la plus récente. La couleur des éléments de la légende est en concordance avec celle des courbes correspondantes.

L'activation de l'option 'CURVE INFO' permet, par un clic sur une courbe du graphique, d'afficher une fenêtre contextuelle. Celle-ci fournit des informations détaillées relatives au graphique global, à la courbe spécifique sélectionnée et au point de donnée précisément ciblé par l'interaction.

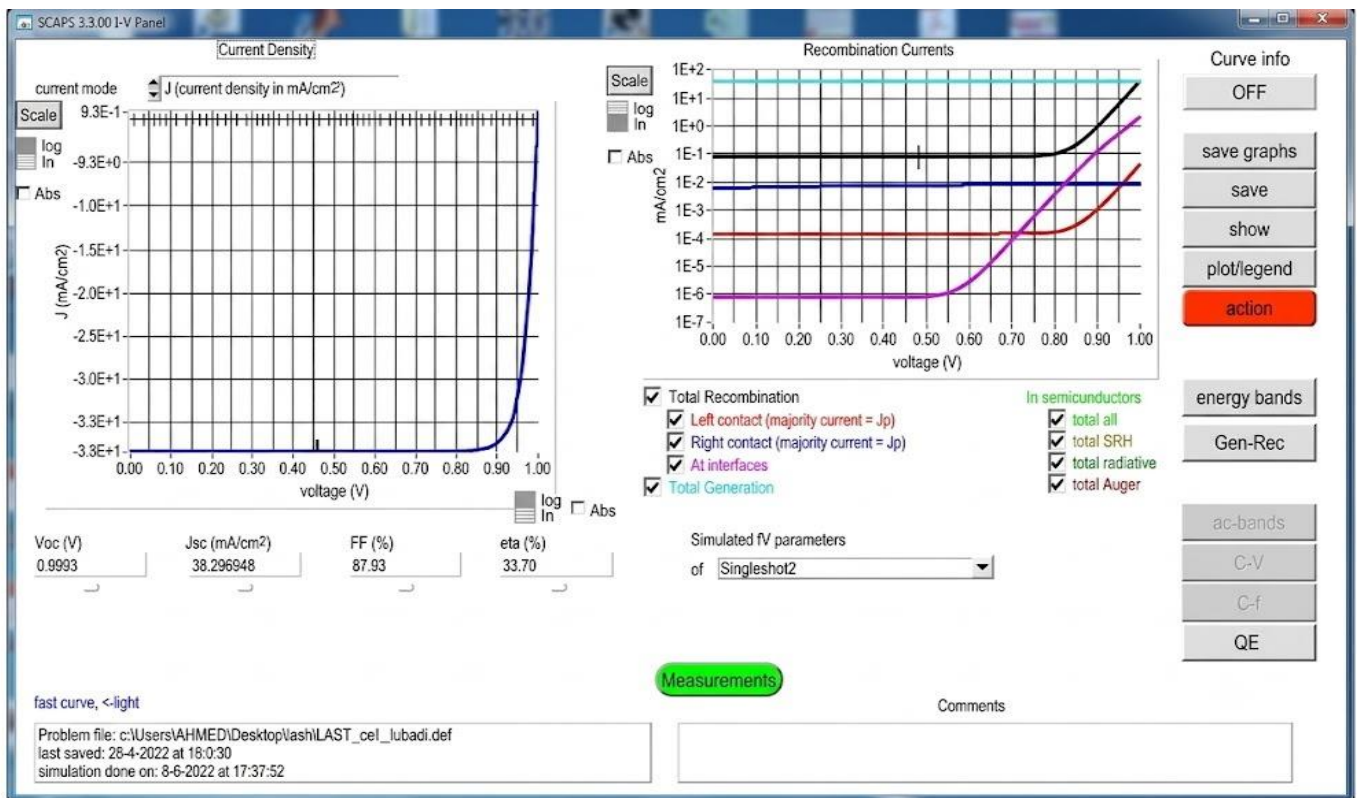


Figure III.7 : Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et en éclaircissement.

III.4 Définition d'une cellule solaire :

Pour la spécification des paramètres d'une cellule solaire, l'utilisation de l'interface graphique du programme est préconisée. Cette approche interactive facilite l'entrée des paramètres, ce qui permet d'éviter la génération de valeurs impossibles ou incohérentes par le logiciel SCAPS.

III.4.1 Édition de la structure d'une cellule solaire :

L'activation du bouton « Set Problème » dans le panneau d'action affiche le panneau « Solar Cell Définition ». Ce panneau permet de créer, de modifier, d'enregistrer ou de charger des structures de cellules solaires à partir de fichiers externes. Ces fichiers de définition sont au format ASCII standard avec l'extension .def et peuvent être consultés avec des éditeurs de texte tels que Notepad.exe ou WordPad.exe. Cependant, toute modification manuelle de ces fichiers est déconseillée, car elle pourrait les rendre inutilisables.

La modification des propriétés des couches, des contacts et de l'interface s'effectue en sélectionnant le bouton correspondant, comme illustré à la figure 3.8. L'ajout de nouvelles couches est également possible via le bouton « ADD LAYER ».



Figure III.8 : Définition de la structure d'une cellule solaire.

III.4.2 Contact

L'amélioration des performances des cellules solaires requiert généralement l'emploi de contacts ohmiques. Dans la présente étude, cette condition a été postulée et vérifiée. La réflexion à la face avant a été considérée comme négligeable afin de prévenir les absorptions parasites, impliquant que la majorité des photons incidents sont absorbés par les matériaux constitutifs. Inversement, la réflexion arrière doit être prise en compte lorsque l'épaisseur est significativement réduite, car certains photons peuvent alors atteindre le contact arrière sans avoir été absorbés. Ce phénomène est observé, par exemple, pour des absorbeurs d'une épaisseur inférieure à 100 nm. Dans le cadre de cette thèse, le coefficient de réflexion de la face arrière a été fixé à 93 % pour intégrer la réflexion totale des couches de la cellule solaire, compte tenu des épaisseurs d'absorbeur inférieures à 100 nm utilisées dans cette étude.

Les contacts présentent des propriétés électriques et optiques. Les propriétés électriques sont définies par les paramètres suivants :

- Les vitesses de recombinaison surfacique des électrons et des trous libres ;
- L'idéalité du contact, caractérisée par un travail de sortie spécifique (régime de bandes plates) ;
- La barrière des porteurs majoritaires ;
- L'effet tunnel, si son inclusion est pertinente.

Concernant les propriétés optiques, la transmission ou la réflexion peuvent être spécifiées par une valeur numérique ou un fichier de données.

III.4.3 Définition des couches :

L'activation du bouton « Ajouter une couche » ouvre une interface (illustrée à la figure 3.11) permettant l'introduction des divers paramètres du matériau. Ces paramètres peuvent présenter une distribution uniforme ou non uniforme, déterminée par les caractéristiques physiques du matériau.

Le premier champ est dédié à la saisie du nom de la couche, lequel correspond au type de dopage. Le second champ permet de spécifier l'épaisseur de la couche. Le troisième bloc est consacré à la pureté et au profil du matériau. Le quatrième bloc est destiné à la définition du gap d'énergie, de l'affinité électronique, de

la permittivité diélectrique, des densités effectives des bandes de conduction et de valence, des vitesses thermiques des électrons et des trous libres, et des mobilités des électrons et des trous. Un champ additionnel est disponible pour spécifier les masses des électrons et des trous, ce qui est réalisé en considérant le transport des porteurs par effet tunnel. Lorsque le matériau est un composé d'éléments dont les concentrations ne sont pas uniformes, l'introduction de variations graduelles des paramètres susmentionnés est possible.

Le cinquième bloc (figure 3.9) est dédié à la définition du dopage, de son type et de sa densité. Le dopage peut être uniforme ou présenter des variations graduelles (linéaires, paraboliques, etc.). Le sixième bloc permet de définir l'absorption de la couche, comme indiqué à la figure 3.9. L'absorption peut être spécifiée au moyen du modèle analytique intégré à SCAPS ou importée sous forme de données. SCAPS propose des données d'absorption pour plusieurs types de semi-conducteurs. Il est également envisageable d'employer des données d'absorption externes pour des semi-conducteurs non répertoriés dans SCAPS, à condition que le format de fichier corresponde à celui des fichiers d'absorption du logiciel.

The screenshot shows the 'Left Contact (Back)' dialog box with the following settings:

- Electrical properties:**
 - Thermionic emission / surface recombination velocity (cm/s):
 - electrons: 1.00E+5
 - holes: 1.00E+7
 - Metal work function (eV): 5.1251
 - Majority carrier barrier height (eV):
 - relative to EF: 0.0749
 - relative to EV or EC: 0.0000
 - ☐ Allow contact tunneling
 - Effective mass of electrons: 1.00E+0
 - Effective mass of holes: 1.00E+0
- Optical properties:**
 - optical filter: ☐
 - Filter Mode: ☒ transmission, ☐ reflection
 - Filter Value: 0.000000
 - Complement of Filter Value: 1.0000E+0
 - From Value: ☐
 - From File: ☐
 - Select Filter File: [button]

Buttons at the bottom: OK (pink), cancel (grey).

Figure III.9: Panneau des propriétés des contacts

LAYER 2		CH3NH3PbI3
thickness (μm)		0.470
		uniform pure A (y=0)
The layer is pure A: y = 0, uniform		0.000
Semiconductor Property P of the pure material		pure A (y = 0)
bandgap (eV)		1.560
electron affinity (eV)		3.900
dielectric permittivity (relative)		10.000
CB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)		2.760E+18
VB effective density of states ($1/\text{cm}^3$)		3.900E+18
electron thermal velocity (cm/s)		1.000E+6
hole thermal velocity (cm/s)		1.000E+6
electron mobility (cm^2/Vs)		1.500E+0
hole mobility (cm^2/Vs)		1.500E+0
☐ Allow Tunneling	effective mass of electrons	1.000E+0
	effective mass of holes	1.000E+0

Figure III.10 : Propriétés de la couche ajoutée.

no ND grading (uniform)	
shallow uniform donor density ND ($1/\text{cm}^3$)	0.000E+0
no NA grading (uniform)	
shallow uniform acceptor density NA ($1/\text{cm}^3$)	1.000E+11

Figure III.11 : Propriétés des dopages définis..

L'indication du type de recombinaisons en volume présent est fournie à droite du panneau des propriétés de la couche Figure (3.11). Tous les types de recombinaisons sont présents, qu'elles soient directes ou indirectes.

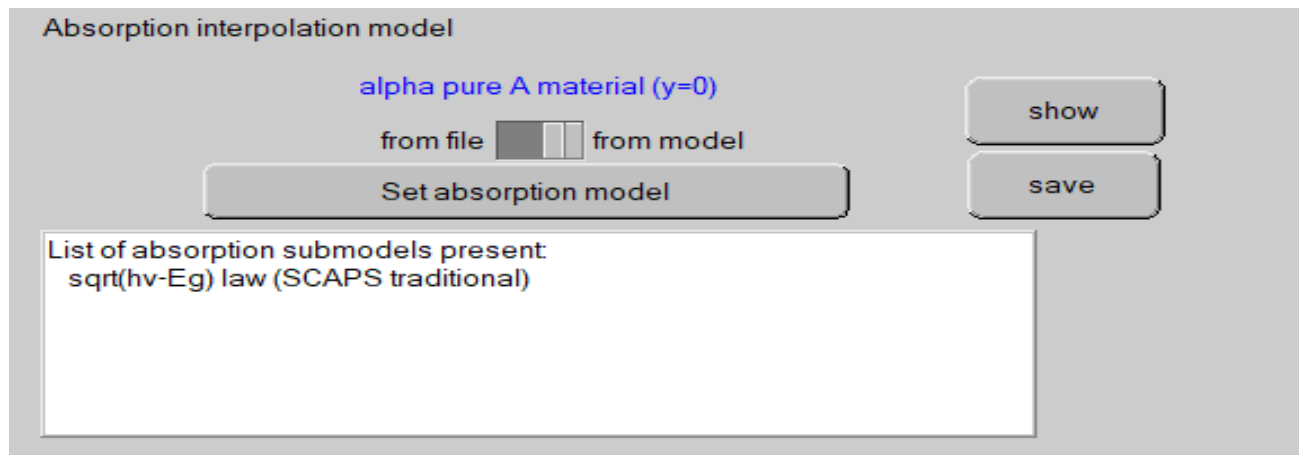
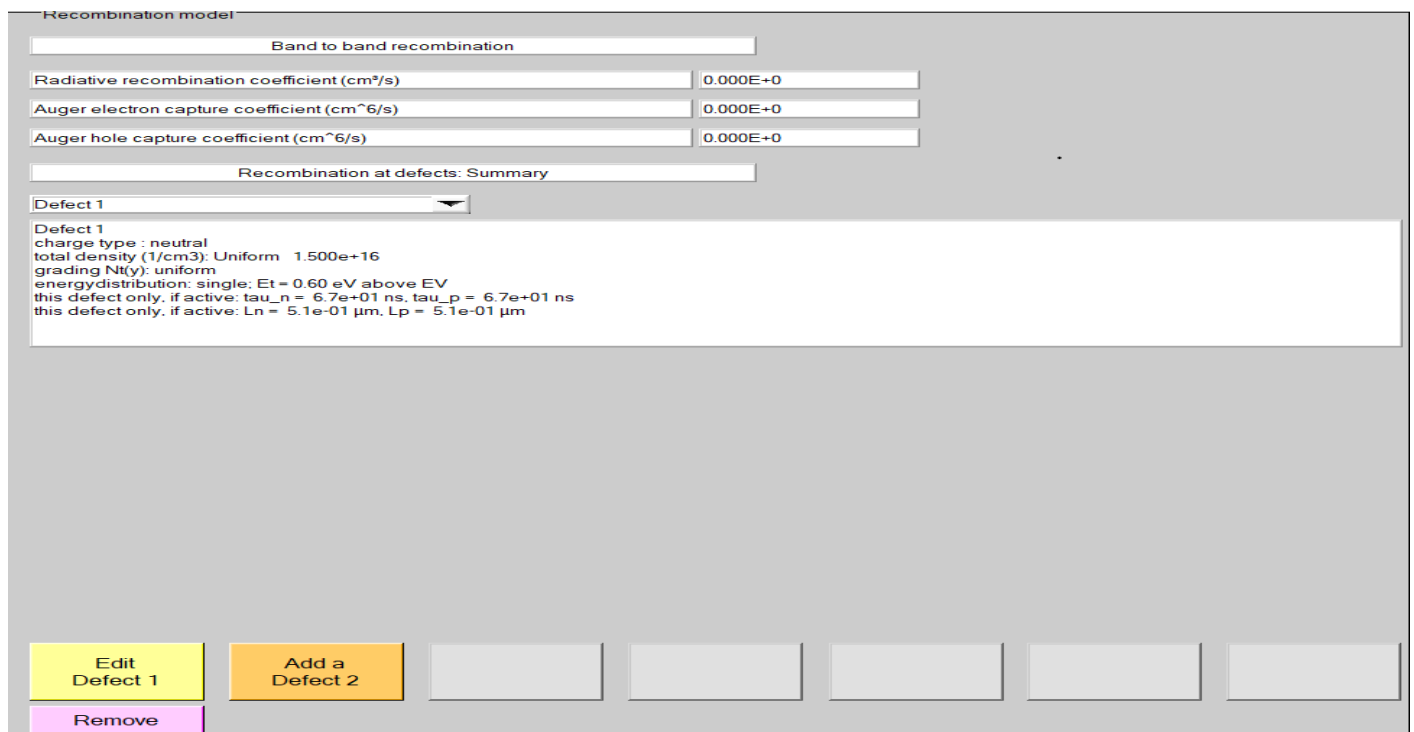


Figure III.12 : Modèle de l'absorption.

La nature des combinaisons en volume affichée est précisée à droite du panneau des caractéristiques de la couche Figure (3.12). Tous les types de recombinaisons sont présents, qu'elles soient directes ou indirectes.



Defect 1 of CH₃NH₃PbI₃

defect type	Neutral
capture cross section electrons (cm ²)	1.000E-15
capture cross section holes (cm ²)	1.000E-15
energetic distribution	Single
reference for defect energy level Et	Above EV (SCAPS < 2.7)
energy level with respect to Reference (eV)	0.600
characteristic energy (eV)	0.100

no Nt grading (uniform)

Nt total (1/cm³) uniform Nt 1.500E+16

Optical capture of electrons ☐ From model ☒ From file

refractive index (n)	3.000
effective mass of electrons (rel.)	1.000E+0
effective field ratio	1.00E+0
cut off energy (eV)	10.00
optical electron capture cross sections file:	

Figure III.13 : Définition des types de recombinaison et des défauts.

Les défauts, également désignés sous le terme de pièges, peuvent se caractériser par diverses propriétés : ils peuvent être uniformes ou non uniformes, présenter une nature discrète ou des distributions gaussiennes, et se manifester comme des donneurs, des accepteurs, des centres neutres, monovalents ou divalents. La modélisation peut par ailleurs inclure les transitions de porteurs entre les différents niveaux d'énergie de ces pièges.

III.5 Limites d'utilisation du SCAPS

Le simulateur SCAPS présente plusieurs avantages significatifs. Sa rapidité d'exécution est notable, de même que l'accessibilité des fichiers d'entrée au format texte, facilitant la manipulation des données spectrales et des paramètres du dispositif par l'utilisateur. Le modèle intègre les interfaces et les phénomènes de recombinaison, ainsi que les résistances série et shunt. Il permet en outre la détermination des caractéristiques capacité-tension et capacité-fréquence.

Néanmoins, certaines limitations sont associées à l'utilisation du SCAPS. Le modèle suppose une ionisation complète des dopants, indépendamment de la température, et repose exclusivement sur la statistique de Maxwell-Boltzmann. Il ne permet pas la simulation des semi-conducteurs dégénérés. Par ailleurs, il restreint les mécanismes de recombinaison pris en compte à trois catégories : la recombinaison radiative, celle d'Auger, et la recombinaison indirecte via un défaut ou un centre recombinant.

Conclusion

SCAPS-1D est un logiciel couramment employé pour la simulation numérique unidimensionnelle des dispositifs photovoltaïques. Son fonctionnement repose sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et des équations de continuité des électrons et des trous. Son interface accessible et sa facilité d'emploi en font un instrument pertinent pour l'étude et l'optimisation des cellules solaires. Ce chapitre présente une description détaillée du principe de fonctionnement de ce simulateur, de ses modules, des étapes de définition de la structure, ainsi que des fonctionnalités d'analyse et de visualisation des résultats. Pour illustrer les capacités de ce logiciel, une simulation d'une structure classique de cellule solaire à base de CIGS a été réalisée. Le chapitre suivant abordera la présentation de la structure étudiée, les résultats des performances photovoltaïques obtenus par simulation, et leur discussion.

Chapitre IV :

Discussion des résultats

Introduction :

Les outils de simulation occupent aujourd'hui une place centrale en recherche appliquée, particulièrement dans le domaine photovoltaïque. Leur capacité à prédire le comportement des matériaux avant synthèse offre un avantage décisif : optimiser les ressources tout en accélérant le développement technologique. L'étude d'optimisation réaliser dans ce travail a été réalisé a l'aide du logiciel SCAPS-1D afin révéler les potentialités d'une cellule solaire pérovskite à base de ZnO/CH₃NH₃PbI₃/CuI, en ciblant spécifiquement l'optimisation des couches clés. L'objectif principal de cette étude est de comprendre l'impact de certains paramètres physiques, notamment l'épaisseur des couches ETL , HTL et pérovskite , ainsi que les concentrations de dopage des couche ZnO et CuI (la couche pérovskite étant exclu de cette analyse car cette dernier et de nature intrinsèque) sur les propriétés photovoltaïques de la cellule. A savoir la tension en circuit ouvert (V_{co}), le courant de court-circuit (I_{cc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (EFF).

nous avons réalisé durant ce projet une série de simulations afin d'identifier la structure optimale assurant les meilleures performances. Les résultats obtenus et les discussions détaillées seront présentés dans ce chapitre ainsi que d'éventuelles perspectives.

IV. 1 Présentation de la cellule solaire photovoltaïque étudiier :

L'objectif principal de cette étude était d'optimiser les performances d'une cellule solaire réalisé à partir d'une structure NIP constituer du **ZnO Oxyde de Zinc** : Couche semi-conductrice de type (N). Elle joue le rôle de **couche de transport d'électrons** (ETL - Electron Transport Layer). Ce matériau est transparent et permet de collecter les électrons générés par l'absorbeur .ainsi que **(CH₃NH₃PbI₃)** un matériau intrinsèque (I) et absorbeur de lumière, constitué d'une structure de type **pérovskite hybride**. Dans la littérature, il est souvent abrégé par **MAPbI₃**. C'est le cœur de la cellule qui absorbe les photons pour créer des paires électron-trou. Et pour finir **(CuI) (Iodure de Cuivre)** : Couche semi-conductrice de type (P), jouant le rôle de **couche de transport de trous** (HTL - Hole Transport Layer). Elle permet de collecter les charges positives (trous) et de bloquer le passage des électrons vers l'électrode opposée.

L'analyse repose sur trois couche constituante la cellule à savoir : la couche ETL (ZnO), la couche HTL (CuI) et la couche pérovskite (NH₃CH₃PbI₃).

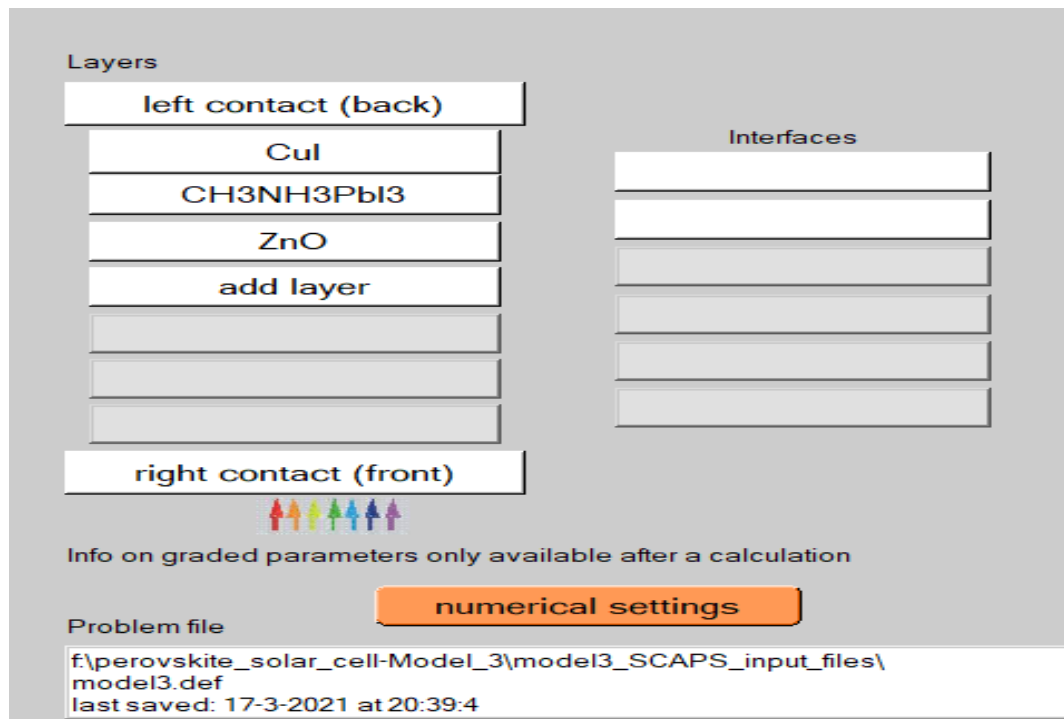


Figure IV- 1 : Architecteur de la cellule solaire pérovskite simulée avec le SCAPS-1D.

Les paramètres physiques attribués à chaque couche de la cellule solaire, tels qu'intégrés dans l'environnement de simulation du logiciel **SCAPS-1D**, sont détaillés dans le **Tableau IV-1** ci-dessous :

Paramètre	ZnO	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	CuI
Epaisseur (μm)	0.2-04	0.3- 0.5	0.2-0.24
Permittivité(ev)	8.100	10	6.5
Bande interdite(eV)	3.200	1.560	3.1
Affinités des électrons χ (ev)	4.100	3.900	2.100
Densité d'effective Nc (cm ⁻³)	4.500 ^e +18	2.760 ^e +18	2.200 ^e +19
Densité d'effective Nv (cm ⁻³)	1.000 ^e +18	3.900 ^e +18	1.800 ^e +19
Mobilité des électrons Un (cm ² .v ⁻¹ .s ⁻¹)	300	1.500	1
Mobilité des électrons Up (cm ² .v ⁻¹ .s ⁻¹)	1	1.500	4.390
Densité de dopage Nd(cm ⁻³)	1e17-1 ^e 19	0	0
Densité de dopage Na(cm ⁻³)	0	0	1 ^e 16-1 ^e 18

Tableau VI-1 : Paramètres de la cellule solaire utilisés dans le logiciel SCAP-1D

Nous avons inséré toutes les paramètres physiques, électriques et optique propres à chaque couche, en s'appuyant sur des données fiables issues de la littérature, afin de garantir la précision des résultats de la simulation et d'approfondir la compréhension de l'effet de l'épaisseur et de la concentration de dopage sur les performances de la cellule.

IV. 2 Le Procéder de la simulation de la cellule solaire perovskite :

Pour évaluer le rôle des paramètres initialement fixes sur le comportement de la cellule, chaque variable a été étudié séparément selon une démarche d'exclusion. Les autres facteurs restaient figés lors de chaque simulation afin d'isoler leurs effets individuels. L'étude couvre spécifiquement :

1. **Épaisseur de la couche ETL en ZnO** : simuler dans la gamme allant de 0.2 μm à 0.4 μm .
2. **Concentration de dopage du ZnO** : ajuster entre $1\text{e}17$ et $1\text{e}19 \cdot 10^{-3}$.
3. **Épaisseur de la couche HTL en CuI** : simuler dans la gamme allant de 0.2 μm à 0.4 μm .
4. **Concentration de dopage du CuI** : ajuster entre $1\text{e}16$ et $1\text{e}18 \text{ cm}^{-3}$.
5. **Épaisseur de la couche perovskite en $\text{NH}_3\text{CH}_3\text{PbI}_3$** : simuler dans la gamme allant de 0.3 μm à 0.5 μm .

IV.3 Résultats et discussion :

IV.3.1 L'effet de l'épaisseur de la couche ETL en ZnO :

Lors de cette première étape de notre étude d'optimisation nous fait varier l'épaisseur de la couche ETL à base de ZnO dans la gamme de 200 à 400 nm toujours à l'aide du logiciel **SCAPS-1D**, et nous avons abouti aux résultats suivant illustré dans la Figure IV-1 et le Tableau IV-2 :

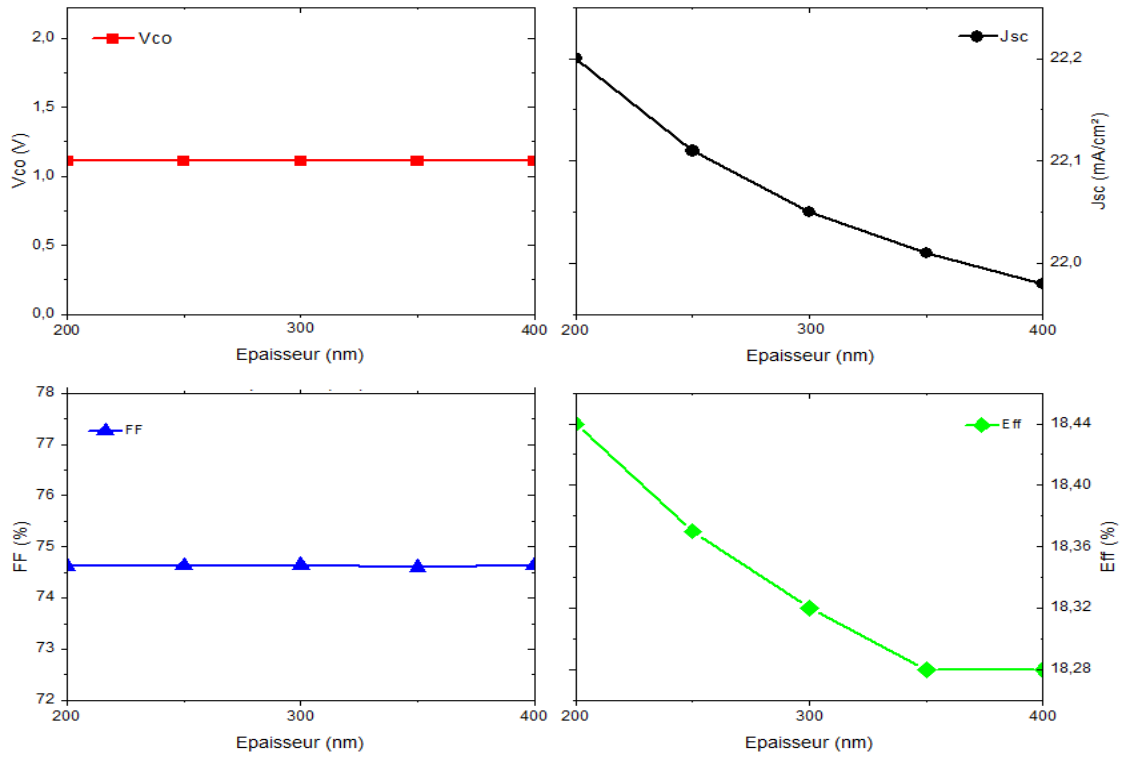


Figure IV-2 : Caractéristiques de la cellule solaire à base perovskite : V_{co} , I_{cc} , FF et EFF pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche ETL (ZnO)

Epaisseur du CdS(nm)	200	250	300	350	400
$V_{co}(V)$	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11
$I_{cc}(mA/cm^2)$	22.20	22.11	22.05	22.01	21.98
FF (%)	74.62	74.63	74.64	74.64	74.64
EFF (%)	18.44	18.37	18.32	18.28	18.26

Tableau IV-2 : Paramètres de sortie photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire perovskite en fonction de l'épaisseur de la couche ETL en ZnO.

La simulation effectuée à révéler que l'épaisseur de la couche ETL joue un rôle déterminant dans la qualité de la jonction formée avec le pérovskite. En effet, lorsque la couche de ZnO devient plus épaisse, on observe une baisse du courant de court-circuit (J_{sc}), car une plus grande partie des photons sont absorbée par le ZnO au lieu d'atteindre la couche absorbante en $CH_3CH_3PbI_3$, limitant ainsi la création de paires électron-trou.

À l'inverse, si la couche de ZnO est trop fine, cela peut provoquer des imperfections à la jonction et favoriser l'apparition de courants de fuite, ce qui nuit à la tension de circuit ouvert (V_{co}) ainsi qu'à la performance globale du dispositif. Les résultats obtenu favorise l'utilisation qu'une épaisseur de l'ordre de 200 nm ce qui devrais constituer un bon compromis, permettant d'obtenir une jonction de qualité tout en assurant une collecte efficace de la lumière.

IV.3.2 L'effet de la concentration du dopage (ZnO) :

A partir de la simulation présentant nous avons fixé l'épaisseur de la couche ZnO à 200 nm et nous avons entamer la variation de la concentration de dopage du ZnO, tout en conservant les autres paramètres inchangés, Les résultats obtenus sont résumés dans un *Tableau IV-3* présentant séparément les valeurs de chaque paramètre. Ces données sont accompagnées de courbes graphiques illustratives, comme indiqué dans la *Figure IV-2*.

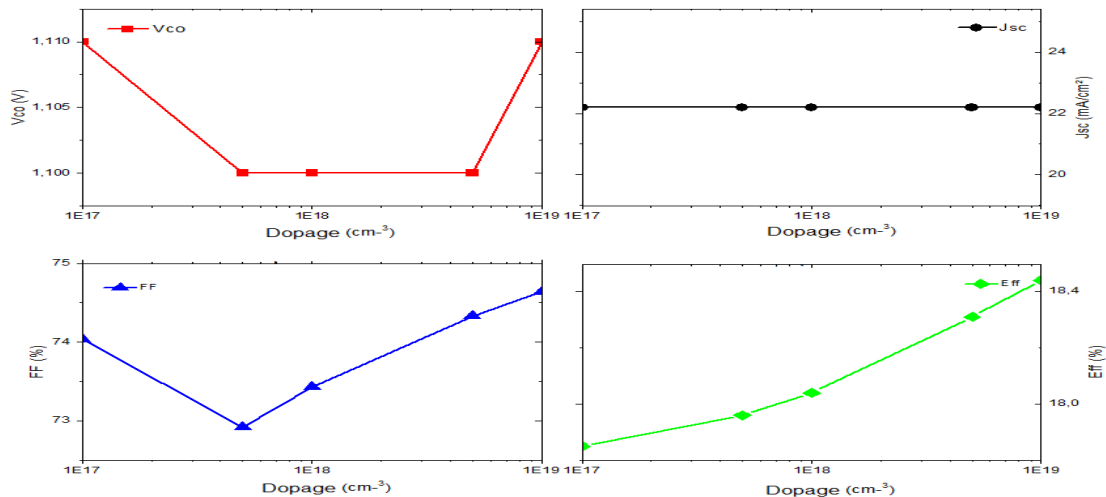


Figure IV-3 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire à pérovskite en fonction de la concentration du dopage de la couche de ZnO .

Dopage (cm ⁻³)	1 E17	5 E17	1 E18	5 E18	1 E19
V _{co} (V)	1.11	1.10	1.10	1.10	1.11
I _{cc} (mA/cm ²)	22.20	22.20	22.20	22.20	22.20
FF (%)	72.04	72.92	73.43	74.33	74.64
EFF (%)	17.85	17.96	18.04	18.31	18.44

Tableau IV-3 : Influence de la concentration du dopage du ZnO sur V_{co}, I_{cc}, FF et EFF.

Les résultats ont démontré que le V_{co} et l'I_{cc} sont restés relativement stables malgré les variations de la concentration de dopage. Cela indique la couche ETL, jouant le rôle de couche fenêtre, c'est-à-dire qu'elle n'influence pas directement la génération du courant ou la tension, mais impacte principalement la qualité du transport des porteurs de charge.

Cependant une concentration de dopage plus importante améliore la conductivité de la couche ETL et favorise la séparation des charges, ce qui fait augmenter l'efficacité de conversion (EFF) ainsi que le facteur de forme (FF). Les résultats de simulation démontrent qu'il existe un dopage optimal de l'ordre de 1e19 cm⁻³, permettant d'optimiser la qualité de la couche ETL (ZnO) sans introduire de défauts structuraux importants.

IV.3. 3 L'effet de l'épaisseur de la couche HTL en CuI :

Après avoir déterminé une épaisseur d'ETL de 200 nm ainsi qu'une concentration de 1 e 19 comme étant optimale. Nous nous intéressant maintenant à la couche HTL en CuI.

Une Simulation a été réalisé pour étudier l'effet de l'épaisseur dans la gamme [200-400 nm] les résultats ont été obtenus et sont présentés dans la Figure IV-4, ainsi que dans le Tableau IV-4 :

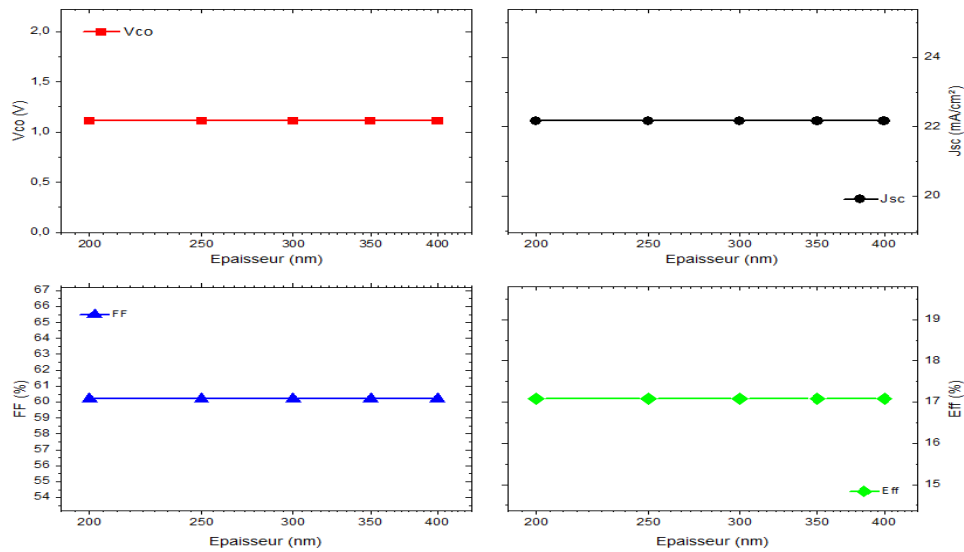


Figure IV-4 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de la couche de HTL (CuI).

Epaisseur (nm)	200	250	300	350	400
V_{co} (V)	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11
I_{cc} (mA/cm^2)	22.17	22.17	22.17	22.17	22.17
FF(%)	69.20	69.20	69.20	69.20	69.20
EFF(%)	17.08	17.08	17.08	17.08	17.08

Tableau IV-4 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire.

D'après La simulation numérique nous constatons que la tension en circuit ouvert se stabilise malgré les variations d'épaisseur au allons tour de 1.11 V. Cette stabilité indique que ce paramètre est **totalelement insensible** à l'épaisseur du HTL. Il est connu dans la littérature que le V_{co} est gouvernée par la séparation des quasi-niveaux de Fermi dans l'absorbeur (pérovskite), indépendamment de l'épaisseur du CuI. Le courant de court-circuit ne subit aucune variation indiquant que la couche HTL **n'intercepte pas de photons utiles**. Toute la génération de courant se produit dans la pérovskite. L'épaisseur du CuI n'affecte donc pas la collection optique. Tandis que le facteur de forme présente une faible valeur de 69,20 Cela représente l'effet négatif des résistances internes ou recombinaisons parasites, qui entravent le transport efficace des porteurs.

Le rendement de conversion suit logiquement cette tendance, avec une efficacité de conversion relativement faible de 17,08 %.

Après l'expertise réaliser nous somme arriver a la conclusion que l'épaisseur de la couche HTL n'affecte pas vraiment les performances de la cellule étudiier contrairement au dopage de cette dernière ce que nous allons présenté de la partie suivante

IV.3.4 L'effet de la concentration du dopage HTL (CuI) :

Dans cette partie de notre travail nous avons exploré l'influence de la concentration du dopage de la couche HTL. Les résultats obtenus sont représentés dans la Figure IV-5 et résumés dans le Tableau IV-5 :

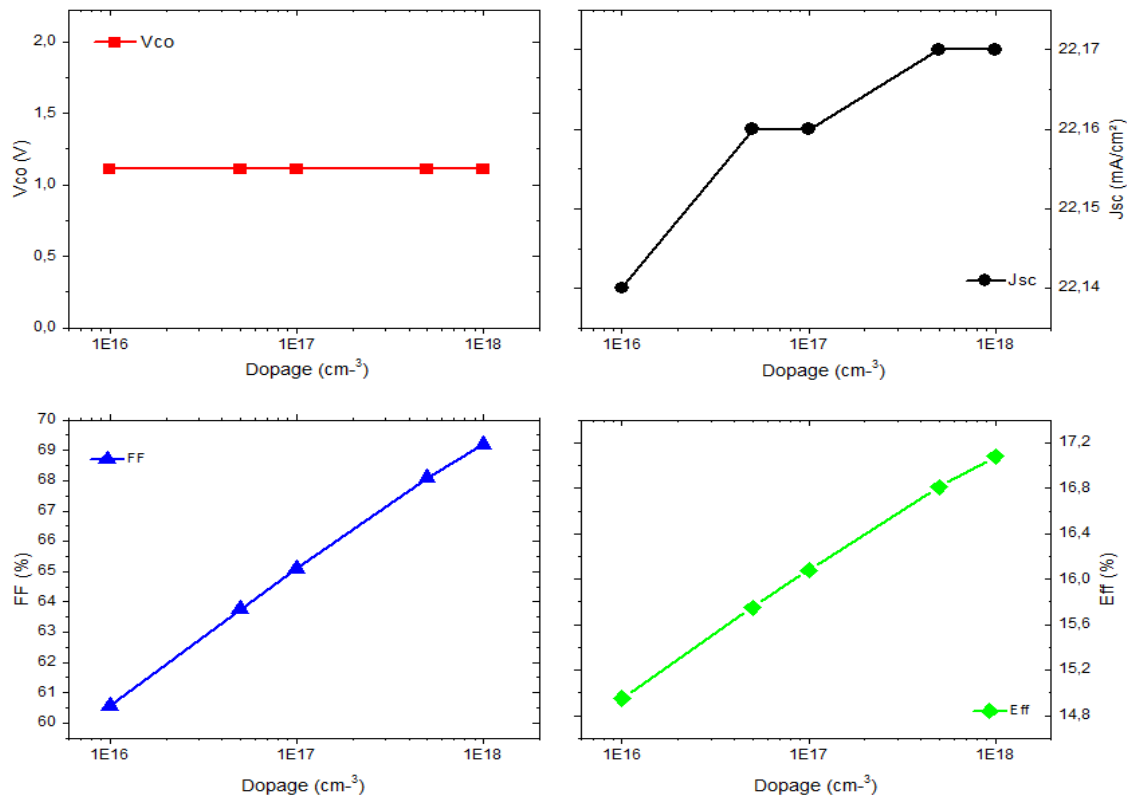


Figure IV-5 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF, EFF) de la cellule solaire pérovskite en fonction du dopage de la couche de HTL.

Dopage (cm ⁻³)	1E16	5E16	1E17	5E17	1E18
Vco (V)	1.11	1.11	1.11	1.11	1.11
Jcc (mA/cm ²)	22.14	22.16	22.16	22.17	22.17
FF(%)	60.58	63.76	65.11	68.08	69.20
EFF(%)	14.95	15.75	16.08	16.81	17.08

Tableau IV-5 : Présente les caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , I_{cc} , FF , EFF) de la cellule solaire photovoltaïque.

Dans cette étude, l'effet de la variation de la concentration de dopage dans la couche HTL en CuI sur les performances de la cellule solaire a été analysé à travers les paramètres sortis : la tension en circuit ouvert (V_{co}), le courant de court-circuit (I_{cc}), le facteur de forme (FF) et l'efficacité de conversion (Eff). Tous les autres paramètres ont été conservés constants, tandis que la concentration de dopage a été ajustée dans la plage de $1 \text{ E}16 \text{ cm}^{-3}$ à $1 \text{ E}18 \text{ cm}^{-3}$.

Les résultats ont indiqué une stabilité notable de la tension V_{co} , qui est de 1,11 V en raison V_{co} dépend principalement du **quasi-niveau de Fermi** de la couche absorbante (pérovskite), et non de la couche HTL (CuI). En revanche, le courant de court-circuit I_{cc} a légèrement augmenté avec l'augmentation du dopage, passant de 22,14 mA/cm² à 22,17 mA/cm². Cette augmentation peut s'expliquer par l'amélioration du **champ électrique interne** à l'interface CuI/pérovskite : un dopage plus élevé dans le HTL renforce la jonction entre HTL/pérovskite, ce qui améliore la **collection des porteurs photo-générés** (trous en particulier). La variation reste faible car c'est la pérovskite qui absorbe la lumière, pas le CuI. Le facteur de forme FF a connu une amélioration notable, passant de 60,58 % à 69,20 %, ce qui reflète une diminution des pertes internes, notamment au niveau de la résistance série, et une amélioration globale du transport des porteurs.

Concernant le rendement de conversion, celui-ci a connu une nette augmentation, atteignant un maximum de 17,08 % pour une concentration de dopage de $1 \text{ E}18 \text{ cm}^{-3}$ est portée presque entièrement par l'amélioration du facteur de forme. Cela confirme que le **dopage du CuI est un paramètre d'optimisation clé** pour cette structure.

IV.3.5 L'effet de l'épaisseur de la couche pérovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) :

Après avoir étudié l'influence des épaisseurs des couches ETL et HTL et des concentrations de dopages de ces deux dernières, nous terminions ce travail par une simulation afin d'évaluer l'influence de l'épaisseur de la couche pérovskite dans la gamme [300-500 nm] , étant donné que les structures des pérovskite sont de nature NIP a savoir un pérovskite intrinsèque l'influence du dopage de cette couche n'as pas été étudié. Les résultats ont été obtenus et sont présentés dans la Figure IV-6, ainsi que dans le Tableau IV-6 :

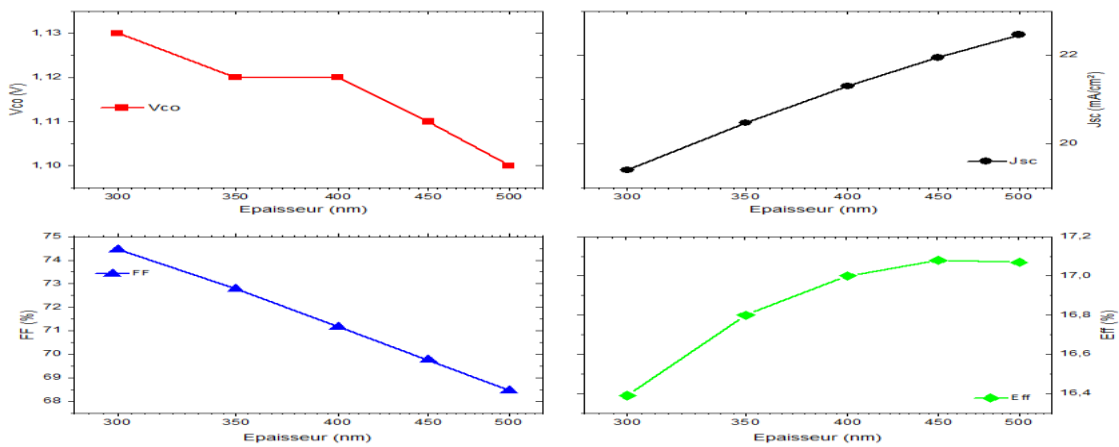


Figure IV-6 : Caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , J_{sc} , FF, EFF) de la cellule solaire pérovskite en fonction de l'épaisseur de la couche pérovskite.

Epaisseur (nm)	300	350	400	450	500
V_{co} (V)	1.13	1.12	1.12	1.11	1.10
J_{sc} (mA/cm^2)	19.40	20.47	21.30	21.95	22.47
FF(%)	74.46	72.79	71.17	69.76	68.47
EFF(%)	16.39	16.80	17.00	17.08	17.07

Tableau IV-6 : Les caractéristiques photovoltaïques (V_{co} , J_{sc} , FF, EFF) de la cellule solaire.

Photovoltaïque suivant la variation de l'épaisseur de la couche pérovskite. L'analyse des quatre paramètres photovoltaïques en fonction de l'épaisseur de la couche absorbante de pérovskite, variant de 300 à

500 nm, révèle un comportement cohérent sur le plan physique, conduisant à un optimum d'efficacité bien défini.

On observe une diminution progressive et constante du V_{co} , qui passe de 1,13 V à 300 nm à 1,10 V à 500 nm. Ce comportement s'explique par l'augmentation de la quantité de la matière de la couche absorbante, qui s'accompagne d'une hausse du taux de recombinaison volumique des porteurs de charge. En effet, dans une couche plus épaisse, les porteurs photo-générés loin de la jonction ont un chemin de diffusion plus long à parcourir avant d'être collectés, ce qui augmente la probabilité de recombinaison radiative et non-radiative. Cette hausse des recombinaisons se manifeste concrètement par une diminution de la séparation des quasi-niveaux de Fermi, ce qui engendre une baisse de V_{co} . Ce phénomène est amplement documenté dans la littérature scientifique concernant les cellules pérovskite et représente le principal désavantage d'un absorbeur dont l'épaisseur est excessive. La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) augmente quant à elle de façon pratiquement constante, passant de 19,3 mA/cm² à 300 nm à environ 22,3 mA/cm² à 500 nm. Cette tendance est physiquement intuitive : une couche absorbante plus épaisse capte davantage de photons incidents, en particulier ceux de faible énergie (longueurs d'onde élevées), qui nécessitent un trajet optique plus long pour être absorbés. L'augmentation de l'épaisseur améliore donc directement l'absorption optique, ce qui génère davantage de paires électron-trou et un courant de court-circuit plus élevé. Cette progression régulière de J_{sc} reflète le fait que la pérovskite CH₃NH₃PbI₃ possède un coefficient d'absorption élevé.

Le facteur de forme (FF) suit une tendance décroissante marquée, chutant de 74,5 % à 300 nm à environ 68,7 % à 500 nm. Cette dégradation traduit une détérioration de la qualité du transport de charge au sein de la cellule. À mesure que l'épaisseur augmente, la résistance série effective de la couche absorbante augmente, et les porteurs de charge doivent diffuser sur de plus grandes distances, ce qui accroît les pertes par recombinaison avant collection. Le champ électrique interne, de valeur finie, devient moins efficace pour séparer et drainer les porteurs sur toute l'épaisseur de l'absorbeur. L'efficacité de conversion (Eff) résulte du compromis entre ces effets opposés. Elle augmente d'abord rapidement de 16,4 % à 300 nm, puis atteint un pic d'environ 17,1 % entre 450 et 500 nm. La progression initiale est dominée par l'augmentation du J_{sc} , qui compense la dégradation simultanée du V_{co} et du FF. Au-delà de 450 nm, la progression est toutefois beaucoup plus marquée : les gains supplémentaires en J_{sc} sont quasiment compensés par les pertes en FF et en V_{co} , ce qui indique que la cellule atteint un optimum d'efficacité vers 450-500 nm.

Conclusion :

Ce chapitre présente une analyse numérique effectuée sur une cellule photovoltaïque de type pérovskite utilisant le $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ comme matériau d'absorption. La simulation a examiné l'impact de l'épaisseur des couches active ainsi que des concentrations de dopage des couches ETL et HTL sur le rendement de la cellule. Notre investigation nous a permis de conclure que la couche de transport de trous CuI , n'a aucune influence mesurable sur les paramètres photovoltaïques. La tension en circuit ouvert, la densité de courant de court-circuit, le facteur de forme et l'efficacité restent parfaitement stables sur cette plage. Ce comportement s'explique par le rôle passif du CuI en termes d'absorption optique, ainsi que par sa conductivité suffisante pour assurer le transport des trous sans résistance série limitant, quelle que soit son épaisseur dans cette gamme. Ce qui est intéressant en point de vue coût car cela indique qu'une épaisseur minimale de 200 nm peut être adoptée sans compromettre les performances, ce qui simplifie le procédé de fabrication en revanche l'influence du dopage de cette couche a été bien remarquée par l'amélioration du **champ électrique interne** à l'interface CuI /pérovskite : un dopage plus élevé dans le HTL renforce la jonction entre HTL/pérovskite, ce qui améliore la **collection des porteurs photo-générés** (trous en particulier). Le même impact a été remarqué sur l'effet du dopage de la couche ETL (ZnO) une concentration de dopage plus importante induit une amélioration de la conductivité de la couche ETL et favorise la séparation des charges, ce qui fait augmenter l'efficacité de conversion (EFF) ainsi que le facteur de forme (FF). mais une épaisseur moins importante de cette couche permet à plus de photons d'atteindre la couche absorbante. Quant à la couche absorbante de pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, son épaisseur introduit un compromis physique fondamental entre deux mécanismes opposés. D'une part, l'augmentation de l'épaisseur de 300 à 500 nm améliore progressivement l'absorption optique et fait croître la densité de courant de court-circuit, qui passe de 19,3 à 22,3 mA/cm^2 , conformément à la loi de Beer-Lambert. D'autre part, cette même augmentation d'épaisseur détériore le transport des porteurs de charge, ce qui se manifeste par une baisse de la tension V_{oc} de 1,13 à 1,10 V et une chute du facteur de forme de 74,5 % à 68,7 %.

De manière plus générale, ces conclusions en ont abouti à mettre en valeur la place stratégique occupée par la simulation et les outils de simulation dans le monde technologique actuelle, ces résultats témoignent de l'efficacité notable de l'importance d'optimiser les épaisseurs et les taux de dopage pour rehausser les performances photovoltaïques.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

Ce travail de fin d'études a été consacré à la modélisation et à l'optimisation numérique unidimensionnelle d'une cellule solaire à couches minces de troisième génération à base de matériau pérovskite. Pour mener à bien cette étude, nous avons exploité le logiciel de simulation **SCAPS-1D**, un outil performant pour analyser le comportement physique et électrique des structures photovoltaïques complexes.

L'objectif principal de notre simulation consistait à évaluer l'influence des paramètres géométriques et électroniques des différentes couches sur les performances photovoltaïques globales du dispositif, à savoir la tension en circuit ouvert (V_{co}), la densité de courant de court-circuit (J_{sc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η).

Les étapes majeures de ce travail et les conclusions qui en découlent se résument comme suit :

1. **Étude et optimisation de l'absorbeur Pérovskite ($CH_3NH_3PbI_3$)** : L'analyse de la variation de l'épaisseur de la couche absorbante a révélé un compromis physique critique. L'augmentation de l'épaisseur de 300 à 500 nm permet d'élargir le domaine spectral d'absorption et d'accroître significativement le courant de court-circuit (J_{sc}), qui passe de 19,40 à 22,47 mA/cm². Cependant, cette augmentation s'accompagne d'une hausse des recombinaisons volumiques des porteurs photo-générés, entraînant une diminution de la tension en circuit ouvert (V_{co}) de 1,13 à 1,10 V et du facteur de forme (FF) de 74,46 % à 68,47 %. Les simulations ont permis d'identifier un compromis optimal pour une épaisseur de l'absorbeur se situant autour de 450 nm, offrant un rendement de conversion maximal de l'ordre de **17,1 %**.
2. **Influence des couches de transport (ETL et HTL)** : L'étude de l'impact de l'épaisseur et du dopage des couches de transport d'électrons (ETL en ZnO) et de trous (HTL en CuI) a mis en évidence leur rôle crucial dans les performances du dispositif. L'épaisseur de la couche ETL (ZnO) influence directement le courant de court-circuit : une couche plus fine (200 nm) permet à davantage de photons d'atteindre l'absorbeur, maximisant ainsi le J_{sc} (22,20 mA/cm²) et le rendement (18,44 %). En revanche, la couche HTL (CuI) s'est avérée insensible aux variations d'épaisseur, ce qui permet d'adopter une épaisseur minimale (200 nm) sans compromettre les performances.

Concernant le dopage, une concentration plus élevée dans la couche ETL (jusqu'à 1e19 cm⁻³) améliore la conductivité et la séparation des charges, ce qui augmente le facteur de forme (jusqu'à 74,64 %) et le rendement (jusqu'à 18,44 %). De même, l'augmentation du dopage de la couche HTL (CuI) de 1e16 à 1e18 cm⁻³ a permis d'améliorer significativement le facteur de forme (de 60,58 % à 69,20 %) et l'efficacité de conversion (de 14,95 % à 17,08 %), renforçant ainsi le champ électrique interne à l'interface CuI/pérovskite et améliorant la collection des trous.

3. **Synthèse des résultats** : En combinant les paramètres optimaux identifiés (ETL ZnO : 200 nm, dopage $1e19 \text{ cm}^{-3}$; HTL CuI : 200 nm, dopage $1e18 \text{ cm}^{-3}$; absorbeur pérovskite : 450 nm), la cellule solaire simulée atteint des performances remarquables : $V_{co} = 1,11 \text{ V}$, $J_{sc} \approx 22,17 \text{ mA/cm}^2$, $FF = 74,64 \%$ et un rendement de conversion maximal de **17,1 %**. Ces résultats, obtenus dans des conditions standard (AM1.5G, 1000 W/m^2 , 300 K), confirment l'importance de l'optimisation des paramètres structuraux et électroniques pour maximiser l'efficacité des cellules solaires à pérovskite.

Ce travail démontre la puissance des outils de simulation numérique comme SCAPS-1D pour la conception et l'optimisation des cellules solaires de nouvelle génération. Il confirme également le potentiel exceptionnel des pérovskites hybrides pour le photovoltaïque, tout en soulignant la nécessité d'un contrôle précis des paramètres de fabrication pour atteindre des rendements élevés.

En guise de **perspectives**, ce travail ouvre la voie à plusieurs prolongements scientifiques d'intérêt majeur :

- **Modélisation de structures sans plomb (Lead-free)** : Remplacer le plomb par des alternatives écologiques et moins toxiques comme l'étain (Sn) ou le bismuth (Bi) afin de répondre aux exigences de respect de l'environnement.
- **Étude approfondie de la dégradation thermique** : Simuler le comportement de la cellule sous des conditions de température extrêmes pour évaluer sa stabilité à long terme, qui reste l'un des défis majeurs avant la commercialisation industrielle des pérovskites.
- **Architecture Tandem** : Explorer des configurations de cellules tandem (Pérovskite/Silicium) sous SCAPS-1D pour franchir la limite théorique de Shockley-Queisser et atteindre des rendements supérieurs à 30 %.
- **Optimisation des défauts et des interfaces** : Étudier plus en détail l'influence de la densité de défauts et des recombinaisons aux interfaces ETL/pérovskite et pérovskite/HTL afin de réduire les pertes et d'améliorer encore les performances du dispositif.

Référence

Référence

- [1] Office fédéral des questions conjoncturelles Service de la technologie, Centrales photovoltaïques : Guide pour le dimensionnement et la réalisation de projets, A l'usage des bureaux d'ingénieurs, Coordination romande du programme d'action « Construction et énergie » EPFL-LESO, Case postale 12, 1015 Lausanne, Juin 2006.
- [2] Direction des ressources en électricité, Les systèmes photovoltaïques Guide de l'acheteur, Canada, 2003, N°de catalogue : M92-28/2001F, ISBN : 0-662-86306-2.
- [3] Kaouala Abdelli , Lynda Abdelli “design of perovskite solarcells “, Mémoire de Master, Université Mohammed Khider à Biskra 2019/2020.
- [4] S. Karima, “Contribution de la microscopie EBIC et des calculs numériques pour l'étude de cellules photovoltaïques,” 2016.
- [5] DECHOUCHA,D. « Etude des propriétés électronique et optique linéaire pour le chalcopryrite CuAlTe_2 », Mémoire de Master en Electronique, Université Mohamed Boudiaf – Msila, (2015).
- [6] V. Daniel, 2003, Le rayonnement thermique , bilan radiatif et effet de serre » en ligne sur le site ENS-DEGESCO planet-terre :
- [7] : "Solar Radiation Measurements" par Frank Vignola, Joseph Michalsky et Thomas Stoffel, dans l'encyclopédie "Reference Module in EarthSystems and Environmental Sciences", publiée par Elsevier en 2015.
- [8] : Renne, D., Geiger, A., &Hentschel, G. (2010). RenewableEnergy: Technology, Economics and Environment (p. 18) [22] : Brochure, (2000), « Dimensionnement et installation des systèmes Solaires PV pour l'éclairage domestique », Centre de Développement des Energies Renouvelables Royaume du Maroc Marrakech édition l'UNESCO et l'IEPF Marrakech 29 juillet 2000.
- [9] : P. Bessemoulin and J.Oliviéri, "Le rayonnement solaire et sa composante ultraviolette", La Météorologie 8e série - n° 31 – septembre (2000).
- [10] Amar, H. Propriétés électriques des cellules solaires à base de séléniure de cuivre-indium-gallium $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) (Mémoire de magistère). Université Mohamed Khider, Biskra, Algérie, (2014).
- [11] OUDDAH MOURAD «Étude du silicium poreux destine aux cellules solaires », Mémoire de magister, UniversitéMentouri- Constantine, 2009.
- [12] Becquerel, E. Des effets chimiques et électriques produits sous l'influence de la lumière solaire (Thèse de doctorat, Faculté des sciences de Paris). FirminDidot frères, (1840).
- [13] Smith, W. Effect of light on selenium during the passage of an electric current. Nature, 7, 303, (1873).

- [14] W.G. Adams, R. Day, Philosophical Transactions of the Royal Society of London, 167 (1877) 313-349.
- [15] Fritts, C. E. On a new form of selenium cell, and some electrical discoveries made by its use. American Journal of Science, Series 3, 26(156), 465–472, (1883).
- [16] Einstein, A. Übereinendie Erzeugung und Verwandlung des Lichtesbetreffendenheuristischen Gesichtspunkt. Annalen der Physik, 17(6), 132–148, (1905).
- [17] Queisser, H. J. Slow solar ascent. In K. H. J. Buschow (Ed.), Advances in Solid State Physics, (2004).
- [18] Easton, R., &Votaw, M. A quartz crystal microbalance for vacuum applications.Review of Scientific Instruments, (1959).
- [18] Amar, H. Propriétés électriques des cellules solaires à base de séléniure de cuivre-indium gallium $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS) (Mémoire de magistère). Université Mohamed Khider, Biskra, Algérie, (2014)
- [19] Bensalem, S. Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires (Mémoire de magistère). Université Ferhat Abbas, Sétif, Algérie, (2011).
- [20] Orgeret, M. Les piles solaires, le composant et ses applications. Paris, France : Éditions Masson, (1985).
- [21] DANIEL LINCOT Directeur de recherches au CNRS « La conversion photovoltaïque de l' énergie solaire »,2007, www.martin-bucher.de,Stuttgart/Germany
- [22] Abdallah Benyoucef, « Développement de Surfaces à Base de Dioxyde de Titane par PVD Pour Une Application Aux Cellules Solaires », Thèse de Doctorat.
- [23] Vighetti Stéphane « Systèmes photovoltaïques raccordés au réseau: Choix et dimensionnement des étages de conversion ». Thèse de doctorat, Université Grenoble, Institut polytechnique de Grenoble, 2010.
- [24] Rose, G. De NovisQuibusdamFossilibus, Quae in MontibusUraliisInveniuntur, Scripsit. Ann. Phys. 1839, 558.
- [25] S. Brittman, G. W. P. Adhyaksa, and E. C. Garnett, “The expanding world of hybrid perovskites:materials properties and emerging applications,” MRS Commun., vol. 5, no. 1.
- [26] Shahzada Ahmad, SamranaKazim, Michael Gr_tzel - Perovskite Solar Cells_ Materials, Processes, and Devices-Wiley-VCH (2022).
- [27] <https://images.app.goo.gl/uZiKmZJQbtsDpedA8>.
- [28] M. Cyrot et al., “Properties of a new perovskiteoxyde Sr_2VO_4 ,” J. Solid State Chem., vol. 85, no. 2,pp. 321–325, Apr. 1990.

- [29] Halide Perovskite Semiconductors, Structures, Characterization, Properties, and Phenomena, Edited by Yuanyuan Zhou and Iván Mora-Seró (2024).
- [30] Danladi, E., Dogo, D. S., Michael, S. U., Uloko, F. O., & Salawu, A. A. O. (2021). Recent advances in modeling of perovskite solar cells using scaps-1d: effect of absorber and etm thickness. *East European Journal of Physics*, (4), 5-17.
- [31] Zhang, L., Mei, L., Wang, K., Lv, Y., Zhang, S., Lian, Y., ... & Ding, L. (2023). Advances in the application of perovskite materials. *Nano-Micro Letters*, 15(1), 177.
- [32] J. Hutton and R.J. Nemes, *Acta Cryst. A* 37 (1981) 916,
- [33] Rocks C. et al. 2017 « Understanding surface chemistry during MAPbI₃ spray deposition and its effect on photovoltaic performance » *Journal of Materials Chemistry C* 5 .
- [34] KANOUN Ahmed-Ali « Etude théorique et prédictive des nouveaux matériaux pour conception des cellules solaires et applications photovoltaïques » Thèse de doctorat, Université Abou-Bekr Belkaid – Tlemcen, 2019.
- [35] T. Dai, Q. Cao, L. Yang, M. H. Aldamasy, M. Li, Q. Liang, H. Lu, Y. Dong, and Y. Yang, « Strategies for High-Performance Large-Area Perovskite Solar Cells toward Commercialization », *Crystals*, 11(3)(2021)295.
- [36] R. Ihly et al., “Efficient charge extraction and slow recombination in organic–inorganic perovskites capped with semiconducting single-walled carbon nanotubes,” *Energy & Environmental Science*, vol. 9, no. 4, pp. 1439–1449, 2016.
- [37] Chakrabarti T, Saha M, Khanda A, Sarkar SK. « Modeling of Lead-Free CH₃NH₃SnI₃-Based Perovskite Solar Cell Using ZnO as ETL ». *Advances in Communication, Devices and Networking*: Springer; 2018. p. 125-31.
- [38] Nijs, J., et al. (année non spécifiée). SCAPS-1D: A new one-dimensional solar cell simulation program. *Solar Energy Materials and Solar Cells*.
- [39] Kabir, M. I., Shahahmadi, S. A., Lim, V., Zaidi, S., Sopian, K., & Amin, N. (2012). Amorphous Silicon Single-Junction Thin-Film Solar Cell Exceeding 10% Efficiency by Design Optimization. *International Journal of Photoenergy*, vol., Article ID 460919.
- [40] Adaine, Abdoulwahab. *Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN*. Diss. 2018.
- [41] Burgelman, M., Decock, K., Niemegeers, A., Verschraegen, J., & Degraeve, S.

SCAPS manual. (2016).

[42] Touafek, Naima. Contribution à l'étude d'une cellule solaire en couches minces à base de $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$. 2015.

[43] Darga, A. Formation: INTRODUCTION A LA SIMULATION DE CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES. 2015.