

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

UNIVERSITE MOULOUD MAMMARI DE TIZI-OUZOU

Faculté de génie électrique et d'informatique

Département d'électronique



Mémoire de Fin d'Etudes

Spécialité : Electronique

Option : Microélectronique

Présenté par:

HAMADI Lamia

MESSAOUDI Sarah

Thème

Etude et simulation des cellules solaires pérovskites par
SCAPS -1D

Devant le jury :

Mme. NEMMAR Farida	MCB	UMMTO	Président
Mme. BOUDIA Ouardia	MCB	UMMTO	Examineur
Mme. SALEM Dalila	MAA	UMMTO	Encadreur

Soutenu le :18/09/2025

Remerciements

Au nom de Dieu le clément et le miséricordieux, louange à ALLAH le tout puissant, le premier, le dernier ...

En tout premier lieu, nous remercions Dieu, le tout puissant de nous avoir donné la force pour survivre, ainsi que l'audace pour dépasser toutes les difficultés.

Nous souhaitons témoigner notre reconnaissance la plus vive à notre encadrante, Madame SALEM Dalila. Nous admirons profondément la qualité de son encadrement de ce mémoire, sa collaboration enrichissante sa sympathie et son encouragement.

Nous remercions les membres de jury pour l'honneur qu'ils nous ont fait en acceptant d'examiner notre travail et de l'enrichir par leurs propositions. Ainsi que tous les enseignants du département électronique pour leurs disponibilités, leurs conseils tout au long de notre cursus au sein de ce département.

A toutes personnes qui ont contribué de près ou de loin au succès de ce modeste travail. En particulier nos chères familles et nos amis(es). Vous avez notre reconnaissance la plus sincère.

Dédicace

Je désire exprimer ma profonde gratitude et mon affection sincère envers ceux à qui je dédie humblement ce travail :

A mes chers parents, vous êtes les piliers de ma vie, ma source de force et de détermination.

Votre amour inconditionnel m'a porté à travers les moments difficiles et a illuminé mes succès. Vos sacrifices et votre soutien sont des trésors que je chérirai éternellement. Que dieu tout puissant vous préserve en santé, vous comble de bonheur et vous accorde une longue vie.

A mes frères Smail et Yanis, vous avez été bien plus que des membres de ma famille, vous êtes mes confidents, mes compagnons de rire et de larmes. Ensemble, nous avons grandi et partagé tant de souvenirs précieux, je souhaite un avenir rayonnant, rempli de joie et de fraternité.

A tous mes proches et ma belle-sœur, vous êtes une source inépuisable de réconfort et d'encouragement. Vos conseils avisés et votre amour m'ont toujours guidé sur le chemin de la réussite.

A mon binôme et mon amie Sarah, tu as été ma complice et ma partenaire tout au long de ce voyage. Ta présence à mes côtés a rendu chaque étape plus lumineuse.

A mes amis (es), vous êtes la preuve vivante que l'amitié est un trésor précieux, je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance et mon sincère respect.

A tous ceux qui ont croisé ma route, que ce soit en personne ou à travers les écrans, votre impact sur ma vie est profondément ressenti. Votre soutien m'a donné la confiance nécessaire pour persévérer.

Enfin, à Dieu, je rends grâce pour toutes les bénédictions et les opportunités qui ont jalonné mon parcours. Puissent ces remerciements refléter une fraction de la gratitude que je ressens envers chaque personne qui a contribué à mon épanouissement.

Lamia

Dédicace

En ce moment si spécial de ma vie, alors que je touche au terme de ce parcours universitaire qui représente des années d'efforts, de sacrifices et de persévérance, je tiens à exprimer ma profonde gratitude et mon amour envers toutes les personnes qui ont marqué ma vie et qui m'ont accompagnée de près ou de loin dans cette aventure.

A ma précieuse famille,

Vous êtes ma source de force, mon repère et mon refuge.

A mes parents, je vous dois tout. Votre amour inconditionnel, vos innombrables sacrifices et vos encouragements constants m'ont portée et guidée à chaque étape. C'est grâce à vous que j'ai pu croire en mes rêves et avancer avec confiance malgré les obstacles. Vous êtes mes héros et je vous dédie ce travail avec tout l'amour et le respect que je vous porte.

A mes frères Omar, Yasser et Anis, vous êtes mes compagnons de vie, mes soutiens fidèles dans les moments de doute comme dans ceux de joie. Votre présence et vos conseils ont toujours été une grande richesse pour moi.

A mes belles-sœurs Jennifer et Fatma, merci de faire partie de notre famille avec tant de gentillesse et d'affection. Votre présence a apporté chaleur et équilibre dans nos vies.

A ma sœur Alicia, ma complice et mon rayon de lumière, merci pour ton soutien, ton amour et cette complicité unique que nous partageons.

A mes amis,

Je dédie aussi ce travail à mes précieux amis **Lamia, Aghiles, Amayas et Manel.** Merci pour votre amitié sincère et vos sourires qui ont illuminé mon quotidien. Vous avez été mes confidents, mes épaules dans les moments difficiles, mes compagnons dans les instants de bonheur et de détente. Vos encouragements, vos paroles motivantes et vos éclats de rire resteront à jamais gravés dans ma mémoire.

A toutes les personnes qui ont cru en moi,

Votre soutien, vos prières et vos mots d'encouragement m'ont accompagnée dans les moments les plus durs. Vous avez été pour moi une source de courage et de motivation.

Ce mémoire n'est pas seulement le fruit de mes efforts, mais aussi celui de tout l'amour, du soutien et de la confiance que j'ai reçu de vous tous. Chaque réussite, chaque pas franchi est aussi le vôtre.

Sarah

Liste des figures

Liste de figures :

Chapitre I :

Figure I.1. Différents types de rayons	6
Figure I.2. Représentation de la structure d'une cellule photovoltaïque simple	7
Figure I.3. Principe de conversion photovoltaïque	8
Figure I.4. Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque	9
Figure I.5. Le principe de la cellule photovoltaïque	9
Figure I.6. Caractéristique court tension et paramètre physique d'une cellule photovoltaïque	10
Figure I.7. Différents régimes selon la puissance d'éclairement	12
Figure I.8. Modèle de cellule photovoltaïque idéale	14
Figure I.9. Modèle de cellule photovoltaïque réelle.....	15
Figure I.10. Schéma équivalent d'une cellule PV Modèle à deux diodes	17
Figure I.11. Circuit équivalent du modèle à quatre paramètres	18
Figure I.12. Caractéristique I-V d'une cellule photovoltaïque	18
Figure I.13. Représentation schématique des liaisons électronique dans un semi-conducteur... ..	20
Figure I.14. Schéma structurel d'une cellule photovoltaïque à base de silicium poreux	22
Figure I.15. La structure d'une cellule solaire avec ses différentes couches	22
Figure I.16. (a) Exemples de technologies photovoltaïques (b) Etat de développement pour ces technologies photovoltaïques	25
Figure I.17. Principaux types de technologies de cellules PV recensés qui diffèrent par les matériaux utilisés ou /et leur épaisseur	26

Chapitre II :

Figure II.1. Représentation schématique d'une maille de la structure pérovskite idéale	28
Figure II.2. La pérovskite Titanate de Calcium (CaTiO_3)	29
Figure II.3. Deux différentes façons de représenter la structure pérovskite ABX_3 cubique. a) atome B à l'origine (octaèdre BX_6 représenté), b) atome A à l'origine de la maille.....	30
Figure II.4. Représentation des deux effets de la piézoélectricité.....	31

Liste des figures

Figure II.5. Quelques matériaux piézoélectriques	31
Figure II.6. Dipôle induit par décalage des barycentres	32
Figure II.7. Courbe d'absorption des matériaux	34
Figure II.8. Pérovskite Led	40
Figure II.9. Architecture des cellules solaires pérovskite a) Architecture planaire ; b) Architecture mésoporeuse ; c) Architecture inversée.....	42
Figure I.10. Différentes méthodes de préparation des films de pérovskites	44
Figure II.11. Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite	45

Chapitre III :

Figure III.1. Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS	56
Figure III.2. Définition du point de fonctionnement	57
Figure III.3. Choix de l'illumination	58
Figure III.4. Interface de définition des couches de la cellule solaire	59
Figure III.5. Définition de la structure d'une cellule solaire	60
Figure III.6. Panneaux de définition des propriétés par défaut	61
Figure III.7. Processus de recombinaison (a) radiative, (b) Auger et (c) SRH.....	62
Figure III.8. Propriétés du contact	63
Figure III.9. Propriétés de la couche ajoutée	65
Figure III.10. Modèle de l'absorption.....	66
Figure III.11. Types des recombinaisons directs ou à travers des pièges	66
Figure III.12. Mesures à simuler ⁶⁷	
Figure III.13. Panneau d'affichage des diagrammes de bande d'énergie, courant et concentration	68
Figure III.14. Panneau d'affichage des résultats de simulation « Output window »	69

Chapitre IV :

Figure IV.1. Structure de la cellule solaire à simuler	70
---	----

Liste des figures

Figure IV.2. Schéma de la cellule solaire pérovskite simulée par SCAPS-1D	71
Figure IV.3. Influence des différentes couches actives sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire	74
Figure IV.4. Effet de l'épaisseur de la couche active sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.....	76
Figure IV.5. Influence de l'épaisseur de la couche active (CsSnI3) sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire	77
Figure IV.6. Influence des différentes couches ETL sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire	80
Figure IV.7. Effet de l'épaisseur de la couche ETL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.....	81
Figure IV.8. Influence de l'épaisseur de la couche ETL (TiO ₂) sur la caractéristiques J (V) de la cellule solaire.....	82
Figure IV.9. Influence des différentes couches HTL sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire	85
Figure IV.10. Effet de l'épaisseur de la couche HTL(CuO) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire	86
Figure IV.11. Influence de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire.....	87
Figure IV.12. Effet de la température sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire	88
Figure IV.13. Influence de la température sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire ...	89

Liste de tableaux :

Chapitre II :

Tableau II.1. Propriétés physiques de certains matériaux type pérovskite	34
Tableau II.2. Les systèmes cristallins et leurs paramètres	37
Tableau II.3. Variation des structures cristallines en fonction du facteur de tolérance t	39
Tableau II.4. Evolution des performances des cellules solaires à pérovskites en fonction des architectures et matériaux (2009-2025)	49

Chapitre IV :

Tableau IV.1. Propriétés des différentes couches de la cellule solaire (ITO, ZnO, couche active, Spiro-OMeTAD)	72
Tableau IV.2. Effet des différents matériaux pérovskites pour couches actives sur les performances de la cellule solaire	73
Tableau IV.3. Effet de l'épaisseur de la couche active (CsSnI ₃) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite.....	75
Tableau IV.4. Les paramètres des différents matériaux pour la couche de transport d'électron ETL.....	77
Tableau IV.5. Résultats pour différents matériaux pour la couche transport d'électron ETL.	78
Tableau IV.6. Effet de l'épaisseur de la couche ETL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.....	80
Tableau IV.7. Les paramètres des différents matériaux pour la couche transport de trou HTL	82
Tableau IV.8. Résultats pour différents matériaux de transport de trou HTL	83
Tableau IV.9. Effet de l'épaisseur de la couche HTL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.....	85
Tableau IV.10. Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en fonction de la température	87

Liste des symboles et abréviations :

PV : L'effet photovoltaïque

GES : Gaz à Effet de Serre

a-Si:H : Silicium amorphe hydrogéné

E : Energie du photon

h : Constante de Planck

ν : Fréquence de l'onde électromagnétique (Hz)

c : Vitesse de la lumière dans le vide

λ : Longueur d'onde (m)

I(V) : La caractéristique courant-tension

I_{cc} : Courant de court-circuit

V_{co} ou V_{oc} ou V_{co} : Tension à circuit ouvert

FF : Facteur de forme

k : Constante de Boltzmann

T_c : Température absolue

q : Constante de charge d'électron, $1.6 \cdot 10^{-19}$

I_{ph} : Courant photonique

I_s : Courant de saturation

P_{max} : Puissance maximale délivrée par la cellule

η : Rendement

P_{in} : Puissance incidente (W/m^2)

IQE : Rendement quantique interne

EQE : Rendement quantique externe

$\varphi(\lambda)$: Le flux lumineux incident

e : La charge de l'électron

SR : Réponse spectrale de la cellule

R_s : La résistance série

R_{sh} : La résistance shunt

I_d : Courant de la diode (courant de recombinaison)

V : Tension aux bornes de la cellule solaire

V_d : Tension aux bornes de la diode

Listes des symboles et abréviations

I_0 : Le courant de saturation inverse de la diode

R_p : La résistance parallèle

N : Le facteur de qualité de diode

T : Température de cellule en kelvin

I_p : Courant qui fuit à travers la résistance parallèle (shunt)

I : Courant total de la cellule (A)

I_{sc} : Courant de court-circuit (short-circuit current)

I_m : Courant au point de puissance maximale

V_m : Tension au point de puissance maximale

c_1 : Paramètre empirique, coefficient sans dimension qui ajuste la forme de la courbe I–V

c_2 : Facteur d'ajustement de la pente exponentielle

CdTe : Tellure de cadmium

CIGS : Cuivre-indium-gallium

a-Si : Silicium amorphe

CdS : Sulfure de cadmium

ITO : L'oxyde d'étain et d'indium

ÉVA : Ethylène-vinyl-acétate

UV : Ultraviolet

CPV : Cellules solaires à concentration

OPV : Cellules solaires organiques

μ -Si : Silicium microcristallin

TiO₂ : Dioxyde de titane

CSP : Cellules solaires en pérovskite

ECP : Efficacité de conversion de puissance

CaTiO₃ : Titanate de calcium.

ABX₃ : Structure d'un cristal de pérovskite générique

O : L'oxygène

F : Fluorure

MR : La magnéto-résistance

BaTiO₃ : Le titanate de baryum

PbTiO₃ : Le titanate de plomb

Listes des symboles et abréviations

Pb : Le plomb

GdFeO₃ : L'orthoferrite de gadolinium

BiMnO₃ : Manganite de bismuth

BiCrO₃ : Chromite de bismuth

KNbO₃ : Niobate de potassium

r_A , r_B et r_X : Les rayons ioniques du cation A, cation B et de l'anion X

t : Le facteur de tolérance de Goldschmidt

PeLED : Les diodes électroluminescentes à pérovskite

TCO : Oxyde transparent conducteur

ITO : L'oxyde d'indium-étain

FTO : L'oxyde d'étain dopé au fluor

Au : Or

Ag : Argent

ETL : Couche de transport des électrons

HTL : Couche de transport de trous

ETM : Matériau de transport d'électrons

HTM : Matériau de transport des trous

Al₂O₃ : L'oxyde d'aluminium

PEDOT: PSS : Poly(3,4-ethylenedioxythiophene) polystyrene sulfonate

PCBM : Ester méthylique de l'acide phényl-C60-butyrique

BL : Couche tampon

DSSC : Cellule solaire sensibilisée par colorant

PCE : Rendement de conversion de puissance

CH₃NH₃ : Méthylammonium (MA⁺)

PTA : Polytriarylamine

PbI_{3-x}Br_x : Pérovskite halogénée mixte

PbAc₂ : Acetate de plomb(II)

PbCl₂ : Chlorure de plomb(II)

PSC : Cellule solaire à pérovskite

SCAPS : Solar Cell Capacitance Simulator

φ : Le potentiel

ε : La permittivité

Listes des symboles et abréviations

n : La densité des électrons libres

P : La densité des trous libres

$L_n(p)$: Longueur de diffusion de l'électron (trou)

$\tau_n(p)$: Durée de vie de l'électron (trou)

QE : L'efficacité quantique

R : Taux de recombinaison (porteurs/cm³·s)

$C_n^A(C_p^A)$: Coefficient Auger lié aux électrons(trous) (cm⁶/s)

n : Concentration d'électrons (cm⁻³)

p : Concentration de trous (cm⁻³)

n_i : Concentration intrinsèque (cm⁻³)

ϕ_m : Fonction travail du métal ou barrière de contact (en eV)

N_c : Densité effective d'états dans la bande de conduction (cm⁻³)

N_D : Concentration de donneurs (dopage donneur)

N_A : Concentration d'accepteurs (dopage accepteur)

$k_B T$: Energie thermique ($\approx 0,0259$ eV à 300 K)

CH₃NH₃SnI₃ : Méthylammonium étain iodé

CH₃NH₃PbI₃ : Méthylammonium plomb triiodure

CH₃NH₃GeI₃ : Méthylammonium germanium triiodure

CsSnI₃ : Triiodure d'étain et de césium

ZnO : Oxyde de zinc

Spiro-OMETAD : Spiro-méthoxy-triarylamine

C60 : Fullerène C₆₀

PCBM : Phényl-C₆₁-butyrate méthyl ester

NiO : Oxyde de nickel (II)

CuO : Oxyde de cuivre (II)

P3HT : Poly(3-hexylthiophène)

Sommaire :

Listes des figures	I
Listes des tableaux	IV
Listes des symboles et abréviations	V
Introduction générale	1
Chapitre I : Généralités sur les cellules photovoltaïques	
Introduction	4
I. Le gisement solaire	4
I.1. Historique du photovoltaïque ; de la simulation à l'optimisation.....	4
I.2. Le soleil et le spectre solaire	5
II. Les cellules photovoltaïques.....	6
II.1. Définition	6
II.2. Principe de conversion photovoltaïque.....	7
II.3. Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques	8
II.4. Paramètres photovoltaïques	10
III. Modélisation d'une cellule photovoltaïque	14
III.1. Cellule photovoltaïque idéale.....	14
III.2. Cellule photovoltaïque réelle	15
III.3. Modèle à une seule diode	16
III.4. Modèle à deux diodes.....	16
III.5. Modèle explicite	17
III.6. Modèle à quatre paramètres	17
IV. Structure des cellules photovoltaïques	18
IV.1. Couche absorbante.....	18
IV.2. Couche transport.....	18
IV.3. Electrode	19
IV.4. Encapsulation	19
V. Rôle des différentes couches dans une cellules solaire.....	19
V.1. Cellules solaires traditionnelles (silicium cristallin)	19

Sommaire

V.2. Cellules solaires à couches minces	20
VI. Les types des cellules photovoltaïques	22
VI.1. Première génération : cellules solaires à base de silicium	22
VI.2. Deuxième génération : cellules solaires à couches minces	23
VI.3. Troisième génération : cellules solaires avancées	23
Conclusion.....	27

Chapitre II : Etude des matériaux et cellules pérovskites

Introduction	28
I. Présentation des pérovskites	28
I.1. Définition et historique	28
I.2. La structure cristalline des pérovskites	29
I.3. Propriétés générales des pérovskites	30
I.3.1. LA piézoélectricité	30
I.3.2. La pyroélectricité	31
I.3.3. La ferroélectricité	32
I.3.4. La supraconductivité	33
I.3.5. La magnéto-résistance	33
I.3.6. Propriété optique	33
I.3.7. Propriété électronique	34
II. Les types des matériaux pérovskites	35
II.1. Pérovskite tétragonale	35
II.2 Pérovskite rhomboédrique	35
II.3. Pérovskite orthorhombique	35
II.4. Pérovskite monoclinique et triclinique	35
II.5. Polymorphisme	36
III. Critères de stabilité d'une structure pérovskites	38

Sommaire

III.1. Rapport cation-anion	38
III.2. Ordre d'empilement	38
III.3. Facteur de tolérance (Facteur de Goldschmidt)	38
III.4. Composition chimique	39
IV. Application des matériaux pérovskites	39
IV.1. Diode électroluminescente (LED)	39
IV.2. Laser	40
IV.3. Les capteurs	40
IV.4. Catalyseur	40
IV.5. Les cellules photovoltaïques.....	41
V. Les cellules pérovskites	41
V.1. Architecture des cellules pérovskites	41
V.2. Technique de fabrication des couches en pérovskites	43
V.3. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire à base de pérovskite	44
VI. Performances des cellules à base de pérovskite.....	46
VII. Limites actuelles des matériaux pérovskites	52
Conclusion	52
Chapitre III : Présentation du logiciel SCAPS-1D	
Introduction	53
I. Equations de base	53
I.1. Equation de poisson	53
I.2. Equation de continuité	54
I.3. Longueur de diffusion	55
II. Présentation du logiciel SCAPS-1D	55
III. Utilisation du logiciel SCAPS	56
III.1. Interface du logiciel SCAPS-1D	56
III.2. Définir le point de fonctionnement	57

Sommaire

III.3. Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem)	58
III.4. Edition de la structure d'une cellule solaire pérovskite	59
III.5. Définition des couches de la cellule solaire pérovskite	64
III.6. Sélection des mesures à simuler	66
III.7. Fenêtre de résultats	67
Conclusion.....	69
Chapitre IV : Résultats et discussion	
Introduction	70
I. Simulation numérique de la cellule solaire pérovskite	70
I.1. L'effet d'utiliser différents matériaux pérovskites pour la couche active.....	71
I.1.1. Paramètres de la cellule solaire pérovskite à étudier.....	71
I.1.2. Résultats et discussion	73
I.1.3. Effet de l'épaisseur de la couche (CsSnI ₃) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite	75
I.2. Simulation de la cellule solaire pérovskite avec différents matériaux de la couche de transport d'électron ETL	77
I.2.1. Paramètres des matériaux de la couche de transport d'électron ETL.....	77
I.2.2. Résultats et discussion	78
I.2.3. Effet de l'épaisseur de la couche ETL (TiO ₂) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite.....	80
I.3. Simulation de la cellule solaire pérovskite avec différents matériaux de la couche de transport de trou HTL.....	82
I.3.1. Paramètres des matériaux de la couche de transport de trous HTL.....	82
I.3.2. Résultats et discussion	83
I.3.3. Effet de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite.....	85
I.4. Effet de la température sur la cellule solaire pérovskite	87
Conclusion.....	89
Conclusion générale	90
Bibliographie	

Introduction générale

Introduction générale

Ces dernières années, la demande de ressources énergétiques durables et propres a conduit à une croissance intense du développement des énergies renouvelables. L'énergie solaire consiste à exploiter l'effet Photovoltaïque (PV), dans lequel la lumière est directement convertie en électricité. L'énergie solaire est une source d'énergie illimitée, sans aucune émission des GES (Gaz à Effet de Serre). Elle constitue la ressource énergétique la plus abondante et de plus, elle est relativement bien répartie sur terre, chaque mètre carré reçoit en moyenne une puissance de 342 W [1]. Exploiter cette ressource de manière rentable et à faible coût constitue à la fois une opportunité attirante et un grand défi pour l'humanité.

Au cours des dernières décennies, diverses architectures de cellules photovoltaïques ont été mises au point afin d'optimiser la conversion de l'énergie solaire. Actuellement, ce sont les technologies photovoltaïques à base de Silicium cristallin (c-Si) sous ses formes multi- cristallines et monocristallines qui dominent le marché du photovoltaïque. Les cellules photovoltaïques au Silicium cristallin présentent une grande stabilité, une longue durée de vie dépassant 20 ans et des rendements de conversion de puissance supérieure à 25% [2].

Dans le but de réduire les coûts de production des cellules solaires en Si, des cellules à base de matériaux en couches mince ont émergé. Les candidats les plus prometteurs pour cette génération de cellules solaires sont le Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), le Tellurure de cadmium (CdTe) ainsi que le Diséléniure de cuivre-indium (CuInSe_2) et ses alliages. Bien que ces cellules solaires de deuxième génération aient un avantage concurrentiel en raison de leurs coûts inférieurs et de leur bon rendement de conversion allant jusqu'à 23.35%, elles présentent certains inconvénients. En effet la plupart des matériaux qui composent ces cellules sont à la fois rares et chers (indium) ou très toxiques (cadmium) [3].

Actuellement les cellules solaires à pérovskite de la troisième génération sont les plus prometteuses de toutes les autres générations, montrant un développement rapide et ouvrant de nouvelles directions dans le domaine photovoltaïque. Les pérovskites sont des matériaux décrits par la formule ABX_3 , présentant des propriétés électriques, structurelles et optiques très avantageuses. La pérovskite en tant qu'absorbeur de lumière dans les cellules solaires a permis en peu de temps d'obtenir des améliorations significatives de l'efficacité de conversion de puissance (PCE). Depuis le premier essai d'une cellule solaire à base de pérovskite en 2009, le PCE de ces cellules solaires s'est rapidement amélioré de 3,8% à 25,2% [4].

Les matériaux pérovskites peuvent être déposés en solution, cela permet la réalisation des cellules photovoltaïques de grandes surfaces. La commercialisation des cellules à

Introduction générale

pérovskites repose sur l'amélioration du coût de l'installation par rapport aux technologies Silicium et organique avec l'utilisation de matériaux absorbeur de lumière et matériaux d'électrodes déposés avec des techniques basses températures, telles que la pulvérisation, impression, rouleau à rouleau (roll to roll) et le spin coating. Les matériaux pérovskites ont un coefficient d'absorption élevé, grande mobilité de porteurs de charges et une longueur de diffusion de porteurs élevée [5]. La structure de la cellule solaire pérovskite est : le substrat d'oxyde transparent conducteur (TCO), la couche compacte bloquante d'oxyde métallique (BL), la couche de transport d'électrons (ETL), la couche de pérovskite (PL), la couche de transport de trous (HTL) et le contact arrière.

Afin d'améliorer les performances d'une cellule solaire photovoltaïque, il est essentiel d'identifier et de prédire les paramètres optimaux qui influencent la conception et le rendement de la cellule. Dans ce contexte, l'utilisation d'outils de simulation numérique constitue un atout majeur pour le développement et l'optimisation des dispositifs photovoltaïques. L'objectif principal de ce mémoire est d'étudier l'impact des différentes couches constitutives sur les performances des cellules solaires à base de pérovskites, en utilisant le logiciel de simulation SCAPS-1D. Une étude comparative sera réalisée sur quatre matériaux pérovskites actifs ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ et CsSnI_3), quatre couches HTL (Spiro-OMeTAD, NiO, P3HT et CuO) et quatre couches ETL (TiO_2 , ZnO, PCBM et C60), afin de déterminer la combinaison la plus performante. À chaque fois que le matériau le plus adapté sera identifié, une optimisation de l'épaisseur de la couche active et les couches interfaciales sera réaliser afin d'affiner davantage les performances. Enfin, nous analyserons également l'effet de la température sur les caractéristiques électriques et optiques de la cellule solaire, dans le but de proposer la structure optimale offrant le meilleur rendement.

Ce mémoire est structuré de la façon suivante :

Après une introduction générale, le premier chapitre présente des généralités sur la conversion photovoltaïque, le principe de fonctionnement des cellules solaires et le développement technologique des différentes générations. Nous allons présenter également l'évolution de la technologie des cellules solaires qui a connu plusieurs générations selon la structure et les matériaux utilisés.

Dans le deuxième chapitre, nous présenterons les propriétés fondamentales du composé pérovskite. Nous décrirons les propriétés optiques et électriques de ces matériaux ; ainsi que

Introduction générale

leurs applications, leurs architectures, leurs techniques de fabrication et leurs principes de fonctionnement...etc

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le logiciel SCAPS utilisé dans notre étude de simulation.

Le quatrième chapitre couvre l'étude et la simulation des cellule solaires pérovskites. Dans ce chapitre nous allons essayer à travers des discussions et des interprétations des résultats de comprendre le rôle de différents facteurs agissant sur les performances des cellules.

Enfin, nous allons terminer ce mémoire par une conclusion générale sur l'ensemble des résultats obtenus dans ce travail.

Chapitre I :

Généralités sur les cellules photovoltaïques

Introduction :

Dans un contexte mondial marqué par la transition énergétique et la recherche de solutions durables, l'énergie solaire s'impose comme une alternative incontournable aux sources d'énergie fossiles, et offre un potentiel immense grâce à son abondance et sa disponibilité. Parmi les différentes technologies exploitant cette ressource inépuisable, le photovoltaïque occupe une place prépondérante en raison de sa capacité à convertir directement le rayonnement solaire en électricité propre et renouvelable. Dans ce premier chapitre nous visons à présenter les notions fondamentales relatives aux cellules photovoltaïques. Nous aborderons l'historique et les principes de base de cette technologie, les différents types existants ainsi que leurs performances et applications.

I. Le gisement solaire :**I.1. Historique du photovoltaïque ; de la simulation à l'optimisation :**

Le physicien français Edmond Becquerel a décrit pour la première fois l'effet photovoltaïque en 1839 et Albert Einstein a expliqué son mécanisme en 1912, mais cela reste une curiosité scientifique jusqu'aux années 1950. Becquerel a découvert que certains matériaux pouvaient fournir une petite quantité de courant électrique qui est générée lorsqu'elle est exposée à la lumière. En 1875 Werner Von Siemens expose devant l'académie des sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. L'effet photovoltaïque en tant que tel a été découvert en 1887 par le physicien "Allemand Heinrich Rudolf Hertz".

En 1954, des chercheurs américains (Chapin, Fuller, Pearson et Prince) travaillant pour les laboratoires Bell Téléphone (devenus aujourd'hui Alcatel -Lucent Bell labs) développent une cellule photovoltaïque à haut rendement de 6%. Les américains lancent en 1959 le satellite Van Guard qui est alimenté par des piles photovoltaïques ayant un rendement de 9% [8]. La première maison avec une installation photovoltaïque voit le jour en 1973 à l'université de Delaware aux Etats-Unis d'Amérique. C'est en 1983 que la première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt 4000 kilomètres en Australie.

A partir des années 2000 L'optimisation des cellules solaires commence à se concentrer sur l'amélioration de leur efficacité et de leur coût. Cela implique des recherches sur des matériaux alternatifs (comme les pérovskites) et des techniques de simulation pour mieux comprendre les processus physiques à l'œuvre dans les cellules solaires. Les simulations numériques de la performance des cellules photovoltaïques deviennent une partie essentielle du processus de

conception. Aujourd'hui, l'énergie photovoltaïque est à la disposition des entreprises et des particuliers et les panneaux photovoltaïques ont des rendements de 20% [8].

I.2. Le soleil et le spectre solaire :

Le Soleil est une étoile, donc une énorme boule de gaz chaud qui produit de l'énergie et qui rayonne. Le Soleil est l'étoile la plus proche de la Terre (150 millions de kilomètres) [9]. Il est composé de 70 % d'hydrogène et de 28% d'hélium, les 2% restants représentant la plupart des autres atomes qui existent dans l'univers. Plus de 60 éléments chimiques ont été identifiés [10].

Le spectre solaire est en effet composé de toutes sortes de rayonnements d'énergies et de couleurs différentes, caractérisées par leur gamme de longueur d'onde. Les photons, grains de lumière qui composent ce rayonnement électromagnétique, sont considérés comme des porteurs d'énergie qui est reliée à leur longueur d'onde par la relation suivante :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (\text{I.1})$$

Avec : h est la constante de Planck, ν la fréquence, c la vitesse de la lumière et λ la longueur d'onde.

On distingue par les longueurs d'ondes les différents types de rayons :

- Rayonnement ultraviolet (UV) : longueur d'onde entre 100 et 400 nanomètres (nm) ; invisibles, ne peuvent être ressentis [4]. On distingue trois types de radiations UV :
 - ✓ Les UVA (320-400 nm) Ce sont les rayons UV les moins énergétiques, mais ils sont responsables du vieillissement de la peau et des dommages cellulaires à long terme. Ils pénètrent profondément dans la peau.
 - ✓ Les UVB (280-320 nm) Ces rayons sont plus énergétiques et peuvent causer des brûlures de la peau et des cancers de la peau à long terme. Ils sont partiellement absorbés par la couche d'ozone.
 - ✓ Les UVC (100-280 nm) Ce sont les rayons les plus dangereux, mais heureusement, la majeure partie est absorbée par l'atmosphère et la couche d'ozone, ce qui les empêche d'atteindre la surface de la Terre.
- Rayonnement visible (lumière) : 400-800 nm ; visibles, ne peuvent être ressentis 52% du rayonnement solaire sont des radiations visibles. Elles nous permettent de distinguer les formes et les couleurs[11].

- Rayonnement infrarouge : 800 - 1400 nm ; invisibles, peuvent être ressentis 44% du rayonnement solaire sont des radiations infrarouges. Elles sont ressenties sous forme de chaleur [11].
- Rayons X : Ce sont des rayons très énergétiques avec une longueur d'onde inférieure à 10 nm. Bien qu'une petite quantité de rayons X puisse atteindre la Terre, la majorité est absorbée par l'atmosphère [11].
- Rayons Gamma : Les rayons gamma ont les longueurs d'onde les plus courtes et les plus énergétiques. Comme les rayons X, la plupart sont absorbés par l'atmosphère terrestre et n'atteignent pas la surface de la Terre. Ils sont produits lors de phénomènes extrêmement énergétiques, comme les supernovas ou les éruptions solaires majeures [11].

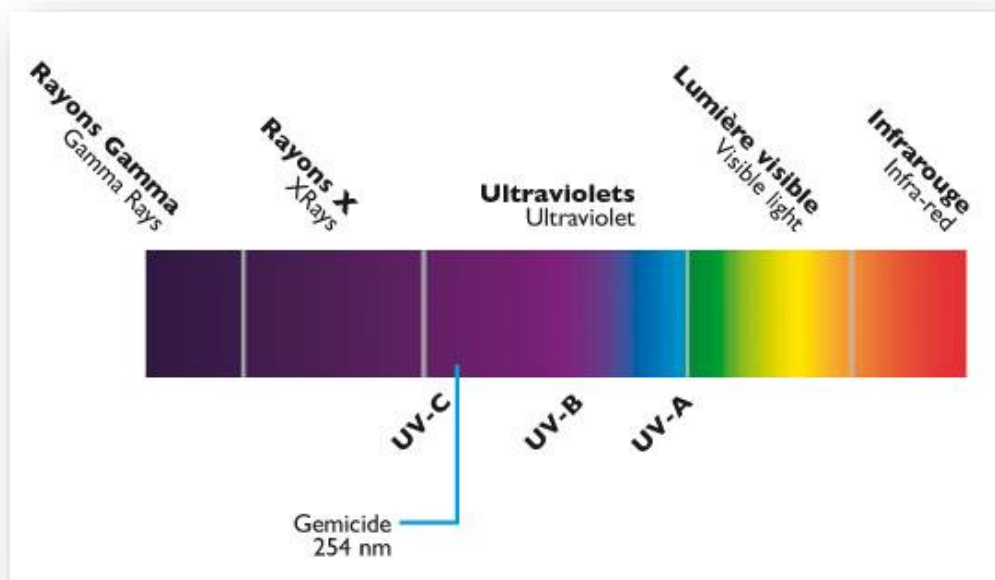


Figure I.1. Différents types de rayons

II. Les cellules photovoltaïques :

II.1. Définition :

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique semi-conducteur qui génère de l'électricité lorsqu'il est exposé au rayonnement solaire (photons), générant de l'électricité par l'effet photovoltaïque. Ce rayonnement est constitué de photons dont les longueurs d'onde vont de l'ultraviolet (0,2 μm) à l'infrarouge lointain (3 μm) [12]. La structure la plus simple d'une cellule photovoltaïque est illustrée dans la figure I.2.

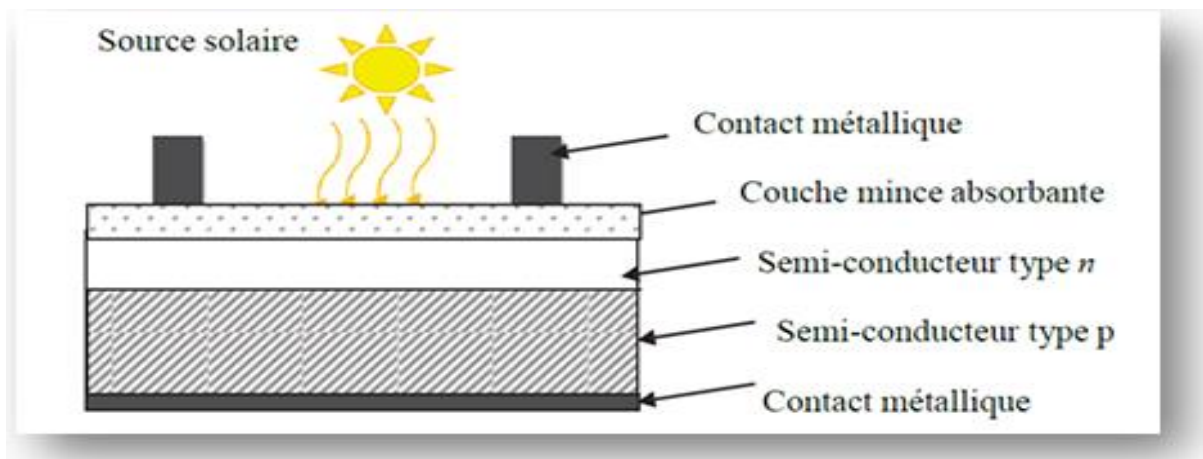


Figure I.2. Représentation de la structure d'une cellule photovoltaïque simple [13]

II.2. Principe de conversion photovoltaïque :

Principe de la conversion photovoltaïque désigne la conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique à l'aide de matériaux semi-conducteurs. Ce processus est basé sur l'effet photovoltaïque, qui se produit lorsque les photons de la lumière du soleil frappent la surface d'une cellule solaire et détache des électrons, générant ainsi un flux d'électricité [14].

Il repose sur l'effet photoélectrique, qui est la capacité des photons à créer des porteurs de charge (électrons et trous) dans un matériau. Lorsqu'un semi-conducteur est éclairé par un rayonnement de la bonne énergie, l'énergie des photons absorbés permet des transitions électroniques de la bande de valence à la bande de conduction du semi-conducteur, ce qui génère des paires électron-trou. Si l'appareil est isolé, une différence de potentiel apparaît aux bornes de la jonction (photo tension) ; si l'appareil est connecté à une charge électrique externe, le courant circule alors qu'aucune tension n'est appliquée. C'est le principe de base d'une cellule photovoltaïque [15].

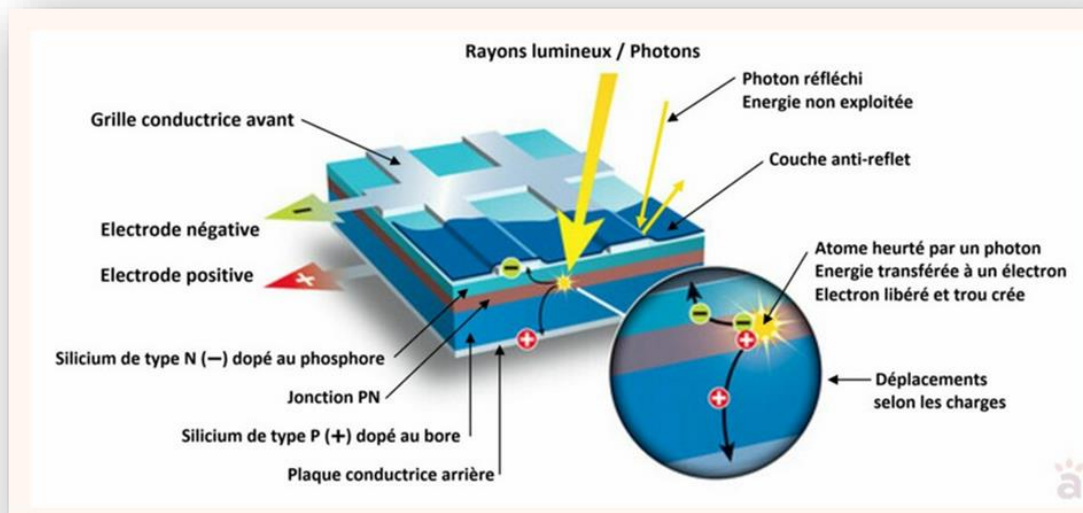


Figure I.3. Principe de conversion photovoltaïque [16]

II.3. Principe de fonctionnement des cellules photovoltaïques :

- a. **Absorption de la lumière** : Lorsqu'un photon (particule de lumière) frappe la cellule photovoltaïque, il libère de l'énergie. Si cette énergie est suffisante, elle va exciter un électron dans le matériau semi-conducteur.
- b. **Création de paires électrons-trous** : L'énergie du photon permet à un électron de passer d'un niveau d'énergie inférieur à un niveau plus élevé, créant ainsi une paire électron-trou. Un électron libre (chargé négativement) est libéré dans la structure, tandis qu'un trou (un espace où un électron a été arraché, et donc chargé positivement) est créé dans le réseau cristallin du silicium.
- c. **Séparation des charges** : Les électrons et les trous sont séparés par le champ électrique interne à la cellule photovoltaïque, qui est créé par la jonction des deux types de silicium (P et N). La couche de silicium de type N a un excès d'électrons, tandis que la couche de type P a un excès de trous. Ce champ électrique provoque la séparation des électrons et des trous, empêchant leur recombinaison.
- d. **Circulation des électrons** : Une fois séparés, les électrons libres sont poussés vers le côté de la cellule photovoltaïque de type N, et les trous vers le côté de

type P. Les électrons peuvent alors circuler à travers un circuit externe, générant ainsi un courant électrique.

- e. **Conversion du courant** : Comme les panneaux photovoltaïques génèrent du courant continu (CC), un onduleur est nécessaire pour convertir ce courant continu en courant alternatif (CA), utilisé pour alimenter des appareils électriques.

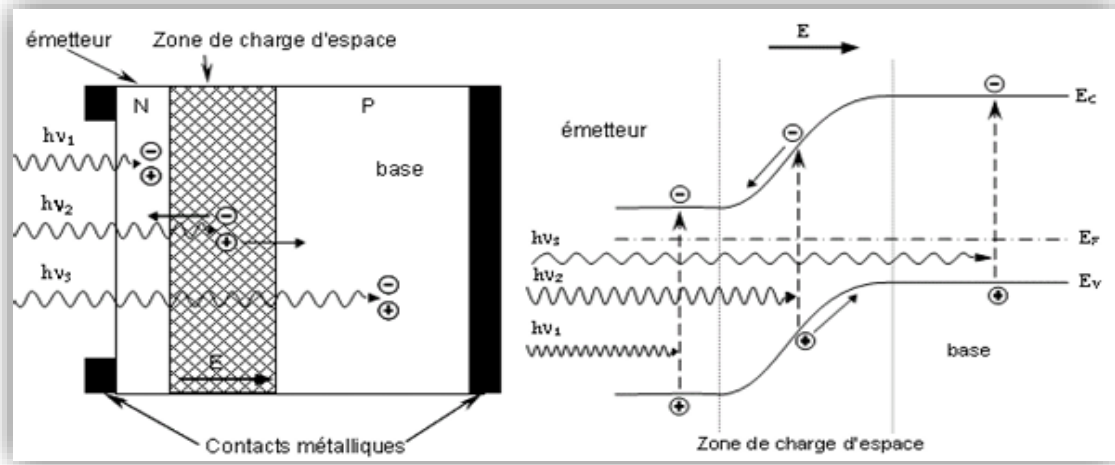


Figure I.4. Structure (image gauche) et diagramme de bande (image droite) d'une cellule photovoltaïque

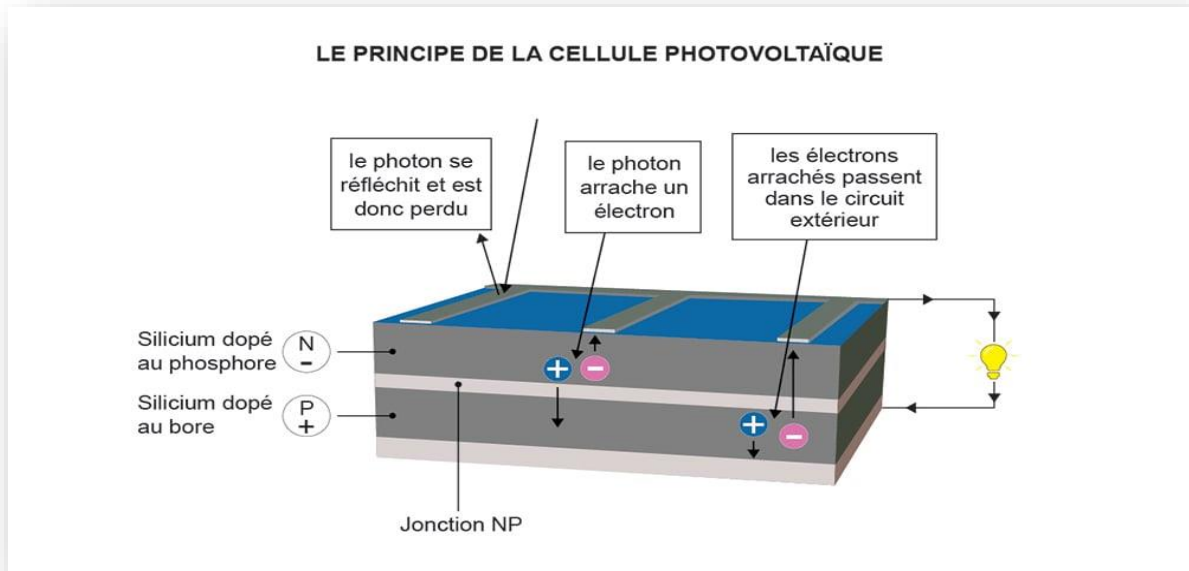


Figure I.5. Le principe de la cellule photovoltaïque

II.4. Paramètres photovoltaïques :

Il existe de nombreux paramètres qui permettent de caractériser une cellule solaire. Ces paramètres sont appelés paramètres photovoltaïques et sont déduits de la caractéristique $I(V)$. La figure 1.6 représente une caractéristique courant-tension $I(V)$ dans le noir et sous illumination typique d'une cellule photovoltaïque à jonction PN. Le tracé de cette courbe permet d'accéder à bon nombre de paramètres physiques caractéristiques du composant. Les premiers paramètres qui apparaissent sur la caractéristique courant-tension d'une cellule photovoltaïque sont le courant de court-circuit (I_{cc}), la tension à circuit ouvert (V_{co}) et le facteur de forme (FF) du composant.

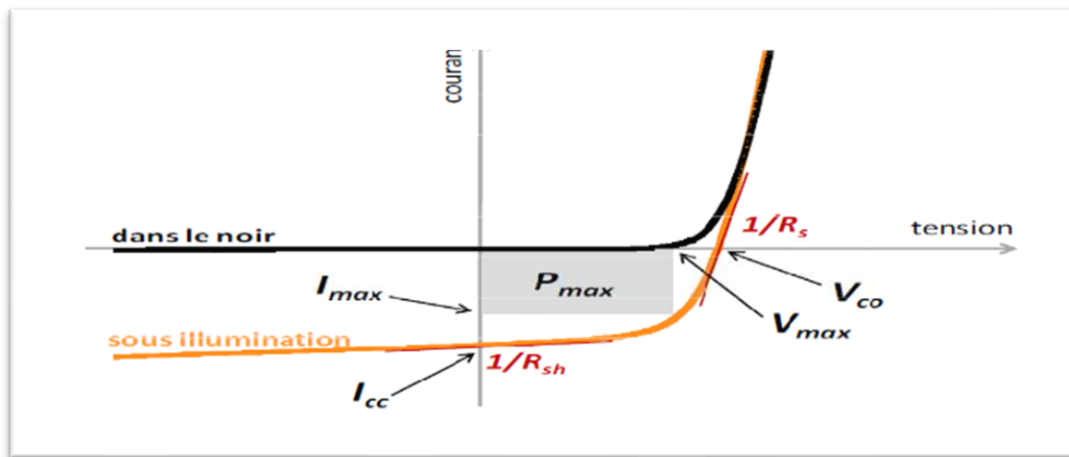


Figure I.6. Caractéristique court tension et paramètre physique d'une cellule photovoltaïque

➤ Courant de court-circuit (I_{cc})

Il s'agit du courant lorsque le potentiel appliqué à la cellule est nul. C'est le plus grand courant que la cellule peut fournir. Celui-ci est en fonction de la température, de la longueur d'onde du rayonnement, de la surface active de la cellule, et de la mobilité des porteurs. Ce courant est linéairement dépendant de l'intensité lumineuse reçue.

➤ Tension de circuit ouvert (V_{co})

Comme son nom l'indique, c'est la tension aux bornes de la cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge ou lorsqu'elle est connectée à une charge de résistance infinie. Elle dépend essentiellement du type de cellule solaire (jonction PN, jonction Schottky), des matériaux de la couche active et de la nature des contacts de la couche active-électrode. Elle dépend de plus de l'éclairement de la cellule.

$$v_{CO} = k \cdot T_c / q \log(I_{ph} / I_s + 1) \quad (I.2)$$

Avec :

$k \cdot T_c / q$: représentant le potentiel thermodynamique

T_c : la température absolue

q : la constante de charge d'électron, $1.6 \cdot 10^{-19}$ C

k : la constante de Boltzmann, 1.380649×10^{-23} J/K

I_{ph} : le courant photonique

I_s : le courant de saturation

Deux régimes peuvent être observés suivant le degré d'éclairement figure I-7. Régime des faibles flux lumineux : dans ce cas, $I_{ph} \ll I_s$, ce qui permet d'écrire :

$$\log(I_{ph} / I_s + 1) = (I_{ph} / I_s) \quad (I.3)$$

D'où :

$$v_{CO} = k \cdot T_c / q (I_{ph} / I_s) \quad (I.4)$$

C'est la zone de comportement linéaire de la cellule. La formule précédente peut s'écrire Aussi $v_{CO} = R_o \cdot I_{ph}$, en posant $R_o = (k \cdot T_c / q \cdot I_s)$: R_o est la résistance interne de la diode en polarisation externe nulle (circuit ouvert) et sous faible flux lumineux.

➤ Régime des flux lumineux suffisamment intenses pour que $I_{ph} \gg I_s$, soit :

$$(I_{ph} / I_s) \gg 1$$

D'où :

$$v_{CO} = k \cdot T_c / q \log(I_{ph} / I_s) \quad (I.5)$$

C'est le domaine du comportement logarithmique.

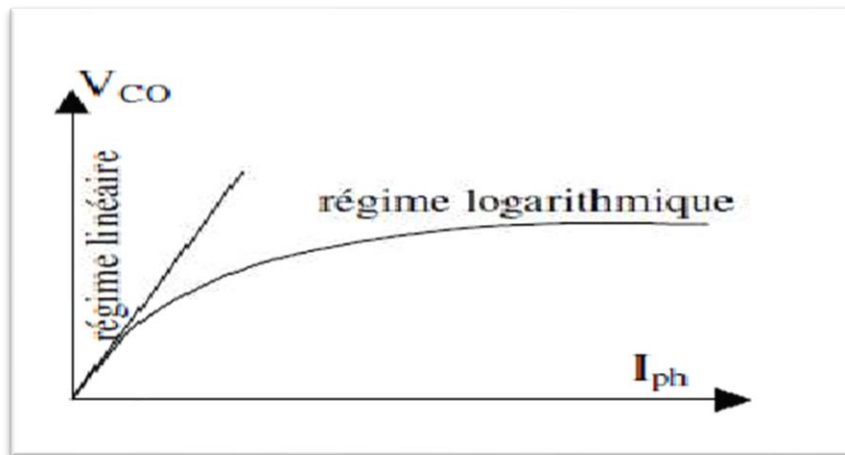


Figure I.7. Différents régimes selon la puissance d'éclairement

Il est important de remarquer que cette tension augmente avec le log de I_{ph} , donc avec le log de l'illumination. En revanche, elle décroît avec la température, malgré le terme KT_c/q . En effet, le courant de saturation, I_s dépend de la surface de la diode (donc de la cellule) et des caractéristiques de la jonction : il varie exponentiellement avec la température et cette dépendance en température compense largement le terme KT_c/q . Donc la tension de circuit ouvert V_{co} baisse avec la température, ce qui est important dans le dimensionnement des systèmes.

➤ Facteur de forme, FF

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

$$FF = P_{max} / (I_{cc} \cdot v_{co}) \quad (I.6)$$

➤ Le rendement η

Le rendement η des cellules PV désigne le rendement de conversion en puissance. Il est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente, P_{in} .

$$\eta = (P_{max} / P_{in}) = (FF \cdot I_{cc} \cdot v_{co}) / P_{in} \quad (I.7)$$

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

➤ Le rendement quantique, EQE

Le rendement quantique est le rapport entre le nombre d'électrons dans le circuit externe et le nombre de photons incidents. Lorsque les photons perdus par réflexion (à la fenêtre de la cellule) et les photons perdus par transmission à travers toute l'épaisseur de la cellule (à cause de l'absorption incomplète) ne sont pas pris en compte, cette grandeur s'appelle alors le rendement quantique interne, IQE (internal quantum efficiency). Dans le cas contraire, ce paramètre s'appelle le rendement quantique externe, EQE (external quantum efficiency). Le rendement quantique externe est défini comme suit :

$$EQE(\lambda) = I_{cc}(\lambda) / \varphi(\lambda) \cdot E(\lambda) / e = I_{cc}(\lambda) / \varphi(\lambda) \cdot (h \cdot c / e \cdot \lambda) \quad (I.8)$$

Où $\varphi(\lambda)$ est le flux lumineux incident, e la charge de l'électron et E l'énergie du photon ($E = \frac{hc}{\lambda}$, h étant la constante de Planck, c la vitesse de la lumière et λ la longueur d'onde).

Le rapport $I_{cc}(\lambda) / \varphi(\lambda)$ est appelé « réponse spectrale » de la cellule, elle est notée $SR(\lambda)$.

Elle représente la sensibilité de la cellule pour chaque longueur d'onde. On peut donc redéfinir le rendement quantique externe comme suit :

$$EQE(\lambda) = SR(\lambda) \cdot (h \cdot c / e \cdot \lambda) \quad (I.9)$$

L'EQE est aussi désigné sous le terme d'IPCE (de l'expression anglaise Incident Photon to Current Efficiency). En remplaçant les trois constantes par leurs valeurs numériques, on obtient

$$IPCE(\lambda) = 1.24(I_{cc} / \varphi(\lambda)) \cdot \lambda \quad (I.10)$$

IPCE(λ) : L'efficacité du photon incident en courant pour une longueur d'onde donnée, λ .

1.24 : Une constante qui permet de relier l'énergie et la longueur d'onde dans le cadre de cette formule.

III. Modélisation d'une cellule photovoltaïque :

La photopile présentée comporte en réalité une résistance série (R_s) et une résistance shunt (R_{sh}). Ces résistances auront une certaine influence sur la caractéristique $I=f(V)$:

1. **La résistance série** : elle représente la résistance interne de la cellule, elle est due à la résistance volumique du semi-conducteur, à la résistance volumique des électrodes métalliques et à la résistance de contact entre le semi-conducteur et le métal. La résistance série doit être faible pour une meilleure efficacité de la cellule solaire, car une valeur plus élevée de la résistance série réduit le courant de court-circuit [17].
2. **La résistance shunt** : elle est due à un courant de fuite au niveau de la jonction, aux impuretés et aux défauts cristallins. La valeur de la résistance shunt doit être faible. Cette faible valeur de résistance shunt entraîne une réduction de la tension en circuit ouvert [10].

III.1. Cellule photovoltaïque idéale :

Une cellule photovoltaïque peut être simplement décrite comme une source de courant idéale produisant un courant I_{ph} proportionnel à la puissance lumineuse incidente, en parallèle avec une diode représentée sur la figure ci dessous, qui correspond à la région de transition p-n de la cellule photovoltaïque. Selon la loi des nœuds [18].

$$I = I_{ph} - I_d \quad (I.11)$$

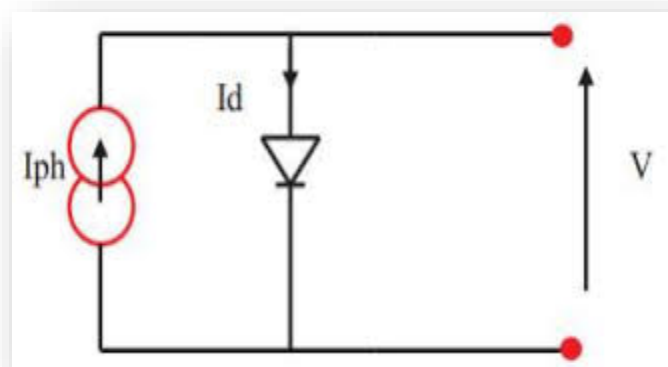


Figure I.8. Modèle de cellule photovoltaïque idéale [18]

Pour un générateur PV idéal, la tension aux bornes de la résistance est égale à celles aux bornes de la diode :[11]

$$v = v_d \tag{I.12}$$

La diode étant un élément non linéaire, sa caractéristique I-V est donnée par la relation [18] :

$$I = I_0 \left(\exp\left(\frac{v_d}{v_t}\right) - 1 \right) \tag{1.13}$$

Avec :

I_0 : Le courant de saturation inverse de la diode.

v_d : La tension à la borne de diode.

$v_t = K_t / q$: est le potentiel thermique.

Donc la relation sera : [11]

$$I = I_{ph} - I_0 \left(\exp\left(\frac{v_d}{v_t}\right) - 1 \right) \tag{1.14}$$

III.2. Cellule photovoltaïque réelle :

Les modèles photovoltaïques précédents ne prenaient pas en compte tous les phénomènes qui se produisent lors de la conversion de l'énergie lumineuse. En effet, dans des situations pratiques, il y a une perte de tension en sortie ainsi qu'un courant de fuite. Par conséquent, cette perte de tension est modélisée par la résistance série R_s et le courant de fuite est modélisé par la résistance parallèle R_p [19].

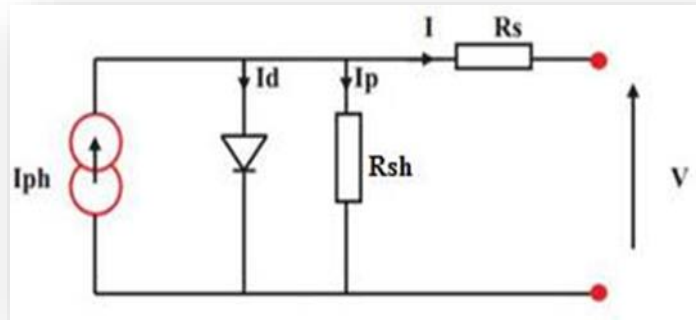


Figure I.9. Modèle de cellule photovoltaïque réelle [19]

Donc on a [11] :

$$I_p = \left(\frac{v + R_s \cdot I}{R_p} \right) \tag{1.15}$$

$$I_d = I_0 \exp\left(\left(\frac{v + R_s \cdot I}{v_t}\right) - 1\right) \tag{1.16}$$

Avec :

I : courant fourni par la cellule

$$I_{ph} = I_{sc} \left(\frac{G}{1000} \right) : \text{le photo courant dépendant de l'éclairement (G)}$$

I_0 : courant de saturation de la diode

k : constante de Boltzmann ($1,381 \cdot 10^{-23}$ J/K)

Q : charge de l'électron = $1,602 \cdot 10^{-19}$ C

N : Le facteur de qualité de diode

T : Température de cellule en kelvin

La relation (1.14) sera : [11]

$$I = I_0 \left(\exp\left(\frac{v+R_s \cdot I}{v_t}\right) - 1 \right) - \left(\frac{v+R_s \cdot I}{R_p}\right) \quad (1.17)$$

III.3. Modèle à une seule diode :

Le modèle à une seule diode est le modèle le plus cité dans la littérature. Il est défini par le même schéma électrique équivalent que la figure 1.10 composé d'une source de courant qui simule la conversion du rayonnement solaire en énergie électrique, d'une résistance shunt (R_{sh}) représentant l'état de la surface périphérique de la cellule, et d'une résistance série (R_s) et d'une diode parallèle pour simuler une jonction P-N.

Le courant généré par le module est donné par [19] :

$$I = I_{ph} - I_s \left\{ \exp\left[\frac{q(v+R_s \cdot I)}{A \cdot k \cdot T \cdot j}\right] - 1 \right\} - \frac{v+R_s \cdot I}{v \cdot R_{sh}} \quad (I.18)$$

III.4. Modèle à deux diodes :

Cette fois, nous avons deux diodes pour représenter la polarisation de la jonction PN. D'une part ces diodes symbolisent la recombinaison des porteurs minoritaires sur la surface du matériau, d'autre part sur le volume du matériau. Le schéma de principe du générateur photovoltaïque passe à la situation de la figure 1.10 [20].

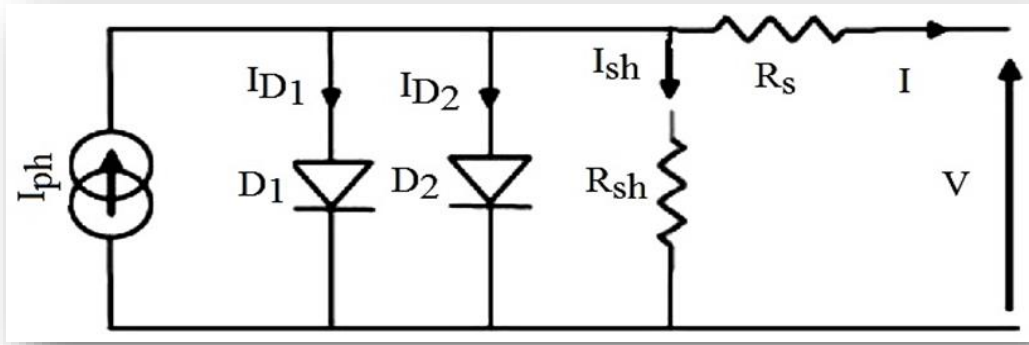


Figure I.10. Schéma équivalent d'une cellule PV Modèle à deux diodes [20]

Le courant fourni par la cellule est donné par la relation (1.16) :

$$I = I_{ph} - I_{s1} \left\{ \exp\left[\frac{q(v+R_s \cdot I)}{A \cdot k \cdot T \cdot j}\right] - 1 \right\} - I_{s2} \left\{ \exp\left[\frac{q(v+R_s \cdot I)}{2 \cdot A \cdot k \cdot T \cdot j}\right] - 1 \right\} - \frac{v+R_s \cdot I}{R_{sh}} \quad (I.19)$$

Avec :

I_{s1} et I_{s2} : sont les courants de saturation de la première et deuxième diode respectivement.

III.5. Modèle explicite :

Le modèle est dérivé après quelques approximations du modèle à une seule diode et ne nécessite que trois points importants de la courbe I-V : le courant de court-circuit I_s , tension de circuit ouvert v_{c0} , courant I_m et tension v_m au point de puissance optimal. Les caractéristiques I-V sont décrites comme suit [21] :

$$I = I_{sc} \left[1 - c_1 \left(\exp\left(\frac{v}{c_2 v_{c0}}\right) - 1 \right) \right] \quad (1.20)$$

Avec :

$$c_1 = \left(1 - \frac{I_m}{I_{sc}} \right) \exp\left(\frac{-v_m}{c_2 \cdot v_{c0}}\right) \quad c_2 = \frac{\frac{v_m}{v_{c0}} - 1}{\ln \left(1 - \frac{I_m}{I_{sc}} \right)}$$

III.6. Modèle à quatre paramètres :

Le modèle traite la cellule photovoltaïque comme une source de courant, en fonction de l'irradiance, en parallèle avec la diode et en série avec la résistance série R_s . La résistance shunt R_{sh} a peu d'effet sur le module simple. Les quatre paramètres qui apparaissent dans l'équation caractéristique I(V) sont : le courant de photon I_{ph} , la résistance série R_s et les deux

caractéristiques de la diode I_s et A . Ces paramètres doivent être déterminés à partir du système d'équations $I(V)$ pour différents points de fonctionnement.

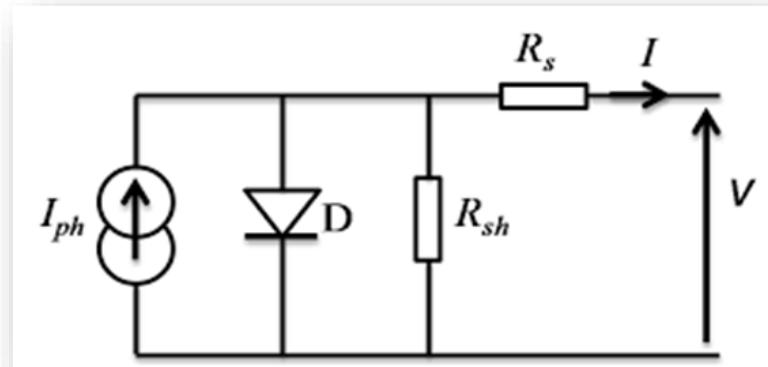


Figure I.11. Circuit équivalent du modèle à quatre paramètres

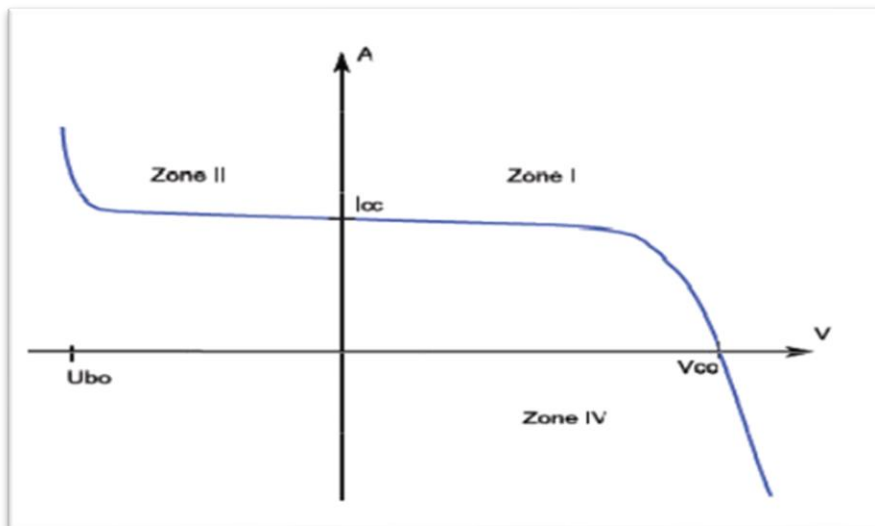


Figure I.12. Caractéristique I-V d'une cellule photovoltaïque

IV. Structure des cellules photovoltaïques :

La structure des cellules photovoltaïques, qu'elles soient en couches minces ou en silicium cristallin, comporte plusieurs couches essentielles pour leur fonctionnement. Voici une description détaillée de ces couches, en incluant la couche absorbante, la couche de transport, l'électrode, et l'encapsulation :

IV.1. Couche active

- **Matériaux** : Pour les cellules à couches minces, les matériaux couramment utilisés incluent le tellure de cadmium (CdTe), le diséléniure de cuivre-indium-gallium

(CIGS), et le silicium amorphe (a-Si). Ces matériaux ont une épaisseur réduite et sont conçus pour absorber efficacement la lumière solaire.

- **Fonction** : La couche absorbante est responsable de la conversion des photons en paires électron-trou, qui sont ensuite séparées pour générer un courant électrique.

IV.2. Couche de transport

- **Matériaux** : Dans les cellules à couches minces, cette couche est souvent constituée de matériaux conducteurs qui facilitent le transport des électrons et des trous vers les électrodes. Par exemple, pour les cellules CIGS, une couche de sulfure de cadmium (CdS) peut servir de couche tampon et de transport.
- **Fonction** : faciliter le mouvement des électrons et des trous générés lors de l'absorption de la lumière.

IV.3. Electrode

- **Matériaux** : Les électrodes sont généralement fabriquées à partir de matériaux conducteurs comme l'aluminium pour la borne négative (cathode) et l'oxyde d'étain et d'indium (ITO) pour la borne positive (anode), qui est transparente pour permettre le passage de la lumière.
- **Fonction** : Les électrodes collectent les électrons et les trous séparés par la couche absorbante et les dirigent vers un circuit extérieur pour former un courant continu.

IV.4. Encapsulation

- **Matériaux** : L'encapsulation est réalisée avec des matériaux comme l'ÉVA (éthylène-vinyl-acétate), le polyéthylène ou le polyvinyle, qui protègent la cellule des intempéries et des dommages mécaniques.
- **Fonction** : L'encapsulation assure la durabilité et la fiabilité des cellules photovoltaïques en les protégeant contre l'humidité, les UV, et les chocs physiques.

Autres couches

- **Substrat** : Le substrat est la base sur laquelle les couches sont déposées. Il peut être en verre, plastique ou métal, selon l'application souhaitée.
- **Barrière d'insolation** : Cette couche est utilisée pour éviter les interactions indésirables entre le substrat et les couches semi-conductrices.

- **Revêtement anti-réfléchissant** : Appliqué sur la face exposée au soleil pour minimiser les réflexions et maximiser l'absorption de la lumière.

V. Rôle des différentes couches dans une cellule solaire :

Dans une cellule solaire, chaque couche joue un rôle crucial pour optimiser la conversion de l'énergie lumineuse en électricité. Voici une description détaillée des couches dans les cellules solaires traditionnelles et à couches minces :

V.1. Cellules Solaire Traditionnelles (Silicium Cristallin)

1. Couches de Silicium Dopées (Type n et Type p) :

- Ces deux couches sont dopées différemment pour créer une jonction p-n.
- La couche dopée de type n contient du phosphore, ce qui lui donne un excès d'électrons.
- La couche dopée de type p contient du bore, ce qui crée un déficit d'électrons.
- Lorsque la lumière frappe ces couches, elle libère des électrons qui se déplacent vers l'électrode appropriée.

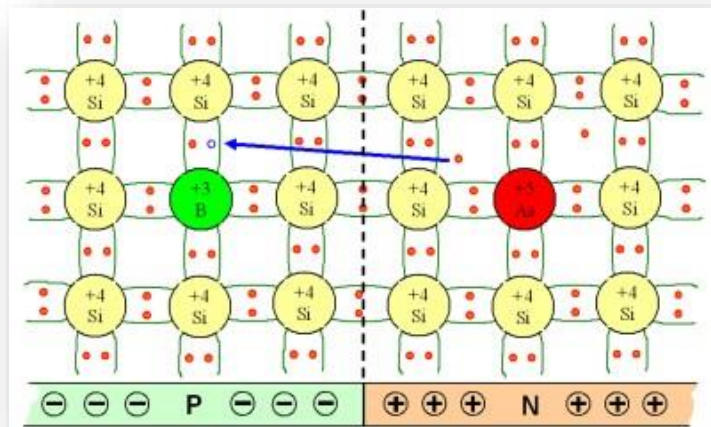


Figure I.13. Représentation schématique des liaisons électronique dans un semi-conducteur

2. Jonction P-N :

- Cette zone est essentielle car elle permet aux électrons libérés par les photons d'être séparés et dirigés vers les électrodes métalliques.

3. Électrodes Métalliques :

- Une grille métallique au-dessus et une plaque métallique en dessous facilitent le flux du courant électrique généré.

V.2. Cellules Solaire à Couches Minces

1. **Substrat :**

Matériau support comme le verre ou le plastique sur lequel toutes les autres couches sont déposées.

2. **Couche de Barrière d'Isolation :**

Protège contre toute interaction indésirable entre le substrat et les matériaux semi-conducteurs suivants.

3. **Couche Arrière de Contact :**

Généralement faite d'un matériau conducteur comme l'aluminium ou le molybdène pour connecter la partie négative de la cellule.

4. **Couches Semi-Conductrices (CdTe, CIGS, a-Si) :**

Absorbent la lumière solaire pour convertir l'énergie en électricité grâce à leur propriété semi-conductrice unique.

5. **Couche Avant de Contact :**

Transparente et conductrice (comme ITO), elle connecte la partie positive de la cellule solaire.

6. **Revêtement Antireflet :**

Réduit les réflexions parasites pour maximiser l'absorption lumineuse par les couches actives.

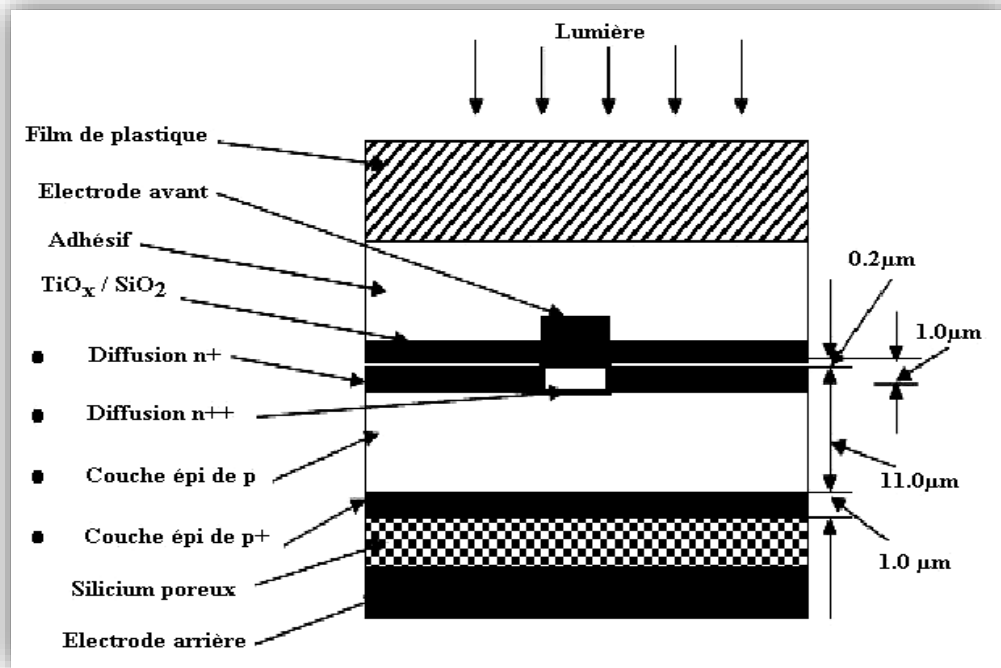


Figure I.14. Schéma structurel d'une cellule photovoltaïque à base de silicium poreux

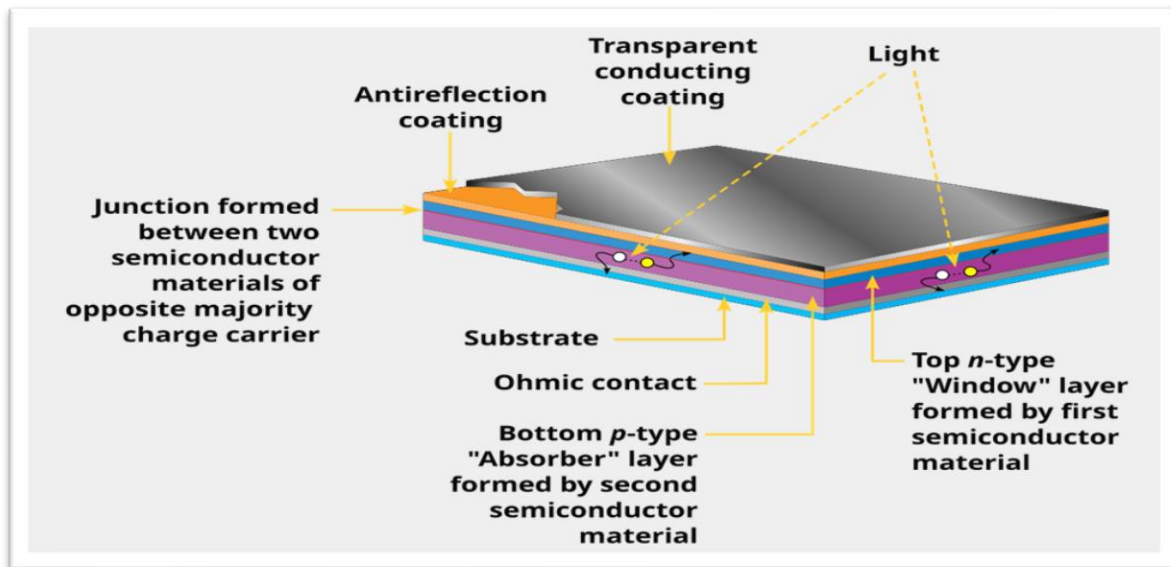


Figure I.15. La structure d'une cellule solaire avec ses différentes couches

VI. Les type des cellules photovoltaïques :

Les cellules solaires sont généralement classées en trois générations, chacune représentant une évolution technologique visant à améliorer l'efficacité, réduire les coûts de production et

explorer de nouvelles méthodes pour capter l'énergie solaire. Voici un aperçu des trois générations de cellules solaires :

VI.1. Première génération : Cellules solaires à base de Silicium

- **Matériaux** : Silicium cristallin (monocristallin et polycristallin).
- **Technologie** : Ces cellules utilisent le silicium, un matériau semi-conducteur bien connu, pour convertir la lumière solaire en électricité. Elles sont fabriquées à partir de tranches de silicium pur cristallisé.
- **Efficacité** : Entre 10 et 22 % en fonction du type de silicium (monocristallin étant le plus efficace).
- **Avantages** :
 - ✓ Longue durée de vie (plus de 25 ans).
 - ✓ Haute efficacité pour les cellules monocristallines.
 - ✓ Technologie éprouvée et largement utilisée.
- **Inconvénients** :
 - ✓ Coût élevé de production, notamment pour les cellules monocristallines.
 - ✓ Processus de fabrication énergivore et utilisation de ressources naturelles importantes (comme le silicium).

VI.2. Deuxième génération : Cellules solaires à couche mince

- **Matériaux** : Divers matériaux semi-conducteurs comme le tellure de cadmium (CdTe), le cuivre-indium-gallium-sélénium (CIGS) et le silicium amorphe (a-Si).
- **Technologie** : Ces cellules utilisent des matériaux déposés en fines couches sur un substrat (souvent du verre ou du plastique). Ces cellules sont beaucoup plus légères et flexibles que les cellules en silicium cristallin.
- **Efficacité** : Moins élevée que les cellules à Silicium, généralement entre 10 et 15 %.
- **Avantages** :
 - ✓ Moins coûteuses à produire.
 - ✓ Flexibilité et légèreté (ce qui les rend adaptées à certaines applications, comme les panneaux solaires intégrés dans les bâtiments).
 - ✓ Processus de fabrication plus simple et moins énergivore.
- **Inconvénients** :

- ✓ Moins efficaces que les cellules en silicium.
- ✓ Durabilité souvent inférieure à celle des cellules en silicium.
- ✓ Certains matériaux (comme le cadmium) peuvent poser des problèmes environnementaux.

VI.3. Troisième génération : Cellules solaires avancées

Les cellules solaires de troisième génération visent à surmonter les limitations des deux premières générations en termes d'efficacité, de coût et de flexibilité. Elles utilisent des matériaux et des concepts novateurs pour maximiser l'absorption de l'énergie solaire.

- **Cellules solaires à concentration (CPV) :**
 - **Principe** : Utilisent des lentilles ou des miroirs pour concentrer la lumière sur une petite cellule solaire à haute efficacité.
 - **Efficacité** : Très élevée (jusqu'à 40 % ou plus).
 - **Avantages** : Haute efficacité, utilisation de matériaux rares de manière plus efficace.
 - **Inconvénients** : Nécessitent des systèmes de suivi solaire, coûteuses et complexes.
- **Cellules solaires organiques (OPV) :**
 - **Principe** : Utilisent des matériaux organiques comme des polymères pour la conversion de la lumière en électricité.
 - **Efficacité** : Moins efficace que les cellules à silicium (environ 10 à 12 %), mais en progression.
 - **Avantages** : Coût faible, légèreté, flexibilité, et possibilité de fabrication en grandes surfaces par impression.
 - **Inconvénients** : Moins durable, efficacité encore inférieure par rapport aux autres technologies.
- **Cellules solaires tandem :**
 - **Principe** : Superposent plusieurs couches de matériaux photovoltaïques pour capter différentes longueurs d'onde de lumière.
 - **Efficacité** : Peut dépasser 30 %, avec des records plus élevés dans certaines configurations.
 - **Avantages** : Amélioration de l'efficacité grâce à l'utilisation de plusieurs matériaux qui captent différentes parties du spectre lumineux.

- **Inconvénients** : Fabrication complexe et coût élevé pour le moment.
- **Cellules solaires à pérovskite** :
 - **Principe** : Utilisent des matériaux à structure cristalline similaire à la pérovskite, souvent un composé à base de plomb.
 - **Efficacité** : En laboratoire, elles ont atteint des rendements proches de 25 %, avec des perspectives de croissance.
 - **Avantages** : Fabrication à faible coût, flexibilité, et un potentiel d'efficacité élevé.
 - **Inconvénients** : Problèmes de durabilité et de toxicité du plomb (dans certains types de pérovskites).

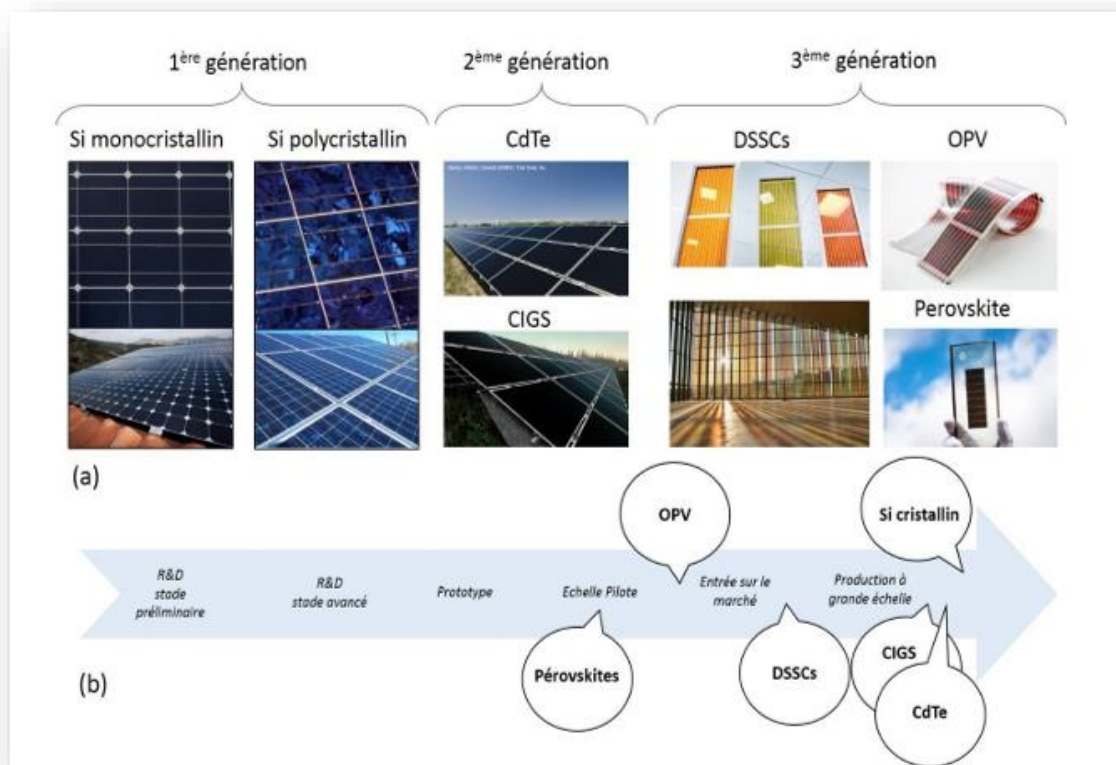


Figure I.16. (a) Exemples de technologies photovoltaïques (b) Etat de développement pour ces technologies photovoltaïques

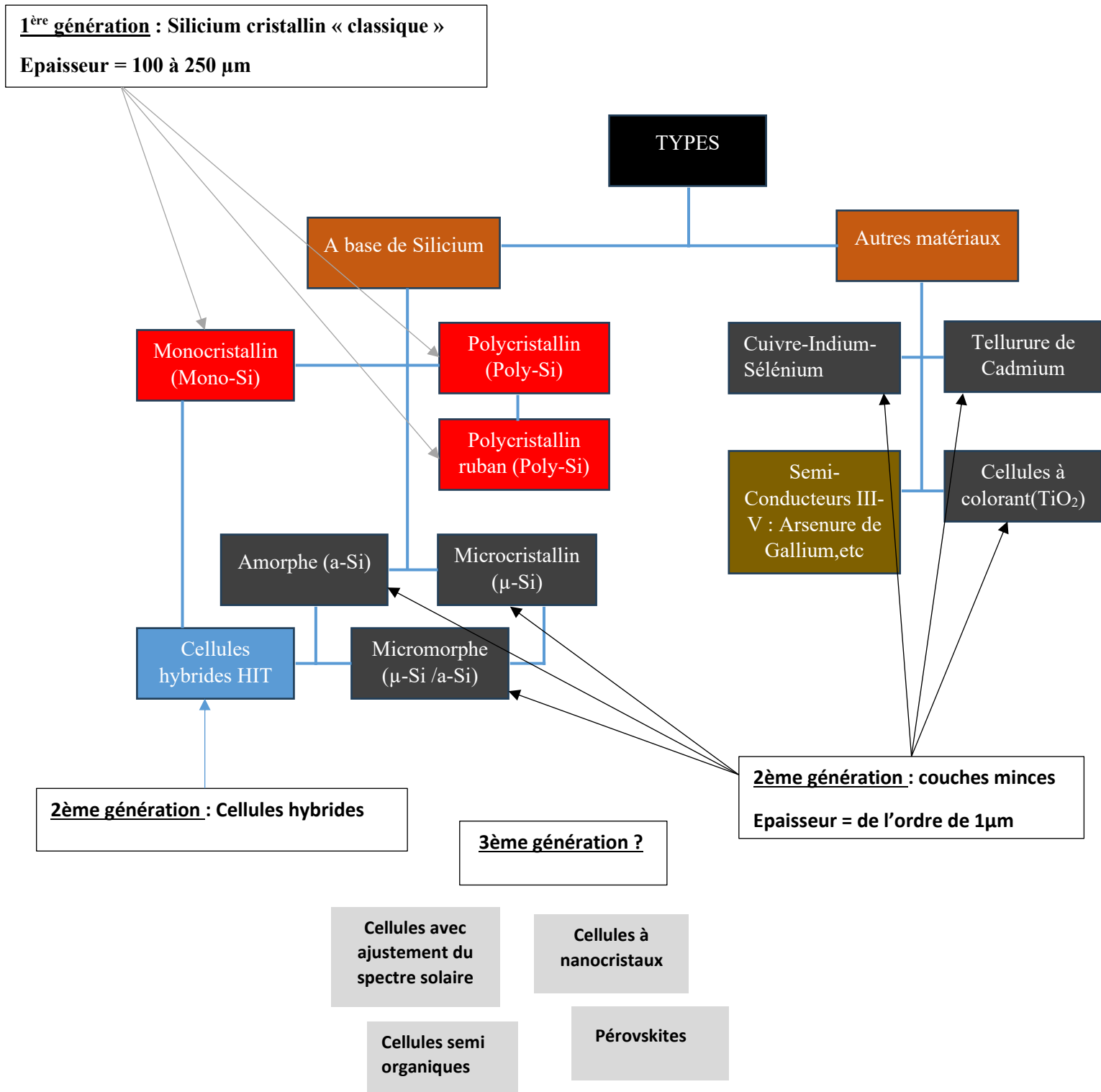


Figure I.17. Principaux types de technologies de cellules PV recensés qui diffèrent par les matériaux utilisés ou /et leur épaisseur

Conclusion :

Les cellules photovoltaïques permettent de convertir l'énergie solaire en électricité grâce à l'effet photovoltaïque. Leur développement a progressé depuis le Silicium jusqu'aux nouvelles technologies comme les pérovskites. Chaque génération de cellules vise à améliorer le rendement, la stabilité et le coût pour favoriser une transition énergétique durable.

Chapitre II :

Etude des matériaux et cellules
pérovskites

Introduction :

Dans le but de développer des systèmes photovoltaïques économiques alternatifs aux cellules solaires en silicium, les cellules solaires à base de pérovskite ont suscité ces dernières années un intérêt considérable. Ces cellules solaires en pérovskite (CSP) ont soulevé une grande attention en raison de leur efficacité de conversion de puissance (ECP) exceptionnelle, qui a rapidement augmenté de 3,9 % à 25,5 % en moins d'une décennie. Elles ont une large possibilité d'utilisation grâce à leurs différentes propriétés d'où vient l'intérêt de les étudier. Ce chapitre est consacré entièrement à une étude bibliographique des cellules solaires à base de ce matériau émergent.

I. Présentation des pérovskites :**I.1. Définition et Historique :**

La pérovskite est un composé minéral, constitué de calcium et de titane. Sa formule chimique est « CaTiO_3 ». Cette structure a été découverte en 1839 par le minéralogiste allemand Gustave Rose dans l'Oural. C'est un minéral noir ou brun-rouge, d'aspect métallique, assez rare. Elle est nommée pérovskite en l'honneur du minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Perovski [22-23]. La structure la plus simple de la pérovskite est la structure cubique simple de formule ABX_3 qui désigne un ensemble des composés cristallins acquis sous un même arrangement atomique et qui fait références à des structures tridimensionnelles (3D) de symétrie cubique figure II.1 (avec l'ion A dans les coins, l'ion B au centre et l'ion négatifs occupe la position centrée de l.

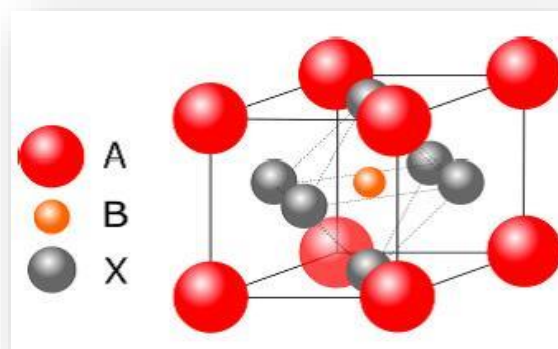


Figure II.1. Représentation schématique d'une maille de la structure pérovskite idéale



Figure II.2. La pérovskite Titanate de Calcium (CaTiO_3) [24]

I.2. La structure cristalline des pérovskites :

Chimiquement, les pérovskites (de prototype CaTiO_3) de formule générale ABX_3 , sont constituées de trois sites (deux cationiques A et B, et un site anionique X). Le site A (cation A) est occupé par un/des cations de rayon ionique élevé, 12 anions d'oxygène comme proches voisins (Ca^{2+} , Sr^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} , Bi^{2+}). Le site B (cation B) un cation de rayon ionique plus faible, 6 anions d'oxygène comme proches voisins est occupé par les ions (Ti^{4+} , Zr^{4+} , Fe^{3+} , Sc^{3+}).

Les anions X sont généralement l'ion oxygène O ou fluorure F. La figure II.3 représente la structure de la maille élémentaire d'une pérovskite simple ABX_3 , les positions des atomes A, B et X sont : A (0.0.0), B ($1/2$, $1/2$, $1/2$) et X1($1/2$, $1/2$, 0), X2 ($1/2$, 0, $1/2$) et X3 (0, $1/2$, $1/2$). De plus, la maille élémentaire des pérovskites dans cette structure contient 5 atomes (un atome du cation A, un atome du cation B et trois atomes d'oxygène), il s'agit donc d'un assemblage compact où la compacité, qui est la proportion d'espace occupée par les atomes de la maille de cette structure (cubique à faces centrées) est de 74 %.

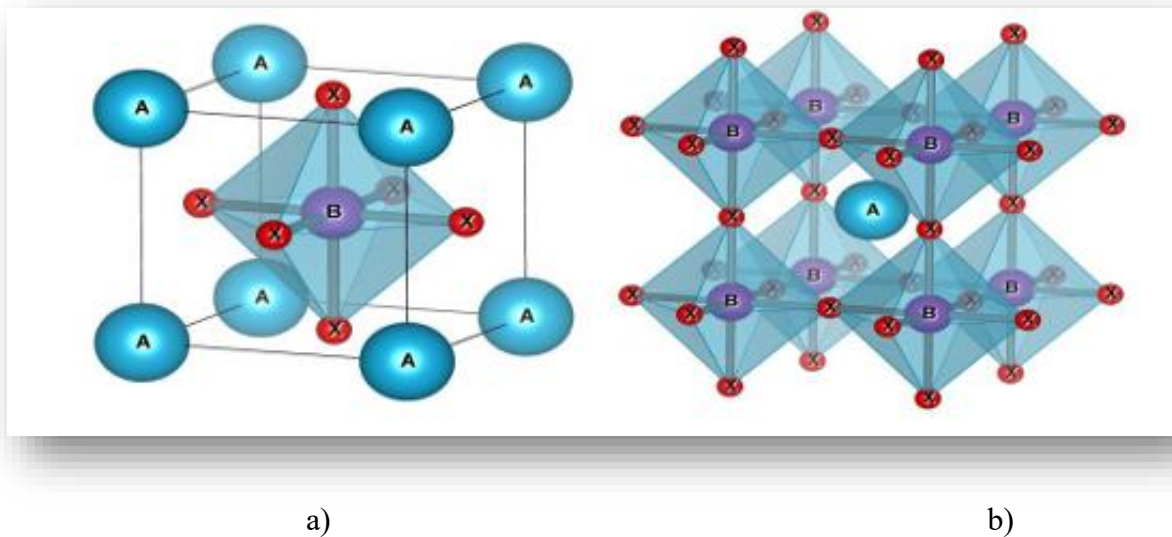


Figure II.3. Deux différentes façons de représenter la structure pérovskite ABX_3 cubique. a) atome B à l'origine (octaèdre BX_6 représenté), b) atome A à l'origine de la maille

I.3. Propriétés générales des pérovskites :

Durant les vingt dernières années, parmi les propriétés physiques observées dans les pérovskites, nous illustrerons dans cette partie les propriétés les plus étudiés

I.3.1. La piézoélectricité :

La piézoélectricité a été trouvée en premier temps en 1916 par le physicien français Paul Langevin. Les matériaux, dont les propriétés peuvent transformer l'énergie mécanique ou la chaleur en électricité, sont appelées piézoélectriques [25]. Il existe deux effets de la piézoélectricité : Lorsqu'on applique une contrainte mécanique sur un corps, il se charge électriquement en surface. C'est l'effet direct. Il est utilisé dans les capteurs. Inversement, lorsqu'on applique un champ électrique sur le même corps, il se déforme. C'est l'effet inverse. Cet effet est à la base des actionneurs [26].

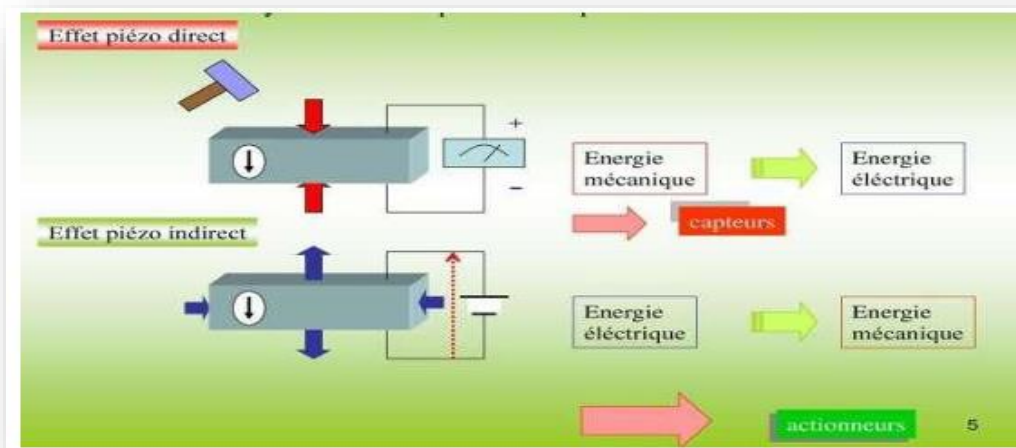


Figure II.4. Représentation des deux effets de la piézoélectricité [27]

La piézoélectricité est essentiellement dépendante de la symétrie des cristaux qui génèrent une polarisation de la maille. La formation du moment dipolaire provient d'une application d'une contrainte sur les centres de gravité des charges positives et négatives [25].

Les matériaux piézoélectriques sont utilisés dans :

- Les microphones.
- Les capteurs sous-marins.
- Moteurs piézoélectriques (ultrasonore) [26].



Figure II.5. Quelques matériaux piézoélectriques [27]

I.3.2. La pyroélectricité :

Les pyroélectriques sont un sous-groupe des piézoélectriques. Les matériaux qui peuvent générer une polarisation spontanée à une variation de température sont dits pyroélectriques [28]. En général, la pyroélectricité est la propriété d'un matériau dans lequel un changement

de température entraîne une variation de polarisation électrique. Cette variation de polarisation crée une différence de potentiel temporaire, celle-ci disparaissant après le temps de relaxation diélectrique [29]. Ces matériaux possèdent un axe polaire unique et peuvent donc présenter une polarisation spontanée le long de cet axe qui dépend généralement de la température. Parmi les matériaux piézoélectriques, il y a 10 classes qui sont pyroélectriques [30].

Les pérovskites qui possèdent cette propriété sont utilisées dans :

- les détecteurs thermiques.
- les imageurs IR [31].

I.3.3. La ferroélectricité :

Les ferroélectriques sont un sous-groupe des pyroélectriques. Ces matériaux possèdent des dipôles spontanés. Pour qu'un matériau devienne un ferroélectrique, deux conditions doivent être vérifiées :

- L'existence de la polarisation spontanée (dipôles spontanés).
- Par contre aux matériaux pyroélectriques, cette polarisation doit être inversée en présence d'un champ électrique externe dans un domaine de température donné [28].

La ferroélectricité disparaît au-dessus d'une température à laquelle le matériau perd son aimantation permanente, c'est la température de Curie T_C et donc il devient paraélectrique [29].

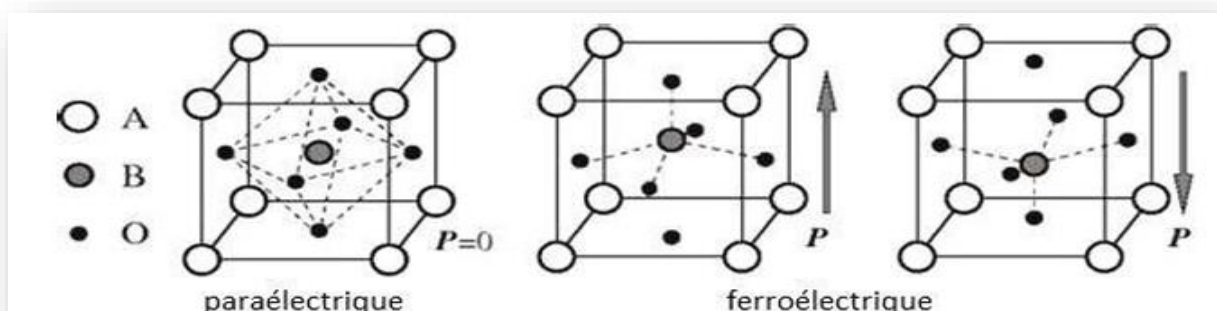


Figure II.6. Dipôle induit par décalage des barycentres [30]

Les matériaux ferroélectriques sont utilisés dans :

- Les mémoires d'ordinateur non-volatiles.
- Diodes optiques.
- Filtres ultrasonores [31].

I.3.4. La supraconductivité :

La supraconductivité est notamment présente au sein de matériaux dont la structure est dérivée de celle des pérovskites. A des températures élevées, les pérovskites peuvent être des supraconducteurs. Cette propriété est caractérisée quand la résistance électrique d'un matériau est absente et le champ magnétique à l'intérieur de ce matériau est annulé à des températures très basses. Les pérovskites qui possèdent cette propriété sont utilisées dans les condensateurs, les appareils à micro-ondes et dans l'électronique ultrarapide [32].

I.3.5. La magnétorésistance :

La magnétorésistance (MR) a été découverte en 1857 par William Thomson. Les pérovskites qui possèdent cette propriété changent soudainement leur résistance électrique lorsqu'elles sont placées dans un champ magnétique [32]. Les recherches scientifiques récentes ont permis de découvrir différents types de magnétorésistance : la Magnétorésistance géante de multicouches métalliques, la magnétorésistance à effet tunnel et la magnétorésistance colossale (essentiellement des oxydes de manganèse de type pérovskite) [33].

Les pérovskites qui possèdent cette propriété sont utilisées dans : les bandes, les disques magnétiques, têtes de lecture pour les disques... [32]. Les matériaux importants de structure pérovskite, possédant des propriétés et des applications intéressantes peuvent être trouvés dans le tableau II.1 [34].

I.3.6. Propriété optique :

La pérovskite est un matériau à bande interdite directe et par conséquent, il a une force d'absorption optique élevée et une plage plus large pour absorber suffisamment d'énergie solaire pour atteindre une valeur élevée d'efficacité de conversion de puissance [35]. De la figure II.7 on peut voir qu'à la longueur d'onde visible le coefficient d'absorption de la pérovskite est plus élevé. De sorte que la pérovskite peut absorber plus de photons. Cette grande absorption, comparée à celle du silicium cristallin permet de réduire l'épaisseur de la couche pérovskite à environ 500 nm pour une absorption quasi complète [36]. Les porteurs de charges photo générées sont alors plus facilement collectés du fait de la plus faible distance à parcourir.

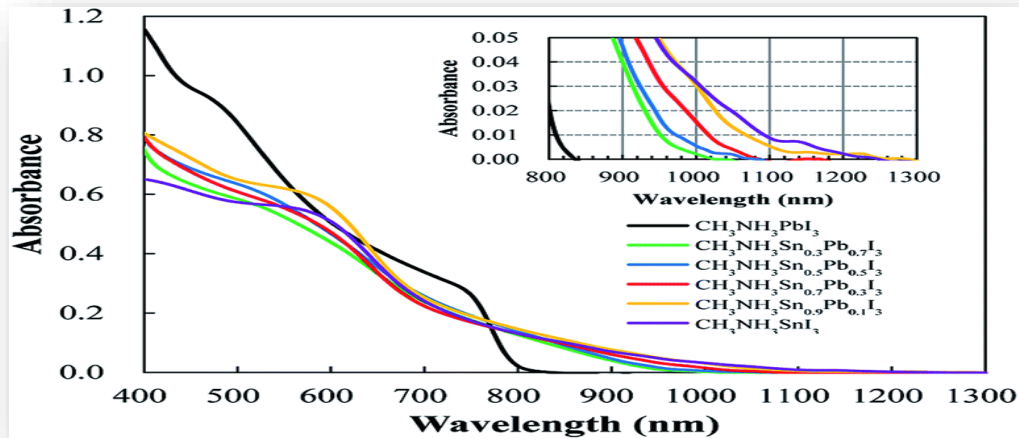


Figure II.7. Courbe d'absorption des matériaux [37]

I.3.7. Propriété électronique :

Les matériaux pérovskites présentent des propriétés électroniques remarquables qui dépendent de leur structure cristalline de type ABX₃. Leur permittivité diélectrique élevée permet de réduire les pertes par recombinaison en stabilisant les porteurs de charge, tandis que leur tolérance aux défauts minimise la formation de pièges électroniques nuisibles. Grâce à ces caractéristiques, les pérovskites offrent une bonne mobilité des électrons et des trous, et sont donc très performants dans des dispositifs comme les cellules solaires, les LEDs ou les photodétecteurs.

Tableau II.1. Propriétés physiques de certains matériaux type pérovskite

Composition	Propriété physique	Application
CaTiO_3	Diélectricité	Micro-onde
BaTiO_3	Ferroélectricité	Mémoires d'ordinateur non- volatiles
$\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$	Piézoélectricité	Sondes
$\text{Ba}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_3$	Semi-conducteur	Semiconducteur
$\text{Y}_{0.33}\text{Ba}_{0.67}\text{CuO}_{3-\delta}$	Supraconducteur	Détecteurs des signaux magnétiques
$(\text{Ln}, \text{Sr}) \text{CoO}_{3-\delta}$	Conducteur mixte ionique et électronique	Diffusion de gaz membranes
$\text{BaInO}_{2.5}$	Conducteur ionique	Electrolyte en piles à combustible
$\text{AMnO}_{3-\delta}$	Magnétorésistance géante	Têtes de lecteur pour des disques durs

II. Les types des matériaux pérovskites :

II.1. Pérovskite tétragonale :

L'exemple le plus connu d'une pérovskite tétragonale est probablement la forme du BaTiO₃ ferroélectrique à la température ambiante, avec $a = 3.994 \text{ \AA}$, $c = 4.038 \text{ \AA}$ et $Z = 1$. Dans ce cas les octaèdres TiO₆ sont légèrement distordu (une liaison Ti-O à 1.86 \AA , quatre à 2.00 \AA et une plus longue à 2.17 \AA). Le baryum est coordonné, par quatre oxygènes à 2.80 \AA , quatre à 2.83 \AA et quatre autres à 2.88 \AA . Dans l'isotype PbTiO₃, les polyèdres TiO₆ sont plus tordus que dans BaTiO₃, cela peut être lié à la puissance plus grande de polarisation et le rayon ionique du Pb (II), ceci a été souvent discuté dans les systèmes contenant ce cation [38]. Ce type offre un rendement de 18%.

II.2. Pérovskite Rhomboédrique :

En plusieurs matériaux, la maille cubique peut avoir une petite déformation à la symétrie rhomboédrique. Si cette déformation n'élargit pas la maille unitaire, il est possible de l'indexer à la maille unitaire contenant une ou deux formules unitaires respectivement avec les angles rhomboédriques $\alpha \sim 90^\circ$ où $\alpha \sim 60^\circ$. Cependant, les anions sont généralement déplacés comme l'exige la maille de plus grande unité avec $\alpha \sim 60^\circ$. Les exemples des pérovskites rhomboédriques sont LaAlO₃ et LaCoO₃. LaCoO₃ a la structure rhomboédrique à la température ambiante, mais à températures se transformant à une autre phase élevée il subit deux transitions de phase intéressantes se transformant à une autre phase rhomboédrique [39,40]. Offrant un rendement qui est supérieur à 30% en simulation, ce sont des résultats théoriques, non certifié expérimentaux.

II.3. Pérovskite Orthorhombique :

La structure GdFeO₃ est probablement la plus illustrative de toutes les pérovskites orthorhombiques distordues. Les paramètres de mailles sont :

$a = 5.346 \text{ \AA}$, $b = 5.616 \text{ \AA}$ et $c = 7.666 \text{ \AA}$ avec $Z = 4$ [41].

Dans cette structure les octaèdres de FeO₆ sont distordus et inclinés. En outre le polyèdre GdO₁₂ est sévèrement distordu, montrant des coordinations (8 + 4) [42]. Ce type présente un rendement de 11.3%.

II.4. Pérovskite monoclinique et triclinique :

La maille unitaire (BiMnO₃) monoclinique ou (BiCrO₃) triclinique ont été rapportée dans plusieurs cas. Cependant, dans beaucoup de cas, ces mailles se sont avérées être des pseudo mailles d'une vraie maille multiple. Par exemple ; les phases de-type GdFeO₃ ont été fréquemment classées sur les bases d'une pseudo maille monoclinique avec $a \sim b \sim a'$ et $\beta \sim 90^\circ$.

II.5. Polymorphisme :

Comme indiqué : précédemment, un grand nombre de matériaux type pérovskite présentent plusieurs modifications polymorphes. Certaines d'entre elles sont très importantes par rapport à ces propriétés physiques et à leurs applications. Par exemple, dans BaTiO₃ et KNbO₃ on observe les transformations suivantes avec l'augmentation des températures :

Rhomboédrique ↔ orthorhombique ↔ tétragonale ↔ cubique

Ces changements de phase sont réversibles et toutes ces formes polymorphes possèdent une maille unitaire pseudocubique avec $a' \sim 4 \text{ \AA}$. Il convient de noter que les trois formes sont ferroélectriques à plus basse température [43]. Les polymorphismes offrent un rendement de 21.59%.

Tableau II.2. Les systèmes cristallins et leurs paramètres

Type de pérovskite	Exemples	Symétrie cristalline	Paramètres de maille	Caractéristiques principales
Tétraгонаle	BaTiO ₃ , PbTiO ₃	Quadratique	$a=b \neq c ; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Anisotropie modérée, bon ferroélectrique (BaTiO ₃), changement de phase à haute T.
Rhomboédrique	LaAlO ₃ , LaCoO ₃	Rhomboédrique	$a=b \neq c ; \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	Structure légèrement déformée, souvent présente à basse température.
Orthorhombique	GdFeO ₃	Orthorhombique	$a \neq b \neq c ; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Forte distorsion, propice aux propriétés magnétiques complexes.
Monoclinique	BiMnO ₃	Monoclinique	$a \neq b \neq c ; \alpha=\beta=\gamma=90^\circ, \beta \neq 90^\circ$	Possède une distorsion plus forte, Ferro électrique ou multi ferroïque.
Triclinique	BiCrO ₃	Triclinique	$a \neq b \neq c ; \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	Structure la plus déformée, instable thermodynamiquement.
Polymorphe	BaTiO ₃ , KNbO ₃	Différentes selon la température	Varie avec la phase : cubique, tétraгонаle, orthorhombique, etc .	Changement de phase selon la température, affecte les propriétés électriques.

III. Critères de stabilité d'une structure pérovskite :

La stabilité de la structure pérovskite est influencée par divers facteurs, tels que la composition chimique, la taille des ions et l'ordre d'empilement.

III.1. Rapport cation- anion :

Dans les structures pérovskites, les cations occupent les coins d'un octaèdre et un anion se trouve au centre. Pour assurer la stabilité, il est important que le rapport de taille entre les cations et les anions soit approprié. En règle générale, les cations doivent être plus grands que les anions pour éviter les contraintes de coordination.

III.2. Ordre d'empilement :

Il est important de noter que dans la structure pérovskite, les cations sont coordonnés par un arrangement d'oxygène formant des octaèdres. La stabilité de cette structure dépend de l'ordre d'empilement des octaèdres ainsi que de la disposition des cations à l'intérieur de ceux-ci. Il est crucial que l'arrangement soit tel que les forces électrostatiques entre les cations et les anions soient équilibrées et minimisées pour garantir la stabilité de la structure.

III.3. Facteur de tolérance (Facteur de Goldschmidt) :

Dans une structure pérovskite, le facteur de tolérance permet d'évaluer la capacité d'une structure pérovskite à subir des distorsions octaédriques. Ce dernier est généralement employé pour prédire si une telle structure sera stable ou si elle subira des distorsions afin de s'adapter à la différence de taille entre les cations. Le facteur de Goldschmidt est un paramètre important utilisé pour définir les diverses structures dérivées de la structure pérovskite idéale, et souvent représenté par :

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

Où r_A , r_B et r_X les rayons ioniques du cation A, cation B et de l'anion X, respectivement. Dans une structure pérovskite idéale (cubique), le facteur de tolérance devrait se rapprocher de la valeur de 1. Tous écarts par rapport à la valeur idéale indiquent que la structure idéale a tendance à se déformer en formant d'autres structures cristallines (orthorhombique, rhomboédrique ou Hexagonale). Le tableau illustre la déformation de la structure idéale en fonction de la valeur du facteur de Goldschmidt (t)

Tableau II.3. Variation des structures cristallines en fonction du facteur de tolérance t

$t < 0.75$	$0.75 < t < 1.06$			$t > 1.06$
Ilménite	Pérovskites			Hexagonal (PbTiO ₃)
	$0.75 < t < 0.96$	$0.96 < t < 1.06$	$0.99 < t < 1.06$	
	Distorsion orthorhombique (GdFeO ₃)	Distorsion rhomboédrique (LaCO ₃ et BaFeO ₃)	Cubique (SrTiO ₃ et Rb MnF ₃)	

III.4. Composition chimique :

Les compositions chimiques jouent un rôle important dans la stabilité de la structure pérovskite. Celle-ci peut varier en fonction des éléments présents, notamment des cations de valences différentes et des anions. Des substitutions ou des dopages contrôlés peuvent être utilisés pour modifier les propriétés et la stabilité de la structure. Il est noté que les conditions de stabilité mentionnées précédemment sont générales et peuvent varier selon les matériaux pérovskites considérés. La structure pérovskite est connue pour sa grande diversité de compositions et de propriétés, ce qui la rend intéressante dans de nombreux domaines de la science des matériaux.

IV. Application des matériaux pérovskites :

IV.1. Diode électroluminescente (LED) :

Les diodes électroluminescentes à pérovskite (PeLED) ont été présentées dans les années 90, les matériaux actifs étaient des structures lamellaires. Elles sont apparues comme un candidat prometteur pour les sources lumineuses de nouvelle génération en raison de leur excellente pureté de couleur, de leur accordabilité spectrale, de leur rendement lumineux élevé et de leurs faibles coûts de traitement [44].

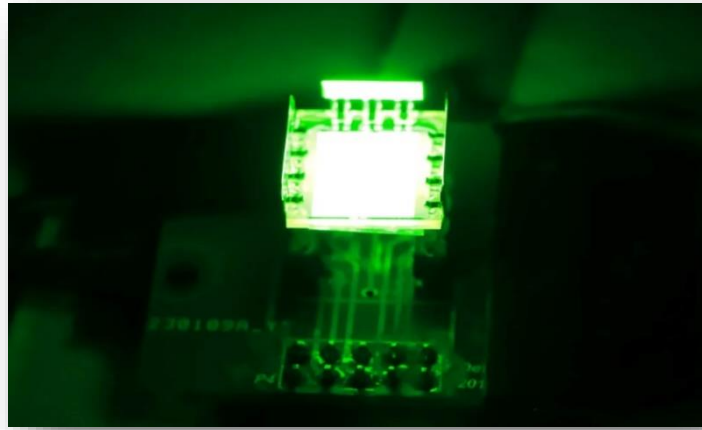


Figure II.8. Diode électroluminescente [45]

IV.2. Laser:

Un effet laser a été observé pour la première fois dans les matériaux pérovskites en 1998. L'un des grands avantages de ces matériaux réside dans la possibilité de contrôler leur bande interdite en ajustant leur composition chimique. Cela permet de concevoir des lasers émettant à différentes longueurs d'onde, couvrant une grande partie du spectre visible et proche infrarouge. De plus, leur fabrication est peu coûteuse, car ils peuvent être élaborés à partir de solutions à basse température, ce qui ouvre la voie à des dispositifs lasers flexibles, imprimables ou intégrables sur divers supports.

IV.3. Les capteurs :

Les matériaux pérovskites, suscitent un intérêt croissant dans le domaine des capteurs en raison de leurs excellentes propriétés optiques et électroniques. Leur structure cristalline bien définie leur confère une forte sensibilité à l'environnement, ce qui les rend particulièrement efficaces pour détecter divers types de signaux physiques, chimiques ou biologiques.

IV.4. Catalyse :

Les pérovskites, notamment les oxydes de métaux de transition de type ABO_3 , jouent un rôle de plus en plus important dans le domaine de la catalyse hétérogène. Leur structure cristalline particulière permet une grande flexibilité chimique, ce qui les rend très adaptés à diverses réactions catalytiques. La présence de lacunes d'oxygène favorise le transfert d'oxygène, essentiel pour les réactions redox. Et pour la stabilité thermique et chimique adaptée aux environnements sévères.

IV.5. Les cellules photovoltaïques :

Les matériaux pérovskites sont très prometteurs pour les cellules photovoltaïques en raison de leurs principaux avantages :

- ✓ Haute efficacité de conversion de l'énergie solaire, avec des rendements dépassant 25% en laboratoire.
- ✓ Faible coût de fabrication, grâce à des procédés simples à basse température.
- ✓ Excellente absorption de la lumière, couvrant une large partie du spectre solaire.
- ✓ Flexibilité, permettant la fabrication de cellules solaires souples ou transparentes.
- ✓ Compatibilité avec les cellules au silicium pour former des dispositifs en tandem encore plus performants.

V. Les cellules pérovskites :

V.1. Architecture des cellules pérovskites :

Les cellules solaires à pérovskite sont généralement conçues avec une couche active de pérovskite placée entre deux couches sélectives de charge, elles-mêmes situées entre deux électrodes. La couche inférieure est une électrode transparente en oxyde conducteur (TCO), comme l'oxyde d'indium-étain (ITO) ou l'oxyde d'étain dopé au fluor (FTO), qui permet le passage de la lumière vers la couche active de pérovskite. La couche supérieure est une électrode métallique, souvent en or (Au) ou argent (Ag).

Les deux couches sélectives de charge sont :

- **ETL (Electron Transport Layer)** : De même, ce terme désigne un matériau de transport d'électrons (ETM), chargé de transporter les électrons générés vers l'électrode inférieure.
- **HTL (Hole Transport Layer)** : Ce terme est souvent utilisé pour désigner la couche de transport de trous. Cependant, la dénomination plus correcte est HTM (Hole Transport Material), car il s'agit bien d'un matériau, et non d'une simple couche. Le HTM a pour rôle de transporter les trous (lacunes d'électrons) générés dans la couche de pérovskite vers l'électrode supérieure.

En fonction de la disposition de ces couches, on distingue trois principales architectures de cellules à pérovskite (voir figure II.9) :

A) Architecture planaire

La structure typique est : TCO / ETM / pérovskite / HTM / électrode métallique.

- Le TiO_2 compact est utilisé comme ETM.
- Le Spiro-OMeTAD est utilisé comme HTM.
- Le TCO peut être du verre recouvert d'ITO ou de FTO.

B) Architecture mésoporeuse

Similaire à la structure planaire, elle intègre en plus une couche mésoporeuse d'ETM (souvent TiO_2 ou Al_2O_3) au-dessus du TiO_2 compact. Cette structure favorise une meilleure infiltration de la pérovskite et une séparation efficace des charges.

C) Architecture inversée

Dans cette configuration, l'ordre des couches de transport est inversé.

- Le HTM (comme le PEDOT: PSS) est déposé directement sur le TCO.
- L'ETM est souvent un matériau comme PCBM (ester méthylique de l'acide phényl-C60-butyrique). Cette structure est aussi connue sous le nom de p-i-n, par opposition au type classique n-i-p [46].

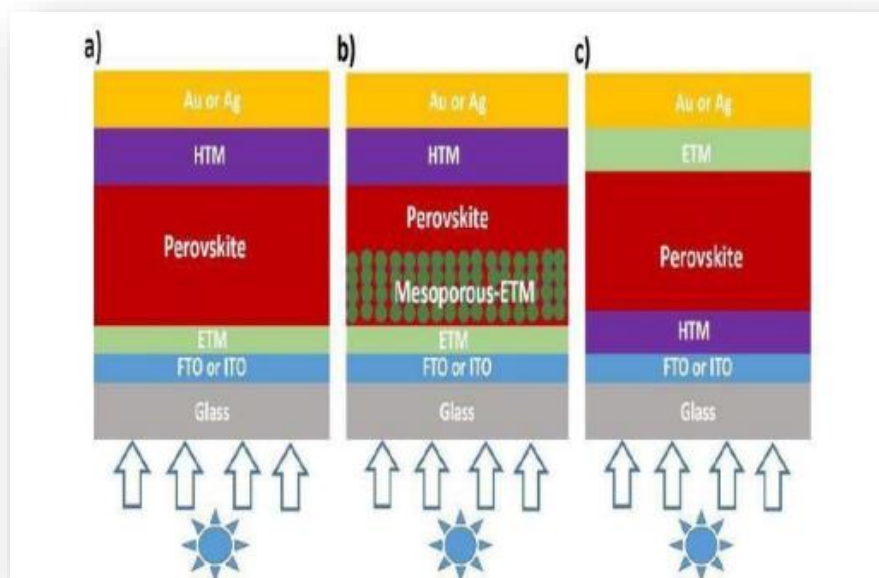


Figure II.9. Architecture des cellules solaires pérovskite a) Architecture planaire ; b) Architecture mésoporeuse ; c) Architecture inversée

Ces trois configurations représentent les principales structures utilisées pour les cellules solaires à pérovskite. Elles se distinguent par l'ordre et la nature des couches fonctionnelles, notamment les matériaux de transport de charge.

V.2. Techniques de fabrication des couches en pérovskites :

Les couches en pérovskite offrent de nombreux avantages : une forte capacité d'absorption de la lumière, des niveaux d'énergie élevés, une excellente compatibilité avec les processus de transfert de charge au sein de la cellule, une structure favorable à la réduction des phénomènes de recombinaison, ainsi qu'un bon rapport qualité-prix. Cependant, ces matériaux présentent également des limites notables : une grande sensibilité à l'humidité, une composition souvent peu respectueuse de l'environnement, et une stabilité à long terme qui demeure un défi à surmonter [47].

Les principales méthodes de dépôt des films de pérovskite incluent les procédés sous vide tels que le dépôt en une seule étape, le dépôt séquentiel en phase vapeur, ou encore le dépôt à double source ainsi que les techniques en solution, comme le spin-coating en une seule étape. Parmi celles-ci, la méthode la plus couramment utilisée reste le spin-coating en deux étapes, incluant le dépôt par pulvérisation (spray) et le dépôt chimique en bain (CBD). Ces différentes approches de fabrication sont résumées dans la figure II.10. Pour garantir des performances optimales, les films de pérovskite doivent assurer une couverture complète de la surface de l'ETL ou de la BL, présenter une rugosité modérée, et atteindre une taille de grains pouvant aller jusqu'au micron.

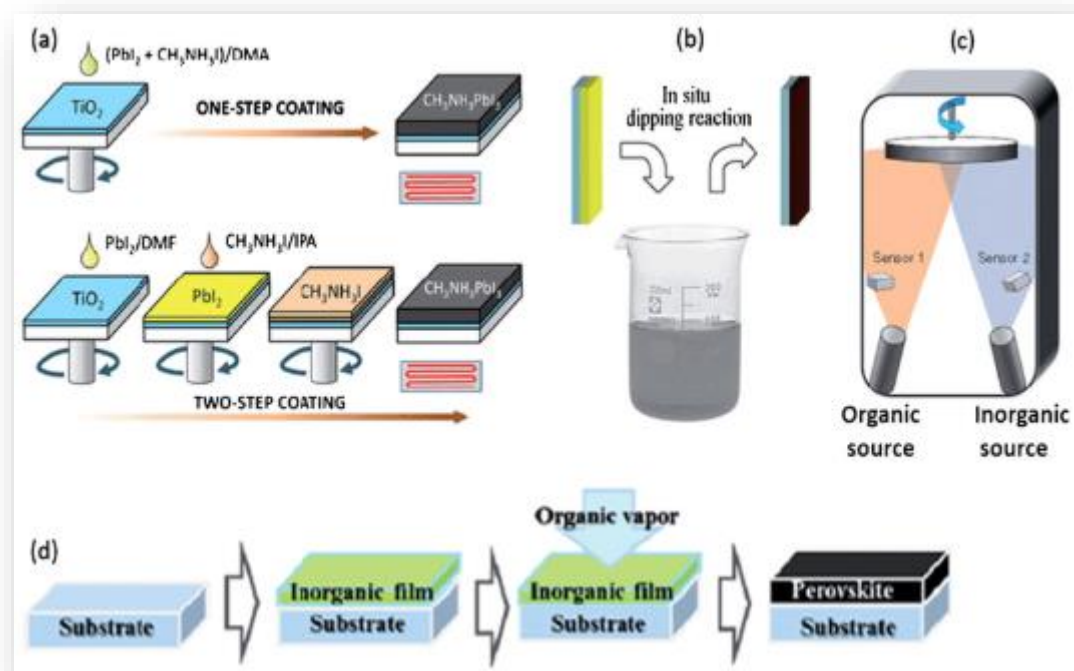


Figure I.10. Différentes méthodes de préparation des films de pérovskites

(a) le dépôt de précurseur en phase unique, (b) la méthode de dépôt séquentiel en deux phases, (c) le dépôt sous vide à double source (DSVD), et (d) la méthode VGP

V.3. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire à base de pérovskite :

Le fonctionnement d'une cellule solaire à base de pérovskite repose sur l'absorption de la lumière (photons) par une couche active de pérovskite. Ce matériau a la particularité de présenter une faible énergie de liaison des excitons, ce qui permet la génération rapide de porteurs de charge libres (électrons et trous), en quelques picosecondes seulement. Une fois générés, ces porteurs de charge sont transportés vers les interfaces de la cellule selon un processus en trois étapes principales (flèche rouge) qui est présenté dans la figure II.11 :

1. **Photo-excitation** : la lumière est absorbée par la couche de pérovskite, générant des paires électrons-trous. C'est la première étape fondamentale du processus photovoltaïque.
2. **Extraction des électrons vers l'ETL** : les électrons générés dans la pérovskite sont transférés vers la couche de transport d'électrons (ETL), ici représentée par le dioxyde de titane (TiO₂). Cette étape permet aux électrons d'atteindre l'électrode négative.

3. **Extraction des trous vers la HTL** : simultanément les trous sont transférés vers la couche de transport de trous (HTL), ou de manière équivalente, des électrons peuvent être transférés depuis l'HTL vers la pérovskite. Ce transfert facilite le cheminement des trous vers l'électrode positive.

Cependant, plusieurs phénomènes indésirables (flèche bleue) peuvent limiter l'efficacité de la cellule :

- **Recombinaison des porteurs** : les électrons et les trous peuvent se recombiner avant d'être extraits, ce qui réduit le rendement.
- **Transferts de charge inverses** : des charges peuvent retourner depuis les couches de transport vers la pérovskite, ce qui entraîne des pertes d'énergie.
- **Court-circuit direct** : un contact direct entre les couches ETL (ex. TiO_2) et HTL peut provoquer un court-circuit, altérant le fonctionnement de la cellule.

Enfin, après avoir franchi les interfaces de contact sélectives, les charges restantes sont collectées par les électrodes, générant un courant électrique utilisable [48].

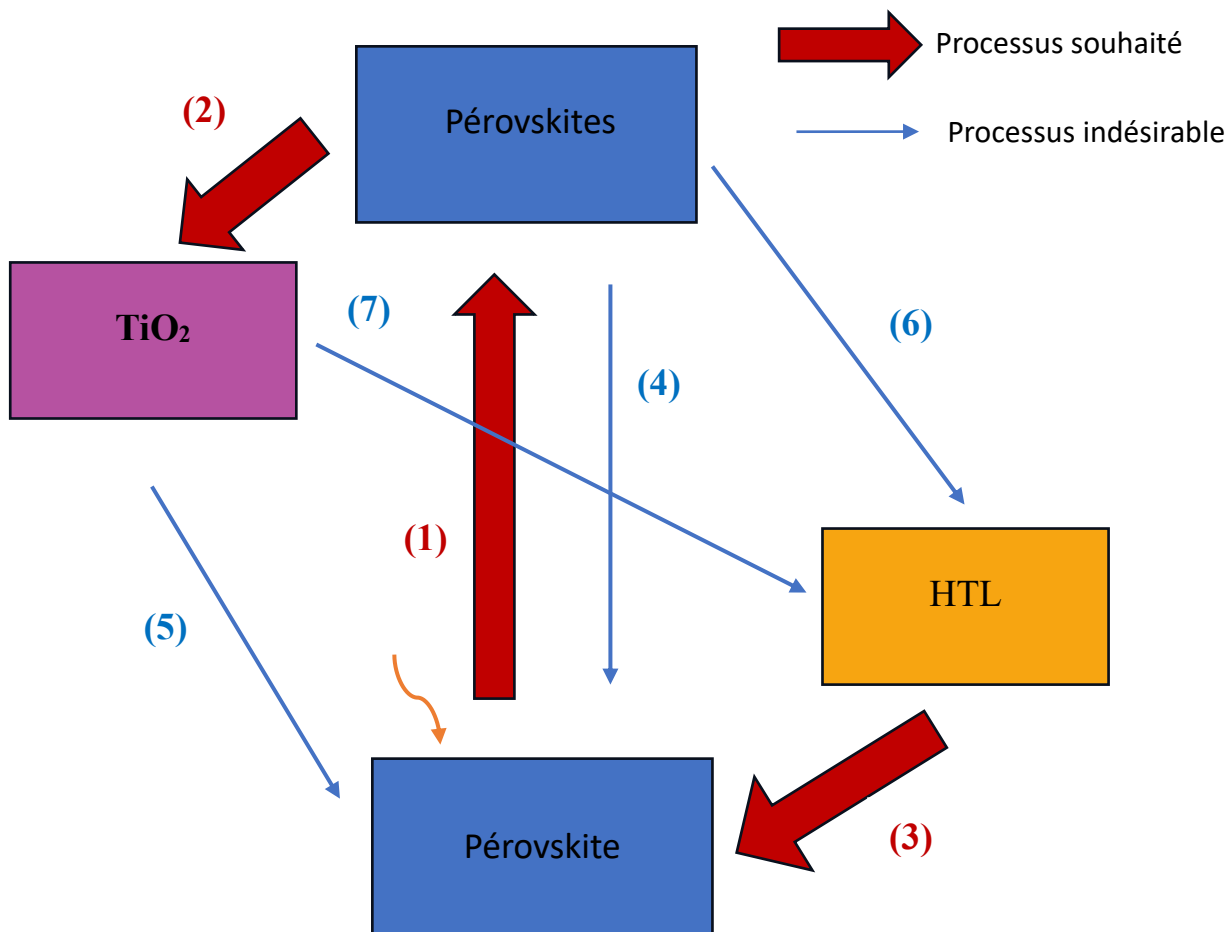


Figure II.11. Diagramme de transfert des électrons et les processus de recombinaison dans les cellules solaires à base de pérovskite

D'après la figure II.11 la cellule est composée de trois couches principales :

1. TiO_2 : couche de transport d'électrons (ETL)
2. Pérovskite : couche absorbante
3. HTL : couche de transport de trous

Fonctionnement souhaité (flèches rouges = processus souhaités) :

(1) Absorption de la lumière : La pérovskite absorbe le photon \longrightarrow un électron et un trou sont générés.

(2) Transfert de l'électron : l'électron est transféré de la pérovskite vers le TiO_2 (ETL).

(3) Transfert de trou : le trou est transféré de la pérovskite vers HTL.

Ces deux transferts (2) et (3) permettent la séparation des charges, et leur collecte par les électrodes.

Processus indésirables (flèches bleues) :

Ce sont les recombinaisons : les électrons et les trous se recombinent avant d'être collectés \longrightarrow pertes d'énergie.

(4) Recombinaison directe dans la pérovskite : un électron et un trou se recombinent à l'intérieur de la couche pérovskite.

(5) Recombinaison à l'interface TiO_2 / pérovskite :

Les électrons transférés vers TiO_2 peuvent revenir se recombiner avec les trous de la pérovskite. (Ce processus ralentit le transport et diminue le rendement).

(6) Recombinaison à l'interface HTL / pérovskite : les trous peuvent se recombiner avec les électrons de la pérovskite à l'interface.

(7) Court-circuit direct : un contact entre TiO_2 et HTL permet aux électrons et aux trous de se recombiner directement sans passer par la pérovskite. Ce qui détruit le fonctionnement de la cellule.

VI. Performances des cellules solaires à base de pérovskites :

Les matériaux pérovskites sont connus depuis plusieurs années, mais leur potentiel dans les cellules solaires n'a été révélé qu'en 2009, lorsque Miyasaka et ses collègues ont mentionné leur première utilisation dans ce domaine [49]. À l'origine, ces cellules étaient conçues sur l'architecture des cellules solaires à colorant (DSSC), en y intégrant une fine couche de pérovskite déposée sur du TiO_2 mésoporeux jouant le rôle de collecteur d'électrons, ce qui a

permis d'atteindre un rendement de conversion de puissance (PCE) de 3,8 %. Toutefois, en présence d'un électrolyte liquide corrosif, la stabilité de ces cellules ne dépassait que quelques minutes. En 2011, Park et al. ont amélioré ce rendement à 6,5 % avec une conception similaire [50].

Pour pallier les limitations dues aux électrolytes liquides, un électrolyte solide, le spiroMeOTAD, a été introduit comme matériau de transport de trous (HTM). Ce changement a permis la fabrication de cellules entièrement solides, traitées en une seule étape, atteignant un PCE de 9,7 % avec une stabilité nettement améliorée [51]. Cette efficacité élevée est due à un bon transfert de charges : les trous générés dans les nanoparticules excitées de $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbI}_3$ sont transférés vers le TiO_2 mésoscopique et le spiroMeOTAD, comme le confirment des analyses par laser femtoseconde. Cette configuration améliore à la fois la stabilité et l'efficacité des cellules par rapport aux DSSC classiques.

En 2012, Snaith et Lee ont montré qu'une cellule solaire pérovskite pouvait fonctionner efficacement sans couche mésoporeuse de TiO_2 , atteignant un rendement d'environ 10 %, surpassant les DSSC traditionnelles [52]. De son côté, Heo et al. ont atteint un PCE de 12 % en superposant une couche de pérovskite sur une structure de TiO_2 infiltrée de pérovskite [53]. En comparant divers HTM, ils ont observé que la polytriarylamine (PTA) offrait la meilleure efficacité.

Par la suite, Seok et ses collaborateurs ont amélioré le rendement à 12,3 % en introduisant des pérovskites à halogénures mixtes $(\text{CH}_3\text{NH}_3)\text{PbI}_{3-x}\text{Br}_x$ [54]. L'ajout de 10 à 20 % de brome, de plus petit rayon ionique, permet une transition structurelle de la phase tétragonale à pseudo-cubique, améliorant encore la stabilité et l'efficacité [55].

En 2015, Zhang a mis au point des films de pérovskite sans défauts d'épingle, atteignant un PCE de 15,2 % avec du PbAc_2 , grâce à une méthode de revêtement en une étape suivie d'un recuit. Des essais similaires avec PbCl_2 et PbI_3 ont également montré des gains d'efficacité. Burschka et al. ont démontré qu'un procédé de dépôt en deux étapes pour une architecture sensibilisée permettait de dépasser les 15 % d'efficacité [56], tandis que Liu et al. ont atteint ce même niveau via une technique d'évaporation thermique [57].

Jeon et son équipe ont ensuite porté le PCE à 16,2 % en ajustant les niveaux d'énergie des halogénures mixtes à l'aide de PTAA comme HTM [58]. Un rendement de 17,9 % a été atteint en optimisant les épaisseurs des couches de TiO₂ et de pérovskite.

Zhou et al. ont ensuite mis au point des cellules atteignant un rendement record de 19,3 %, en améliorant l'alignement des bandes entre les couches HTM, ETM et la pérovskite [59]. Enfin, en 2015, des chercheurs du KRICT en Corée ont franchi la barre des 20 % avec un PCE de 20,1 % [60]. Shin et al. ont proposé une nouvelle voie de synthèse douce basée sur une solution colloïdale pour produire une électrode de LBSO, permettant à des cellules MAPbI₃ d'atteindre un PCE stable de 21,2 %, contre 19,7 % pour un dispositif basé sur du TiO₂ mésoporeux. Ces cellules à base de LBSO ont montré une remarquable stabilité, conservant 93 % de leur performance après 1000 heures d'exposition au soleil.

Les techniques de fabrication des cellules pérovskites sont bien plus douces que celles des cellules au silicium cristallin, lesquelles nécessitent des grandes températures. En revanche, les pérovskites peuvent être déposées par des procédés simples comme l'enduction centrifuge ou par immersion, souvent à température ambiante. Leur principal avantage réside dans leurs rendements élevés, rivalisant déjà avec ceux du silicium industriel. Toutefois, leur commercialisation est freinée par leur instabilité à long terme et leur forte sensibilité à l'eau et à l'oxygène. De plus, les pérovskites les plus efficaces aujourd'hui contiennent du plomb, un élément toxique pour l'environnement.

En 2016, l'optimisation des couches de transport a permis d'atteindre 21.6%. De 2017 à 2018, plusieurs améliorations ont permis d'atteindre 22.6 %, avec une stabilité accrue. En 2019, l'introduction d'additifs CH₃NH₃Cl dans les pérovskites CH₃NH₃PbI₃, a permis d'atteindre un rendement record de 24.02 %. Et, en 2020, des progrès technologiques ont permis d'atteindre 25.5 %, confirmant le potentiel des PSC comme alternative aux cellules solaires traditionnelles [61].

À partir de 2021, les cellules solaires à base de pérovskites connaissent non seulement une amélioration de leurs performances, mais également un essor industriel significatif.

En avril 2021, des chercheurs développent un prototype de cellule en silicium à contacts bilatéraux atteignant plus de 26 % d'efficacité, un record pour ce type d'architecture. Le mois suivant, une équipe propose une approche innovante reposant sur une « colle moléculaire »,

permettant d'accroître la stabilité et la fiabilité à long terme des dispositifs pérovskites. Sur le plan industriel, la première ligne de production commerciale de panneaux solaires à base de pérovskites, utilisant une technique d'impression jet d'encre, est inaugurée en Pologne (Saule Technologies). Toujours en 2021, une base de données regroupant plus de 15 000 publications et les caractéristiques de plus de 42 000 dispositifs pérovskites est mise en ligne, offrant un outil d'analyse systématique à la communauté scientifique. Enfin, l'entreprise polonaise ML System ouvre la première ligne de fabrication de vitres quantiques, intégrant des couches de *quantum dots* capables de produire de l'électricité tout en améliorant l'efficacité énergétique des bâtiments [62].

En 2022, les cellules tandem pérovskite–silicium franchissent une étape décisive avec un rendement de 30 % atteint aux Pays-Bas, suivi par un record mondial de 32,5 % obtenu par le Helmholtz-Zentrum Berlin, certifié par l'ESTI et le NREL. L'année 2023 confirme cette tendance avec une série de records successifs : 33,2 % (KAUST, avril), 33,7 % (KAUST, mai), puis 33,5 % et 33,9 % (LONGi, juin et novembre). Ce dernier record a permis de dépasser la limite théorique de Shockley-Queisser (33,7 %). En parallèle, des cellules single-junction continuent de progresser : des chercheurs de Singapour (NUS/SERIS) atteignent 24,35 % sur une cellule inversée de 1 cm², tandis que l'Université de Nanjing annonce 28,0 % pour une cellule tout-pérovskite (3D/3D), présentant une stabilité de plus de 90 % après 600 heures de fonctionnement.

En 2024, l'EPFL met au point un module 2D/3D de 27,2 cm², atteignant un rendement de 23,3 % (stabilisé à 22,97 %), avec une remarquable stabilité (94,7 % après 1 000 h). La même année, la société SolaEon établit un record mondial pour une cellule single-junction de 1 cm² avec 26,14 %, certifié par un organisme indépendant chinois.

Enfin, l'année 2025 confirme la maturité croissante de cette technologie. En janvier, l'Université des Sciences et Technologies de Chine (USTC) annonce un rendement record de 26,7 % pour une cellule pérovskite single-junction, certifié par le NREL et inclus dans les *Solar Cell Efficiency Tables*. Quelques mois plus tard, LONGi franchit un nouveau cap avec un rendement certifié de 34,85 % pour une cellule tandem pérovskite–silicium, établissant un record mondial. En avril, l'institut coréen KIER annonce un rendement de 23,64 % pour un tandem flexible pérovskite–CIGS, ouvrant la voie à de nouvelles applications. Parallèlement, dans une démarche écologique, l'Université du Queensland développe des cellules sans

plomb (Sn-based) atteignant 16,65 % d'efficacité, avec une stabilité exceptionnelle de plus de 1 500 heures d'illumination continue sans encapsulation [63-69].

Tableau II.4. Evolution des performances des cellules solaires à pérovskites en fonction des architectures et matériaux (2009-2025)

Année	Chercheur(s)	Architecture / Innovation	Matériaux utilisés	Rendement (PCE)	Remarques
2009	Miyasaka et al.	DSSC avec fine couche de pérovskite	TiO ₂ mésoporeux + électrolyte liquide	3.8%	Première démonstration ; stabilité de quelques minutes seulement
2011	Park et al.	DSSC améliorée	TiO ₂ mésoporeux + électrolyte liquide	6.5%	Amélioration du rendement mais stabilité toujours faible
2012	Snaith & Lee	Cellule sans TiO ₂ mésoporeux	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	10%	Première alternative sérieuse aux DSSC classiques
2012	Heo et al.	Superposition pérovskite sur TiO ₂ infiltré	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	12%	Meilleure efficacité avec PTA comme HTM
2013	Seok et al.	Pérovskite à halogénures mixtes	(CH ₃ NH ₃ PbI _{3-x} Br _x)	12.3%	Br améliore stabilité et structure pseudo-cubique
2015	Zhang	Films sans défauts (méthode PbAc ₂)	MAPbI ₃	15.2%	Dépôt en une étape + recuit
2015	Burschka et al.	Dépôt en deux étapes	MAPbI ₃	>15%	Architecture sensibilisée
2015	Liu et al.	Évaporation thermique	MAPbI ₃	15%	Procédé physique plutôt que solution
2015	Jeon et al.	HTM optimisé (PTAA)	MAPbI ₃	16.2%	Ajustement énergétique des halogénures mixtes
2015	Optimisation épaisseurs	Structure TiO ₂ +	MAPbI ₃	17.9%	Contrôle fin des couches actives

		pérovskite			
2015	Zhou et al.	Alignement des bandes optimisé	MAPbI ₃	19.3%	Amélioration interface ETM/HTM
2015	KRICT (Corée)	Nouvelle architecture	MAPbI ₃	20.1%	Première fois >20 %
2015	Shin et al.	Électrode LBSO	MAPbI ₃	21.2%	Stabilité 93 % après 1000 h d'ensoleillement
2016	Optimisation HTM	Couche de transport	MAPbI ₃	21.6%	Amélioration continue
2017	Divers	Optimisations multiples	MAPbI ₃	22.6%	Meilleure stabilité
2019	Divers	Additifs MAcl	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	24.02%	Record single-junction
2020	Divers	Procédés avancés	MAPbI ₃	25.5%	Rendement proche du silicium
2021	Divers	Prototype silicium contacts bilatéraux	Tandem Pérovskite-Si	>26%	Première ligne de production (Saule Tech, Pologne)
2022	Pays-Bas	Tandem Pérovskite-Si	Pérovskite + Si	30%	Record tandem
2022	HZB (Berlin)	Tandem certifié ESTI/NREL	Pérovskite + Si	32.5%	Certification internationale
2023	KAUST	Records successifs	Tandem Pérovskite-Si	33.2% / 33.7%	Dépasse limite théorique Shockley-Queisser
2023	LONGi	Records tandem	Pérovskite-Si	33.5% / 33.9%	Record mondial industriel
2023	NUS/SERIS (Singapour)	Cellule inversée (1 cm ²)	MAPbI ₃	24.35%	Single-junction inversée
2023	Université de Nanjing	Tout-pérovskite 3D/3D	Pérovskite	28.0%	Stabilité >90 % après 600 h
2024	EPFL	Module 2D/3D (27.2 cm ²)	Pérovskite hybride	23.3% (22.97% stabilisé)	Grande surface + bonne stabilité
2024	SolaEon	Single-junction (1 cm ²)	Pérovskite	26.14%	Record certifié indépendant
2025	USTC (Chine)	Single-	Pérovskite	26.7%	Inclus dans

		junction certifié NREL			Solar Cell Efficiency Tables
2025	LONGi	Tandem Pérovskite–Si	Pérovskite–Si	34.85%	Nouveau record mondial
2025	KIER (Corée)	Tandem flexible	Pérovskite–CIGS	23.64%	Cellule flexible innovante
2025	Université du Queensland	Cellule sans plomb	Pérovskite Sn-based	16.65%	Stable >1500 h sans encapsulation

VII. Limites actuelles des matériaux pérovskites :

Les matériaux pérovskites, malgré leurs excellentes performances électroniques, présentent encore plusieurs limites qui freinent leur utilisation à grande échelle. L'un des principaux obstacles réside dans la durabilité et la stabilité des matériaux utilisés. Les pérovskites, bien que performantes, présentent une sensibilité accrue à l'humidité et à l'oxygène, ce qui peut compromettre leur longévité lorsqu'elles sont exposées aux éléments naturels. De plus, la plupart des pérovskites performantes contiennent du plomb, un élément toxique pour l'environnement et la santé, posant un problème de durabilité et de sécurité.

Et dans le processus de fabrication l'une des problématiques majeures concerne l'encapsulation des cellules pour les protéger efficacement contre les agressions extérieures. Les méthodes d'encapsulation doivent être suffisamment robustes pour garantir une protection optimale sans pour autant alourdir ou compliquer le processus de fabrication. De plus, le contrôle précis de la qualité du film mince de pérovskite lors du dépôt est crucial pour assurer une performance homogène sur l'ensemble de la cellule.

Conclusion :

Les cellules solaires à base de pérovskite représentent une avancée majeure dans le domaine des énergies renouvelables grâce à leur efficacité de conversion de puissance en constante progression, leur flexibilité de fabrication et leur coût de production relativement bas. Ainsi, bien que prometteuses, ces technologies nécessitent encore des recherches approfondies pour améliorer leur durabilité, rendre leur fabrication plus respectueuse de l'environnement et assurer leur viabilité commerciale à grande échelle. Néanmoins, au vu des progrès rapides réalisés ces dernières années, les cellules solaires à pérovskite demeurent une solution d'avenir crédible pour une transition énergétique durable.

Chapitre III :

Présentation du logiciel SCAPS-1D

Introduction :

Avec l'évolution des modèles numériques, la simulation des dispositifs à cellules solaires s'est progressivement imposée comme un outil fiable et incontournable pour l'étude et la compréhension de leurs propriétés. Ces modèles ont permis d'analyser plus en profondeur les mécanismes internes des cellules solaires, ce qui a grandement contribué à leur amélioration, de rendement que de performance globale. Dans ce chapitre, nous allons d'abord présenter les équations mathématiques utilisés pour décrire le fonctionnement des cellules solaires [70]. Ensuite, nous allons décrire le logiciel de simulation des cellules solaires (SCAPS) utilisé dans notre travail.

I. Equations de base :

Pour modéliser précisément les propriétés électriques des cellules solaires le logiciel SCAPS résout numériquement les équations de base des semi-conducteurs [71] avec l'approximation dérive diffusion.

I.1. Equation de poisson :

L'équation de Poisson est utilisée pour décrire la relation entre les charges potentielles et spatiales.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = q\varepsilon[n(x) - p(x) - N_D^+(x) + N_A^-(x) - P_t(x) + n_t(x)] \quad (\text{III.1})$$

Où :

φ : est le potentiel,

q : est la charge élémentaire,

ε : est la permittivité,

n : est la densité des électrons libres,

p : est la densité de trous libres,

N_D : est la densité de dopage de type donneur,

N_A : est la densité de dopage de type accepteur,

P_t : est la densité des piégé à trous,

n_t : est la densité des piégé à électrons.

I.2. Equations de continuité :

Ces équations permettent d'analyser simultanément la dérive, la diffusion, la génération et la recombinaison des porteurs.

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_n + G - R_n \quad (\text{III.2})$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla \cdot J_p + G - R_p \quad (\text{III.3})$$

Où :

G : est le taux de génération optique d'électrons (trous),

R_n (R_p) : est le taux de recombinaison d'électrons (trous).

J_n, J_p : sont les densités de courant d'électrons et de trous données par les équations de transport (III.4) et (III.5).

$$J_n = -q_n \mu_n \nabla \Psi + q D_n \nabla n \quad (\text{III.4})$$

$$J_p = -q_p \mu_p \nabla \Psi + q D_p \nabla p \quad (\text{III.5})$$

Où :

q : est la charge élémentaire,

μ_n (μ_p) : est la mobilité des électrons (trous),

D_n (D_p) : est le coefficient de diffusion des électrons (trous).

Le coefficient de diffusion dépend de la mobilité des porteurs comme il est montré dans les équations (III.6) et (III.7).

$$D_n = \frac{\mu_n K_B T}{q} \quad (\text{III.6})$$

$$D_p = \frac{\mu_p K_B T}{q} \quad (\text{III.7})$$

Où :

K_B : est la constante de Boltzmann,

T : est la température.

I.3. Longueur de diffusion :

La longueur de diffusion décrit la capacité de transport des porteurs dans un dispositif de cellule solaire. Cela dépend du coefficient de diffusion et de la durée de vie des porteurs [72]. Cela est représenté dans les équations (III.8) et (III.9).

$$L_n = \sqrt{D_n \tau_n} \quad (\text{III.8})$$

$$L_p = \sqrt{D_p \tau_p} \quad (\text{III.9})$$

Où :

L_n (p) : est la longueur de diffusion de l'électron (trou),

τ_n (p) : est la durée de vie de l'électron (trou).

II. Présentation du logiciel SCAPS-1D :

SCAPS-1D (Solar Cell Capacitance Simulator One Dimension) est un logiciel de simulation unidimensionnelle des cellules solaires, développé par le département d'électronique et des systèmes d'information (ELIS) de l'Université de Gand, en Belgique [73].

Parmi les principaux avantages de SCAPS-1D :

- ✓ Les fichiers d'entrée sont accessibles à l'utilisateur sous format texte (données spectrales, paramètres du dispositif).
- ✓ Possibilité d'introduire des interfaces dans la structure simulée.
- ✓ Prise en compte des phénomènes de recombinaison au niveau des interfaces.
- ✓ Intégration de résistances en série dans le modèle.
- ✓ Simulation des caractéristiques capacité-tension et capacité-fréquence.
- ✓ Logiciel reconnu pour sa grande rapidité d'exécution.

SCAPS 1D explore les propriétés fondamentales telles que :

- ✓ Le courant de court-circuit I_{SC} ,
- ✓ La tension en circuit ouvert V_{OC} ,
- ✓ La densité de courant J_c ,
- ✓ Les caractéristiques de tension I-V,
- ✓ La capacité-fréquence (C - f),
- ✓ L'efficacité de la conversion de puissance du dispositif η ,

- ✓ L'efficacité quantique QE,
- ✓ Le facteur de remplissage FF.

III. Utilisation du logiciel SCAPS :

Le logiciel est organisé en plusieurs panneaux dans lesquels l'utilisateur peut définir les paramètres où dans lesquels les résultats sont calculés [74]. SCAPS analyse la physique du modèle en tenant en compte des profils de recombinaison, de la distribution du champ électrique, des mécanismes de transports des porteurs et des densités de courant individuelles.

III.1. Interface du logiciel SCAPS-1D :

L'interface de démarrage du logiciel SCAPS-1D, appelée panneau d'action, constitue la fenêtre principale du programme (voir Figure III.1). C'est à partir de ce panneau que l'utilisateur peut contrôler l'ensemble des paramètres externes liés à la simulation, tels que la température, la tension, la fréquence, l'éclairement solaire, etc.

Le panneau d'action se divise en six sections principales, chacune ayant une fonction spécifique décrite ci-dessous [75].

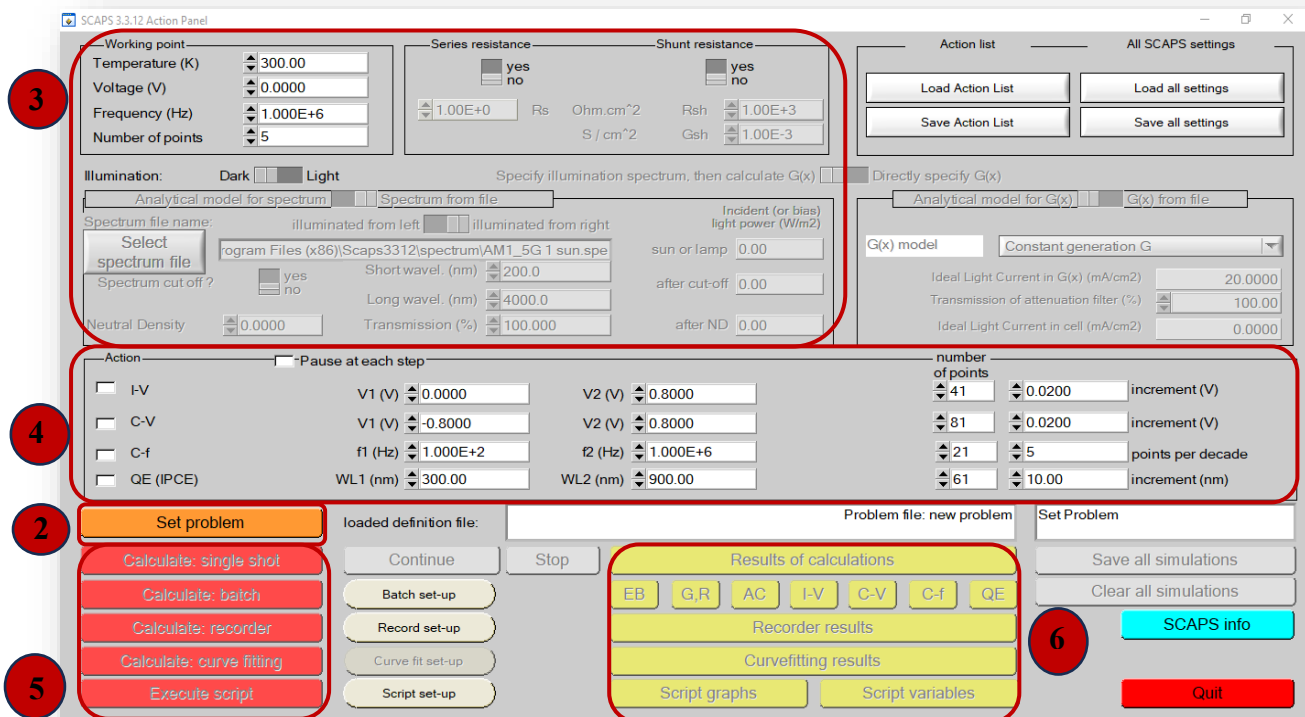


Figure III.1. Fenêtre d'exécution « Action Panel » du logiciel SCAPS

La description des blocs numérotés de 1 à 6 est :

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(s) calcul(s).
6. Afficher les courbes de simulation.

III.2. Définir le point de fonctionnement :

Le point de fonctionnement spécifie les paramètres importants de simulation.

- **La température T** : Importante pour toute les mesures.
Dans le logiciel SCAPS, seulement NC(T), NV(T), les vitesses thermiques, la tension thermique et toutes leurs dérivés sont les variables qui ont une dépendance explicite de la température, on doit entrer pour chaque température les paramètres de matériaux correspondants.
- **La tension V** : C'est la tension de polarisation continue dans la simulation C-f et dans la simulation QE. Cette tension est éliminée dans les simulations I-V et C V. Le logiciel SCAPS commence toujours les simulations à 0V et passe à la tension du point de fonctionnement en un nombre de pas que vous devez spécifier (number of point).
- **La fréquence f** : C'est la fréquence à laquelle la mesure C-V est simulée, elle est ignorée dans les simulations I-V, QE et C-f.

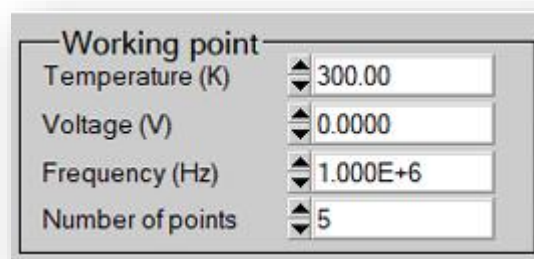


Figure III.2. Définition du point de fonctionnement

- **L'illumination** : Elle est utilisée dans toutes les mesures. Pour $QE(\lambda)$, elle détermine les conditions de polarisation de la lumière. Les paramètres de base sont : l'obscurité ou la lumière, le choix du côté illuminé, le choix du spectre. Le spectre d'illumination on Sun (=1000 W/m²) avec la masse d'air 1.5 global est le spectre par défaut, mais il existe aussi une large gamme de lumières monochromatiques et de spectres pour plus de simulations personnalisées. S'il y a un simulateur optique, on peut immédiatement charger un profil de génération au lieu d'utiliser un spectre.

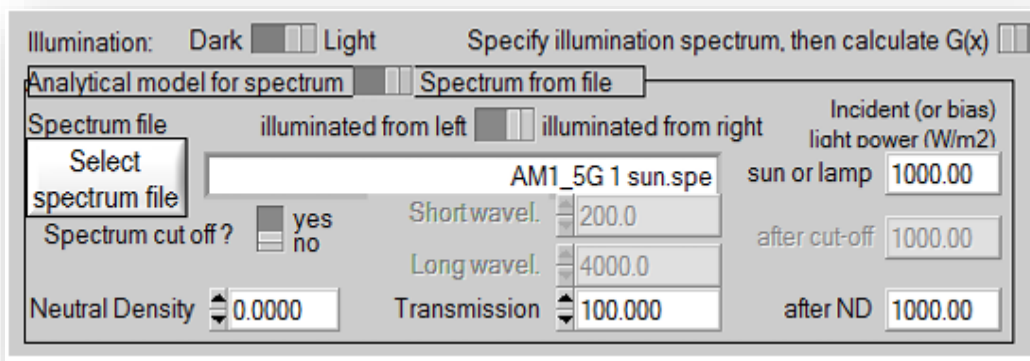


Figure III.3. Choix de l'illumination

III.3. Fenêtre de conception du dispositif (Set Problem) :

Pour définir le problème dont la géométrie, les matériaux et toutes les propriétés de la cellule solaire, on doit cliquer sur le bouton « Définir le problème » sur le panneau d'action, une nouvelle fenêtre s'ouvre qui est le panneau de définition de la cellule solaire (Figure III.4). Cette interface joue un rôle important dans la simulation de la cellule, dans ce panneau, nous pouvons créer différentes couches et définir leurs paramètres physiques et leurs propriétés, nous pouvons également avoir une visualisation de la structure de l'appareil [76].

Il y a trois parties de l'interface de définition de périphérique et des détails dans ce panneau :

- **Section (1)** : dans cette partie, nous pouvons définir des structures comprenant jusqu'à 9 couches. La première couche est le contact arrière, le dernier est le contact frontal. L'utilisateur peut spécifier les propriétés de toutes les couches.
- **La section (2)** : est un affichage de la structure définie du dispositif photovoltaïque avec contact avant et arrière. Il existe également des boutons supplémentaires pour la

sélection de l'éclairage du dispositif soit du côté contact arrière soit du côté contact avant, le sens de la tension appliquée à un appareil et enfin un bouton dédié à inverser l'ordre des couches de structure.

- **La section (3) :** a des boutons pour enregistrer le fichier de définition dans la bibliothèque SCAPS ou une bibliothèque externe, en chargeant les fichiers de définition de structure précédemment enregistrés. Les boutons Annuler et OK permettent de quitter ou d'entrer dans l'interface de définition de l'appareil et de revenir à l'interface de démarrage.

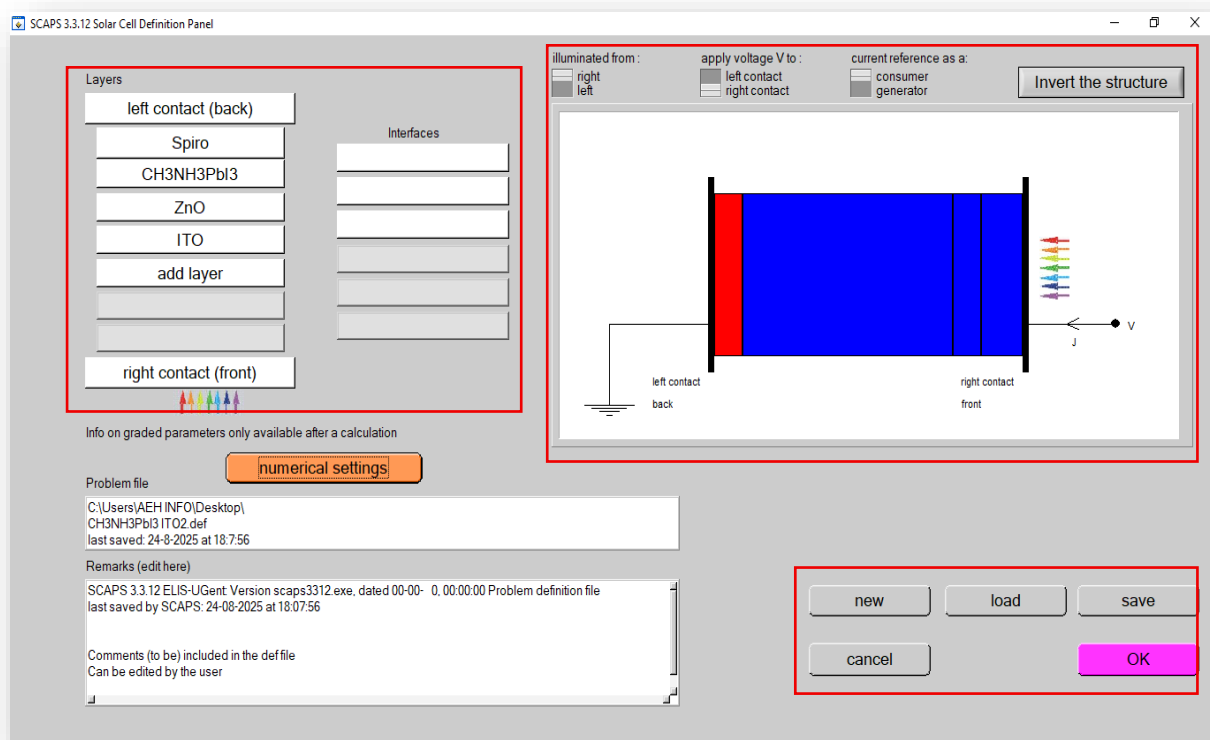


Figure III.4. Interface de définition des couches de la cellule solaire

III.4. Edition de la structure d'une cellule solaire :

Quand on clique sur le bouton SET PROBLEM sur le panneau d'action, le panneau 'SOLAR CELL DEFINITION' s'affichera. Ce dernier permettra de créer ou de modifier les structures des cellules solaires et de les enregistrer ou bien de les charger à partir d'autres fichiers. Ces fichiers de définition sont des fichiers standards ASCII (American Standard Code for Information Inter change) d'extension «def» qui peuvent s'ouvrir avec Notepad.exe ou

Wordbad.exe. Il est déconseillé de les modifier au risque de les rendre inutilisables par la suite. Les propriétés des couches, des contacts et d'interfaces peuvent être modifiées en cliquant sur le bouton approprié comme le montre la figure III.4. De la même manière, des couches peuvent être rajoutées en cliquant 'ADD LAYER'.

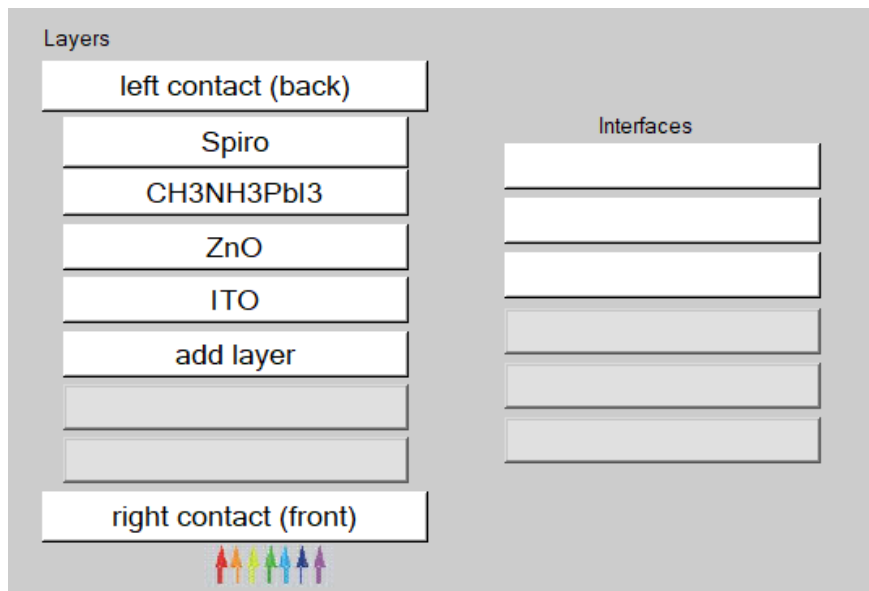


Figure III.5. Définition de la structure d'une cellule solaire

a) Défauts

Les défauts peuvent être définis en cliquant sur le bouton "add defect" dans le panneau de définition des propriétés de la couche. Ce panneau permet aussi de définir les modèles de recombinaison.

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 1.000E+13

Optical capture of electrons From model From file

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

Optical capture of holes From model From file

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

accept cancel

Figure III.6. Panneaux de définition des propriétés par défaut

b) Mécanisme de recombinaison

Dans SCAPS, on retrouve trois types différents de processus de recombinaison :

Bande à bande (radiative), Shockley-Read-Hall (SRH) et Auger.

- Recombinaison bande à bande : est un processus inverse à celui de l'absorption de photons. Les électrons dans la bande de conduction redescendent dans la bande de valence, émettent un photon et se recombinent avec des trous (Figure III.7.a). Le taux de recombinaison dans ce cas peut être exprimé par :

$$R = \gamma(n_p - n_i^2) \quad (\text{III.10})$$

- Recombinaison Auger : est un processus lors duquel une recombinaison de paire électron-trou se produit pendant la transition d'un niveau d'énergie élevé à un niveau d'énergie faible et l'énergie résultante est transmise à un troisième porteur (Figure III.7.b). Il peut être décrit par l'équation :

$$R = (C_n^A + C_p^A)(np - n_i^2) \quad (\text{III.11})$$

• Recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) : également appelée recombinaison assistée par un piège (Figure III.7.c). Elle se produit en raison de défauts ou d'impuretés dans les matériaux. Le taux de recombinaison SRH est donné par :

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n - n_0) + \tau_n(p - p_0)} \quad (\text{III.12})$$

Où, R est le taux de recombinaison, γ est le coefficient de recombinaison, τ_n et τ_p sont respectivement les durées de vie des électrons et des trous. n_0 et p_0 sont respectivement les concentrations des électrons et des trous à l'équilibre, C_n^A et C_p^A sont des constantes, qui peuvent être définie dans SCAPS.

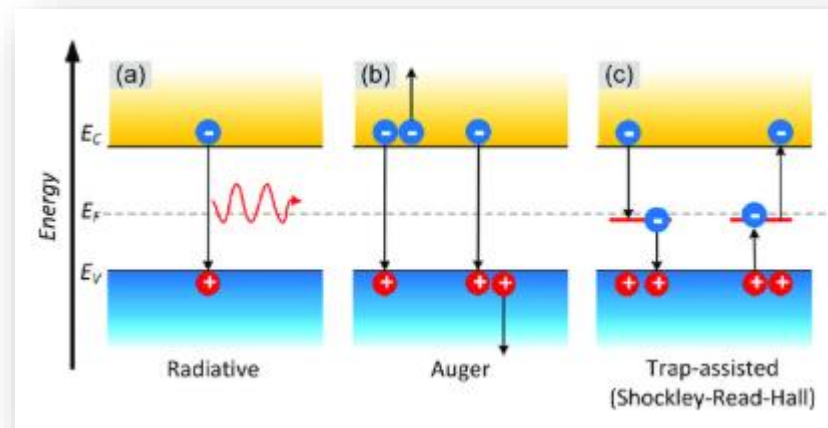


Figure III.7. Processus de recombinaison (a) radiative, (b) Auger et (c) SRH [63]

c) Absorption

Le coefficient d'absorption peut être défini comme le degré d'absorption d'énergie par un matériau. Il est déterminé par la nature du matériau. Dans SCAPS, le coefficient d'absorption est donné par l'équation (III.13) :

$$a(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h\nu} \right) \sqrt{h\nu - E_{gap}} \quad (\text{III.13})$$

Où, A et B sont les constants d'absorption, h est la constante de Planck et $\frac{1}{2}$ est la vitesse de la lumière [77].

d) Contact

Les propriétés des contacts peuvent être définies en cliquant sur le bouton de contact avant ou arrière dans le panneau de définition de cellule, ce qui ouvre le panneau des propriétés du contact", Figure (III.8).

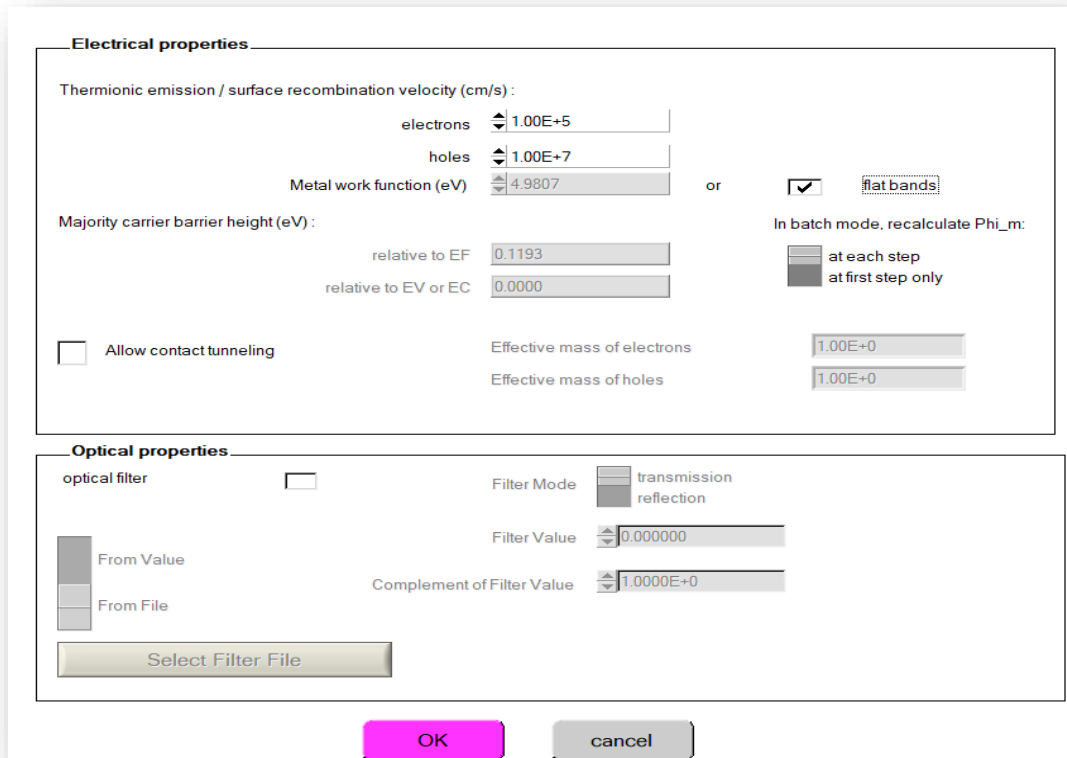


Figure III.8. Propriétés du contact

Le travail de sortie est l'énergie minimale requise pour déplacer un électron d'un solide vers le vide. La valeur du travail de sortie est utilisée pour décrire la force de l'énergie de liaison d'un électron dans les matériaux. Dans SCAPS, le travail de sortie peut être définie par l'utilisateur ou calculé à l'aide du modèle de SCAPS, comme représenté dans les équations :

Contact de type-n :

$$\phi_m = \chi + k_B T \ln \left(\frac{N_c}{N_D - N_A} \right) \quad (III.14)$$

Contant de type-p :

$$\phi_m = \chi + E_{gap} - k_B T \ln\left(\frac{N_C}{N_D - N_A}\right) \quad (\text{III.15})$$

Contact de type intrinsèque :

$$\phi_m = \chi + k_B T \ln\left(\frac{N_C}{n_i}\right) \quad (\text{III.16})$$

Où, ϕ_m est le travail de sortie, χ est l'affinité électronique, N_C est la densité effective d'état de la bande de conduction, N_A et N_D sont la concentration de dopage des accepteurs et des donneurs et n_i est la concentration intrinsèque.

Les propriétés des contacts se divisent en propriétés électriques et optiques. Dans les propriétés électriques, on définit :

- ✓ Les vitesses de recombinaison surfaciques des électrons et des trous libres ;
- ✓ Si le contact a un travail de sortie, ou il est idéal (régime de bande plates) ;
- ✓ La barrière des porteurs majoritaires ;
- ✓ L'effet tunnel (si on veut en tenir compte).

Pour les propriétés optiques, on peut définir :

- ✓ La transmission ou la réflexion par une valeur ou un fichier de données.

III.5. Définition des couches de la cellule solaire :

En cliquant sur le bouton « add layer » dans la vue Solar Cell Definition Panel, une fenêtre s'ouvre qui contient les différents paramètres du matériau à introduire comme indiquée sur la figure III.10. Ces paramètres peuvent avoir des distributions uniformes ou non uniformes selon la physique du matériau. Les propriétés de la couche sont les suivants du haut au bas :

- ✓ Le nom de la couche (qui correspond au type du dopage) ;
- ✓ L'épaisseur de la couche ;
- ✓ La pureté du matériau et son profile ;
- ✓ Le gap d'énergie, l'affinité électronique, la permittivité diélectrique relative, les densités effectives des bandes de conduction et de valence, vitesse thermique des électrons et des trous libres, les mobilités des électrons et des trous ;
- ✓ Les masses effectives des électrons et des trous si on tient compte du transport des porteurs par effet tunnel ;

- ✓ Si le matériau est un composé d'éléments avec des concentrations non uniformes, on peut introduire des variations graduelles des précédents paramètres ;
- ✓ Le type de dopage et la densité, le dopage aussi peut être introduit comme étant uniforme, comme il peut avoir des variations graduelles (linéaire, paraboliques,) ;
- ✓ L'absorption de la couche comme le montre la figure III.11 peut être définie par le modèle analytique fourni par SCAPS comme elle peut être introduite sous forme de données. SCAPS fournit un nombre de données de l'absorption pour plusieurs types de semi-conducteurs. On peut également utiliser d'autres données de l'absorption pour des semi-conducteurs non disponibles dans SCAPS à condition que le fichier ait la même extension des fichiers de l'absorption fournis par SCAPS.

The screenshot displays the 'LAYER 2' configuration window in SCAPS-1D. The material is set to 'CH3NH3PBI3'. The thickness is 0.300 μm. The layer is configured as 'uniform pure A (y=0)'. The semiconductor properties are set to 'pure A (y=0)'. The physical properties table is as follows:

bandgap (eV)	1.500
electron affinity (eV)	3.900
dielectric permittivity (relative)	10.000
CB effective density of states (1/cm ³)	2.000E+20
VB effective density of states (1/cm ³)	8.000E+19
electron thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
hole thermal velocity (cm/s)	1.000E+7
electron mobility (cm ² /Vs)	1.000E+1
hole mobility (cm ² /Vs)	1.000E+1
<input type="checkbox"/> Allow Tunneling	
effective mass of electrons	1.000E+0
effective mass of holes	1.000E+0

Doping parameters are set to 'no ND grading (uniform)' with a donor density of 1.000E+15 1/cm³, and 'no NA grading (uniform)' with an acceptor density of 0.000E+0 1/cm³. The absorption model is 'alpha pure A material (y=0)', with options to load from a file or from the model. The 'Set absorption model' button is active, and the 'List of absorption submodels present' shows 'sqrt(hv-Eg) law (SCAPS traditional)'.

Figure III.9. Propriétés de la couche ajoutée

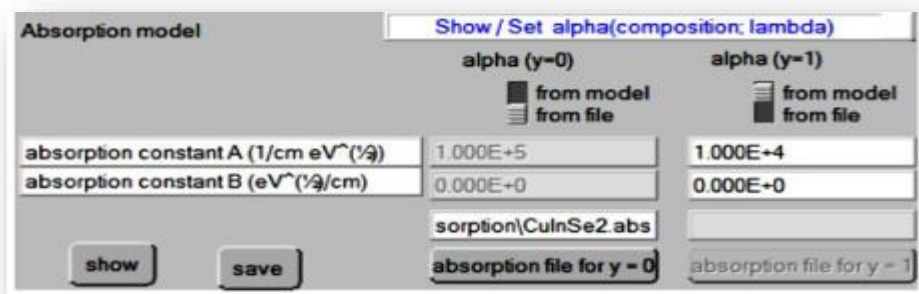


Figure III.10. Modèle de l'absorption

Le type des recombinaisons en volume présent est indiqué dans le côté droite du panneau des propriétés de la couche comme présenté sur la figure III.12. Tous les types des recombinaisons sont présents directs ou à travers des pièges.

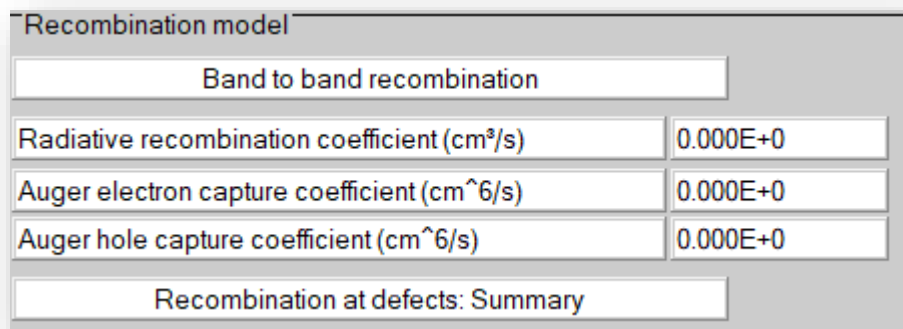


Figure III.11. Types des recombinaisons directs ou à travers des pièges

III.6. Sélection des mesures à simuler :

Dans la partie « Action » du panneau d'action, on peut choisir un ou plusieurs mesures à simuler: IV, C-V, C-f et $QE(\lambda)$. On peut ajuster également les valeurs initiales et finales de l'argument ainsi que le nombre des étapes.

Action	Pause at each step		Stop after Voc		number of points	increment (V)
<input checked="" type="checkbox"/> I-V	V1 (V)	0.0000	V2 (V)	1.5000	76	0.0200
<input type="checkbox"/> C-V	V1 (V)	-0.8000	V2 (V)	0.8000	81	0.0200
<input type="checkbox"/> C-f	f1 (Hz)	1.000E+2	f2 (Hz)	1.000E+6	21	5
<input checked="" type="checkbox"/> QE (IPCE)	WL1 (nm)	100.00	WL2 (nm)	900.00	81	10.00

Figure III.12. Mesures à simuler

Lancer le calcul

On clique sur le bouton « Calculate : single shot » pour lancer la simulation.



III.7. Fenêtre de résultats :

Après avoir introduit toutes les données nécessaires (configuration de la cellule solaire, propriétés de la couche et propriétés du matériau), le bouton « calculer » dans l'interface du panneau d'action peut être cliqué pour démarrer la simulation. Par conséquent, le panneau des bandes d'énergie s'ouvre et les calculs commencent. Cette fenêtre affiche les résultats de la simulation sous forme de graphe avec la possibilité de les sauvegarder ou exporter leurs valeurs. SCAPS est capable de calculer les bandes d'énergie, les concentrations et les courants à un point de fonctionnement donné, les caractéristiques (I-V), les caractéristiques (C-V) et (C-f), le rendement quantique (QE), et les bandes d'énergies en régime alternatif figure III.14 [75].

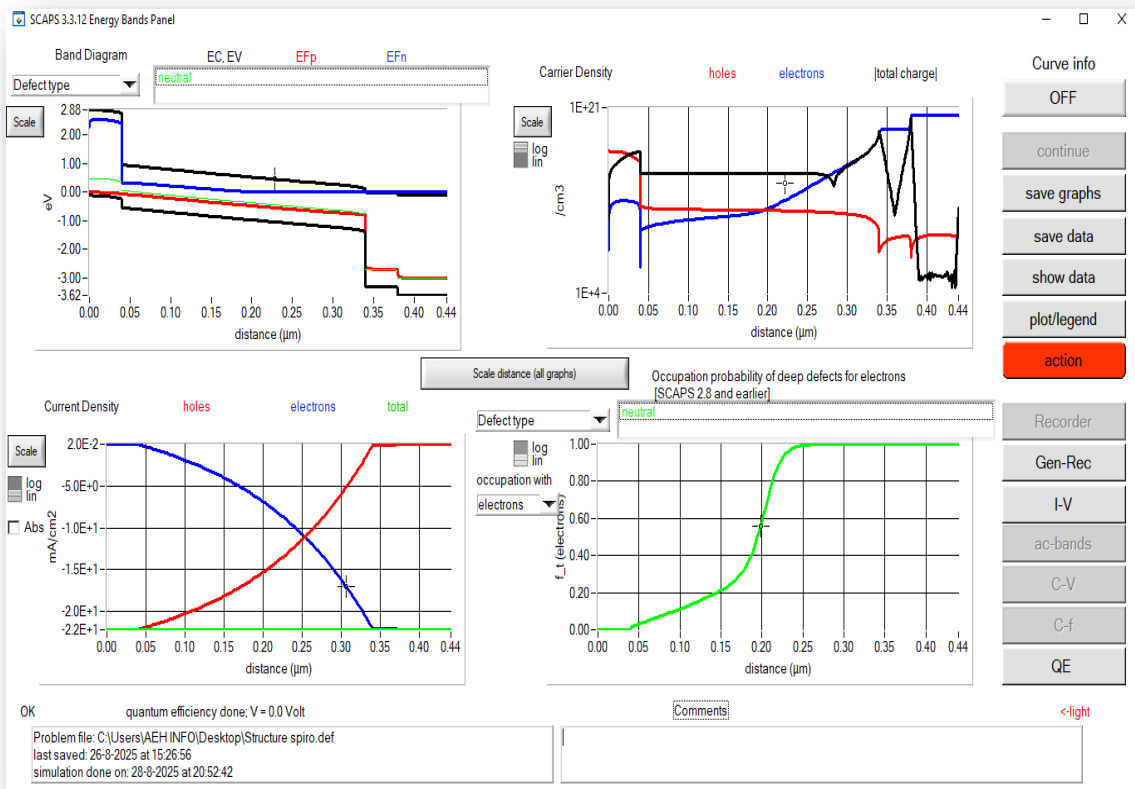


Figure III.13. Panneau d’affichage des diagrammes de bande d’énergie, courant et concentration

La figure III.15 présente l’interface de sortie des résultats de simulation obtenus à l’aide du logiciel SCAPS-1D. Le graphique situé à gauche illustre la caractéristique courant–tension (J-V) de la cellule solaire simulée. L’analyse de cette courbe permet de déterminer les paramètres photovoltaïques fondamentaux, à savoir la tension en circuit ouvert ($V_{oc} = 1,1287V$), la densité de courant de court-circuit ($J_{sc} = 22,19 \text{ mA/cm}^2$), le facteur de forme ($FF = 81,28\%$) ainsi que le rendement de conversion ($\eta = 20,33 \%$). Ces valeurs traduisent la performance électrique globale du dispositif étudié. Le graphique de droite, quant à lui, illustre l’évolution des différents courants de recombinaison en fonction de la tension appliquée. La courbe noire correspond à la recombinaison totale, tandis que les autres courbes mettent en évidence les mécanismes de recombinaison individuels, tels que la recombinaison Shockley–Read–Hall, Auger et radiative.

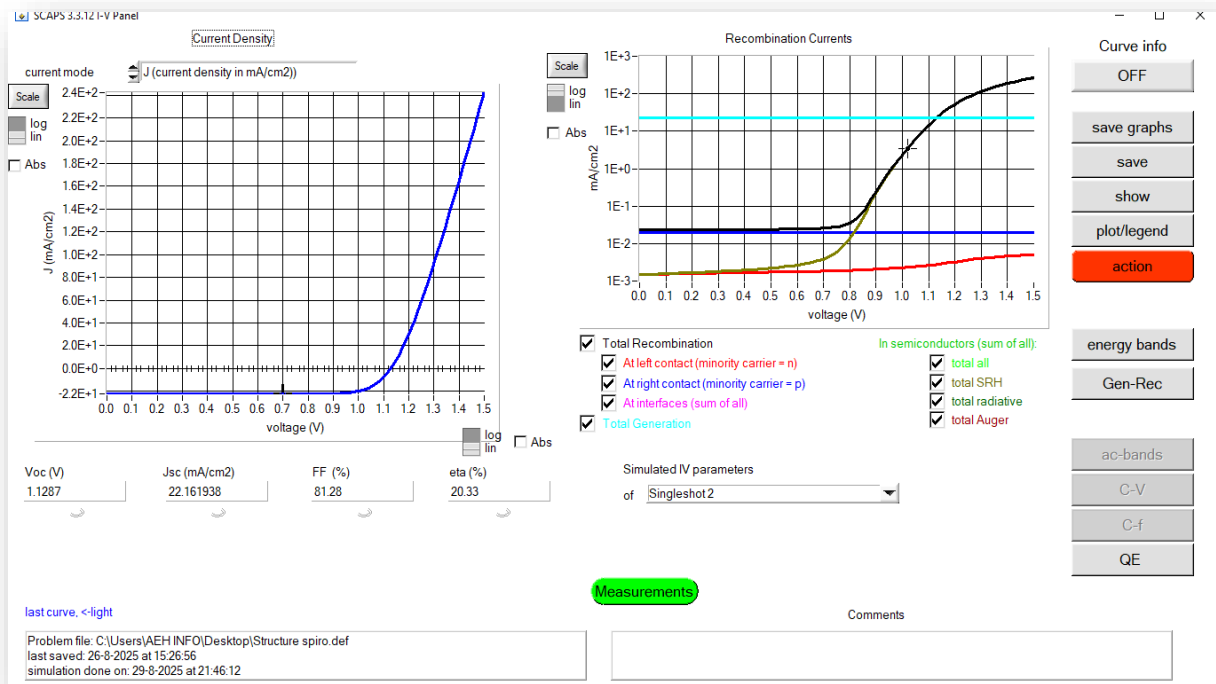


Figure III.14. Panneau d’affichage des résultats de simulation « Output window »

Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons présenté l’outil de simulation SCAPS-1D, largement utilisé pour l’étude et la modélisation des cellules solaires. Le modèle physique intégré dans ce simulateur permet de reproduire avec précision le comportement électro-optique des dispositifs photovoltaïques et d’optimiser leurs paramètres géométriques, électriques et optiques. Grâce à cette approche, il devient possible d’évaluer l’effet des différentes couches constitutives sur les performances globales de la cellule solaire et d’identifier les conditions favorables à l’amélioration de son rendement.

Chapitre IV :

Résultats et discussion

Introduction :

Dans ce chapitre, nous allons présenter les différentes simulations numériques effectuées à l'aide du logiciel SCAPS-1D (version 3.3.12), dans le but d'évaluer et d'optimiser les performances des cellules solaires à base de pérovskites. L'étude portera sur l'analyse comparative de plusieurs matériaux pour les couches actives ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, CsSnI_3) de transport des charges (HTL et ETL), ainsi que sur l'influence de paramètres tels que l'épaisseur et la température. Ces simulations permettront d'identifier les combinaisons les plus prometteuses et de proposer une structure optimisée offrant un rendement amélioré.

I. Simulation numérique de la cellule solaire pérovskite :

La figure IV.1 présente la structure de la cellule solaire à base de pérovskite qui constitue le point de départ de notre étude. Dans ce cadre, nous avons envisagé l'utilisation de plusieurs matériaux pour la couche active, à savoir $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ (méthylammonium étain iodé), $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (méthylammonium plomb triiodure), $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$ (méthylammonium germanium triiodure) et CsSnI_3 (triiodure d'étain et de césium), afin d'évaluer leur impact sur les performances optoélectroniques de la cellule et de déterminer le matériau le plus prometteur pour l'optimisation du rendement.

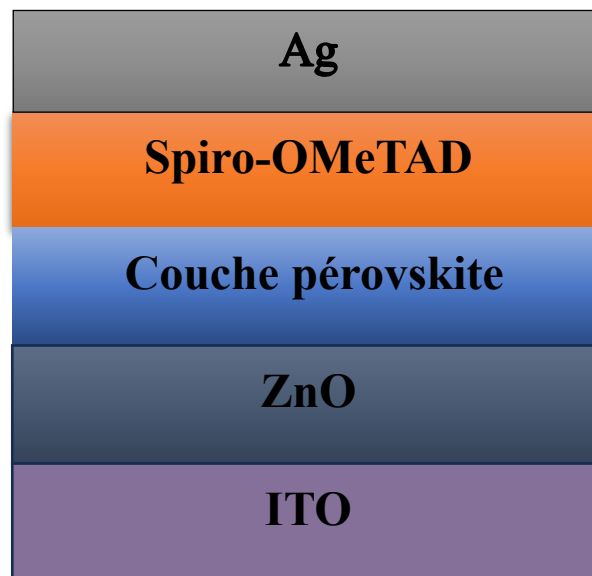


Figure IV.1. Structure de la cellule solaire pérovskite à simuler

La cellule se compose d'une couche active en pérovskite $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ qui sera ensuite remplacée par $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ et CsSnI_3 , d'une couche de matériau de transfert d'électrons ETL (ZnO) et d'une couche de transfert de trous HTL (Spiro-OMETAD). La cathode de cette cellule est constituée par le matériau ITO et l'anode par le matériau Ag. La lumière du spectre solaire AM 1,5 G est appliquée en face de la couche ITO de la cellule solaire. La meilleure couche active sera déterminée à travers le remplacement successif de la couche absorbante par les matériaux sélectionnés ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$ et CsSnI_3), ce qui permettra d'identifier celui offrant les performances les plus optimales.

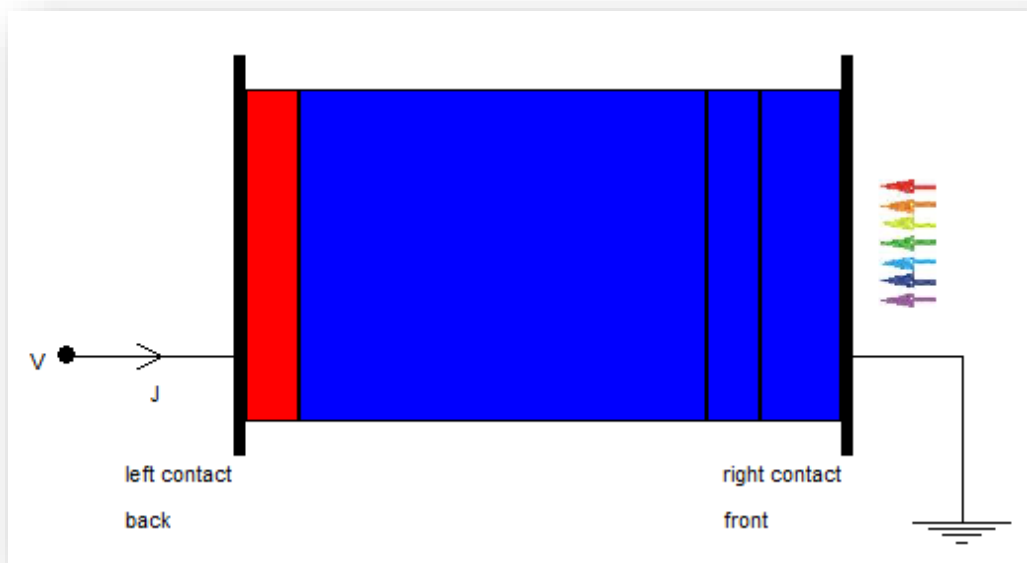


Figure IV.2. Schéma de la cellule solaire pérovskite simulée par SCAPS-1D

I.1 L'effet d'utiliser différents matériaux pérovskites pour la couche active

I.1.1. Paramètres de la cellule pérovskite étudiée :

Les paramètres de la structure ainsi que les paramètres physiques des différentes couches sont groupés dans le tableau suivant.

Tableau IV.1. Propriétés des différentes couches de la cellule solaire (ITO, ZnO, Spiro-OMeTAD, couche active, Ag)

Matériaux	Spiro-OMeTAD	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	CH ₃ NH ₃ GeI ₃	CH ₃ NH ₃ SnI ₃	CsSnI ₃	ZnO	ITO
Épaisseur (µm)	0.040	0.300	0.300	0.300	0.300	0.040	0.060
Bande de gap (eV)	3.000	1.500	1.500	1.600	1.300	3.300	3.500
Affinité électronique (eV)	2.100	1.500	3.900	4.000	4.500	4.000	4.000
Constante diélectrique (relative)	3.000	10.000	6.500	6.600	9.000	8.500	9.000
Densité effective d'états CB (1/cm ³)	1.000E+18	2.000E+20	2.200E+18	2.100E+18	2.200E+18	4.000E+18	2.200E+18
Densité effective d'états VB (1/cm ³)	1.000E+19	8.000E+19	1.800E+19	1.800E+19	1.800E+19	2.000E+19	1.800E+19
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Vitesse thermique du trou (cm/s)	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7	1.000E+7
Mobilité électronique (cm ² /Vs)	1.000E-4	1.000E+1	4.000E+1	4.000E+1	5.000E+0	1.000E+2	3.000E+1
Mobilité des trous (cm ² /Vs)	2.000E-4	1.000E+1	8.000E+0	7.900E+0	1.000E+0	3.000E+1	5.000E+0
Densité des donneurs ND (1/cm ³)	0.000E+0	1.000E+15	0.000E+0	0.000E+0	0.000E+0	1.000E+19	2.000E+20
Densité des accepteurs NA (1/cm ³)	1.000E+17	0.000E+0	3.000E+2	3.000E+3	2.000E+17	0.000E+0	0.000E+0

I.1.2. Résultats et discussion :

Dans le cadre de cette étude, la couche active a été successivement remplacée par différents matériaux pérovskites notamment CH₃NH₃PbI₃, CH₃NH₃GeI₃, CH₃NH₃SnI₃ et CsSnI₃. Les résultats obtenus des différents paramètres photovoltaïques J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$), V_{co} (V), FF (%) et η (%) sont représentés dans le tableau suivant.

Tableau IV.2. Effet des différents matériaux pérovskites pour couches actives sur les performances de la cellule solaire

Matériaux absorbants	Voc (V)	Jsc ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
CH ₃ NH ₃ PbI ₃	1.1287	22.16	81.28	20.33
CH ₃ NH ₃ GeI ₃	1.2826	22.16	82.73	23.52
CH ₃ NH ₃ SnI ₃	1.3778	19.21	83.91	22.21
CsSnI ₃	1.1057	28.86	80.97	25.84

L'analyse des résultats obtenus à partir du tableau montre que la cellule solaire à base de CsSnI₃ présente les meilleures performances avec un rendement de 25,84 %. Cette efficacité élevée est directement liée à une bande interdite optimale ($\approx 1,3$ eV), proche de la valeur théorique idéale selon la limite de Shockley–Queisser [78]. Grâce à cette bande interdite, le matériau absorbe une partie plus large du spectre solaire, notamment dans le proche infrarouge, ce qui se traduit par un courant de court-circuit élevé ($J_{sc} = 28,86$ mA/cm²). De plus, la bonne mobilité des porteurs dans CsSnI₃ favorise une extraction efficace des charges photogénérées et réduit les recombinaisons, expliquant ainsi la supériorité de ce matériau en termes de rendement global.

À l'inverse, la cellule basée sur CH₃NH₃SnI₃ atteint un rendement plus limité de 22,21 %, malgré une tension en circuit ouvert élevée ($V_{oc} = 1,3778$ V) et le meilleur facteur de forme du lot (FF = 83,91 %). Le courant de court-circuit plus faible ($J_{sc} = 19,21$ mA/cm²) constitue le facteur limitant. Cette faiblesse peut être attribuée à une absorption optique moins étendue et à des phénomènes de recombinaison liés aux défauts induits par l'instabilité chimique de l'étain, réduisant ainsi l'efficacité de collecte des charges.

La cellule à base de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ affiche quant à elle un rendement satisfaisant de 20,33 %, dû à un équilibre correct entre V_{oc} (1,1287 V), J_{sc} (22,16 mA/cm^2) et FF (81,28 %). Toutefois, son courant de court-circuit reste inférieur à celui obtenu avec CsSnI_3 . Cette limitation provient de sa bande interdite plus large ($\approx 1,55$ eV), qui restreint l'absorption à la zone visible du spectre et laisse le proche infrarouge non exploité.

Enfin, la cellule utilisant $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$ présente un rendement relativement élevé de 23,52 %, grâce à une tension en circuit ouvert importante ($V_{oc} = 1,2826$ V) et un facteur de forme correct (82,73 %). Le courant généré ($J_{sc} = 22,16$ mA/cm^2) reste cependant modéré comparé à celui de CsSnI_3 , en raison de la capacité limitée du matériau à exploiter efficacement l'ensemble du spectre solaire. Par ailleurs, les pertes liées à la mobilité des charges et aux recombinaisons à l'interface avec la couche de transport de trous (HTL) traduisent un alignement énergétique imparfait, ce qui limite encore le rendement global. Ces résultats sont illustrés sur la caractéristique $J(V)$ qui est représentée sur la figure IV.3.

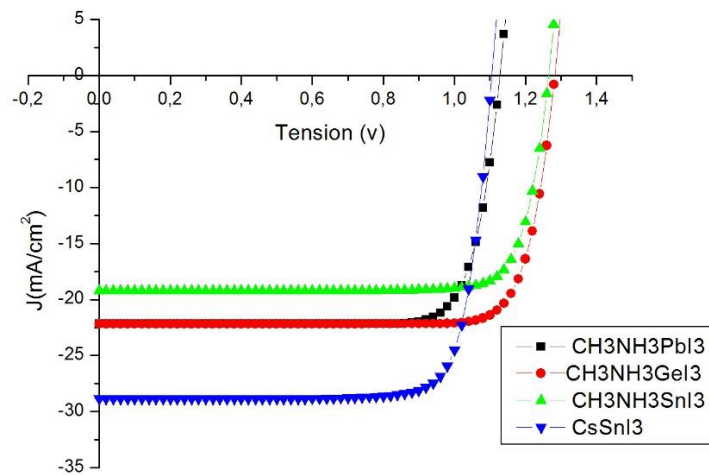


Figure IV.3. Influence des différentes couches actives sur la caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire

I.I.3. Effet de l'épaisseur de couche (CsSnI3) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire :

L'épaisseur de la couche absorbante est un paramètre important qui joue un rôle essentiel dans l'optimisation des performances de la cellule solaire. Il devrait être optimal afin d'augmenter la densité des électrons et des trous photo-générés et de minimiser leur recombinaison [79].

Dans notre étude, nous avons varié l'épaisseur du matériau pérovskite (CsSnI3) de 100 à 900 nm. Les autres paramètres sont fixes comme illustrés dans le tableau IV.1. Les résultats des différents paramètres photovoltaïques obtenus J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$), V_{co} (V), FF (%) et η (%) sont représentés dans le tableau suivant.

Tableau IV.3. Effet de l'épaisseur de la couche active (CsSnI3) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

Épaisseur (nm)	V_{co} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
100	1.1316	16.63	82.11	15.46
300	1.1057	28.26	80.97	25.84
600	1.0850	33.44	79.62	28.89
900	1.0742	34.65	78.53	29.23

L'interprétation des résultats obtenus dans notre travail montre que l'augmentation de l'épaisseur de la couche absorbante entraîne une hausse significative de J_{sc} , due à une meilleure absorption des photons et donc à une génération plus importante de porteurs de charge. En revanche, V_{oc} et FF présentent une légère diminution avec l'augmentation de l'épaisseur, en raison de l'augmentation des recombinaisons dans la couche la plus épaisse et des pertes ohmiques. Le rendement global η augmente rapidement entre 100 et 300 nm, puis tend à se stabiliser au-delà de 600 nm.

Ainsi, bien que les plus grandes épaisseurs (600–900 nm) offrent un rendement légèrement supérieur, elles entraînent une diminution de V_{oc} et de FF, ce qui peut affecter la stabilité et la performance pratique de la cellule. À l'inverse, une épaisseur de 300 nm permet de combiner

un J_{sc} déjà élevé et un rendement substantiel (25.84 %) tout en conservant une V_{oc} et un FF encore élevé. Cette épaisseur représente donc un compromis optimal entre tous les paramètres électriques et optiques de la cellule.

En conclusion, pour la cellule simulée, l'épaisseur optimale de la couche active CsSnI₃ est de 300 nm, car elle permet d'atteindre un bon équilibre entre tous les paramètres photovoltaïques le courant, tension, facteur de forme et rendement global. Dans une cellule solaire Pérovskite, plus la couche absorbante est plus épaisse plus l'absorption de photons est plus importante et plus la concentration des porteurs photo générée est plus grande, qui à son tour augmente l'efficacité de la cellule. Mais lorsque l'épaisseur augmente au-delà de 300 nm, l'efficacité diminue lentement en raison de l'augmentation du taux de recombinaison des paires électrons et trous, en raison de la grande distance entre les deux électrodes, ce qui entraîne une réduction de l'efficacité de la cellule [80]. Les figures IV.4 illustre les changements dans les caractéristiques photovoltaïques, à savoir la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (J_{sc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion de puissance (η), de la cellule solaire avec la variation de l'épaisseur de la couche absorbante.

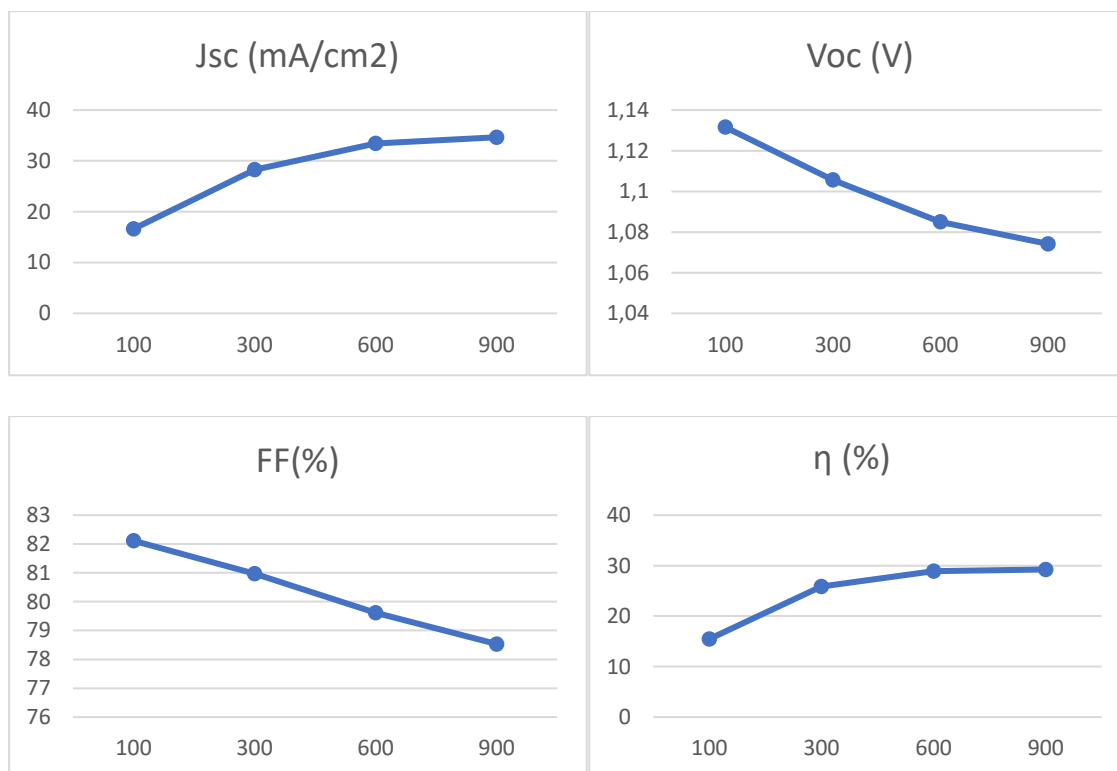


Figure IV.4. Effet de l'épaisseur de la couche active sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

Cette influence est aussi illustrée sur la caractéristique $J(V)$ qui est représentée sur la figure IV.5. On remarque que la densité du courant J_{sc} augmente avec l'épaisseur de la couche pérovskite.

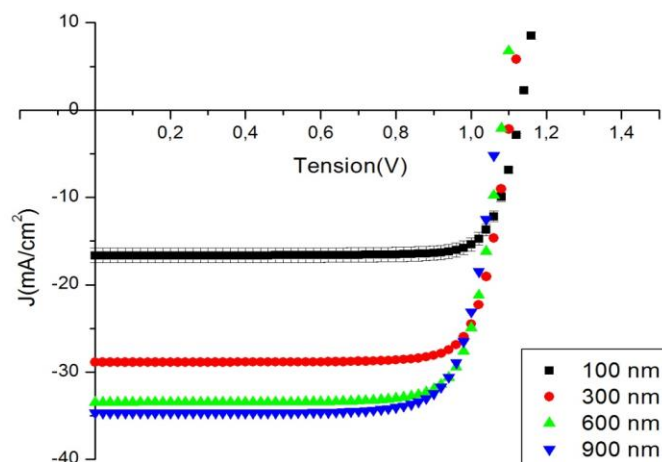


Figure IV.5. Influence de l'épaisseur de la couche active (CsSnI_3) sur la caractéristique $J(V)$ de la cellule solaire

I.2. Simulation de la cellule solaire pérovskite avec différents matériaux de la couche transport d'électron ETL :

I.2.1. Paramètres des matériaux de la couche de transport d'électrons ETL

Dans notre étude, nous avons considéré plusieurs matériaux pour la couche ETL (TiO_2 , ZnO , C_60 , PCBM). Les paramètres de ces différents matériaux sont indiqués dans le tableau suivant.

Tableau IV.4. Les paramètres des différents matériaux pour la couche de transport d'électron ETL

Matériaux	TiO_2	ZnO	C_60	PCBM
Épaisseur (nm)	40	40	40	40
Bande de gap (eV)	2	3.3	1.2	1.2
Affinité électronique (eV)	4.2	4	4.5	4.5
Constante diélectrique (relative)	10	8.5	10	10

Densité effective d'états CB (1/cm ³)	2.2*10 ¹⁸	4*10 ¹⁸	8*10 ¹⁹	1*10 ¹⁸
Densité effective d'états VB (1/cm ³)	1.8*10 ¹⁹	2*10 ¹⁹	8*10 ¹⁹	1*10 ¹⁹
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
Vitesse thermique du trou (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
Mobilité électronique (cm ² /Vs)	1*10 ²	1*10 ²	8*10 ⁻²	2*10 ¹
Mobilité des trous (cm ² /Vs)	2.5*10 ¹	3*10 ¹	3.5*10 ⁻³	1*10 ¹
Densité des donneurs ND (1/cm ³)	1*10 ¹⁷	1*10 ¹⁹	1*10 ¹⁵	1*10 ¹⁵
Densité des accepteurs NA (1/cm ³)	–	–	–	–

I.2.2. Résultats et discussion :

Dans notre simulation, nous avons varié les matériaux des couches interfaciales ETL (TiO₂, ZnO, C60, PCBM). Le tableau IV.5 résume les résultats des paramètres photovoltaïques obtenus J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$), V_{oc} (V), FF (%) et η (%) des différentes cellules.

Tableau IV.5. Résultats pour différents matériaux pour la couche de transport d'électron ETL

Matériaux	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
TiO ₂	1.1054	28.98	81.00	25.95
C60	1.0440	30.46	63.68	20.25
PCBM	1.0635	30.47	69	22.36
ZnO	1.1057	28.86	80.97	25.84

L'évaluation comparative des performances photovoltaïques associées à différents matériaux employés comme couche de transport d'électrons (ETL) met en évidence des écarts significatifs. Les résultats obtenus indiquent que le dioxyde de titane (TiO_2) et l'oxyde de zinc (ZnO) constituent les configurations les plus performantes, avec un rendement avoisinant 25%. Ces performances élevées sont attribuées à une tension en circuit ouvert ($V_{oc} \approx 1,10 \text{ V}$), à un courant de court-circuit ($J_{sc} \approx 28,9 \text{ mA/cm}^2$) ainsi qu'à un facteur de forme ($FF \geq 80 \%$). L'association de ces paramètres traduit une bonne adéquation énergétique avec la couche active CsSnI_3 et une réduction notable des phénomènes de recombinaison interfaciale, favorisant ainsi une extraction efficace des porteurs de charge.

À l'inverse, l'intégration du PCBM en tant qu'ETL génère un courant de court-circuit plus élevé ($30,47 \text{ mA/cm}^2$), mais cette amélioration ne se traduit pas par une performance globale optimale. En effet, le rendement demeure limité à 22,36 %, principalement en raison d'un facteur de forme modéré (69 %), dû à plusieurs causes : une résistance interne élevée qui freine le transport des électrons, une recombinaison excessive des porteurs aux interfaces, ou un mauvais alignement énergétique entre le PCBM et la couche absorbante, ce qui empêche l'extraction efficace des charges, réduisant ainsi la puissance maximale délivrée par la cellule, et donc son rendement global [81].

Par ailleurs, la configuration reposant sur le C60 présente des performances inférieures, avec un rendement de seulement 20,25 %. Bien que le courant de court-circuit soit relativement élevé ($30,46 \text{ mA/cm}^2$), la combinaison d'un V_{oc} plus faible ($\sim 1,04 \text{ V}$) et surtout d'un FF très réduit (63,68 %) traduit une intensité accrue des processus de recombinaison et un mauvais alignement énergétique, ce qui limite considérablement l'efficacité de la cellule [82].

Cette analyse montre que le TiO_2 et le ZnO sont les couches de transport d'électrons les plus adaptées pour les cellules solaires à base de CsSnI_3 , grâce à l'alignement favorable de leurs bandes de conduction avec celle de l'absorbeur et à leur capacité à assurer une extraction efficace des électrons photogénérés. La figure IV.6 illustre l'influence des différentes couches ETL sur la caractéristiques $J(V)$ de la cellule solaire.

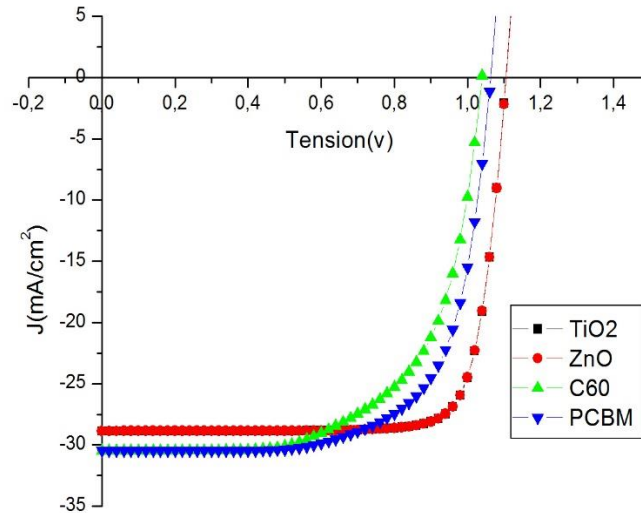


Figure IV.6. Influence des différentes couches ETL sur la caractéristiques J (V) de la cellule solaire

I.2.3. Effet de l'épaisseur de couche ETL (TiO₂) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire :

Dans cette partie de simulation on va étudier l'Effet de l'épaisseur de couche ETL (TiO₂) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire les résultats sont regroupés dans le tableau suivant

Tableau IV.6. Effet de l'épaisseur de la couche ETL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

Epaisseur (nm)	Voc(V)	Jsc ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
40	1.1054	28.98	81.00	25.95
80	1.1055	29.08	80.97	26.04
120	1.1056	29.18	80.96	26.12
160	1.1058	29.25	80.95	26.18
200	1.1058	29.32	80.94	26.24

La variation de l'épaisseur de la couche de TiO₂ entre 40 et 200 nm montre un impact limité sur les performances de notre cellule solaire. Le Voc reste quasi constante (~1,105 V), tandis que

le J_{sc} augmente légèrement (28,98 à 29,32 mA/cm²), traduisant une meilleure collecte des électrons. Le FF demeure stable avec une très faible diminution, et le rendement (η) s'améliore faiblement de 25,95 % à 26,24 %. Ces résultats montrent que l'augmentation de l'épaisseur de la couche TiO₂ permet une amélioration progressive du rendement, mais avec un impact limité. Au-delà d'une certaine valeur critique, une épaisseur trop importante pourrait accroître la résistance série et réduire la performance globale, donc une épaisseur proche de 200 nm constitue un compromis optimal entre transport des charges et efficacité globale. La figure IV.7 montre l'effet de l'épaisseur de la couche ETL (TiO₂) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire pérovskite. La figure IV.8 illustre l'influence des différentes épaisseurs de la couche TiO₂ sur la caractéristiques J(V) de la cellule solaire.

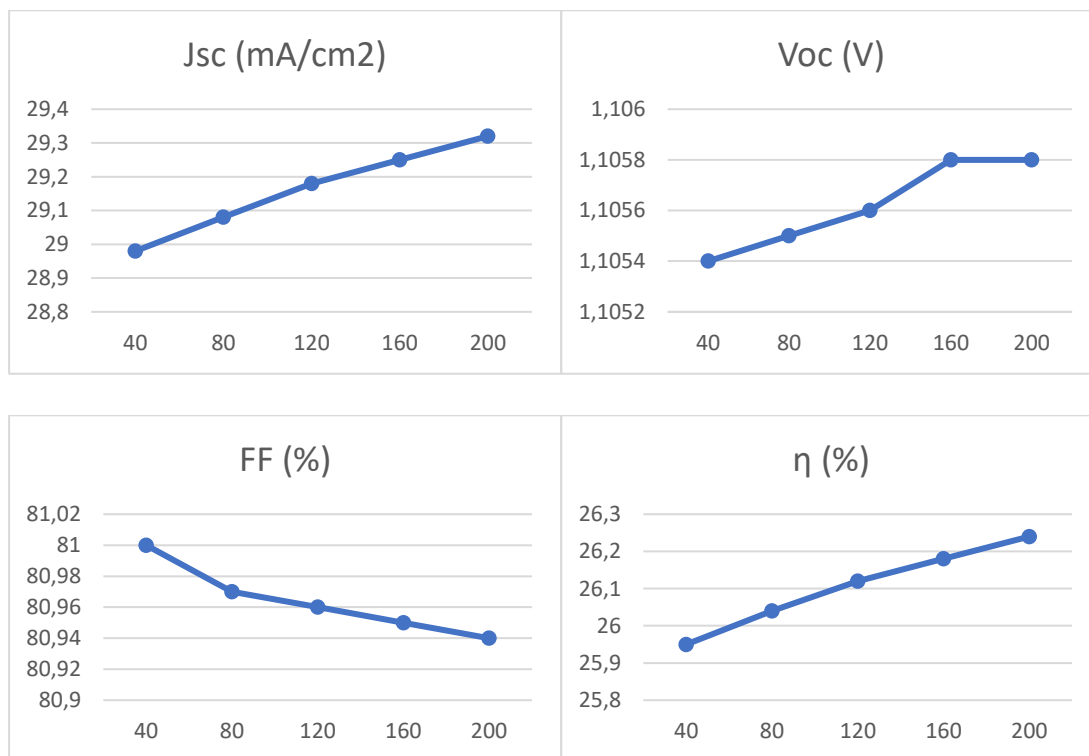


Figure IV.7. Effet de l'épaisseur de la couche ETL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

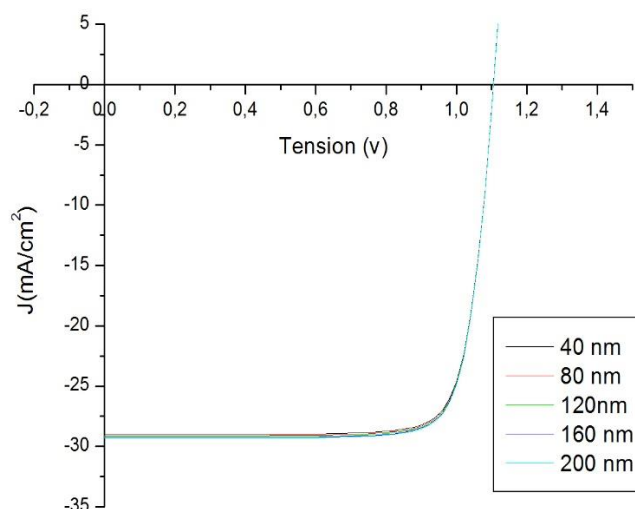


Figure IV.8. Influence de l'épaisseur de la couche ETL (TiO₂) sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire

I.3. Simulation de la cellule solaire pérovskite avec différents matériaux de la couche de transport de trou HTL :

I.3.1. Paramètres des matériaux de la couche de transport de trou HTL

Dans notre étude, nous avons considéré plusieurs matériaux pour la couche transport de trou HTL (Spiro-OMeTAD, NiO, CuO, P3HT). Les paramètres de ces différents matériaux sont mentionnés dans le tableau suivant

Tableau IV.7. Les paramètres des différents matériaux pour la couche transport de trou HTL

Matériaux	Spiro-OMeTAD	NiO	CuO	P3HT
Epaisseur (nm)	40	40	40	40
Bande de gap (eV)	3	3.4	1.35	1.7
Affinité électronique (eV)	2.1	2.1	4.07	3.5
Constante diélectrique (relative)	3	10	18.1	3
Densité effective d'états CB (1/cm ³)	1*10 ¹⁸	2.5*10 ¹⁸	2.2*10 ¹⁸	2*10 ¹⁸

Densité effective d'états VB (1/cm ³)	1*10 ¹⁹	1.8*10 ¹⁹	1.8*10 ¹⁹	2*10 ¹⁹
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
Vitesse thermique du trou (cm/s)	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷	1*10 ⁷
Mobilité électronique (cm ² /Vs)	1*10 ⁻⁴	2*10 ⁴	1*10 ⁰	1*10 ²
Mobilité des trous (cm ² /Vs)	2*10 ⁻⁴	2*10 ⁴	1*10 ¹	1.8*10 ⁻²
Densité des donneurs ND (1/cm ³)	–	–	–	–
Densité des accepteurs NA (1/cm ³)	1*10 ¹⁷	1*10 ²⁰	1*10 ²⁰	1*10 ¹⁸

I.3.2 Résultats et discussion :

Dans notre étude, nous avons simulé la couche HTL pour les matériaux suivants (Spiro-OMeTAD, NiO, CuO, P3HT). Les résultats obtenus J ($\frac{mA}{cm^2}$), V (V), FF (%) et η (%). Les paramètres de ces différents matériaux sont indiqués dans le tableau suivant :

Tableau IV.8. Résultats pour différents matériaux de transport de trou HTL

Matériaux	Voc (V)	Jsc ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
Spiro	1.1054	28.98	81.00	25.95
NiO	1.1052	28.99	86.91	27.84
CuO	1.0836	29.47	87.76	28.02
P3HT	1.1053	29.21	85.16	27.50

L'analyse des performances des différentes couches de transport de trous (HTL) met en évidence des comportements distincts en fonction de la nature du matériau utilisé. Le CuO se distingue par le rendement le plus élevé (28,02 %), résultat attribué à un facteur de forme particulièrement important (87,76 %) et à un courant de court-circuit supérieur (29,47 mA/cm²). Ces caractéristiques traduisent un alignement énergétique favorable avec la couche active CsSnI₃, une mobilité des trous satisfaisante et une réduction notable des pertes résistives [666]. Le NiO, avec un rendement proche (27,84 %), bénéficie d'une tension en circuit ouvert stable (1,1052 V) et d'un facteur de forme élevé (86,91 %). Bien que son courant de court-circuit soit légèrement inférieur à celui du CuO, ses performances globales restent remarquables, reflétant une bonne compatibilité énergétique et une sélectivité efficace des porteurs de charge.

Le P3HT, matériau organique conducteur, affiche un rendement compétitif (27,50 %), soutenu par un courant de court-circuit élevé (29,21 mA/cm²). Toutefois, son facteur de forme plus limité (85,16 %) témoigne de pertes résistives plus importantes, liées à une mobilité des charges plus faible que celle observée dans les oxydes métalliques. Enfin, le Spiro-OMeTAD présente les performances les plus modestes (25,95 %), malgré une tension en circuit ouvert comparable à celle des autres HTL (~1,105 V). Son facteur de forme plus réduit (81 %) et sa conductivité intrinsèque limitée expliquent ce rendement inférieur, d'autant plus qu'il nécessite généralement un dopage pour améliorer son efficacité, au détriment de la stabilité à long terme.

Ainsi, ces résultats confirment que les couches inorganiques telles que le CuO et le NiO surpassent les matériaux organiques (P3HT, Spiro-OMeTAD) en termes de performance et de stabilité, et constituent des alternatives prometteuses pour optimiser l'efficacité et la durabilité des cellules solaires à base de CsSnI₃. La figure IV.9 montre l'influence des différentes couches HTL sur la caractéristiques J (V) de la cellule solaire.

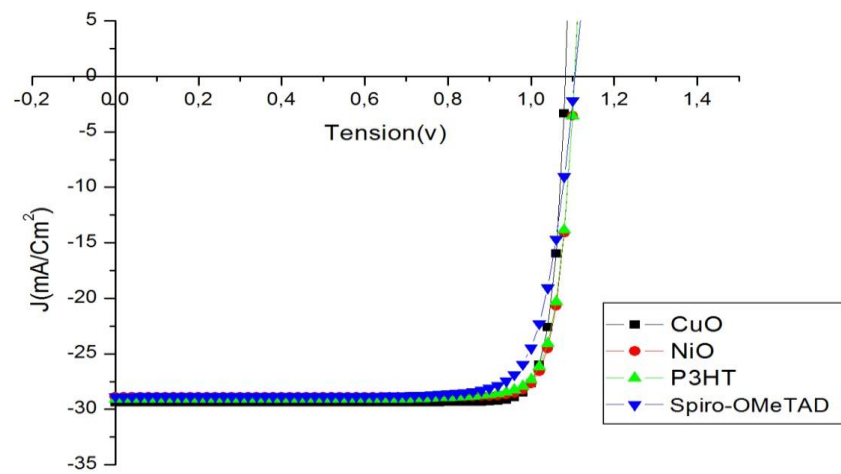


Figure IV.9. Influence des différentes couches HTL sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire

I.3.3. Effet de l'épaisseur de couche HTL (CuO) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire :

L'étude de l'influence de l'épaisseur de la couche de transport de trous (HTL) met en évidence une amélioration progressive des performances photovoltaïques lorsque cette épaisseur est augmentée de 20 nm à 100 nm. En effet, la tension en circuit ouvert (V_{oc}) croît légèrement, passant de 1,0736 V à 1,0940 V, tandis que le courant de court-circuit (J_{sc}) augmente de 29,13 mA/cm² à 29,96 mA/cm². Cette évolution traduit une meilleure sélectivité et une réduction des recombinaisons interfaciales, favorisant ainsi l'extraction des porteurs de charge. Parallèlement, le facteur de forme (FF) présente une légère diminution (de 87,98 % à 87,46 %), liée aux pertes résistives accrues. Toutefois, cette baisse reste minime et n'empêche pas une amélioration globale du rendement (η), qui passe de 27,52 % à 28,67 %.

Tableau IV.9. Effet de l'épaisseur de la couche HTL sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

Epaisseur (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
20	1.0737	29.24	87.97	27.62
40	1.0836	29.47	87.76	28.02

60	1.0885	29.67	87.63	28.30
80	1.0917	29.86	87.53	28.54
100	1.0940	30.04	87.45	28.74

Ces résultats confirment que l'augmentation de l'épaisseur de la couche HTL contribue à optimiser l'efficacité de la cellule solaire jusqu'à une certaine limite, en améliorant le transport des charges et la sélectivité de contact, tout en maintenant des pertes résistives relativement faibles. La figure IV.5 montre l'effet de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur les différents paramètres photovoltaïques de la cellule solaire.

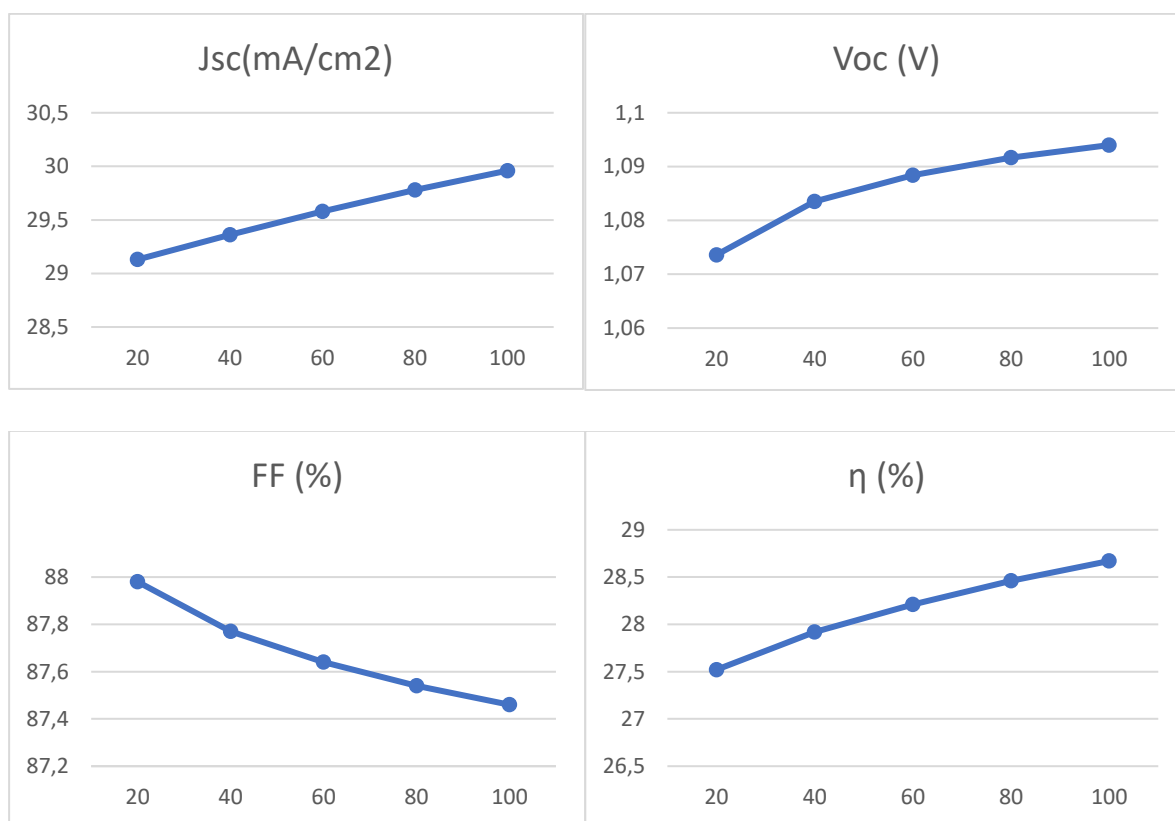


Figure IV.10. Effet de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

Sur la figure IV.11 on trouve l'influence de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur la caractéristiques J(V) de la cellule solaire

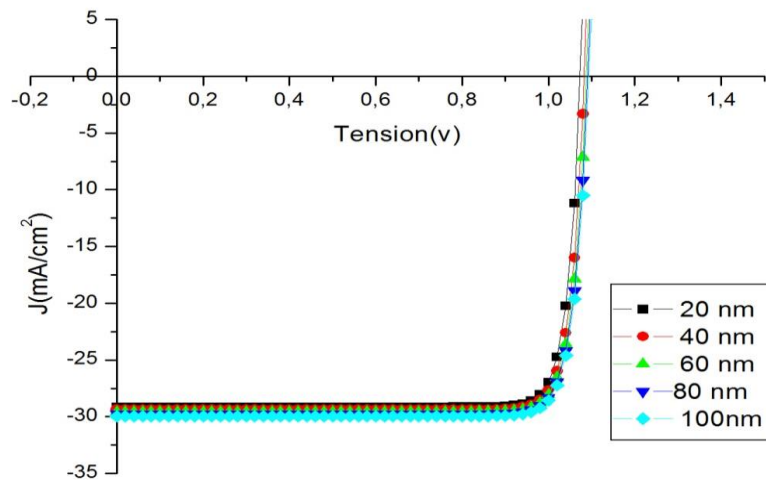


Figure IV.11. Influence de l'épaisseur de la couche HTL (CuO) sur la caractéristique J (V) de la cellule solaire

I.4. Effet de la température sur notre cellule solaire (ITO / TiO₂ /CsSnI₃/CuO) :

Nous avons varié progressivement la température de notre cellule, en partant de la valeur 300 à 380 K. On remarque un changement des paramètres photovoltaïques V_{oc} (V), J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$), FF (%) et η (%) illustré dans le tableau suivant.

Tableau IV.10. Paramètres photovoltaïques de la cellule solaire en fonction de la température

Température (°K)	V_{oc} (V)	J_{sc} ($\frac{mA}{cm^2}$)	FF (%)	η (%)
300	1.0836	29.47	87.76	28.02
320	1.0602	29.47	87.01	27.18
340	1.0358	29.47	86.26	26.33
360	1.0111	29.48	85.48	25.48
380	0.9861	29.48	84.65	24.61

On remarque qu'avec l'augmentation de la température, le courant de court-circuit reste pratiquement constant autour de 29,47–29,48 mA/cm², tandis que la tension en circuit ouvert

(Voc) diminue progressivement de 1,0836 V à 300 K à 0,9861 V à 380 K. Cette baisse de Voc se traduit par une diminution du facteur de forme, qui passe de 87,76% à 84,65 %, entraînant une réduction significative du rendement de la cellule, passant de 28,02 % à 24,61%. Ainsi, on observe que l'efficacité de la cellule chute pour les températures élevées en raison de l'augmentation du taux de recombinaison, qui réduit la longueur de diffusion et limite la collecte des porteurs photogénérés. D'après ces résultats, la meilleure performance est obtenue à 300 K (28,02 %), ce qui confirme que la cellule fonctionne de manière optimale à basse température. Dans la figure IV.12 on peut observer l'effet de la température sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire (J_{sc} , Voc, FF et le η).

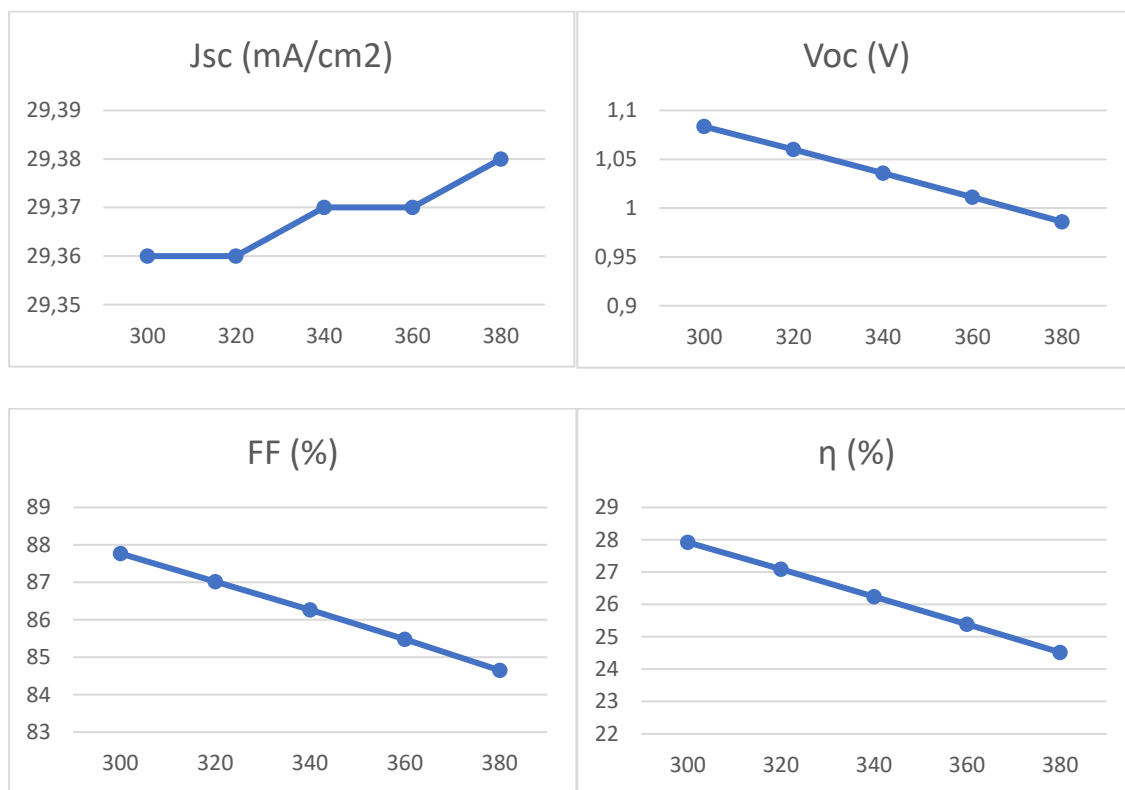


Figure IV.12. Effet de la température sur les paramètres photovoltaïques de la cellule solaire

L'influence de la température sur la caractéristiques J (V) de la cellule solaire est illustrée dans la figure IV.13.

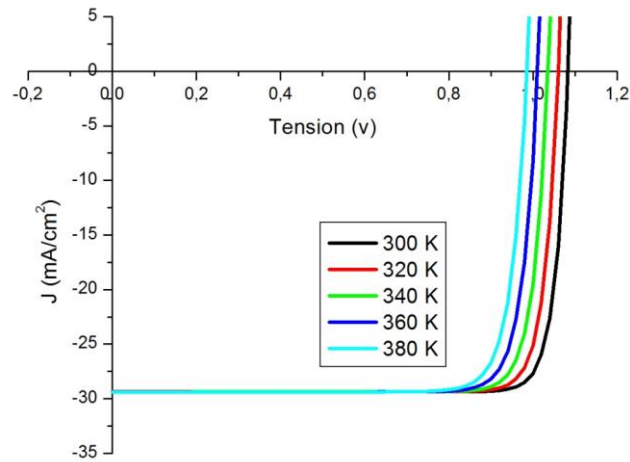


Figure IV.13. Influence de la température sur la caractéristiques J (V) de la cellule solaire

Conclusion :

Dans ce chapitre, les performances optimales des cellules solaires à base de pérovskite ont été étudiées à l'aide du logiciel SCAPS-1D. Les simulations révèlent que le choix des matériaux et l'optimisation des épaisseurs des couches actives en pérovskites, ainsi que les couches interfaciales l'ETL et HTL et l'effet de la température, influencent significativement les performances de la cellule. Les optimisations effectuées ont montré que la structure ITO / TiO₂ /CsSnI₃/ CuO/Ag constitue l'architecture la plus performante, et ce à une température de 300 K, avec une épaisseur de 300 nm pour la couche active, et des épaisseurs respectives de 200 nm et 100 nm pour les couches ETL et HTL.

Conclusion générale

Conclusion générale

Le domaine du photovoltaïque à base des matériaux pérovskites est très dynamique en termes d'avancées scientifiques et technologiques. Ce mémoire était un travail approfondi dans le domaine de la recherche sur les cellules solaires à base de pérovskite. Nous avons étudié les performances de ces cellules en utilisant la simulation numérique avec le logiciel SCAPS-1D. L'objectif principal était d'analyser l'impact des différents matériaux constituant la couche active et les couches interfaciales sur les paramètres photovoltaïques clés, tels que le rendement de conversion de puissance (PCE), la tension de circuit ouvert (V_{oc}), le courant de court-circuit (J_{sc}) et le facteur de forme (FF).

Une comparaison a été menée entre plusieurs matériaux pérovskites ($CH_3NH_3SnI_3$, $CH_3NH_3GeI_3$, $CH_3NH_3PbI_3$ et $CsSnI_3$), couches de transport de trous HTL (Spiro-OMeTAD, NiO, P3HT et CuO) et couches de transport d'électrons ETL (TiO_2 , ZnO, PCBM et C60). Les résultats de simulation ont permis d'identifier les combinaisons les plus performantes et de mettre en évidence les paramètres déterminants pour améliorer l'efficacité des dispositifs. Le matériau $CsSnI_3$ s'est révélé être le matériau de la couche active le plus performant avec un rendement de 25,84 % pour une épaisseur de 300 nm, tandis que les couches interfaciales optimales est le matériau CuO avec un rendement de $\eta = 28,74$ % pour une épaisseur 100 nm de et pour la couche interfaciale ETL c'est le TiO_2 qui presents un rendement de 26% avec une épaisseur 200 nm. Enfin, l'étude de l'influence de la température a mis en évidence une diminution de l'efficacité du dispositifs avec un rendement passant de 28.02 % à 300 K à 24,61% à 380 K. Enfin La structure optimisée est **ITO / TiO_2 / $CsSnI_3$ / CuO /Ag** présente à la temperature 300 K les parametres photovoltaïques les plus performants avec un rendement de conversion proche de 28 %.

L'ensemble de ce travail met en évidence le potentiel remarquable des cellules solaires à pérovskite comme alternative prometteuse aux technologies photovoltaïques existantes. Grâce à leur fort coefficient d'absorption, leur grande mobilité de porteurs et la simplicité de leurs procédés de fabrication, ces cellules présentent des perspectives intéressantes pour une production à grande échelle et à moindre coût. Toutefois, certains

défis subsistent, notamment en termes de stabilité, de durabilité et de toxicité de certains matériaux, qui nécessitent encore des recherches approfondies.

En conclusion, ce mémoire a permis de démontrer l'apport essentiel de la simulation numérique dans la conception et l'optimisation des cellules photovoltaïques de nouvelle génération. Les résultats obtenus constituent une base solide pour des travaux futurs, visant non seulement à améliorer davantage les performances, mais aussi à garantir la fiabilité et la durabilité des cellules solaires à pérovskite, en vue de leur industrialisation et de leur contribution à la transition énergétique mondiale.

Bibliographie :

- [1] : <https://www.digischool.fr/cours/la-puissance-solaire-recue-et-reflechie-par-la-terre>
- [2] : El Jouad, Zouhair. Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organiques. Diss. Université d'Angers ; Université IBN TOFAIL au Maroc, 2016.
- [3] : Zahra, Meziani. « Modelisation de modules photovoltaïques». Université de Batna, Faculté de Technologie, Département d'Electronique, 2012.
- [4] : El Jouad, Zouhair. Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques organique. Diss. Université d'Angers ; Université IBN TOFAIL au Maroc, 2016.
- [5] : kaouala abdelli ,Lynda Abdelli , Mémoire de Master <design of perovskite solar cells >, Univeristé MOHAMMED KHIDER à Biskra 2019/2020.
- [6] : ABED OUSSAMA, AMIRI SAMIR. *Investigation et Optimisation Numérique d'une Cellule Photovoltaïque À base de matériau Pérovskite*. Diss. faculté des sciences et de la technologie* univ bba, 2024.
- [7] : Mohamed, MELOUKI *Réalisation et caractérisation des couches minces SnO₂, TiO₂ pour cellules solaires de type Gratzel* . Diss. USTO MB, 2012.
- [8] : https://fr.wikipedia.org/wiki/Histoire_de_l%27%C3%A9nergie_solaire
- [9] : <https://www.cea.fr/comprendre/Pages/matiere-univers/essentiel-sur-le-soleil.aspx>
- [10] : https://www.pseau.org/outils/ouvrages/iepf_pompage_photovoltaique.pdf
- [11] : <https://www.bag.admin.ch/bag/fr/home/gesund-leben/umwelt-und-gesundheit/strahlung-radioaktivitaet-schall/elektromagnetische-felder-emf-uv-laser-licht/sonne-uv-strahlung/sonnenstrahlung.html#:~:text=Les%20UVA%20repr%C3%A9sentent%20le%2095,terre%20C%20100%2D280%20nm.>
- [12] : https://fr.wikipedia.org/wiki/Cellule_photovolta%C3%AFque .
- [13] : Yang, Woon Seok, et al. "High-performance photovoltaic perovskite layers fabricated through intramolecular exchange." *Science* 348.6240 (2015): 1234-1237.
- [14] : Nelson, Jenny A. *The physics of solar cells*. World Scientific Publishing Company, 2003..
- [15] : Mebrak, Y. "Contribution à l'étude et à la modélisation des éléments d'un système photovoltaïque." mémoire Magister, Département de Physique, Université Abou-Bakr Belkaid, TlemcerL (2011)..
- [16] : https://www.researchgate.net/figure/Principe-de-conversion-de-lenergie-solaire-en-energie-electrique-par-cellule-8-Une_fig2_355733160
- [17] : Mohamed, H. A. R. A. O. U. B. I. A. *Intitulé: Etude simulation d'un générateur de panneau photovoltaïque*. Diss. UNIVERSITE BADJI MOKHTAR ANNABA, 2019.
- [18] : Omr, B., and C. Idris. "L'intégration du photovoltaïque au Réseau électrique Problèmes et perspectives." *Mémoire ingénieurs*. Biskra (2006).
- [19] : Au Japon, le succès d'une PME lilloise dans le solaire flottant, Novembre 2015.
- [20] : MULTON, Hélène HORSIN MOLINARO–Bernard. "Energie électrique: génération photovoltaïque." *Culture Sciences de l'ingénieur* (2020).
- [21] : Gendron, Corinne, et al. "Analyse de la position des acteurs sur l'implantation de la transition énergétique sur le territoire français." (2019).

- [22] : Mohammed, Mr HOUARI. Etude des propriétés Structurales, Optoélectroniques et Thermodynamiques des matériaux Pérovskites et Doubles Pérovskites à base d'halogènes. Diss. Master's Thesis, Université de Mascara, Mascara, 2020.
- [23] : Souza, Eduardo Caetano Camilo de, and Reginaldo Muccillo. "Properties and applications of perovskite proton conductors." *Materials Research* 13 (2010): 385-394.
- [24] : de Recherches Examineur, MC EWELS Chargé, and MB LASNIER Professeur émérite Invité. "SPINELLES NATURELS TRAITES THERMIQUEMENT Intérêts Conséquences."
- [25] : KAOUADJI HIDAYET, Mémoire de Master, initiation à la préparation et caractérisation des matériaux PZT, université de Tlemcen (2019).
- [26] : Cueff, Matthieu, et al. "A fully packaged piezoelectric switch with lowvoltage actuation and electrostatic hold." 2010 IEEE 23rd International Conference on Micro Electro Mechanical Systems (MEMS). IEEE, 2010.
- [27] : EL KETROUSSI Mohammed El amine, Mémoire de Master, Étude des propriétés optiques et piézoélectriques du Pérovskite CaTiO₃ Université Abdelhamid Ben Badis –Mostaganem 2018.
- [28] : Guesmia Kaouthar, Saadi Amina. "Elaboration et Caractérisation Des Oxydes de Type Pérovskite XFeO₃ Dopés."
- [29] : Talantikite, Djahida. Synthèse et caractérisations de phases oxyfluorées dérivées de pérovskites ATiO₃: A= Ca, Sr, Ba. Diss. 2008.
- [30] : Richardot, Thomas. Développement d'un matériau piézoélectrique sans plomb pour la réalisation de sondes ultrasonores haute fréquence. Diss. Tours, 2016.
- [31] : Mose N Collins Omiti, Mémoire de Master, Contribution à l'étude physico chimique de BT, BZ et de BZT, Université Sidi Mohammed Ben Abdellah Fes 2015.
- [32] : Sahraoui Khedidja, mémoire de magister, Etude des propriétés diélectriques et structurales des céramiques du type BaTiO₃-CaTiO₃, UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE 2008.
- [33] : Guesmia Kaouthar, Saadi Amina. "Elaboration et Caractérisation Des Oxydes de Type Pérovskite XFeO₃ Dopés."
- [34] : Bouledjoudja, Sarra, and F. Encadreur Meriche. Caractérisation structurale et optique de l'oxyde ZnAl₂O₄ préparé par voie Sol-gel. Diss. université de jijel, 2022. Université de Biskra (2019).
- [35] : Lee, Jin-Wook, et al. "High-efficiency perovskite solar cells based on the black polymorph of HC (NH₂)₂PbI₃." *Advanced materials* 26.29 (2014): 4991-4998.
- [36] Sarritzu, Valerio, et al. « Bande interdite directe ou indirecte dans les pérovskites hybrides aux halogénures de plomb ? » *Advanced Optical Materials* 6.10 (2018) : 1701254.
- [37] : Gamliel, Shany, and Lioz Etgar. "Organo-metal perovskite based solar cells: sensitized versus planar architecture." *RSC advances* 4.55 (2014): 29012-29021.
- [38] : Gomes, I. T., et al. "Structural and magnetic characterization of LaSrMnO₃ thin films deposited by laser ablation on MgO substrates." *Journal of magnetism and magnetic materials* 322.9-12 (2010): 1174-1177.

- [39] MAHBOUB, Mohammed Sadok. Synthèse, caractérisation par diffraction X et spectroscopie Raman des composés $\text{Ca}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_2$. 5- δ ($\delta = 0, 0.5$). Diss. thèse de doctorat, université Mentouri Constantine, 2012.
- [40] : Baran, E. J., and P. J. Aymonino. "SOME REMARKS ON INFLUENCE OF CATIONS ON VIBRATIONS OF INORGANIC OXOANIONS." *ANALES DE LA ASOCIACION QUIMICA ARGENTINA*. Vol. 56. No. 1-2. SANCHEZ DE BUSTAMANTE 1749, 1425 BUENOS AIRES, ARGENTINA: ASOC QUIMICA ARGENTINA, 1968.
- [41] : Zhang, R. Jiang, B. and CAO, W. elastic piezoelectric and dielectric properties of multi domain $0.67\text{PB}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3-0.33\text{PbTiO}_3$ single crystals. *Journal of applied Physic*, 2001. 90(7):p3471-3475.
- [42] :Raccah, PM, et JB Goodenough. « Transition électron localisé \leftrightarrow électron collectif du premier ordre dans LaCoO_3 . » *Physical Review* 155.3 (1967) : 932.
- [43] : Eddine, Belhout Salah. "Etude des composés de type pérovskite synthétisée par la méthode sol gel."
- [44] : Geller, S., et EA Wood. « Études cristallographiques de composés de type pérovskite. I. Orthoferrites de terres rares et YFeO_3 , YCrO_3 , YAlO_3 . » *Acta Crystallographica* 9.7 (1956) : 563-568.
- [45] : <https://www.perovskite-info.com/perovskite-led?amp=&page=1>
- [46] : Asuo, Ivy Mawusi. Pérovskites aux halogénures traitées en température ambiante pour les dispositifs photovoltaïques et optoélectronique. Diss. Institut National de la Recherche Scientifique (Canada), 2021.
- [47] : Laid KADRI. Thèse de doctorat université Oran Mohamed Boudiafe 'Etude, synthèse et optimisation de la couche compacte de TiO_2 pour applications cellules solaires'
- [48] : Minemoto, Takashi et Masashi Murata. « Modélisation de cellules solaires à pérovskite basée sur la similarité structurelle avec les cellules solaires à semi-conducteurs inorganiques à couches minces. » *Journal of applied physics* 116.5 (2014).
- [49] : Seok Sang Il, Grätzel Michael & Park Nam-Gyu 2017 —Methodologies toward Highly Efficient Perovskite Solar Cells| *Nano-Micro Small* 14 (20) 1704177. Chapitre II Matériaux pérovskites Page | 54
- [50] : Roghabadi, Farzaneh Arabpour, et al. « Évolution de la stabilité des cellules solaires à pérovskite en fonction de la structure cristalline : de l'ABX₃ 3D aux absorbeurs à pérovskite Ruddlesden–Popper 2D ». *Journal of Materials Chemistry A* 7.11 (2019) : 5898-5933.
- [51] : Teuscher, Joël, et al. « Séparation de charge et dynamique des porteurs dans les systèmes photovoltaïques à hétérojonction donneur-accepteur. » *Structural Dynamics* 4.6 (2017).
- [52] : Ye, Wang, et al. « Vers des cellules solaires à pérovskite de grande surface : l'influence des couches de transport d'électrons TiO_2 compactes et mésoporeuses. » *Materials Research Express* 5.8 (2018) : 085506.
- [53] : Hamed, Mohammed SG et Genene Tessema Mola. « Cellules solaires à pérovskite à halogénures mixtes : progrès et défis ». *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences* 45.2 (2020) : 85-112.
- [54] : Beal, Rachel E., et al. « Pérovskites aux halogénures de plomb et de césium à stabilité améliorée pour cellules solaires tandem. » *The journal of physical chemistry letters* 7.5 (2016) : 746-751.
- [55] : Burschka J. et al. 2013 —Sequential deposition as a route to high-performance perovskite-sensitized solar cells| *Nature* 499 (7458) 316-319.
- [56] : Vivo, Paola, Jagadish K. Salunke et Arri Priimagi. « Matériaux transporteurs de trous pour cellules solaires à pérovskite imprimables. » *Materials* 10.9 (2017) : 1087.

- [57] : Jeon, Nam Joong, et al. « Ingénierie des solvants pour cellules solaires hybrides pérovskites inorganiques-organiques hautes performances. » *Nature materials* 13.9 (2014) : 897-903.
- [58] : Zhou, Huanping, et al. « Ingénierie des interfaces de cellules solaires à pérovskite hautement efficaces. » *Science* 345.6196 (2014) : 542-546.
- [59] : Hajjiah, Ali, et al. « Amélioration de la gestion de la lumière pour les cellules solaires tandem pérovskite-silicium à quatre bornes : impact des propriétés optiques et de l'épaisseur de la couche d'espacement entre les sous-cellules. » *Matériaux* 11.12 (2018) : 2570.
- [60] : Shin, Seong Sik, et al. « Électrodes BaSnO₃ dopées au La préparées par voie colloïdale pour cellules solaires à pérovskite efficaces et photostables. » *Science* 356.6334 (2017) : 167-171.
- [61] : Crystals, « Strategies for High-Performance Large-Area Perovskite Solar Cells toward Commercialization », Crystals, vol. 11, no. 3, p. 295, mars 2021, doi: 10.3390/cryst11030295.
- [62] : Hoang, Samantha. « L'histoire environnementale des cellules solaires photovoltaïques. » (2017).
- [63] : Bochun, Kang et Feng Yan. « Émergentes stratégies pour la fabrication à grande échelle de modules solaires à pérovskite : de la conception au procédé. » *Énergie et sciences de l'environnement* (2025).
- [64] : A new world record of 33.9% for the efficiency of crystalline silicon-perovskite tandem solar cells - hzgsolar.com
- [65] : LONGi. « LONGi établit un nouveau record mondial de 33,9 % pour le rendement des cellules solaires tandem silicium cristallin-pérovskite. » *LONGi News* (2023).
- [66] : Srivastava, Abhishek et Parasharam M. Shirage. « Cellules solaires à pérovskite ».
- [67] : Chen, Zhaolai, et al. « Cellules solaires monocristallines à base de pérovskite MAPbI₃ avec un rendement de conversion de puissance supérieur à 21 %. » *ACS Energy Letters* 4.6 (2019) : 1258-1259.
- [68] : The First Record over 26% for Unit Perovskite Solar Cells: SolaEon Technology Breaks World Record Again — CAMAPCKAJA.
- [69] : Kamruzzaman, Md, et al. « Dépôt de CsGeI₃- xClx sans plomb dans des conditions atmosphériques et exploration de matériaux de transport de porteurs appropriés pour améliorer son efficacité de conversion de puissance : une approche de simulation numérique. » *Recherche avancée sur l'énergie et la durabilité* (2025) : 2500053.
- [70] : Fodil Ibtissem, Hérous Amel. "Étude et simulation d'une cellule solaire CH₃NH₃SnI₃." [71] : TM Daisuke Hironiwa, Masashi Murata, Naoki Ashida et Zeguo Tang, "Simulation of optimum band-gap grading profile of Cu₂ZnSn (S, Se) 4 cellules solaires avec différentes propriétés optiques et de défaut avec différentes propriétés optiques et de défaut" , Jpn J Appl Phys, vol. 53, non. 53, p. 1-9, 2014.
- [72] : Helali, Kamélia. Modélisation d'une cellule photovoltaïque : étude comparative. Diss. Université Mouloud Mammeri, 2012.
- [73] : SIRADJ, Ilyas. Simulation d'une cellule solaire pérovskite à base d'étain. Diss. UNIVERSITE KASDI MERBAH OUARGLA.
- [74] : Kim, Kihwan, et al. « Simulations de cellules tandem chalcopyrite/c-Si avec SCAPS-1D. » *Solar energy* 145 (2017) : 52-58.
- [75] : Zerarka Selssabil, Seridji Baya. « Étude de l'effet du transport d'électrons sur les cellules solaires à pérovskite par simulation. » (2020).
- [76] : https://www.researchgate.net/figure/Recombination-mechanisms-in-semiconductors-The-direct-radiative-and-Auger-band-to-band_fig13_326589565

[77] : Omrani, Mir Kazem, et al. « Améliorer les performances des cellules solaires CZTSSe en appliquant une couche SnS BSF. » *Électronique à l'état solide* 141 (2018) : 50-57.

[78] : <https://www.mdpi.com/2072-666X/14/8/1562?utm>

[79] : K.Abdelli et L.Abdelli , Mémoire Master 2 <Design of perovskite solar cells= Université Mohamed khider à Biskra 2020.

[80] : Zerarka Selssabil, Seridji Baya. « Étude de l'effet du transport d'électrons sur les cellules solaires à pérovskite par simulation. » (2020).

[81] : <https://rjwave.org/ijedr/papers/IJEDR1603088.pdf?utm>

[82] : <https://www.pveducation.org/pvcdrom/solar-cell-operation/fill-factor?utm>

Résumés courts (Français - Anglais - Arabe)

Français

Résumé (court ~150 mots)

Les cellules solaires à pérovskites représentent une alternative prometteuse aux technologies photovoltaïques conventionnelles grâce à leur fort rendement et leur faible coût potentiel. Ce mémoire présente une étude et une simulation numérique de ces dispositifs à l'aide du logiciel SCAPS-1D, afin d'analyser l'influence des différentes couches constitutives sur leurs performances.

Quatre matériaux pérovskites ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ et CsSnI_3), ainsi que diverses couches HTL et ETL, ont été comparés. Les résultats de simulation indiquent que la structure optimale $\text{ITO} / \text{TiO}_2 / \text{CsSnI}_3 / \text{CuO} / \text{Ag}$ atteint un rendement proche de 28 % à 300 K. L'étude a également mis en évidence l'impact de la température, avec une diminution de l'efficacité de 28,02 % à 300 K à 24,61 % à 380 K.

Ces résultats soulignent le potentiel remarquable des cellules solaires à pérovskite, tout en rappelant les défis liés à leur stabilité et à leur durabilité.

Mots-clés : Pérovskite, SCAPS-1D, Simulation, Cellules solaires.

English

Abstract (short ~150 words)

Perovskite solar cells are considered a highly promising alternative to conventional photovoltaic technologies thanks to their high efficiency and low-cost potential. This thesis presents a numerical study and simulation of perovskite solar cells using SCAPS-1D software, aiming to assess the impact of different active, hole transport, and electron transport layers on device performance.

Four perovskite absorbers ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{SnI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, and CsSnI_3), along with several HTLs and ETLs, were compared. The optimal configuration $\text{ITO} / \text{TiO}_2 / \text{CsSnI}_3 / \text{CuO} / \text{Ag}$ achieved nearly 28% efficiency at 300 K. The effect of temperature was also demonstrated, with efficiency dropping from 28.02% at 300 K to 24.61% at 380 K.

The results highlight the significant potential of perovskite solar cells while pointing out challenges of stability and durability.

Keywords: Perovskite, SCAPS-1D, Simulation, Photovoltaics.

العربية

الملخص (قصير ~150 كلمة)

تُعد الخلايا الشمسية البيروفسكايتية من أكثر البدائل الواعدة للتقنيات الكهروضوئية التقليدية، نظرًا لكفاءتها العالية وإمكانية إنتاجها لتحليل تأثير المواد الفعالة وطبقات النقل، SCAPS-1D بتكلفة منخفضة. يقدم هذا العمل دراسة ومحاكاة رقمية باستخدام برنامج على أداء الخلايا.

وقد بينت النتائج أن البنية المثلى ETL و HTL تمت مقارنة أربعة مواد بيروفسكايتية، إضافة إلى عدة طبقات ITO / TiO₂ / CsSnI₃ / CuO / Ag 300 K. تحقق مردودية تقارب 28% عند 300 K. كما أظهرت الدراسة انخفاض الكفاءة مع ارتفاع درجة K. إلى 24.61% عند 380 K الحرارة، من 28.02% عند 300 K.

تُبرز هذه النتائج الإمكانيات الكبيرة لهذه الخلايا، مع استمرار التحديات المرتبطة بالاستقرار والمتانة.

محاكاة، الخلايا الشمسية، SCAPS-1D، الكلمات المفتاحية: بيروفسكايت