

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

جامعة عبد الحميد بن باديس مستغانم



Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem

كلية العلوم والتكنولوجيا مستغانم



Faculté Des Sciences et de la Technologie Mostaganem

Mémoire De Fin D'Étude De Master Académique

N° d'ordre : M...../GE/2024

Mémoire

Présenté pour l'obtention du diplôme de Master Académique

Filière : Energies Renouvelables

Spécialité : Energies renouvelables en électrotechnique

Présenté par :

AYOUBA TANKO Sanissi

LANSARI Abdellah

**Performance des panneaux solaires photovoltaïques à base
de cellules solaires tandem pérovskite/pérovskite**

President: M.BENTOUNES HADJ Adda

Professeur

Université de Mostaganem

Examineur: M.MESKINE Said

Professeur

Université de Mostaganem

Encadrant: M.HADRI Baghdad

Professeur

Université de Mostaganem

Année Universitaire : 2023/2024

Remerciements

Tout d'abord, nous remercions Dieu le tout puissant le miséricordieux, le très miséricordieux, qui nous a donné la force, le courage, la santé et la patience d'accomplir ce noble travail.

Ainsi, nous présentons nos sincères remerciements à notre cher encadrant Pr.HADRI Baghdad pour sa patience, son soutien et sa détermination qui nous ont été précieux afin de bien mener ce modeste travail dans les meilleures conditions.

Egalement, nous présentons nos vifs remerciements à l'ensemble des personnels de travail de l'université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem, qui ont été à notre service durant notre cursus scolaire universitaire. De même, nous sommes très reconnaissances à tous ceux qui ont contribué à l'élaboration de ce travail.

Enfin, nous ne saurons terminer ces remerciements sans y remercier le président et les membres du jury de nous avoir fait l'honneur d'évaluer notre travail.

Dédicace

*Je dédie ce travail humble à ma précieuse maman et mon cher père,
qui m'ont prodigué tant d'enseignements tout au long de mon
existence.*

*À mon frère adoré Sofiane, et ma sœur bien-aimée Fatima, dont le
soutien inébranlable, tant physique que moral, ne faiblit jamais
malgré la distance qui nous sépare.*

*À mes amis et amies, qui se reconnaîtront sans qu'il soit besoin de les
nommer individuellement.*

À mes cousins, mes cousines, et leurs familles respectives.

*À mon binôme, Lansari Abdellah, à qui je souhaite une réussite
éclatante et un avenir couronné de succès.*

AYOUBA TANKO SANISSI

Dédicace

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude et reconnaissance envers tous ceux qui ont contribué à la réalisation de mon mémoire de fin d'études. Tout d'abord, je remercie Dieu et je reconnais Sa grâce. J'adresse également mes sincères remerciements au Professeur Baghdad Hadri pour ses précieux conseils et son soutien continu tout au long de la période de recherche et d'écriture. Votre soutien et vos conseils ont été essentiels pour mener à bien ce travail de recherche.

Je me considère chanceux d'avoir eu ma mère, mon père et ma famille aimante à mes côtés tout au long de ce voyage. Merci pour le soutien illimité et l'encouragement constant que vous m'avez apportés, contribuant ainsi au succès de ce projet important.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude à mes amis ALI AG Hamakla et MOKHAMMED AG Chedma pour leur soutien inestimable tout au long de mes études universitaires. Leur présence et leur encouragement constants ont été d'une aide précieuse. Je souhaite également remercier mon binôme AYOUBA TANKO sanissi pour notre collaboration fructueuse dans l'élaboration de notre mémoire de fin d'études. Ces personnes ont été des piliers essentiels de mon parcours académique et je leur suis infiniment reconnaissant.

Un merci spécial à mes camarades de classe du département ; les moments de sérieux et de joie passés avec vous ont été une partie intégrante de cette merveilleuse expérience.

En conclusion, je souhaite exprimer ma gratitude envers tous ceux qui ont contribué et qui ont été à mes côtés lors de ce précieux parcours éducatif. Grâce à vous tous, j'ai accompli cette réussite dont je suis fier.

LANSARI Abdellah

Sommaire

<i>Remerciements</i>	<i>i</i>
<i>Dédicace</i>	<i>ii</i>
<i>Liste des figures</i>	<i>iv</i>
<i>Liste des tableaux</i>	<i>v</i>
<i>Liste des Abréviations et Sigles</i>	<i>vi</i>
<i>Introduction générale</i>	<i>1</i>
<i>Chapitre I: Cellules solaires photovoltaïques</i>	<i>5</i>
<i>Introduction</i>	<i>6</i>
I.1 Jonctions PN.....	<i>6</i>
I.2 Cellules solaires parfaites.....	<i>8</i>
I.2.1 Génération et recombinaison de porteurs de charge.....	<i>8</i>
I.2.2 La jonction PN éclairée : principe de la cellule solaire idéale.....	<i>9</i>
I.2.3 Figures de mérite des cellules solaires.....	<i>11</i>
I.3 Facteurs limitant les performances des cellules solaires	<i>11</i>
I.3.2 Recombinaison Shockley-Read-Hall et défauts cristallins	<i>13</i>
I.3.3 Pertes électriques.....	<i>15</i>
I.3.3.1 Pertes résistives externes dans les cellules solaires	<i>15</i>
<i>Conclusion</i>	<i>15</i>
<i>Chapitre II : Cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite</i>	<i>18</i>
Introduction	<i>19</i>
II.1 Architectures des dispositifs des cellules solaires à pérovskite.....	<i>19</i>
II.1.1 Structure d'une cellule solaire à base de pérovskite.....	<i>19</i>
II.1.1.2 Configuration normale (n-i-p).....	<i>20</i>
II.1.1.2 Configuration inversée (p-i-n)	<i>20</i>
II.1.2 Architecture et fonctionnement d'une cellule solaire à pérovskite	<i>21</i>
II.1.3 Caractérisation des cellules solaires à pérovskite	<i>21</i>
II.1.4. <i>Processus de recombinaison à l'interface</i>	<i>23</i>
II.1.4.1 Recombinaison radiative.....	<i>23</i>
II.1.4.3 Recombinaison Auger.....	<i>24</i>

II.1.4.4. Recombinaison aux joints de grains, en surface et aux interfaces dans les cellules solaires à pérovskite :	24
II.1.5 Cellules solaires tandem pérovskite-pérovskite à deux terminaux	25
II.1.5.1 Principe de fonctionnement de la cellule solaire tandem.....	27
<i>Conclusion</i>	27
<i>Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVAO-ATLAS</i>	30
<i>Introduction</i>	31
<i>Partie 1. Principe de simulation numérique d'une cellule solaire photovoltaïque sous SILVACO-ATLAST</i>	31
<i>III.1. Modèles</i>	32
<i>III.2. Méthode</i>	33
<i>Partie 2 : Résultat du calibrage et d'optimisation de la PSC1 simulée</i>	33
<i>III.3. Résultat du calibrage</i>	33
III.3.1. Courbes de densité-tension (J_{sc} -V)	34
<i>III.4. Résultat de l'optimisation</i>	36
III.4.1. Effet du dopage sur la région TiO ₂ (ETL)	36
III.4.1.1. Analyse et interprétation	38
III.4.2. Effet de la concentration du dopage de la région Pérovskite1 sur les performances de la cellule solaire PSC1	39
III.4.2.1. Analyse et interprétation	40
III.4.3. Effet de la concentration de dopage de la région Spiro (HTL) de la PSC1.....	41
III.4.3.1. Analyse et interprétation	42
III.4.4. Effet de l'épaisseur sur la région TiO ₂ (ETL) de la PSC1	43
III.4.4.1. Analyse et interprétation	44
III.4.5. Effet de l'épaisseur de la région Pérovskite1 de la PSC1.....	45
III.4.5.1. Analyse et interprétation	46
III.4.6. Effet de l'épaisseur de la région Spiro (HTL) de la PSC1	47
III.4.6.1. Analyse et interprétation	48
<i>III.5. Récapitulation des résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1)</i>	49
<i>Conclusion</i>	50
<i>Partie 3 : Résultat du calibrage et de l'optimisation de la PSC2 simulée</i>	51
<i>Introduction</i>	51
<i>III.6. Résultats du calibrage et de l'optimisation de la PSC2</i>	52

III.6.1. Résultat du calibrage	52
III.6.1.1. Courbes de densité-tension (J_{sc} -V).....	53
III.6.1.2. Comparaison aux données expérimentales	54
III.6.2. Résultat de l'optimisation.....	55
III.6.2.1. L'impact de la concentration du dopage de la région TiO ₂ (ETL ₂) sur les performances de la cellule solaire	55
III.6.2.1.1. Analyse et interprétation	57
III.6.2.2. L'effet de la concentration du dopage de la région Pérovskite ₂	58
III.6.2.2.1. Analyse et interprétation	60
III.6.2.3. L'impact du dopage de la région Spiro (HTL ₂) sur les performances de la cellule solairePSC ₂	62
III.6.2.3.1. Analyse et interprétation	64
III.6.2.4. L'effet de l'épaisseur de la région TiO ₂ (ETL ₂)	65
III.6.2.4.1. Analyse et interprétation	67
III.6.2.5. L'effet de l'épaisseur de la région Pérovskite ₂	67
III.6.2.5.1. Analyse et interprétation	69
III.6.2.6. Effet de l'épaisseur de la région Spiro (HTL ₂)	70
III.6.2.6.1. Analyse et interprétation	71
<i>III.7. Récapitulation des résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite₂ (PSC₂).....</i>	<i>72</i>
<i>Conclusion.....</i>	<i>73</i>
<i>III.8. Résultat du calibrage et de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite.....</i>	<i>73</i>
III.8.1. Résultats du Calibrage de la PSC Tandem	75
III.8.2. Résultats de l'optimisation de la PSC Tandem	75
<i>Conclusion.....</i>	<i>76</i>
<i>Chapitre IV : Résultat de simulation numérique sous MATLAB SIMULINK.....</i>	<i>88</i>
<i>Introduction.....</i>	<i>89</i>
<i>IV.1Présentation des paramètres du panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite simulé.....</i>	<i>89</i>
<i>IV.2.Résultats de simulation numérique des performances d'un panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite sous MATLAB SIMULINK.....</i>	<i>90</i>
IV.2.1. Résultats de simulation dans les conditions standard.....	91

IV.2.1.1. Analyse et interprétation	93
IV.2.2. Résultats de simulation de l'effet d'éclairement sous le panneau solaire tandem Pérovskite/Pérovskite	94
IV.2.2.1. Analyse et interprétation	95
IV.2.3. Résultats de simulation de l'effet de température sur le panneau solaire tandem Pérovskite/Pérovskite	95
IV.2.3.1. Analyse et interprétation	97
<i>Conclusion</i>	97
<i>Conclusion générale</i>	98
<i>References bibliographiques</i>	101
<i>Résumé</i>	105

Liste des figures

Figure I. 1: Représentation schématique d'une jonction PN [1] 6

Figure I. 2: Représentation schématique des énergies mises en jeu lors d'une absorption d'énergie lumineuse $h\nu$ [3] 9

Figure I. 3: Représentation schématique d'une jonction PN illuminée avec génération d'une paire e^-/h^+ avec les 4 étapes de la conversion photovoltaïque [1] 10

Figure I. 4: Modèle à une seule diode de la cellule solaire [4]..... 10

Figure I. 5: Caractéristiques I-V et P-V d'une cellule solaire idéale [8] 11

Figure I. 6: Modèle à 1 diode adaptée pour les cellules solaires, prenant en compte l'effet de la résistance série et de la résistance shunt [8] 12

Figure I. 7: Représentation schématique des mécanismes de recombinaison bande à bande et Shockley-Read-Hall (SRH) [5]..... 13

Figure II. 1: Schéma des différentes architectures de dispositifs : a) configuration planaire normale (n-i-p) b) configuration planaire inversée (p-i-n)[10]. 20

Figure II. 2: Schéma des niveaux d'énergie d'une cellule solaire à pérovskite et les rôles des différentes couches. Notamment la couche de transport de trous (HTL), la couche de transport d'électrons (ETL) et la couche active en pérovskite [16] 21

Figure II. 3: Caractéristiques J-V des cellules solaires dans des conditions d'éclairement et d'obscurité[16]..... 22

Figure II. 4: Schéma de la recombinaison radiative [13] 23

Figure II. 5: Schéma de la recombinaison Auger a) impliquant deux électrons b) deux trous[13] 24

Figure II. 6: Schéma de la recombinaison en surface[13] 24

Figure II. 7: (a) Schéma du processus d'absorption dans un dispositif tandem. (b) Schéma d'une structure tandem 2T. (c) Schéma d'une structure tandem 4T [16]. 26

Figure II. 8: Structure de la cellule solaire en pérovskite [16] 27

Figure III. 1: Structure obtenue de la cellule solaire à base de la Pérovskite1 simulée sous SILVACO-ATLAS. 34

Figure III. 2: Courbes de densité-tension ($J_{sc}-V$) du calibrage et d'expérimentation [21] de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée..... 35

Figure III. 3: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région TiO_2 (ETL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 38

Figure III. 4: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Pérovskite1(Absorbeur) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la PSC1 40

Figure III. 5: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Spiro (HTL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1) 42

Figure III. 6: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région TiO_2 (ETL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1(PSC1)..... 44

Figure III. 7: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région pérovskite1 (Absorbeur) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite.... 46

Figure III. 8: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région Spiro (HTL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1)..... 48

Figure III. 9: Courbes de densité-tension ($J_{sc}-V$) du calibrage, d'optimisation et d'expérimentation [21] de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée 50

Figure III. 10: Structure de la cellule solaire à base de la Pérovskite2(PSC2) simulée sous SILVACO-ATLAS 53

Figure III. 11: Courbes de densité-tension ($J_{sc}-V$) du calibrage et d'expérimentation [38] de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée sous SILVACO ATLAS 54

Figure III. 12: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région TiO_2 (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 57

Figure III. 13: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Pérovskite2 de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2)..... 60

Figure III. 14: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région (HTL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2). ... 63

<i>Figure III. 15: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région TiO_2 (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2).</i> 66
<i>Figure III. 16: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région pérovskite2 de la cellule solaire photovoltaïque (PSC2).</i> 69
<i>Figure III. 17: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région Spiro (HTL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2).</i> 71
<i>Figure III. 18: Courbes de densité-tension (J_{sc}-V) du calibrage, d'optimisation et d'expérimentation [38] de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée</i> 72
<i>Figure III. 19: Structure de la cellule solaire tandem simulée sous SILVACO-ATLAS</i> 74
<i>Figure III. 20: Caractéristiques de courant-tension (I-V) de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite calibrée et optimisée par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS.</i> 74
<i>Figure IV. 1: Schéma block de simulation d'un panneau photovoltaïque sous MATALAB SIMULINK</i> 91
<i>Figure IV. 2: Caractéristique courant- tension (I-V) dans les conditions standard du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i> 92
<i>Figure IV. 3: Caractéristique puissance-tension- (P-V) dans les conditions standard du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i> 93
<i>Figure IV. 4 : Caractéristiques de courant-tension (I-V) à température constante et l'irradiations variables du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i>	94
<i>Figure IV. 5: Caractéristiques puissance tension- (P-V) à température constante et l'irradiation variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i> 95
<i>Figure IV. 6: Caractéristiques de courant-tension (I-V) à l'irradiation constante et température variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i> 96
<i>Figure IV. 7: Caractéristiques de puissance-tension (P-V) à l'irradiation constante et température variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite</i> 96

Liste des tableaux

Tableau III. 1: Propriétés des matériaux utilisés pour le calibrage par simulation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1(PSC1) [21]..... 34

Tableau III. 2: Caractéristique PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée 35

Tableau III. 3: Résultat de l’effet du dopage sur la région TiO2 (ETL) de la PSC1 37

Tableau III. 4: Résultat de l’effet du dopage de la région Pérovskite1 de la PSC1 39

Tableau III. 5: Résultats de l’effet de la concentration du dopage de la région Spiro (HTL) de la PSC1 41

Tableau III. 6: Résultat de l’effet de l’épaisseur sur la région TiO2(ETL) de la PSC1 43

Tableau III. 7: Résultat de l’effet de l’épaisseur de la région Pérovskite1 de la PSC1 45

Tableau III. 8: Résultat de l’effet de l’épaisseur sur la région Spiro (HTL) de la PSC1 47

Tableau III. 9: Récapitulation des caractéristiques PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 optimisée 50

Tableau III. 10: Propriétés des matériaux utilisés pour le calibrage par simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2) [39] 52

Tableau III. 11: Caractéristique PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée 54

Tableau III. 12: Résultats de simulation obtenus de la cellule solaire PSC2 par variation de la concentration du dopage de la région TiO2(ETL2) 56

Tableau III. 13: Résultat de l’effet du dopage sur la région Pérovskite2 de la PSC2 59

Tableau III. 14: Résultat de l’effet du dopage sur la région Spiro (HTL2) de la PSC2 63

Tableau III. 15: Résultat de l’effet de l’épaisseur de la région TiO2(ETL2) de la PSC2 66

Tableau III. 16: Résultat obtenus par variation de l’épaisseur de la région Pérovskite2 de la PSC2 68

Tableau III. 17: Résultat obtenus lors de la variation de l’épaisseur de la région Spiro (HTL2) de la PSC2 70

Tableau III. 18: Récapitulation des caractéristiques PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 optimisée par simulation numérique 72

Tableau III. 19: Résultat du calibrage de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite obtenu par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS 75

Tableau III. 20: Résultat de l’optimisation de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite obtenu par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS 76

Liste des Abréviations et Sigles

Abréviation	Nom complet	Unité
PSC	Cellule solaire à pérovskite	
CIGS	Cu(InGa)Se ₂	
FF	Facteur de forme	
Voc	Tension en circuit ouvert	V (Volt)
Isc	Courant de court-circuit	A (Ampère)
Jsc	Densité du courant de court-circuit	mA/cm ² (Milliampère par cm ²)
EFF ou η	Rendement	% (Pourcentage)
PCE	Rendement de conversion de puissance	% (Pourcentage)
ETL	Couche de transport d'électrons	
HTL	Couche de transport de trous	
TCO	Oxyde conducteur transparent	
Tio2	Dioxyde de titane	
FTO	Oxyde d'étain dopé au fluor	
CH ₃ NH ₃ PbI ₃	Pérovskite au plomb et à l'iode (MAPI)	
CH ₃ NH ₃ Pb _{3-x} Cl _x	Pérovskite au plomb, à l'iode et au chlorure	
Spiro	Spiro-OMeTAD	
ITO	Oxyde d'indium-étain	
J-V	densité de courant-tension	
EQE	Rendement quantique externe	% (Pourcentage)
SILVACO ATLAS	Logiciel de simulation pour dispositifs électroniques	
MATLAB SIMULINK	Logiciel de simulation pour systèmes dynamiques	
d	Épaisseur	nm (Nanomètre)
Dopage	Concentration de dopage	/cm ³ (par centimètre cube)
Eg	Énergie de bande interdite	eV (électronvolts)
χ	Affinité électronique	
ϵ_r	Permittivité relative	
Nc	Densité des états effectifs dans la bande de conduction	cm ⁻³ (par centimètre cube)
Nv	Densité des états effectifs dans la bande de valence	cm ⁻³ (par centimètre cube)
Nd	Concentration de dopants donneurs	cm ⁻³ (par centimètre cube)
μ_n	Mobilité des électrons	cm ² /V.s (centimètres carrés par volt-seconde)
μ_p	Mobilité des trous	cm ² /V.s (centimètres carrés par volt-seconde)
δ_e	Section efficace de capture des électrons	cm ² (centimètres carrés)
δ_h	Section efficace de capture des trous	cm ² (centimètres carrés)

Introduction générale

Introduction générale

Les technologies photovoltaïques (PV) ont connu des progrès remarquables en matière d'efficacité au fil des années, permettant une production d'énergie solaire plus importante et abordable. Alors que les cellules solaires de première génération, basées sur la technologie du silicium, dominent actuellement le marché, de nouvelles alternatives prometteuses émergent. Parmi ces nouvelles technologies, on retrouve les cellules solaires à base de pérovskite, un matériau semi-conducteur organique-inorganique présentant des propriétés optiques et électriques intéressantes pour le photovoltaïque. Ces cellules ont fait l'objet de recherches intensives ces dernières années en raison de leur potentiel élevé en termes de rendement et de coûts de fabrication réduits. Une approche particulièrement prometteuse est l'utilisation d'une architecture tandem, où une cellule à base de pérovskite est combinée avec une cellule au silicium traditionnelle. Cette configuration permet de capturer une plus grande partie du spectre solaire, augmentant ainsi l'efficacité globale du système. Des recherches récentes ont démontré que ces cellules tandem pérovskite/silicium pourraient surpasser les performances des cellules au silicium à simple jonction standard, ouvrant la voie à des rendements record et à une réduction des coûts de production d'énergie solaire [35].

Bien que des défis technologiques restent à relever, notamment en termes de stabilité et de durabilité des matériaux à base de pérovskite, ces nouvelles technologies photovoltaïques suscitent un vif intérêt dans l'industrie solaire et pourraient jouer un rôle clé dans la transition vers des sources d'énergie renouvelables plus abordables et efficaces. L'utilisation d'une structure tandem combinant deux matériaux pérovskites de gaps énergétiques différents est une approche particulièrement intéressante pour maximiser l'efficacité des cellules solaires à base de pérovskite. Dans cette configuration, deux sous-cellules à base de pérovskites distinctes sont empilées l'une sur l'autre. La première sous-cellule, avec un gap énergétique plus élevé, absorbe les photons de haute énergie (lumière bleue et violette) tandis que la seconde sous-cellule, avec un gap plus faible, capture les photons de plus basse énergie (lumière rouge et infrarouge). Cette complémentarité dans l'absorption du spectre solaire permet de récupérer une plus grande partie de l'énergie incidente, augmentant ainsi le rendement global de la cellule tandem par rapport à des cellules simples à base de pérovskite. Des rendements supérieurs à 25% [21] ont été démontrés avec ce type d'architecture tandem pérovskite/pérovskite. Le choix des deux matériaux pérovskites et l'optimisation de leur gap énergétique respectif sont cruciaux pour une absorption optimale du spectre solaire. Des

combinaisons prometteuses incluent par exemple les pérovskites à base de formamidinium/césium ou d'étain/plomb.

Bien que, aussi des défis technologiques persistent, notamment la stabilité à long terme et les pertes optiques aux interfaces, cette approche tandem pérovskite/pérovskite fait l'objet de recherches intensives en vue de repousser les limites d'efficacité du photovoltaïque à base de pérovskite. Les cellules tandem à base de pérovskite/pérovskite à 2 terminaux sont une configuration particulière qui présente certains avantages par rapport aux architectures tandem conventionnelles. Dans une structure tandem classique à 4 terminaux, chaque sous-cellule (pérovskite de gap élevé et pérovskite de gap faible) possède ses propres contacts électriques indépendants. Cela permet de connecter les deux sous-cellules en série ou en parallèle selon les besoins. Cependant, la structure à 2 terminaux consiste à empiler monolithiquement les deux sous-cellules avec un seul jeu de contacts électriques communs pour l'ensemble de la cellule tandem.

C'est dans cette optique que ce mémoire se concentre sur les panneaux solaires photovoltaïques à base de cellules solaires tandem pérovskite/pérovskite à 2 terminaux, avec pour objectif d'améliorer les performances d'un tel dispositif. Pour mener à bien ce travail, nous allons le structurer en quatre chapitres.

Le premier chapitre introduit les cellules solaires photovoltaïques, abordant les concepts fondamentaux des jonctions PN, le cas idéal des cellules solaires et leurs paramètres de performance. Il examine également les mécanismes de pertes et facteurs limitant, tels que les recombinaisons et les résistances, ouvrant la voie à l'étude des cellules à base de pérovskites dans les chapitres suivants.

Le deuxième chapitre sera consacré sur les cellules solaires à base de matériaux pérovskites. Il décrit l'architecture générale et le fonctionnement de ces dispositifs, en expliquant la séparation et le transport des charges photogénérés. Les méthodes de caractérisation des performances, comme les courbes courant-tension et puissance-tension, seront présentées pour extraire les paramètres clés tels que la tension en circuit ouvert, le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion. Le rendement quantique externe et les mécanismes de recombinaison des porteurs de charge sont également abordés.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons les résultats de simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite à 2 terminaux issus du logiciel SILVACO ATLAS. Pour une meilleure compréhension, nous allons répartir ces résultats en trois parties distinctes : Dans un premier temps, nous présenterons les résultats du calibrage et

Introduction générale

de l'optimisation par simulation numérique de la sous-cellule individuelle (pérovskite supérieure) ainsi que, nous analyserons et discuterons de ces résultats obtenus. Dans un deuxième temps, nous présenterons également les résultats du calibrage et de l'optimisation par simulation numérique de la sous-cellule individuelle (pérovskite inférieure) ainsi que, nous analyserons et discuterons aussi de ces résultats. Et dans la troisième partie, nous présenterons les résultats de la structure tandem calibrée et optimisée ainsi que, nous discuterons de ces résultats.

Le quatrième chapitre, sera consacré à l'analyse des performances d'un panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite. Dans ce chapitre, nous présenterons les résultats de simulation numériques issus du logiciel MATLAB SIMULINK de ce dispositif ainsi que, nous analyserons et discuterons de ces résultats. En fin de ce mémoire, nous terminerons avec une conclusion générale suivi de quelques perspectives

Chapitre I: Cellules solaires photovoltaïques

Introduction

Ce chapitre présente une introduction générale aux cellules solaires photovoltaïques. Dans un premier temps, les concepts théoriques fondamentaux régissant le fonctionnement des jonctions PN standard sont brièvement exposés. Ensuite, le cas idéal des cellules solaires est présenté, en décrivant leurs caractéristiques et paramètres de performance clés. Enfin, une attention particulière est portée sur les principaux mécanismes de pertes et facteurs limitant qui affectent les cellules solaires réelles, les éloignant des conditions idéales. Cette partie traite des diverses sources de recombinaisons, résistances séries/parallèles et autres phénomènes diminuant le rendement de conversion de ces dispositifs photovoltaïques. L'objectif de ce chapitre est de poser les bases théoriques essentielles avant d'approfondir l'étude des cellules solaires à base de matériaux pérovskites dans les chapitres suivants.

I.1 Jonctions PN

La formation d'une jonction PN repose sur l'assemblage d'un semi-conducteur de type n, dans lequel des atomes donneurs ont été incorporés pour créer un excès d'électrons, avec un semi-conducteur de type p dopé par des atomes accepteurs générant des trous majoritaires[1]. Cette mise en contact intime de matériaux de dopages opposés donne naissance à la structure fondamentale qui est la jonction PN. Une représentation schématique illustrant la configuration résultante est fournie dans la figure ci-jointe. Celle-ci permet de visualiser clairement l'interface entre les régions n et p, à l'interface desquelles s'établit un champ électrique interne caractéristique des jonctions PN.

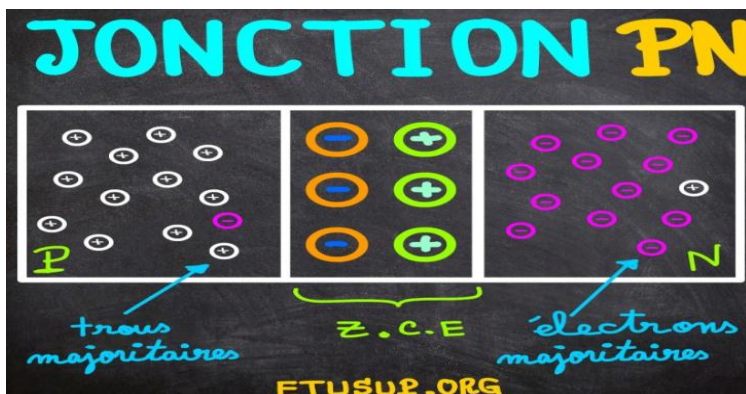


Figure I. 1: Représentation schématique d'une jonction PN [1]

Les concentrations de dopants dans les semi-conducteurs de type n et p sont respectivement N_D [cm^{-3}] et N_A [cm^{-3}]. Étant donné que la région de type n présente un déficit en trous mais un excès d'électrons libres, tandis que la région de type p est déficiente en électrons mais riche

en trous, un phénomène de diffusion des porteurs majoritaires a lieu à l'interface de la jonction. Ce processus laisse derrière lui uniquement les atomes dopants ionisés dans cette zone interfaciale. Dans une première approximation, on peut donc considérer cette région comme étant dépourvue de charges mobiles. C'est pourquoi on la désigne sous le terme de région de déplétion ou zone de charge d'espace (Z.C.E)[6].

Les paramètres électriques d'une jonction PN abrupte idéale peuvent être calculés pour les côtés n et p à l'aide de l'équation de Poisson 1D[2] :

$$\frac{d^2\phi(x)}{dx^2} = -\frac{q}{\epsilon_s} (p - n + N_D - N_A) \quad (I.1)$$

où $\Phi(x)$ est le potentiel à la jonction, p et n sont les concentrations en trous et électrons dérivées des relations de Boltzmann. Cette équation est basée sur " l'approximation de déplétion " où tous les atomes dopants sont ionisés dans la région de déplétion [2]. À partir de cette équation, le potentiel de jonction à l'équilibre est calculé :

$$\phi_0 = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right) \quad (I.2)$$

Lorsqu'une tension de polarisation V_a est appliquée à la jonction, le potentiel de jonction (également appelé potentiel interne) change et est simplement égal à :

$$\phi = \phi_0 - V_a \quad (I.3)$$

Une tension de polarisation positive est appliquée du côté p de la jonction. Cette équation est basée sur l'hypothèse que la chute de potentiel à travers les régions quasi-neutres, qui ne sont pas en déplétion, est négligeable

il est possible de dériver la largeur de la région de déplétion [2]:

$$w_D = \sqrt{\frac{2\epsilon_s (\phi_0 - V_a)}{q N_A}} \quad (I.4)$$

Cette équation est une approximation tenant compte du fait que $N_D \ll N_A$, ce qui est le cas dans les cellules solaires CIGS. Le résultat de cette équation est que la largeur de déplétion diminue pour une polarisation positive. De plus, la capacité de la couche de déplétion peut être dérivée[2] :

$$C_D = \frac{dQ_D}{dV} = \frac{\epsilon_s}{w_D} \quad (I.5)$$

l'équation pour la densité de courant dans une jonction PN[2] :

$$J = J_s \left(\exp\left(\frac{qV_a}{kT}\right) - 1 \right) \quad (I.6)$$

où J_s est la densité de courant de saturation inverse.

I.2 Cellules solaires parfaites

Une cellule solaire idéale peut être considérée comme une jonction PN exposée à la lumière [6]. Son principe de fonctionnement repose sur l'interaction fondamentale entre les photons incidents et les matériaux semi-conducteurs. Lorsqu'un photon d'énergie suffisante frappe le semi-conducteur, il peut être absorbé et générer une paire électron-trou. Ces porteurs de charge photogénérés sont alors séparés par le champ électrique interne de la jonction PN, créant ainsi un courant électrique. Dans une cellule solaire parfaite, chaque photon incident au-dessus du seuil d'absorption contribuerait de manière optimale à la génération de charges, tandis que les mécanismes de recombinaison des porteurs seraient négligeables. Bien que théoriquement idéalisées, ces cellules solaires parfaites représentent l'objectif ultime vers lequel tendent les recherches en optimisant les matériaux, les structures et les procédés de fabrication pour maximiser l'absorption des photons, minimiser les pertes et augmenter l'efficacité de conversion énergétique[3-7].

I.2.1 Génération et recombinaison de porteurs de charge

Dans un semi-conducteur intrinsèque à l'équilibre thermique, la bande de valence est entièrement remplie d'électrons tandis que la bande de conduction est vide [3]. Cependant, lorsqu'un électron de la bande de valence acquiert suffisamment d'énergie, il peut être excité et transféré vers la bande de conduction, laissant derrière lui un état vacant appelé trou. Cette paire électron-trou nouvellement créée constitue les porteurs de charge fondamentaux dans les semi-conducteurs. Contrairement aux électrons piégés dans la bande de valence, ces porteurs photogénérés sont mobiles et peuvent se déplacer librement dans le matériau, les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence. Ce processus de génération de paires électron-trou est essentiel au fonctionnement des dispositifs photovoltaïques, Inversement, les paires électron-trou peuvent aussi se recombiner, un processus indésirable dans lequel un électron de la bande de conduction "retombe" dans un trou de la bande de valence, annihilant ainsi les porteurs de charge. L'équilibre dynamique entre génération et recombinaison détermine les propriétés optoélectroniques clés des matériaux semi-conducteurs pour les applications photovoltaïques [3].

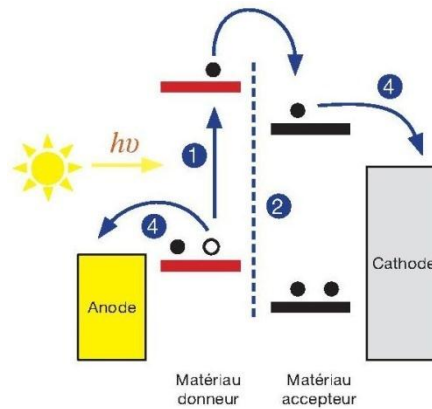


Figure I. 2: Représentation schématique des énergies mises en jeu lors d'une absorption d'énergie lumineuse $h\nu$ [3]

Les principales étapes sont : (1) la création d'un exciton (l'électron est représenté par un disque noir, le trou par un disque blanc), (2) la diffusion de l'exciton à l'interface donneur/accepteur, (3) la dissociation de l'exciton et (4) le transport des porteurs de charges aux électrodes.

Après un certain temps, s'il n'y a pas de mécanisme physique l'en empêchant, l'électron retourne à son état de basse énergie, libérant la même énergie qui avait été absorbée auparavant. Ce mécanisme est appelé recombinaison et est représenté sur la figure I.2.

I.2.2 La jonction PN éclairée : principe de la cellule solaire idéale

Une situation particulièrement intéressante se produit lorsqu'une jonction PN dans un semi-conducteur est exposée à la lumière du soleil [5]. Dans ce cas, l'énergie des photons incidents est transférée aux électrons de la bande de valence, permettant leur transition vers la bande de conduction et créant ainsi des paires électron-trou. Cependant, contrairement à un matériau massif, la jonction PN possède une région de déplétion avec un champ électrique interne inhérent. Ce champ électrique joue un rôle crucial en séparant les porteurs de charge photogénérés : les électrons sont entraînés vers la région dopée n tandis que les trous sont déplacés vers la région dopée p[8-9]. Cette séparation spatiale des charges positives et négatives empêche leur recombinaison et permet la création d'un courant électrique continu à travers la jonction. Tant que la lumière continue d'être absorbée, générant constamment de nouvelles paires électron-trou, celles-ci sont efficacement dissociées par le champ électrique interne. Les électrons extraits de la région n et les trous de la région p peuvent alors être acheminés vers un circuit externe, permettant la conversion directe de l'énergie lumineuse en

énergie électrique. Cette capacité unique des jonctions PN à séparer les porteurs photogénérés est le principe fondamental du fonctionnement des cellules solaires idéales.

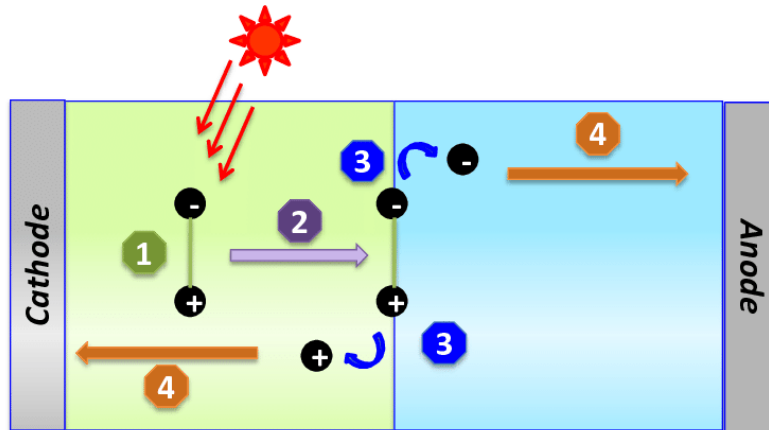


Figure I. 3: Représentation schématique d'une jonction PN illuminée avec génération d'une paire e-/h+ avec les 4 étapes de la conversion photovoltaïque [1]

Une jonction PN sous illumination peut être représentée à l'aide du modèle à 1 diode de la figure I.4.

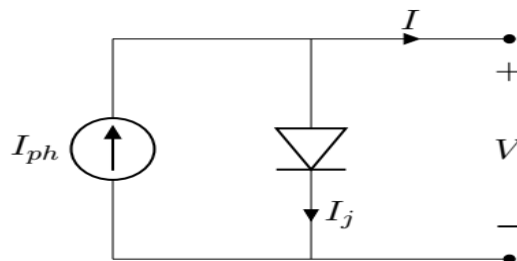


Figure I. 4: Modèle à une seule diode de la cellule solaire[4]

Le courant photogénérés I_{ph} dépend de l'éclairement, de la surface de la cellule et de la capacité d'absorption du matériau de type p. Il induit une augmentation de la tension aux bornes de la jonction PN qui se traduit par une augmentation du courant de diffusion I_j . En utilisant le modèle et l'équation (I.6), le courant total dans la cellule s'écrit [2]:

$$I = I_{ph} - I_j = I_{ph} - I_s \left(\exp \left(\frac{eV}{kT} \right) - 1 \right) \quad (I.7)$$

Le courant I dans une cellule solaire idéale est représenté à côté de la puissance (P) sur la figure I.5.

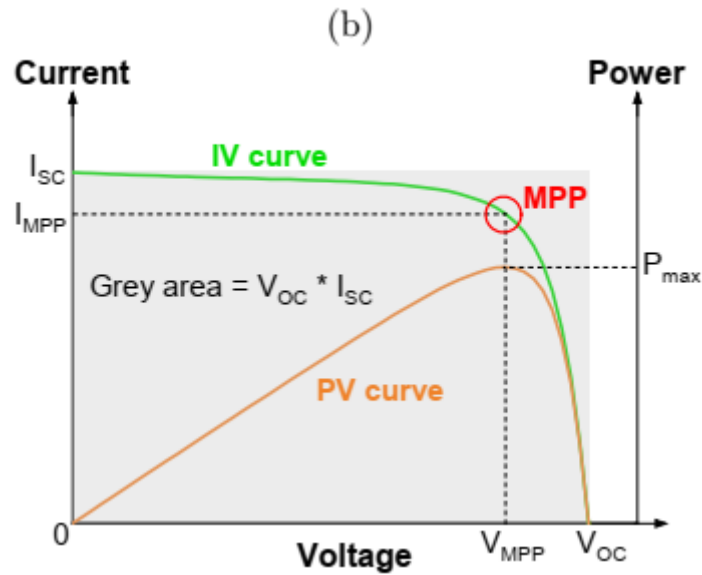


Figure I. 5: Caractéristiques I-V et P-V d'une cellule solaire idéale [8]

I.2.3 Figures de mérite des cellules solaires

Des figures de mérite importantes pour caractériser les performances de la cellule solaire sont extraites de la courbe I-V sous éclairement. Celles-ci sont représentées sur la figure I.5 et sont les suivantes :

- La tension en circuit ouvert V_{oc} . C'est la tension à laquelle le courant est nul.
- Le courant de court-circuit (ou la densité de courant de court-circuit J_{sc}). C'est le courant ou la densité de courant à tension nulle.
- Le point de puissance maximale (V_{mpp} , J_{mpp}) qui est le point de puissance générée maximale.
- Le facteur de forme $FF = \frac{V_{mpp} J_{mpp}}{V_{oc} J_{sc}}$ [9] C'est une mesure d'idéalité pour la cellule solaire.
- Le rendement de la cellule $\eta = \frac{V_{mpp} J_{mpp}}{G} = FF \frac{V_{oc} J_{sc}}{G}$ [9] Il dépend de l'éclairement solaire G qui est connu de la procédure de test de la cellule solaire.

I.3 Facteurs limitant les performances des cellules solaires

Bien que le concept de base d'une cellule solaire idéale soit simple, dans la pratique, plusieurs mécanismes de perte viennent limiter leurs performances et réduire leur efficacité de conversion énergétique. Le modèle à une diode est souvent utilisé pour représenter ces pertes de manière simplifiée [8].

Tout d'abord, il existe des pertes électriques externes liées aux résistances série et parallèle du dispositif. La résistance série, provenant des contacts métalliques, des couches de transport de charges et du semi-conducteur lui-même, s'oppose au flux de courant photogénérés et diminue la tension de sortie. La résistance parallèle, quant à elle, facilite les courants de fuite alternatifs qui contournent la jonction PN, réduisant ainsi le courant de sortie.

Cependant, les principales limitations proviennent de mécanismes de recombinaison intrinsèques au sein du matériau semi-conducteur. La recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH), due à la présence de défauts cristallins ou d'impuretés, permet aux électrons de la bande de conduction de se recombiner avec les trous de la bande de valence de manière non radiative. Ce processus diminue le nombre de porteurs disponibles pour la génération de courant. De même, la recombinaison radiative, bien qu'inévitable, réduit l'extraction des charges photogénérés. Surmonter ces différents mécanismes de perte est l'un des principaux défis de la recherche sur les cellules solaires, visant à optimiser les matériaux, les structures et les procédés afin de maximiser le rendement de conversion énergétique.

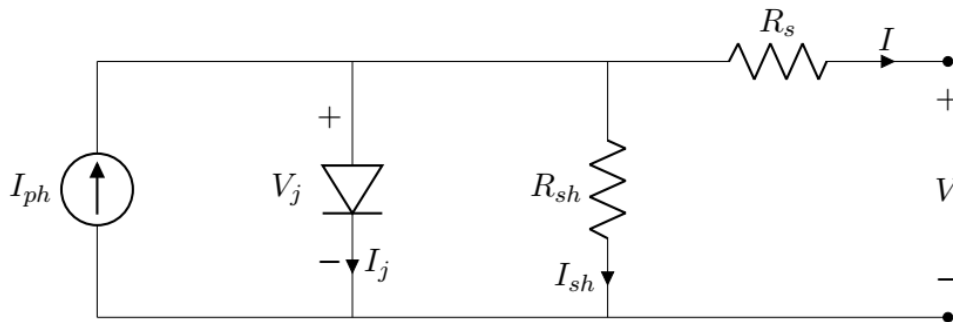


Figure I. 6: Modèle à 1 diode adaptée pour les cellules solaires, prenant en compte l'effet de la résistance série et de la résistance shunt [8]

R_s est la résistance série,

R_{sh} est la résistance shunt

V_j et I_j sont la tension et le courant de jonction.

En utilisant ce modèle, le courant mesuré externe peut être séparé dans ses différentes parties à l'aide des équations suivantes [8]:

$$I = I_{ph} - I_j - I_{sh}$$

$$V = V_j - R_s I \quad (1.8)$$

$$I_j = I_s \left(\exp\left(\frac{eV_j}{kT}\right) - 1 \right)$$

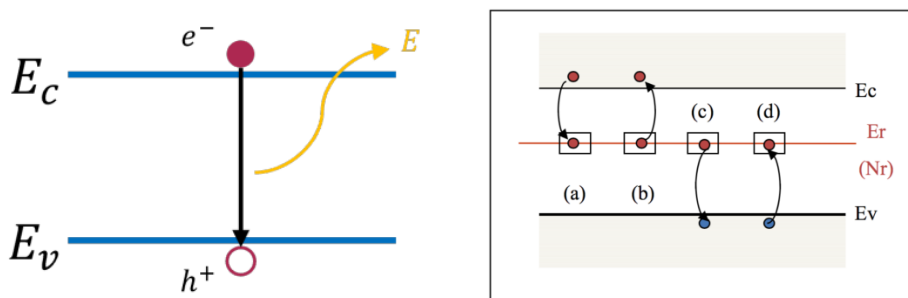
En rassemblant le tout, cela mène à :

$$I = I_{ph} - I_s \left(\exp \left(\frac{eV + IR_s}{kT} \right) - 1 \right) - \frac{V + IR_s}{R_{sh}} \quad (I.9)$$

Ce modèle à 1 diode met en lumière les deux principales sources de pertes électriques externes : la résistance série et la résistance shunt.

I.3.2 Recombinaison Shockley-Read-Hall et défauts cristallins

Bien que la recombinaison radiative bande-à-bande soit un processus fondamental [5], un mécanisme de recombinaison plus dommageable pour les performances des cellules solaires est la recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH). Ce phénomène est étroitement lié à la présence de défauts cristallins et d'impuretés dans le réseau du semi-conducteur. Au lieu d'une transition directe entre la bande de conduction et la bande de valence, la recombinaison SRH implique des niveaux d'énergie intermédiaires, ou pièges, créés par les défauts dans la bande interdite du matériau. Ces états permis au sein de la bande interdite facilitent grandement la recombinaison non radiative des porteurs de charge photogénérés. Le mécanisme se déroule en deux étapes : premièrement, un électron de la bande de conduction est capturé par un piège, puis un trou de la bande de valence est également piégé, permettant leur recombinaison au niveau du défaut. Ce processus Shockley-Read-Hall est beaucoup plus probable que la recombinaison bande-à-bande directe, réduisant ainsi dramatiquement la durée de vie des porteurs minoritaires. La densité et la nature des défauts présents dans le réseau cristallin jouent donc un rôle crucial sur le taux de recombinaison SRH. Minimiser ces imperfections est un défi majeur pour améliorer les propriétés optoélectroniques des cellules solaires à base de semi-conducteurs.



a) recombinaison bande à bande d'une paire e^-/h^+ b) recombinaison SRH d'une paire e^-/h^+

Figure I. 7: Représentation schématique des mécanismes de recombinaison bande à bande et Shockley-Read-Hall (SRH) [5]

C'est le cas des défauts qui ont leur niveau d'énergie à l'intérieur de la bande interdite. Ils peuvent capturer et émettre des charges, agissant donc comme des états intermédiaires pour la recombinaison.

Deux types de défauts existent :

I.3.2.1 Défauts volumiques et défauts d'interface dans les cellules solaires

Les défauts cristallins qui facilitent la recombinaison Shockley-Read-Hall peuvent être classés en deux catégories principales [5-8]: les défauts volumiques et les défauts d'interface. Les défauts volumiques sont des imperfections présentes au cœur même du réseau cristallin du matériau absorbeur. D'autre part, les défauts d'interface se situent aux jonctions entre les différentes couches constituant la cellule solaire. Dans les cellules solaires à base de pérovskites, ces deux types de défauts sont particulièrement critiques. Les joints de grains volumiques et les nombreuses interfaces entre les différents types de couches distinctes représentent d'importantes sources de recombinaison qui limitent sévèrement les performances optoélectroniques. Minimiser l'impact de ces défauts volumiques et d'interface est donc un défi majeur pour améliorer la durée de vie des porteurs et optimiser l'extraction du photocourant dans les cellules solaires à base de matériaux polycristallins.

Mathématiquement, le taux de recombinaison SRH est exprimé comme [2] :

$$U = \frac{n p - n_i^2}{\tau_0(p+n) + 2n_i \cosh\left(\frac{E_t - E_i}{kT}\right)} \quad (\text{I.10})$$

où τ_0 est la durée de vie des porteurs minoritaires donnée par :

$$\tau_0 = \frac{1}{\sigma_0 v_T N} \quad (\text{I.11})$$

avec σ_0 [cm²] la section efficace de capture, qui est dans ce cas supposée être la même pour les électrons et les trous, v_T [cm/s] la vitesse thermique et N [cm⁻³] la densité totale d'états disponibles, parmi lesquels ceux des défauts. Qualitativement, il est logique que la durée de vie du porteur dépende de ces paramètres. La durée de vie d'un porteur serait élevée si :

- (a) σ_0 , est petite.
- (b) v_T , la vitesse de la charge dans le réseau, est petite.
- (c) N , le nombre d'états disponibles pour que la charge les occupe, est petit.

. L'introduction de la recombinaison SRH conduit à un courant modifié dans la cellule solaire.

Toujours d'après [2], le courant de jonction de la cellule solaire devient :

$$I_s \left(\exp\left(\frac{qV}{mkT}\right) - 1 \right) \quad (\text{I.12})$$

Avec m le facteur d'idéalité de la jonction. Lorsqu'aucune recombinaison SRH n'est considérée, $m = 1$. Lorsque les courants de recombinaison sont introduits, $m = 2$.

I.3.3 Pertes électriques

I.3.3.1 Pertes résistives externes dans les cellules solaires

Au-delà des mécanismes de recombinaison intrinsèques aux matériaux, les performances des cellules solaires sont également affectées par des pertes résistives externes, communément représentées par la résistance série (R_s) et la résistance shunt (R_{sh})[9]. La résistance série provient principalement des résistances de contact aux interfaces métal/semi-conducteur ainsi que de la résistivité des couches conductrices elles-mêmes. Une R_s élevée s'oppose au flux de porteurs photogénérés, réduisant la tension de sortie disponible[9-10]. D'autre part, la résistance shunt parallèle est liée aux chemins de fuite alternatifs qui contournent la jonction p-n de la cellule. Une faible résistance shunt R_{sh} favorise donc ces courants de fuite parallèles qui court-circuitent partiellement le dispositif, diminuant le courant de sortie collecté. Ces pertes résistives, couplées aux recombinaisons non radiatives, limitent considérablement le facteur de forme et le rendement des cellules solaires. Minimiser les résistances série et maximiser la résistance shunt sont donc des objectifs essentiels lors de la conception et de la fabrication des cellules photovoltaïques, quel que soit le matériau absorbeur utilisé.

Conclusion

Ce chapitre a commencé par une introduction aux concepts fondamentaux des jonctions PN, leur description théorique, ainsi que la notion de cellule solaire idéale constituée d'une jonction PN illuminée. Les principales caractéristiques de performance telles que la tension en circuit ouvert, le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement ont été expliquées. Ensuite, les principaux mécanismes de pertes présents dans les cellules solaires réelles ont été abordés, notamment les pertes externes dues aux résistances série et shunt, ainsi que les pertes par recombinaison, en particulier la recombinaison Shockley-Read-Hall liée aux défauts volumiques et d'interface. Cette base théorique a permis de préparer la compréhension des chapitres suivants II et III portant sur des aspects plus avancés.

*Chapitre II : Cellules solaires photovoltaïques à
base de pérovskite*

Introduction

Ce chapitre présente en détail les cellules solaires à base de matériaux pérovskites, une technologie photovoltaïque émergente très prometteuse. Après avoir décrit l'architecture générale d'une cellule solaire à pérovskite, le fonctionnement de ces dispositifs est expliqué. La séparation et le transport des charges photogénérées au sein des différentes couches sont détaillés, en lien avec l'alignement des niveaux d'énergie des matériaux. Les différentes méthodes de caractérisation des performances des cellules solaires à pérovskite sont ensuite abordées, notamment les courbes densités de courant-tension et puissance -tension permettant d'extraire les paramètres clés comme la tension en circuit ouvert, le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement de conversion. Le rendement quantique externe, lié aux pertes optiques et électriques, est également présenté. Enfin, les principaux mécanismes de recombinaison des porteurs de charge sont décrits.

II.1 Architectures des dispositifs des cellules solaires à pérovskite

II.1.1 Structure d'une cellule solaire à base de pérovskite

De manière générale, une cellule solaire à pérovskite est constituée d'une couche active en pérovskite, matériau semi-conducteur intrinsèque absorbant la lumière, prise en sandwich entre une couche de transport d'électrons (ETL) de type n et une couche de transport de trous (HTL) de type p. Lorsque la couche de pérovskite absorbe les photons lumineux, des paires électron-trou sont générées. Ces porteurs de charge libres sont ensuite extraits de la pérovskite grâce au champ électrique interne : les électrons migrent vers l'ETL tandis que les trous se déplacent vers la HTL. Les couches ETL et HTL permettent ainsi le transport respectif des électrons et des trous vers les électrodes pour une collecte efficace du courant photogénérés. Cependant, une partie des porteurs peut également se recombiner de manière radiative ou non radiative au sein de la pérovskite, réduisant les performances de la cellule. Deux architectures principales peuvent être distinguées, selon la façon dont la pérovskite est en contact avec l'ETL ou la HTL [10-19].

1) Configuration normale (n-i-p)

2) Configuration inversée (p-i-n)

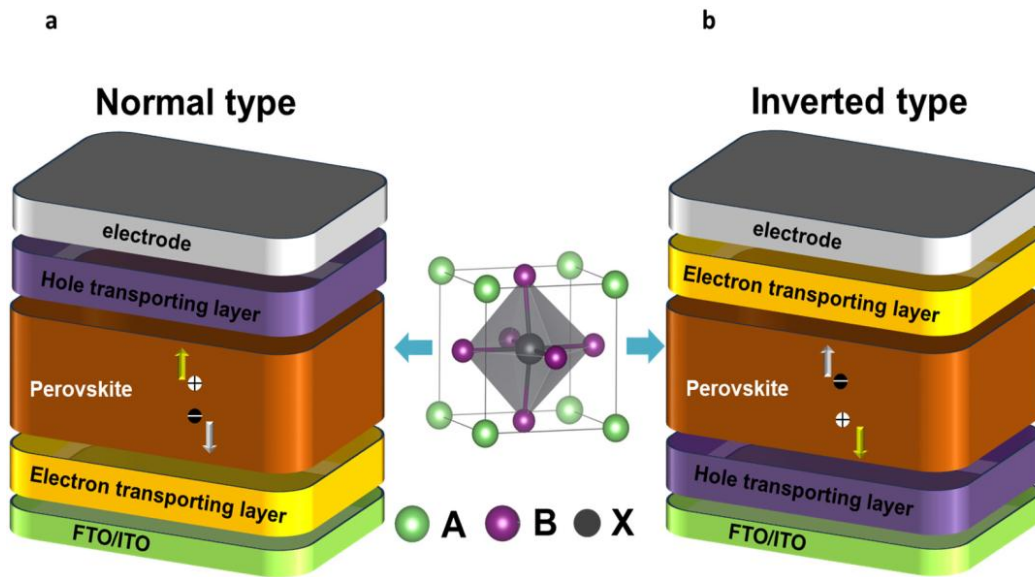


Figure II. 1: Schéma des différentes architectures de dispositifs : a) configuration planaire normale (n-i-p) b) configuration planaire inversée (p-i-n)[10].

II.1.1.2 Configuration normale (n-i-p)

La structure normale est définie par le contact de l'ETL avec l'oxyde conducteur transparent (TCO) avant, comme l'oxyde d'étain dopé au fluor (FTO) ou l'oxyde d'étain dopé à l'indium (ITO) (Figure II.1a). La pérovskite est prise en sandwich entre l'ETL et la HTL, où la HTL est en contact avec l'électrode métallique supérieure, comme l'argent (Ag) ou l'or (Au)[11]. La lumière doit d'abord passer à travers l'ETL dans la structure normale avant d'atteindre la couche de pérovskite. Il est donc nécessaire de choisir un semi-conducteur de type n transparent, communément utilisé comme SnO_2 ou TiO_2 [12]. L'architecture de dispositif la plus simple est la structure planaire [13].

II.1.1.2 Configuration inversée (p-i-n)

La configuration inversée inverse la structure en considérant la structure normale. Ici, la HTL est en contact avec l'électrode transparente avant, et l'ETL est en contact avec l'électrode métallique (Figure II.1b). Normalement, des couches semi-conductrices transparentes de type p sont employées dans cette configuration. La lumière doit d'abord traverser cette couche avant d'atteindre la couche de pérovskite, sans absorption parasite, ce qui pourrait entraîner des pertes. Les HTL typiques sont par exemple l'oxyde de nickel (NiO_x), le poly[bis(4-phényl)(2,5,6-triméthylphényl)amine] (PTAA), ou le poly(3,4-éthylènedioxythiophène) polystyrène sulfonate (PEDOT:PSS).[14,17]

II.1.2 Architecture et fonctionnement d'une cellule solaire à pérovskite

La cellule est composée d'une couche de pérovskite semi-conductrice intrinsèque prise en sandwich entre une couche de transport de trous (HTL) et une couche de transport d'électrons (ETL). Les niveaux d'énergie des bandes de la HTL sont plus élevés que ceux de la pérovskite, tandis que ceux de l'ETL sont plus bas. Lorsque la pérovskite absorbe les photons incidents, les paires électron-trou photogénérés se séparent grâce à cette disposition en niveaux d'énergie : les électrons sont transférés vers les niveaux bas de l'ETL et les trous vers les niveaux hauts de la HTL. Ainsi, la HTL permet l'extraction sélective des trous tout en bloquant les électrons, et inversement l'ETL extrait les électrons et bloque les trous, permettant la collecte efficace des porteurs aux électrodes respectives (figure II.2)[16].

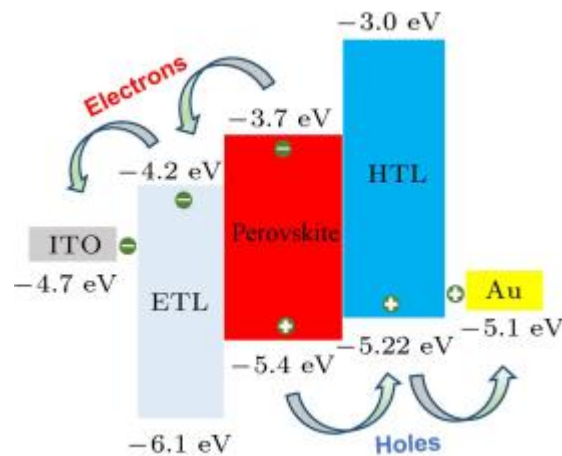


Figure II. 2: Schéma des niveaux d'énergie d'une cellule solaire à pérovskite et les rôles des différentes couches. Notamment la couche de transport de trous (HTL), la couche de transport d'électrons (ETL) et la couche active en pérovskite [16]

II.1.3 Caractérisation des cellules solaires à pérovskite

Les caractéristiques photovoltaïques sont déterminées par les paramètres des cellules solaires à pérovskite mesurés dans des conditions d'éclairement et d'obscurité. La condition préalable du montage de mesure sous éclairage est que le spectre de la source lumineuse corresponde au spectre de masse d'air AM 1,5 et que la mesure soit effectuée dans les conditions d'essai normalisées (STC). Cela inclut l'étalonnage de la source lumineuse avant la mesure à 1000 W/m² et le maintien de la cellule à température ambiante (25°C) pendant toute la durée de la mesure[16]. Les principaux paramètres qui définissent les caractéristiques J-V sont la densité de courant de court-circuit (Jsc), la tension de circuit ouvert (Voc), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion de puissance (PCE) (Figure II.3) [15]. Le Jsc est une mesure qui

Chapitre II : Cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite

décrit la densité de courant circulant dans le circuit externe lorsque les électrodes sont court-circuitées. Le V_{oc} est une mesure de la tension maximale que la cellule solaire peut atteindre, et elle est définie comme la tension lorsqu'aucun courant ne circule. Le J_{sc} représente le courant maximum en court-circuit, le FF traduit la qualité de la courbe J-V rectangulaire idéale, le PCE est le rendement de conversion de la puissance lumineuse incidente en puissance électrique.

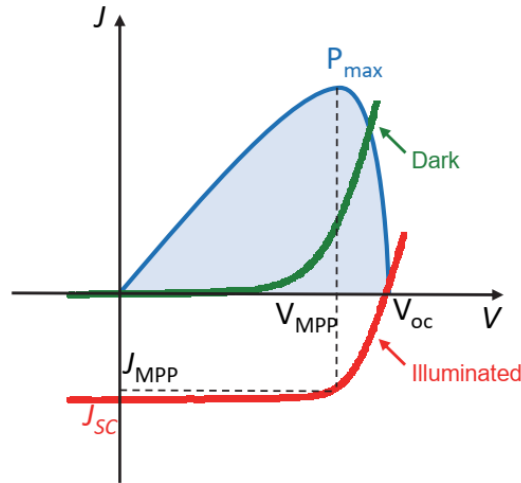


Figure II. 3: Caractéristiques J-V des cellules solaires dans des conditions d'éclairage et d'obscurité[16]

Le V_{oc} est lié à la densité de courant de saturation (J_0) et à la densité de courant photogénérés (J_{ph}). J_0 est affecté par les processus de recombinaison et peut changer d'amplitude, tandis que le J_{ph} ne montre généralement qu'une légère variation. Le V_{oc} et le FF sont définis selon les équations suivantes [9]:

$$V_{oc}$$

$$= \frac{k_B T}{q} \ln \left(\frac{J_{ph}}{J_0} \right) \quad (3)$$

$$FF = \frac{P_{max}}{V_{oc} J_{sc}} = \frac{V_{MPP} J_{MPP}}{V_{oc} J_{sc}} \quad (4)$$

Le PCE est défini comme étant le rapport entre la P_{max} générée par la puissance incidente (I_{in}) sur la cellule solaire, qui est la lumière incidente avec le spectre AM 1,5 tel que défini ci-dessus[9] :

$$PCE = \frac{P_{max}}{I_{in}} = \frac{V_{oc} J_{sc} FF}{I_{in}} \quad (5)$$

Le rendement quantique externe est défini par le nombre de photons incidents convertis en paires électron-trou qui sont collectées aux électrodes. L'EQE est mesuré en illuminant la

cellule solaire avec une lumière monochromatique à une longueur d'onde (λ) spécifique, tandis que le photocourant (I_{ph}) est enregistré et exprimé en fonction de la longueur d'onde (λ) [9].

$$EQE(\lambda) = \frac{I_{ph}(\lambda)}{q\psi_{ph,\lambda}} \quad (6)$$

L'EQE est également défini par q , la charge élémentaire, $\psi_{ph,\lambda}$ le flux de photons spectral. Le J_{sc} à partir de l'EQE peut être obtenu en intégrant l'EQE par rapport au flux de photons du spectre AM 1,5 sur toutes les longueurs d'onde.

II.1.4. Processus de recombinaison à l'interface

Différents types de processus de recombinaison peuvent se produire dans le capteur de lumière pendant le processus de génération de charges, affectant les performances de la cellule solaire. [13,16] Ces quatre processus de recombinaison peuvent être distingués avec les explications suivantes :

II.1.4.1 Recombinaison radiative

La recombinaison radiative (figure II.4), ou recombinaison bande à bande, est le principal processus de recombinaison des semi-conducteurs à bande interdite directe.[10,11] Pendant le processus de recombinaison, l'électron excité dans la bande de conduction(BC) se combine avec le trou dans la bande de valence (BV), et un photon égal à l'énergie de la bande interdite du semi-conducteur est libéré.[10,12]

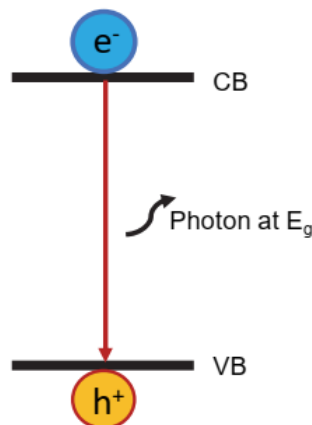


Figure II. 4: Schéma de la recombinaison radiative [13]

II.1.4.3 Recombinaison Auger

Dans la recombinaison Auger non radiative, l'énergie du trou et de l'électron se recombinant est transférée à un autre électron ou trou (Figure II.5). Supposons que l'énergie soit transférée à un électron. Dans ce cas, l'électron est excité vers un niveau supérieur de la BC, suivi d'un processus de relaxation vers la BC, en libérant son énergie sous forme de phonons et finalement en énergie thermique. Si la particule est un trou, elle sera excitée vers un niveau inférieur de la BV, suivie d'un transfert d'énergie en phonons [16,12].

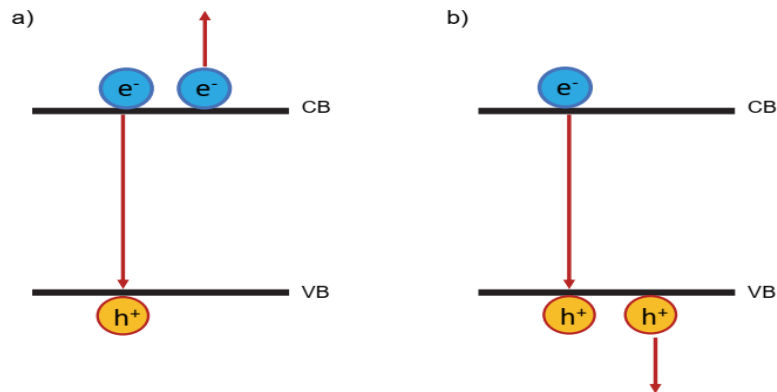


Figure II. 5: Schéma de la recombinaison Auger a) impliquant deux électrons b) deux trous[13]

II.1.4.4. Recombinaison aux joints de grains, en surface et aux interfaces dans les cellules solaires à pérovskite :

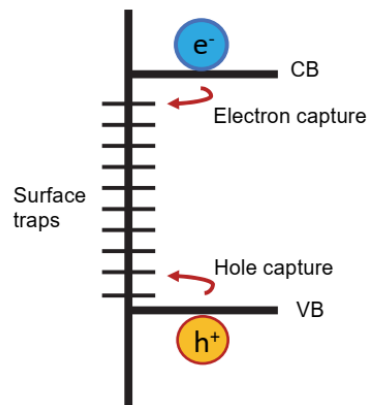


Figure II. 6: Schéma de la recombinaison en surface[13]

Au-delà de la recombinaison volumique dans le matériau massif, les processus de recombinaison peuvent également se produire en surface, aux interfaces entre différents matériaux ainsi qu'aux joints de grains dans les pérovskites polycristallines[13,16], comme

Chapitre II : Cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite

illustré schématiquement sur la Figure II.6. En effet, la présence d'impuretés, de liaisons pendantes ou de défauts cristallins en ces régions crée des états électroniques pièges pouvant favoriser la recombinaison non radiative des porteurs photogénérés, selon un mécanisme similaire à la recombinaison Shockley-Read-Hall décrite dans le chapitre I.

II.1.5 Cellules solaires tandem pérovskite-pérovskite à deux terminaux

Le principal problème rencontré actuellement par les cellules solaires à jonction unique est de trouver un équilibre entre l'augmentation de l'absorption des photons et la minimisation des pertes thermiques [7]. En raison du compromis entre les pertes thermiques et l'augmentation de l'absorption des photons, la puissance maximale possible d'une cellule solaire avec une seule jonction p-n sera inférieure à la limite de Shockley-Queisser (S-Q). Récemment, les scientifiques ont proposé plusieurs concepts physiques pour franchir cette limite, dont l'un est la cellule solaire tandem (TSC)]. Deux sous-cellules dans une cellule tandem complètent la plage d'absorption du spectre, absorbent davantage de photons dans leur ensemble et minimisent les pertes thermiques. Parmi les différents types de TSC, le plus prometteur est la cellule solaire tandem à base de pérovskite (PTSC). Les cellules solaires tandem (PTSC) pérovskite-pérovskite à deux terminaux sont des cellules solaires qui emploient deux matériaux à structure pérovskite dans un agencement en tandem pour augmenter leur efficacité globale. De plus, le gap de la bande interdite de la pérovskite doit être régulé pour permettre le couplage de deux absorbeurs pérovskites afin de construire des PTSC toute-pérovskite.

Les PTSC sont formées par la combinaison de deux cellules solaires à jonction unique (Figure II.8),

Une PTSC à 2 terminaux est une cellule solaire multi-jonction intégrée de manière monolithique conçue en empilant une cellule à jonction unique sur une autre cellule à jonction unique ou en connectant en série les deux cellules. La structure commune de 2T PTSC est : TCO/Cellule supérieure/RL ou TJ/Cellule inférieure [15]

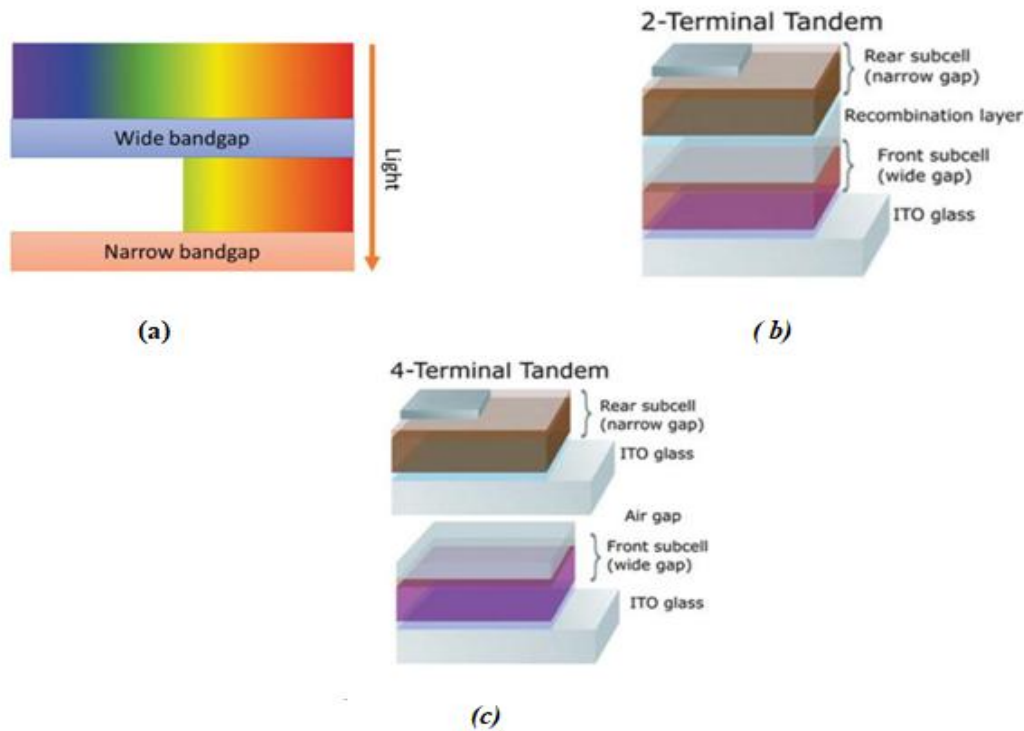


Figure II. 7: (a) Schéma du processus d'absorption dans un dispositif tandem. (b) Schéma d'une structure tandem 2T. (c) Schéma d'une structure tandem 4T [16].

Selon la théorie quantique des semi-conducteurs, la bande interdite des cellules solaires détermine directement la gamme d'énergies solaires pouvant être absorbées. Les hautes énergies du spectre solaire seront absorbées par la sous-cellule supérieure possédant une large bande interdite, tandis que les basses énergies seront absorbées par la sous-cellule inférieure avec une bande interdite plus étroite [16]. Ainsi, l'ensemble du dispositif tandem permet d'absorber une plus vaste plage d'énergies photoniques du spectre solaire pour les convertir en électricité.

Pour intégrer les sous-cellules supérieure et inférieure dans une structure tandem monolithique, une couche de recombinaison (RL) est insérée entre elles. Les deux sous-cellules se retrouvent ainsi connectées en série via cette RL. Par conséquent, une RL fonctionnelle et optimisée est cruciale pour permettre l'égalisation des courants entre les deux sous-cellules et obtenir une tension de circuit ouvert (V_{oc}) élevée. Au-delà de son rôle d'égalisation des courants, la RL est également le siège de la recombinaison des porteurs de charge, déterminant ainsi l'efficacité de recombinaison du dispositif tandem.

II.1.5.1 Principe de fonctionnement de la cellule solaire tandem

Une partie des photons est absorbée en pénétrant le verre et la couche de transport des trous (HTL) de la sous-cellule avant, puis le reste de la lumière est absorbé par la cellule arrière. Les deux cellules génèrent des électrons et des trous qui sont séparés en tant que porteurs libres. Les électrons seront collectés par l'ETL et transportés vers l'électrode arrière ou la couche de recombinaison (RL) à travers la bande de conduction de l'ETL, tandis que les trous seront transportés à travers la bande de valence de l'HTL vers l'électrode avant ou RL, en fonction des structures du dispositif complet.

Cellule supérieure pérovskite :

Les cellules supérieures en pérovskite métal-halogénure sont des dispositifs à film à jonction unique avec de larges bandes interdites, une haute efficacité d'absorption, qui peuvent être facilement intégrés avec d'autres matériaux photovoltaïques (PV). Généralement, l'épaisseur de l'absorbeur en pérovskite est d'environ 500 nm. De plus, pour la pérovskite, la possibilité de régler la bande interdite s'étend de 1,17 à 3,00 eV, ce qui peut parfaitement s'adapter à l'exigence de la bande interdite idéale de la cellule supérieure (~1,67-1,75 eV)[16].

Plusieurs matériaux typiques de cellules supérieures en pérovskite sont le MAPbI₃, le FAPbI₃, le CsPbBr₃, etc.

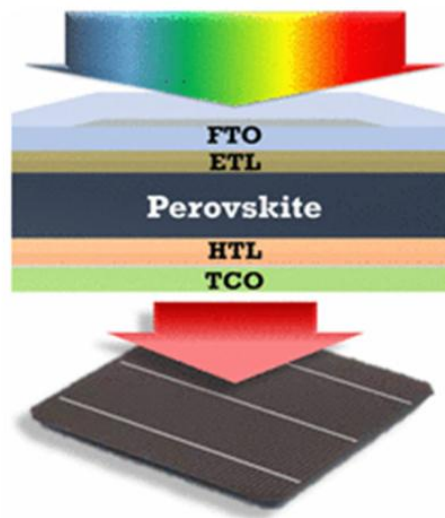


Figure II. 8: Structure de la cellule solaire en pérovskite [16]

Conclusion

Chapitre II : Cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite

En résumé, ce chapitre a traité en détail les cellules solaires à base de matériaux pérovskites halogénures métalliques, mettant en évidence leur potentiel prometteur pour dépasser les limites des cellules à jonction unique conventionnelles. Grâce à la flexibilité de la composition chimique des pérovskites ABX_3 , il est possible d'ajuster finement leur bande interdite sur une large gamme de 1,1 à 3,0 eV. Cela permet d'optimiser les pérovskites pour la sous-cellule supérieure à large bande interdite des architectures tandem sur entièrement pérovskite.

Le fonctionnement de ces dispositifs a été expliqué, avec notamment le rôle clé de la couche de recombinaison permettant l'interconnexion monolithique et l'égalisation des courants entre les deux sous-cellules. Les techniques de caractérisation standards comme les mesures J-V, le rendement quantique externe et les paramètres caractéristiques ont également été détaillées.

Enfin, les principaux mécanismes de recombinaison radiative, Auger et Shockley-Read-Hall aux défauts ont été décrits, ces derniers limitant les performances finales des cellules à base de pérovskites. Malgré les défis restants à relever, notamment les questions de stabilité, les pérovskites présentent un fort potentiel pour le développement de cellules solaires tandem à haut rendement.

***Chapitre III : Résultats de simulation numérique
sous SILVAO-ATLAS***

Introduction

Les cellules solaires tandem à base de pérovskite constituent une solution prometteuse pour augmenter l'efficacité de conversion du rayonnement solaire en courant électrique. Cette technologie novatrice repose sur l'empilement de deux sous-cellules avec des absorbeurs ayant des gaps d'énergie complémentaires, permettant ainsi de capturer une plus grande partie du spectre solaire [18].

Dans ce chapitre, nous étudions numériquement différentes architectures de cellules solaires pérovskite à l'aide du logiciel SILVACO-ATLAS. Nous présentons les résultats de calibrage, d'optimisation pour des cellules solaires simples à base de pérovskite de structure FTO/TiO₂/CH₃NH₃PbI₃/Spiro_OMeTAD/Gold et FTO/TiO₂/CH₃NH₃Pb_{3-x}Cl_x/Spiro_OMeTAD/Silver appelées pérovskite1(PSC1) et pérovskite2(PSC2) respectivement, ainsi que FTO/TiO₂/CH₃NH₃PbI₃/Spiro_OMeTAD/Gold/ITO/CH₃NH₃Pb_{3-x}Cl_x/Spiro_OMeTAD/Silver pour une structure tandem pérovskite/pérovskite

Partie 1. Principe de simulation numérique d'une cellule solaire photovoltaïque sous SILVACO-ATLAS

Le principe de la simulation numérique de cellules solaires sous SILVACO-ATLAS est basé sur la méthode de modélisation informatique avancée permettant d'étudier et d'analyser le comportement des cellules solaires en simulant leur fonctionnement à l'aide de calculs numériques complexes. Ces calculs sont basés sur la résolution des équations fondamentales régissant la physique des semi-conducteurs, comme les équations de continuité et l'équation de Poisson [20]. Ces équations modélisent le comportement des porteurs de charge (électrons et trous) dans la cellule, en prenant en compte des phénomènes clés tels que la génération, la recombinaison et le transport des porteurs de charges. Le travail présenté consiste à programmer les modèles informatiques des cellules solaires à base de pérovskite 1, pérovskite 2 et tandem sous SILVACO-ATLAS, permettant ainsi la résolution numérique de ces équations fondamentales dans des conditions de simulation standards.

➤ Les équations de continuité [19]

$$\text{Pour les électrons : } \overrightarrow{\text{div}} j_n = \mathbf{q} \times \mathbf{R}_n + \mathbf{q} \times \frac{\partial n}{\partial t} - \mathbf{q} \mathbf{G}_n \quad (3.1)$$

$$\text{Pour les trous : } \overrightarrow{\text{div}} j_p = \mathbf{q} \times \mathbf{R}_p + \mathbf{q} \times \frac{\partial p}{\partial t} - \mathbf{q} \mathbf{G}_p \quad (3.2)$$

Avec :

R : Représente le taux de recombinaison électron-trou

G : Représente le taux de génération

j_n, j_p : Sont respectivement les densités du courant des électrons et des trous

➤ **Equation de Poisson [19]**

$$\overrightarrow{\text{div}} = (\boldsymbol{\varepsilon}, \Phi) = \mathbf{q}(\mathbf{n} - \mathbf{p} + N_A^- - N_D^+) \quad (3.3)$$

Avec :

$\boldsymbol{\varepsilon}$: La permittivité électrique ($\boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_0 \times \boldsymbol{\varepsilon}_r$, $\boldsymbol{\varepsilon}_0$ la permittivité du vide, $\boldsymbol{\varepsilon}_r$ la permittivité du matériau)

Φ : Le potentiel électrostatique

q : La charge élémentaire ($q = 1.6 \times 10^{-19} C$)

n, p : Les densités des électrons et des trous respectivement

N_A^-, N_D^+ : Les densités d'atomes donneurs et accepteurs respectivement

III.1. Modèles

Le choix des modèles de simulation numérique sous SILVACO-ATLAS est important pour résoudre efficacement les équations complexes d'une cellule solaire. Pour simuler correctement la structure des cellules solaires à base de pérovskite, plusieurs modèles physiques clés ont été utilisés :

- 1) Recombinaison en surface - pour capturer les recombinaisons aux interfaces semi-conducteur/air ou autres matériaux.
- 2) Recombinaison Auger - pour prendre en compte les recombinaisons non radiatives où un porteur transfère son énergie à un autre.
- 3) Recombinaison Shockley-Read-Hall - pour modéliser les recombinaisons non radiatives via les défauts dans la bande interdite.

4) Mobilité dépendante de la concentration - pour décrire la variation de la mobilité des porteurs en fonction de leur concentration.

5) Rétrécissement de la bande interdite (BGN) - pour considérer la variation de la largeur de bande interdite des matériaux et son impact sur leurs propriétés.

L'inclusion de ces modèles physiques importants permet de capturer avec précision les phénomènes physiques complexes se produisant dans les cellules solaires à pérovskite lors de la simulation numérique sous SILVACO-ATLAS.

III.2. Méthode

La précision de la résolution numérique d'un système d'équations dépend fortement du choix de la méthode de résolution. Dans ce travail, nous avons choisi la méthode de NEWTON pour résoudre efficacement le système d'équations régissant la cellule solaire à base de pérovskite ou tandem.

Partie 2 : Résultat du calibrage et d'optimisation de la PSC1 simulée

III.3. Résultat du calibrage

Nous définissons le calibrage par simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque comme un processus qui consiste à ajuster les paramètres physiques du modèle numérique de la cellule solaire photovoltaïque afin que les résultats de simulation correspondent aux données expérimentales. Pour arriver à ceci, nous avons créé un modèle numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1(PSC1) sous le logiciel ATLAS-SILVACO possédant les propriétés présentées au tableau III.1. Les résultats de simulation numérique de la structure (Figure III.1) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 que nous avons obtenus par calibrage sous ATLAS- SILVACO, nous ont permis d'obtenir les caractéristiques telles que présentées au tableau III.2 ainsi que, la caractéristique de densité-tension (J_{sc} -V) (Figure III.2) de la structure simulée. Ces éléments clés permettent d'évaluer le fonctionnement et l'efficacité de la cellule solaire, offrant ainsi des informations cruciales pour son optimisation. Dans les paragraphes qui suivent, nous présenterons en détail ces résultats que nous avons obtenus ainsi que, nous discuterons et comparerons aux données expérimentales.

Tableau III. 1: Propriétés des matériaux utilisés pour le calibrage par simulation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1(PSC1) [21]

Symboles et unités	TiO ₂	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	Spiro_OMeTAD
d (nm)	25	360	25
Dopage(/cm ³)	20×10 ¹⁹	0.5 ×10 ¹⁶	2×10 ¹⁸
E _g (eV)	3.20	1.6	3.0
κ (eV)	4.21	3.9	2.3
ε _r	16	22	3
N _c (cm ⁻³)	1×10 ¹⁸	1×10 ¹⁸	2.5×10 ²⁰
N _v (cm ⁻³)	1×10 ¹⁹	1×10 ¹⁸	2.5×10 ²⁰
N _d (cm ⁻³)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×e ⁷
N _a (cm ⁻³)	1×10 ⁷	1×10 ⁷	1×10 ⁷
Π _n (cm ² /V.S)	20	2	2×10 ⁻⁴
Π _p (cm ² /V.S)	10	2	2×10 ⁻⁴
δ _e (cm ²)	1×10 ⁻¹⁵	1×10 ⁻¹⁵	1×10 ⁻¹⁵
δ _h (cm ²)	1×10 ⁻¹⁴	1×10 ⁻¹⁴	1×10 ⁻¹⁴
Coefficient radiatif	-	1.5×10 ⁻¹⁰	-
Coefficient Auger	-	3.7×10 ⁻²⁹	-



Figure III. 1: Structure obtenue de la cellule solaire à base de la Pérovskite1 simulée sous SILVACO-ATLAS.

III.3.1. Courbes de densité-tension (J_{sc} -V)

Les courbes de densité-tension (J_{sc} -V) (Figure III.2) ont été obtenues par simulation numérique de la structure de la cellule solaire calibrée à base de la Pérovskite1 sous le spectre standard (AM.1, 5 G). Ces courbes présentent des caractéristiques (Tableau III.2). En les comparant aux résultats expérimentaux, nous observons une légère différence. Les valeurs

Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVACO-ATLAS

obtenues pour la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) le facteur de forme (FF) et le rendement (η) dans la simulation sont légèrement inférieures à celles mesurées expérimentalement. Par contre, la tension en circuit ouvert (V_{oc}) est un peu plus élevée dans la simulation par rapport aux résultats expérimentaux. Cette légère différence entre les résultats de simulation et les données expérimentales valide la véracité des résultats que nous avons obtenus par simulation numérique de la structure de la cellule solaire à base de la pérovskite1(PSC1) calibrée sous SILVACO-ATLAS.

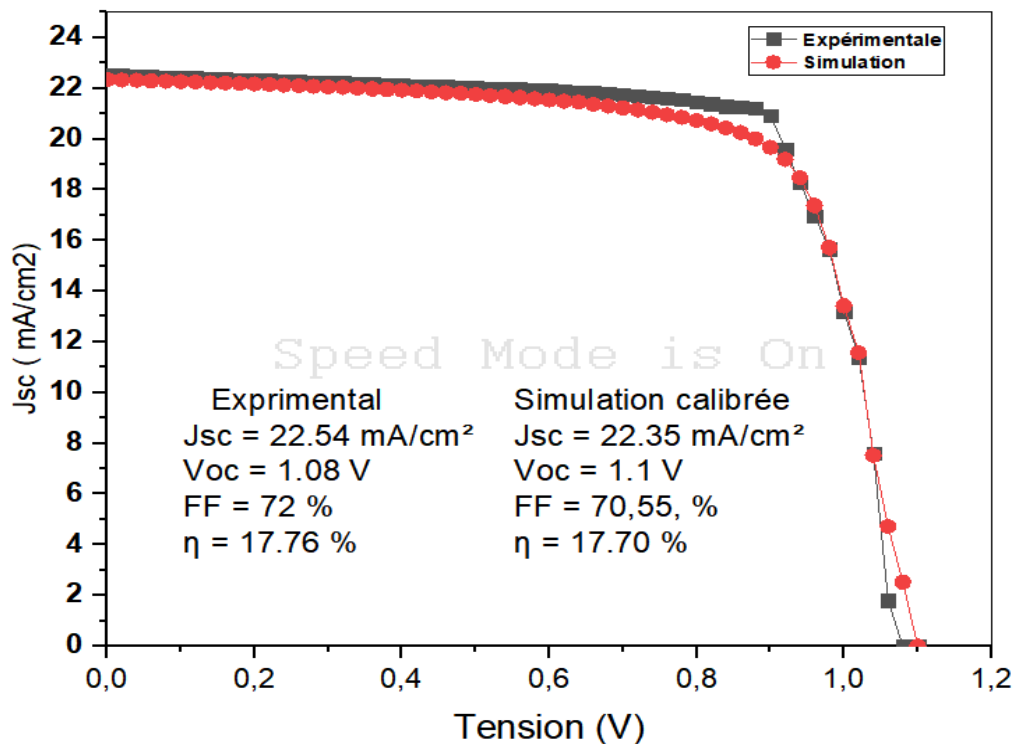


Figure III. 2: Courbes de densité-tension (J_{sc} - V) du calibrage et d'expérimentation [21] de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée

Tableau III. 2: Caractéristique PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée

	J_{sc} (mA.cm ⁻²)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
Expérimental [21]	22.54	1.08	72	17.76
Simulation	22.35	1.1	70.55	17.70

III.4. Résultat de l'optimisation

L'optimisation des cellules solaires à pérovskite passe par une optimisation des différentes couches qui composent le dispositif. Cette optimisation vise à améliorer la concentration des porteurs de charges et les épaisseurs de ces couches dont, le principe est basé sur la variation d'un seul de ces paramètres tout en gardant les autres paramètres invariants[22]. La couche de transport des électrons (ETL) doit être optimisée pour permettre une extraction efficace des électrons photogénérés dans la couche active en pérovskite. La couche active en pérovskite où a lieu l'absorption de la lumière et la génération des paires électrons-trous doit être optimisée pour maximiser ces processus. La couche de transport des trous doit être aussi optimisée pour faciliter la collecte des trous photogénérés vers l'électrode positive [19]. Dans les paragraphes qui suivent, qui nous présenterons en détails les résultats d'optimisation de ces différentes couches.

III.4.1. Effet du dopage sur la région TiO₂(ETL)

Les résultats obtenus de la simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la Pérovskite1(PSC1) par optimisation de la région TiO₂ (ETL) sont présentées au tableau III.3. Ces résultats nous donnent un aperçu sur les caractéristiques de cette dernière par variation de la concentration dans la région TiO₂ (ETL). La concentration la mieux optimisée pour cette région et celle de $35 \times 10^{19} / \text{cm}^3$ qui nous a permis d'atteindre un rendement de 19.02%. La figure III.3 présente les graphes du rendement (η), de facteur de forme (FF), de tension en circuit ouvert (Voc) et de la densité du courant de court-circuit (Jsc) en fonction de la concentration montrant ainsi que ces caractéristiques essentielles de la cellule solaire photovoltaïque peuvent être influencés par variation de la concentration des porteurs de charge dans la région TiO₂ (ETL). Ces résultats soulignent l'importance de la concentration des porteurs de charges dans la région TiO₂ (ETL) en tant que paramètre essentiel pour optimiser l'efficacité de conversion de la lumière en électricité.

Tableau III. 3: Résultat de l'effet du dopage sur la région TiO₂ (ETL) de la PSC1

Concentration (/cm³)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm²)	EFF (%)
1.9×10 ¹⁹	2.36225×10 ⁻¹⁰	1.09688	63.8836	23.6225	16.5529
2.1×10 ¹⁹	2.36033×10 ⁻¹⁰	1.09758	63.9249	23.6033	16.5607
23.5×10 ¹⁹	2.25254×10 ⁻¹⁰	1.12633	71.3865	22.5254	18.1115
22×10 ¹⁹	2.24925×10 ⁻¹⁰	1.12506	71.039	22.4925	17.9767
23×10 ¹⁹	2.2514×10 ⁻¹⁰	1.12591	71.2734	22.514	18.0669
20×10 ¹⁹	2.24576×10 ⁻¹⁰	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
24×10 ¹⁹	2.25373×10 ⁻¹⁰	1.12673	71.4972	22.5373	18.1556
26×10 ¹⁹	2.25882×10 ⁻¹⁰	1.12825	71.9145	22.5882	18.3275
35×10¹⁹	2.28369×10⁻¹⁰	1.13347	73.3947	22.5882	19.0208
27×10 ¹⁹	2.2615×10 ⁻¹⁰	1.12896	72.1092	22.8369	18.4105
28×10 ¹⁹	2.26424×10 ⁻¹⁰	1.12964	72.2956	22.615	18.4916
29×10 ¹⁹	2.26701×10 ⁻¹⁰	1.13038	72.4683	22.6424	18.5706

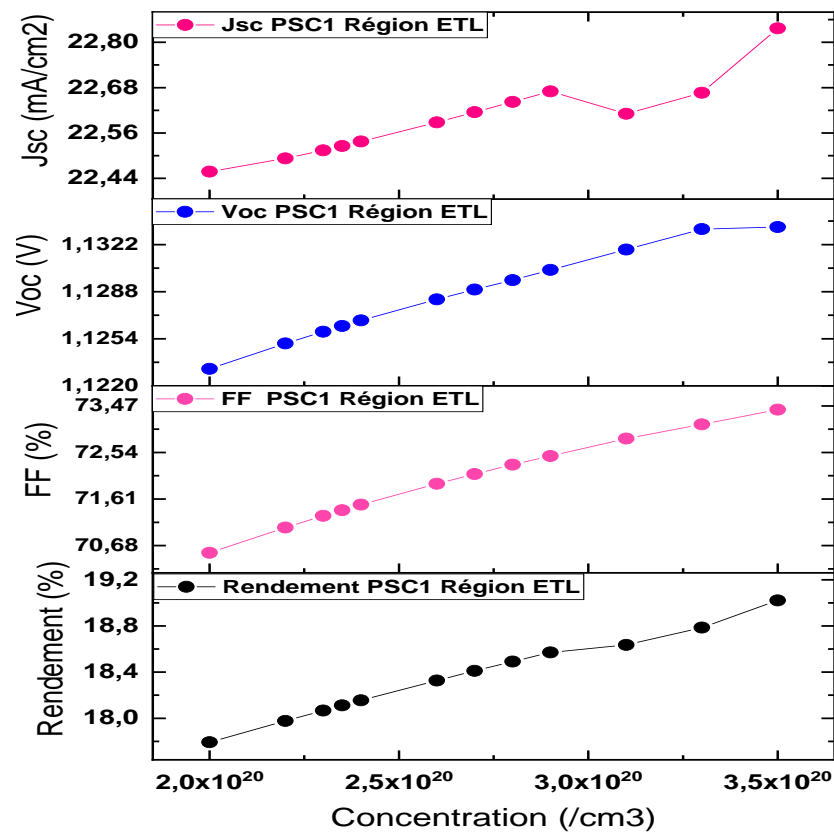


Figure III. 3: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région TiO_2 (ETL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 1

III.4.1.1. Analyse et interprétation

D'après les graphes présentés (figure III.3), on observe que les performances de la cellule solaire photovoltaïque à base de pérovskite 1 (PSC1) s'améliorent significativement lorsque la concentration de porteurs de charge dans la couche de transport d'électrons TiO_2 (ETL) augmente :

- Le rendement (η) et le facteur de forme (FF) augmentent de façon quasi-linéaire, grâce à une meilleure [23] collection et extraction des électrons.
- La tension en circuit ouvert (V_{oc}) montre aussi une tendance croissante, indiquant une réduction des recombinaisons facilitée par un meilleur [23] transport des électrons.

- La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) s'accroît également, résultant d'une collecte plus efficace du courant photogénérés.

III.4.2. Effet de la concentration du dopage de la région Pérovskite1 sur les performances de la cellule solaire PSC1

Le tableau III.4 présente les résultats de l'optimisation obtenus par effet de concentration de dopage de la région Pérovskite1 (PSC1). La concentration la mieux optimisée pour cette région et celle de 0.001×10^{16} qui nous a permis d'atteindre un rendement de 18.24%. La figure III.4 nous montre les caractéristiques de la cellule solaire photovoltaïque en fonction de la concentration de la région Pérovskite1(Absorbeur).

Tableau III. 4: Résultat de l'effet du dopage de la région Pérovskite1 de la PSC1

Concentration (/cm³)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm²)	EFF (%)
1×10^{16}	2.2198×10^{-10}	1.12714	68.409	22.198	17.1266
0.2×10^{16}	2.25807×10^{-10}	1.11935	71.7032	22.5807	18.1235
0.1×10^{16}	2.26172×10^{-10}	1.1179	71.9766	22.6172	18.1984
0.05×10^{16}	2.26348×10^{-10}	1.11706	72.0807	22.6348	18.2252
0.5×10^{16}	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
0.07×10^{16}	2.26278×10^{-10}	1.11741	72.0421	22.6278	18.2155
0.01×10^{16}	2.26485×10^{-10}	1.11632	72.1442	22.6485	18.2402
1×10^{15}	2.26172×10^{-10}	1.1179	71.9766	22.6172	18.1984
0.008×10^{16}	2.26492×10^{-10}	1.11628	72.1469	22.6492	18.2408
0.004×10^{16}	2.26505×10^{-10}	1.11621	72.1517	22.6505	18.2419
0.001×10^{16}	2.26515×10^{-10}	1.11615	72.1555	22.6515	18.2427
1.5×10^{16}	2.1852×10^{-10}	1.12949	66.6541	21.852	16.4513

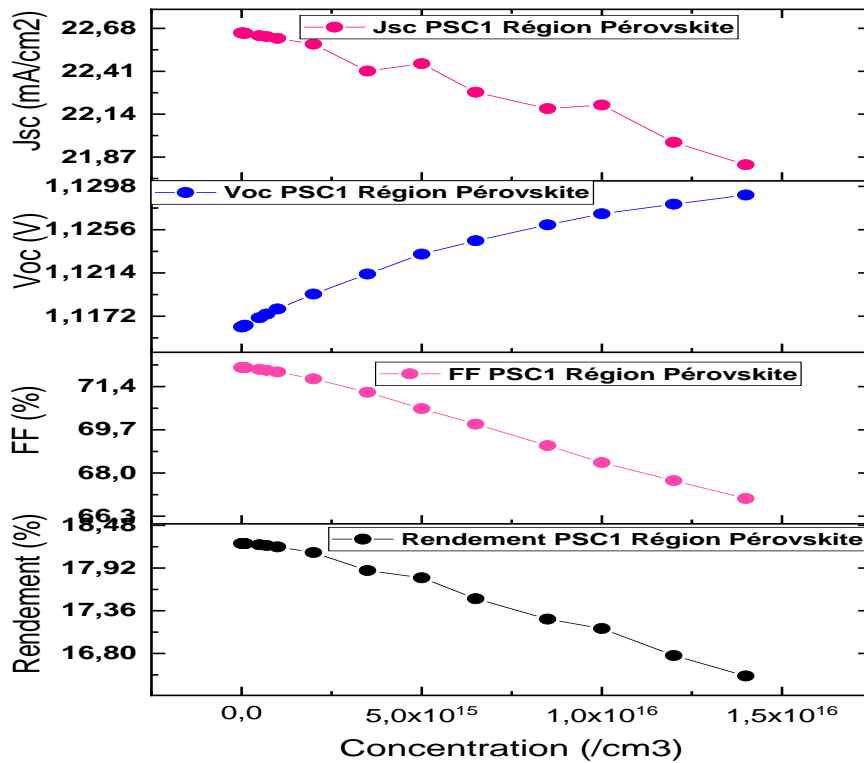


Figure III. 4: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Pérovskite I (Absorbeur) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la PSC1

III.4.2.1. Analyse et interprétation

D'après les graphes de la figure III.4, on observe que lorsque la concentration de porteurs de charge dans la couche absorbeur de pérovskite 1 augmente de 1×10^{16} à $1 \times 10^{19} / \text{cm}^3$:

- Le rendement (η) et le facteur de forme (FF) diminuent de façon quasi-linéaire, passant respectivement de 18,48% à 16,80% et de 71,4% à 66,63%. Cette dégradation indique des effets néfastes d'une trop forte concentration sur la création des paires électron-trou et le remplissage de la courbe J-V[24].

- La tension en circuit ouvert (V_{oc}) montre cependant une légère augmentation de 1,1172 à 1,1298 V, suggérant une réduction des recombinaisons facilitée par un meilleur transport des électrons.

- La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) décroît, indiquant une collecte moins efficace de charges photogénérées à haute concentration de porteurs dans l'absorbeur.

III.4.3. Effet de la concentration de dopage de la région Spiro (HTL) de la PSC1

Le tableau III.5 présente les résultats de l'optimisation obtenus par effet de concentration de dopage de la région Spiro (HTL) à partir de la simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1). La concentration la mieux optimisée pour cette région et celle 30×10^{18} qui nous a permis d'atteindre un rendement de 19.00 %. La figure III.5 nous montre les courbes des paramètres de sortie de la cellule PSC1 en fonction de la concentration de dopage de la région Spiro (HTL).

Tableau III. 5: Résultats de l'effet de la concentration du dopage de la région Spiro (HTL) de la PSC1

Concentration ($/\text{cm}^3$)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm^2)	EFF (%)
2.5×10^{18}	2.24685×10^{-10}	1.12308	71.1835	22.4685	17.9624
2.7×10^{18}	2.24719×10^{-10}	1.12303	71.3741	22.4719	18.0124
2.9×10^{18}	2.2475×10^{-10}	1.12297	71.5574	22.475	18.0602
2×10^{18}	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
3.5×10^{18}	2.24825×10^{-10}	1.1228	72.013	22.4825	18.1785
4×10^{18}	2.24876×10^{-10}	1.12267	72.2859	22.4876	18.2494
6×10^{18}	2.25021×10^{-10}	1.12214	73.0298	22.5021	18.4404
9×10^{18}	2.25165×10^{-10}	1.12132	73.5324	22.5165	18.5656
15×10^{18}	2.25371×10^{-10}	1.11938	73.906	22.5371	18.6447
30×10^{18}	2.25804×10^{-10}	1.10792	75.9667	22.5804	19.0048
20×10^{18}	2.25514×10^{-10}	1.11687	74.4039	22.5514	18.7401
25×10^{18}	2.25654×10^{-10}	1.1125	75.145	22.5654	18.8644
27×10^{18}	2.25713×10^{-10}	1.11032	75.4919	22.5713	18.9193

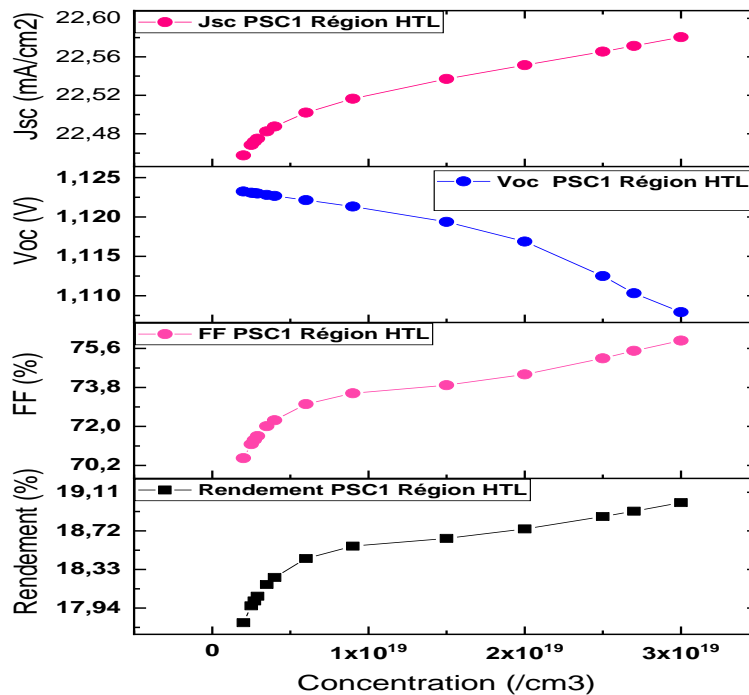


Figure III. 5: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Spiro (HTL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1)

III.4.3.1. Analyse et interprétation

D'après les graphes de la figure III.5, on observe que lorsque la concentration de porteurs de charge dans la couche de transport des trous Spiro (HTL) augmente :

- Le rendement (η) et le facteur de forme (FF) augmentent de façon quasi-linéaire puis se stabilisent à de fortes concentrations. Ceci indique qu'une forte concentration dans la HTL facilite le transport et la collection des trous, améliorant les performances globales de la cellule.
- La tension en circuit ouvert (V_{oc}) montre une légère tendance décroissante, suggérant qu'une haute concentration dans la HTL ne permet pas de réduire suffisamment les recombinaisons.

- La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) augmente, signe d'une meilleure extraction des trous et d'une collecte plus efficace du courant photogénérés grâce à la forte concentration dans la HTL.

III.4.4. Effet de l'épaisseur sur la région TiO_2 (ETL) de la PSC1

Le tableau III.6 présente les résultats de l'optimisation obtenus par la variation d'épaisseur de la région TiO_2 (ETL). L'épaisseur la mieux optimisée pour cette région et celle 0.015 μm qui nous a permis d'atteindre un rendement de 17.88 %. La figure III.6 nous montre les courbes des paramètres de sortie en fonction de l'épaisseur de la région TiO_2 (ETL).

Tableau III. 6: Résultat de l'effet de l'épaisseur sur la région TiO_2 (ETL) de la PSC1

Epaisseur (μm)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm^2)	EFF (%)
0.030	2.245×10^{-10}	1.12276	70.3643	22.45	17.736
0.040	2.24359×10^{-10}	1.12178	70.114	22.4359	17.6464
0.050	2.24269×10^{-10}	1.12087	69.8813	22.4269	17.5665
0.025	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
0.020	2.24687×10^{-10}	1.12378	70.6546	22.4687	17.8402
0.0185	2.24723×10^{-10}	1.12394	70.691	22.4723	17.8548
0.0175	2.24747×10^{-10}	1.12405	70.7158	22.4747	17.8647
0.0170	2.24759×10^{-10}	1.12411	70.7276	22.4759	17.8696
0.0165	2.24771×10^{-10}	1.12416	70.7401	22.4771	17.8745
0.0160	2.24783×10^{-10}	1.12422	70.7523	22.4783	17.8795
0.0155	2.24796×10^{-10}	1.12427	70.7649	22.4796	17.8845
0.015	2.24808×10^{-10}	1.12433	70.7767	22.4808	17.8894

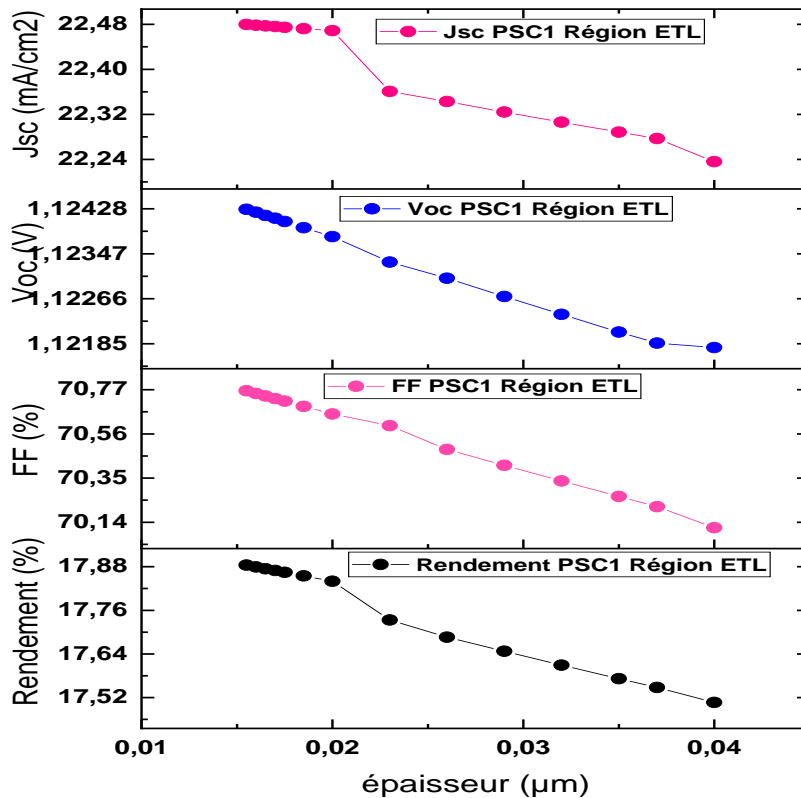


Figure III. 6: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région TiO_2 (ETL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 1 (PSC1)

III.4.4.1. Analyse et interprétation

D'après les graphes de la figure III.6, on observe que lorsque l'épaisseur de la couche de transport d'électrons TiO_2 (ETL) augmente dans la cellule solaire à pérovskite 1 (PSC1), cela affecte négativement sur les caractéristiques de performance :

- Le rendement (η) et la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) diminuent, suivant la même tendance décroissante avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche ETL.
- Le facteur de forme (FF) décroît progressivement, probablement en raison d'une augmentation des résistances séries et/ou une diminution des résistances parallèles induites par le changement d'épaisseur [25].

- La tension en circuit ouvert (Voc) baisse également, ce qui pourrait être lié à des modifications des propriétés électroniques et de la structure de bandes dans la couche ETL plus épaisse.

III.4.5. Effet de l'épaisseur de la région Pérovskite1 de la PSC1

Le tableau III.7 présente les résultats de l'optimisation obtenus par effet de variation d'épaisseur de la région Pérovskite1 (Absorbeur) (PSC1). L'épaisseur la mieux optimisée pour cette région et celle de 0.3 μm qui nous a permis d'atteindre un rendement de 17.86 %. La figure III.7 montre les courbes des paramètres de sortie en fonction de l'épaisseur de la région Pérovskite1 (Absorbeur).

Tableau III. 7: Résultat de l'effet de l'épaisseur de la région Pérovskite1 de la PSC1

Épaisseur (μm)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm^2)	EFF (%)
0.400	2.25611×10^{-10}	1.12112	69.8427	22.5611	17.6658
0.370	2.24884×10^{-10}	1.12271	70.3685	22.4884	17.7666
0.360	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
0.3500	2.24232×10^{-10}	1.12374	70.71	22.4232	17.8174
0.360	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
0.300	2.21882×10^{-10}	1.12616	71.4818	22.1882	17.8615
0.275	2.20184×10^{-10}	1.12721	71.8455	22.0184	17.8316
0.260	2.18951×10^{-10}	1.12779	72.0485	21.8951	17.791
0.255	2.18499×10^{-10}	1.12798	72.1132	21.8499	17.7732
0.250	2.18025×10^{-10}	1.12815	72.1778	21.8025	17.7532
0.240	2.17004×10^{-10}	1.12849	72.302	21.7004	17.7058
0.230	2.1588×10^{-10}	1.1288	72.4369	21.588	17.6518

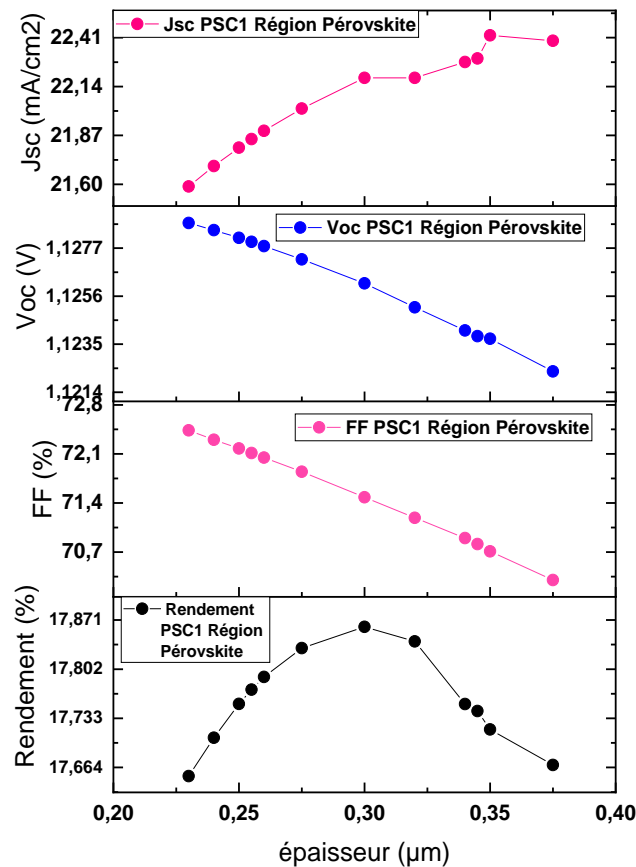


Figure III. 7: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région pérovskite1 (Absorbeur) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite

III.4.5.1. Analyse et interprétation

D'après les graphes de la figure III.7, on observe que pour la cellule solaire à pérovskite 1 (PSC1), les performances sont affectées par la variation de l'épaisseur de la couche absorbeur en pérovskite :

- Le rendement (η) augmente jusqu'à une valeur d'épaisseur optimale, puis diminue au-delà, reflétant un compromis entre absorption de la lumière et la collecte des charges.
- Le facteur de forme (FF) et la tension en circuit ouvert (V_{oc}) montrent une tendance décroissante linéaire avec l'augmentation de l'épaisseur. Ceci suggère qu'une couche trop épaisse dégrade la qualité de la jonction et la séparation des charges[26].

- La densité de courant de court-circuit (J_{sc}) augmente avec l'épaisseur, en raison d'une meilleure absorption de la lumière, mais atteint un plateau en raison des pertes par recombinaison à fortes épaisseurs.

III.4.6. Effet de l'épaisseur de la région Spiro (HTL) de la PSC1

Le tableau III.8 présente les résultats de l'optimisation obtenus par variation d'épaisseur de la région Spiro (HTL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1). L'épaisseur la mieux optimisée pour cette région et celle de 0.016 μm qui a permis d'atteindre un rendement de 17.83 %. La figure III.8 montre les graphes du rendement (η), de facteur de forme (FF), de tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) par variation de l'épaisseur dans la région Spiro (HTL).

Tableau III. 8: Résultat de l'effet de l'épaisseur sur la région Spiro (HTL) de la PSC1

Épaisseur (μm)	Isc (A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc (mA/cm^2)	EFF (%)
0.03	2.24552×10^{-10}	1.12323	70.4189	22.4552	17.7613
0.04	2.24503×10^{-10}	1.12322	70.1728	22.4503	17.6952
0.05	2.24453×10^{-10}	1.12321	69.9042	22.445	17.6234
0.06	2.24382×10^{-10}	1.12315	69.6694	22.4382	17.5513
0.025	2.24576×10^{-10}	1.12323	70.5346	22.4576	17.7924
0.02	2.24617×10^{-10}	1.12329	70.6088	22.4617	17.8153
0.0275	2.24564×10^{-10}	1.12323	70.4774	22.4564	17.777
0.0185	2.24625×10^{-10}	1.1233	70.6425	22.4579	17.8246
0.0175	2.2463×10^{-10}	1.1233	70.6643	22.463	17.8305
0.0170	2.24632×10^{-10}	1.12331	70.6741	22.4632	17.8333
0.0165	2.24635×10^{-10}	1.12331	70.6843	22.4635	17.8361
0.0160	2.24637×10^{-10}	1.12331	70.6936	22.4637	17.8386

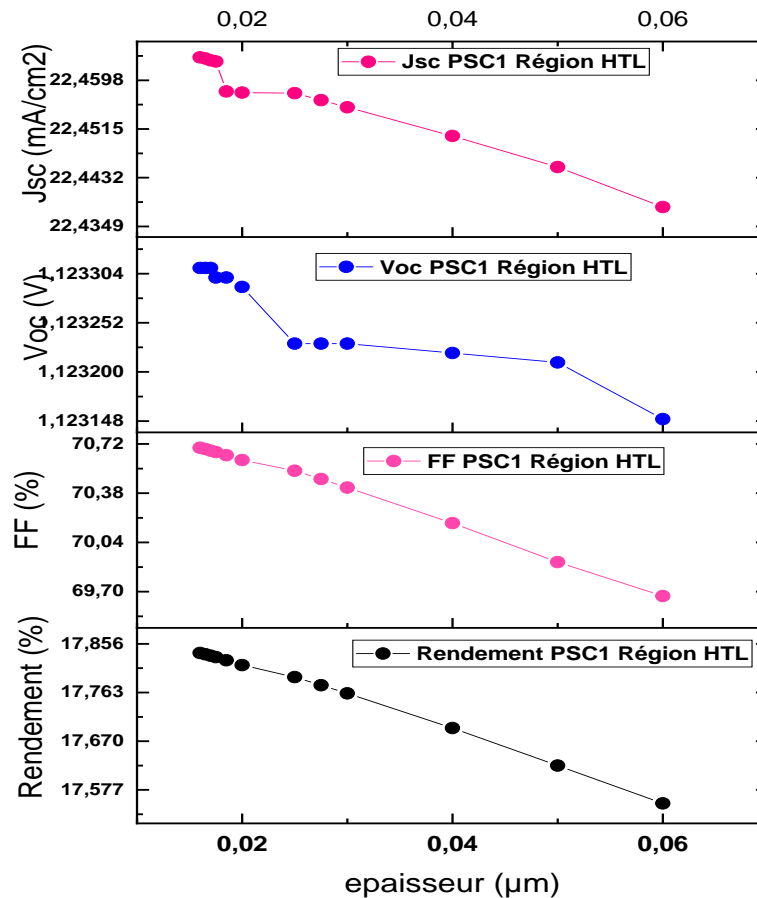


Figure III. 8: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région Spiro (HTL) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1)

III.4.6.1. Analyse et interprétation

D'après les résultats du tableau III.8 et les graphes de la figure III.8 obtenus lors de l'optimisation de l'épaisseur de la couche de transport des trous Spiro (HTL) pour la cellule solaire à pérovskite 1 (PSC1), on constate que:

- La tension en circuit ouvert (V_{oc}) varie légèrement de 1,12087 à 1,12427 V, indiquant une certaine sensibilité à l'épaisseur de la couche HTL.
- Le courant de court-circuit (J_{sc}) varie aussi modérément de 22,45 à 22,4637 mA/cm² en fonction de l'épaisseur.
- Le facteur de forme (FF) et le rendement (η) subissent également des changements notables liés à la variation d'épaisseur de la couche HTL.

Ces résultats mettent en évidence que l'épaisseur de la couche Spiro HTL a un impact significatif sur les performances globales de la cellule PSC1. Une épaisseur trop élevée peut améliorer la conductivité mais présente des risques, tandis qu'une épaisseur trop faible peut rendre la couche plus vulnérable aux dommages mécaniques[27].

III.5. Récapitulation des résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite1 (PSC1)

Le résultat de l'optimisation de la structure (Figure III.1) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 1 que nous avons obtenu par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS, nous a permis d'obtenir les caractéristiques telles que présentées dans le tableau III.9 ainsi que la caractéristique densité-tension (J-V) (Figure III.9). Pour obtenir ce résultat, nous l'avons simulé en utilisant les valeurs optimales pour les concentrations et les épaisseurs de chaque couche présentée dans les étapes précédentes. En comparant ce résultat à celui du calibrage et de l'expérimentation, nous constatons que les caractéristiques photovoltaïques de sortie ainsi que la caractéristique densité-tension (J-V) de la cellule solaire photovoltaïque PSC1 sont beaucoup plus améliorées en optimisant les différentes couches par action sur les concentrations et les épaisseurs.

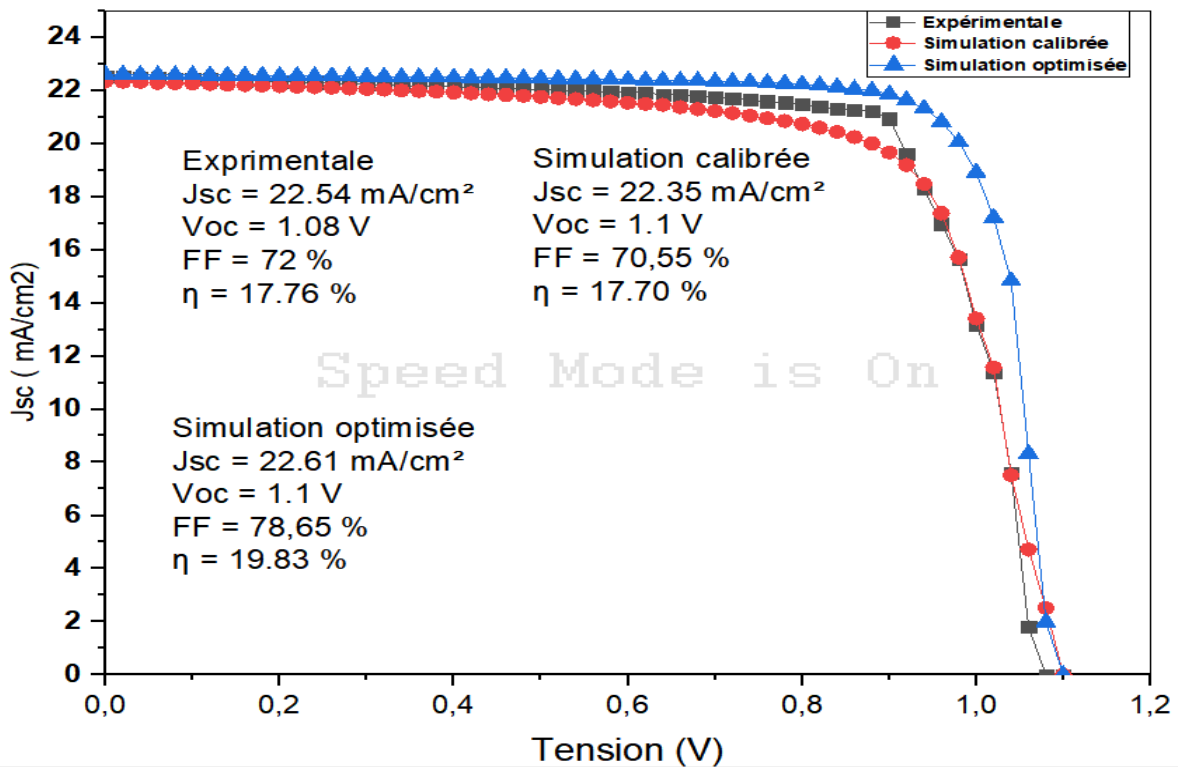


Figure III. 9: Courbes de densité-tension (J_{sc} - V) du calibrage, d'optimisation et d'expérimentation [21] de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 simulée

Tableau III. 9: Récapitulation des caractéristiques PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite1 optimisée

	J_{sc} (mA.cm ⁻²)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
Simulation optimisée	22.61	1.1	78.65	19.83

Conclusion

Cette étude a permis d'approfondir notre compréhension du fonctionnement des cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite de type 1 (PSC1) et d'optimiser leurs performances grâce à la simulation numérique réalisée avec le logiciel SILVACO-ATLAS. Les principes de cette méthode de modélisation avancée, basée sur la résolution des équations fondamentales des semi-conducteurs, ont d'abord été présentés. Ensuite, les résultats du

calibrage et de l'optimisation détaillée de la cellule PSC1 ont été exposés. L'optimisation des concentrations de porteurs dans les différentes couches (ETL, pérovskite, HTL) s'est révélée cruciale pour maximiser les paramètres clés tels que le rendement, le facteur de forme, la tension de circuit ouvert et la densité de courant de court-circuit. Des analyses approfondies ont permis d'élucider les mécanismes physiques sous-jacents. L'optimisation des épaisseurs des couches a également été étudiée, mettant en évidence un compromis entre l'absorption de la lumière et la collecte des charges. En combinant judicieusement ces optimisations, un rendement de 19,83% a pu être atteint pour la cellule PSC1, démontrant ainsi la pertinence de la simulation numérique pour la conception et l'amélioration des performances des cellules solaires à pérovskite.

Partie 3 : Résultat du calibrage et de l'optimisation de la PSC2 simulée

Introduction

Le développement des cellules solaire photovoltaïques à base de pérovskite notamment $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}_{3-x}\text{Cl}_x$, repose sur une optimisation méticuleuse des paramètres de fabrication pour maximiser leur performance. Dans cette optique, cette partie de ce chapitre se concentre sur deux aspects cruciaux :

Premièrement, nous présenterons en détail les résultats du calibrage de la cellule solaire photovoltaïque à base de cette pérovskite. Le calibrage fait référence au processus d'ajustement fin des paramètres de fabrication, tels que les N_c et N_v , les affinités électroniques, les mobilités électroniques des électrons et les trous, afin d'obtenir des films de pérovskite avec des propriétés optoélectroniques optimales se concordant avec celles de l'expérimentation.

Deuxièmement, nous présenterons également en détail les résultats de l'optimisation de la cellule solaire par l'ajustement des épaisseurs et des concentrations des différentes couches constitutives. Les cellules solaires à base de pérovskite sont généralement constituées d'une structure multicouche comprenant des couches de transport de trous, de transport d'électrons, une couche active de pérovskite et des électrodes. L'optimisation des épaisseurs et des concentrations de ces couches est cruciale pour maximiser l'absorption de la lumière, minimiser les recombinaisons de charges et faciliter le transport efficace des charges.

En combinant ces deux aspects, nous visons à obtenir des cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite performantes et stables, avec une efficacité de conversion d'énergie élevée et une durabilité améliorée.

III.6. Résultats du calibrage et de l'optimisation de la PSC2

III.6.1. Résultat du calibrage

Le calibrage par simulation numérique de la cellule solaire à base de la pérovskite 2 (PSC2), dont la structure est présentée à la figure III.10, nous a permis d'obtenir les caractéristiques photovoltaïques de cette dernière, proches des caractéristiques obtenues expérimentalement. Pour obtenir ces résultats de calibrage, nous l'avons simulée en utilisant les propriétés présentées dans le tableau III.10 à l'aide des outils du logiciel SILVACO ATLAS. Ce logiciel de simulation numérique est largement utilisé pour modéliser les dispositifs semi-conducteurs, y compris les cellules solaires [28].

Les paramètres clés du calibrage sont la mobilité des porteurs de charge, les défauts présents dans les matériaux, les recombinaisons électroniques et les propriétés optiques [29]. Un ajustement minutieux de ces paramètres est nécessaire pour reproduire fidèlement les performances expérimentales de la cellule.

Dans les sections suivantes, nous présenterons en détail les résultats issus de la simulation numérique de la cellule PSC2, y compris les courbes caractéristiques courant-tension(J-V), l'efficacité de conversion, le facteur de forme et d'autres métriques photovoltaïques pertinentes. Nous analyserons également l'influence des différents paramètres de simulation sur les performances de la cellule.

Tableau III. 10: Propriétés des matériaux utilisés pour le calibrage par simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2) [39]

Symboles et unités	TiO₂(ETL₂)	CH₃NH₃Pb_{1-x}Cl_x	Spiro_OMeTAD (HTL₂)
d (nm)	50	450	330
Dopage(/cm ³)	8×10 ¹⁹	7.5×10 ¹⁷	7×10 ¹⁹
E _g (eV)	3.20	1.55	3.0
κ (eV)	4.0	3.9	3.0

ϵ_r	9	6.5	2.45
N_c (cm ⁻³)	2.2×10^{18}	4.42×10^{17}	2.2×10^{18}
N_v (cm ⁻³)	1.8×10^{19}	8.47×10^{18}	1.8×10^{19}
N_d (cm ⁻³)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
N_a (cm ⁻³)	1×10^7	1×10^7	1×10^7
Π_n (cm ² /V.S)	20	1.62	2×10^{-4}
Π_p (cm ² /V.S)	10	1.62	2×10^{-4}
δ_e (cm ²)	1×10^{-15}	1×10^{-15}	1×10^{-15}
δ_h (cm ²)	1×10^{-14}	1×10^{-14}	1×10^{-14}
Coefficient radiatif	-	2×10^{-10}	-
Coefficient Auger	-	9.9×10^{-29}	-

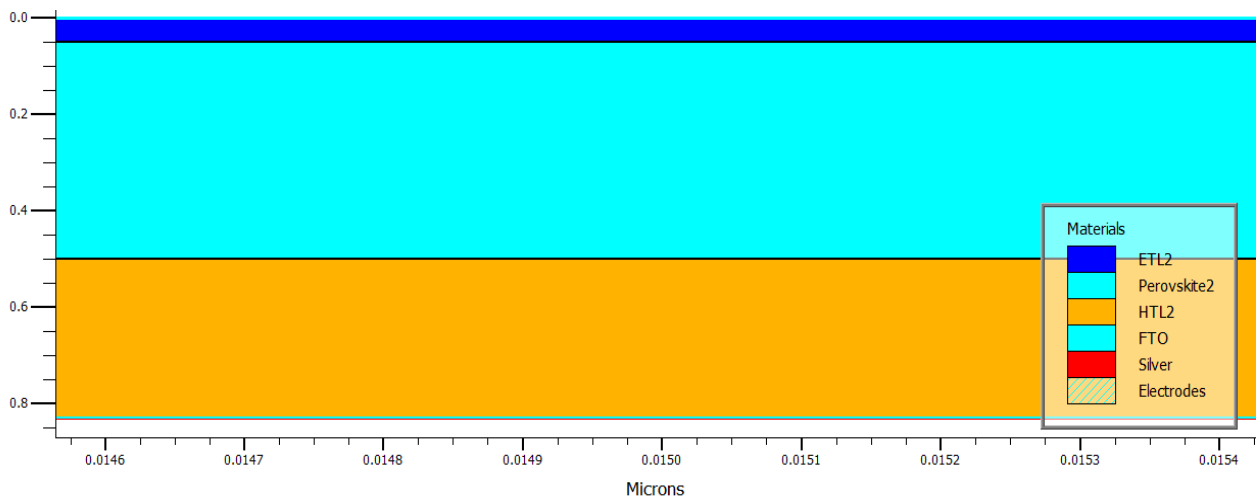


Figure III. 10: Structure de la cellule solaire à base de la Pérovskite2(PSC2) simulée sous SILVACO-ATLAS

III.6.1.1. Courbes de densité-tension (Jsc-V)

Les courbes de la densité de courant-tension (J-V) (Figure III.11) ont été obtenues par simulation numérique et expérimentation de la structure de la cellule solaire calibrée à base de la pérovskite 2 sous le spectre standard AM1.5G. Ces courbes présentent les caractéristiques photovoltaïques issues de l'expérimentation et de la simulation numérique, résumées dans le Tableau III.11. Les courbes J-V sont essentielles pour évaluer les performances d'une cellule solaire, car elles fournissent des informations clés telles que la densité de courant de court-

circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement de conversion (η). La forme des courbes révèle également les mécanismes de recombinaison et de transport des charges dans la cellule[29-30].

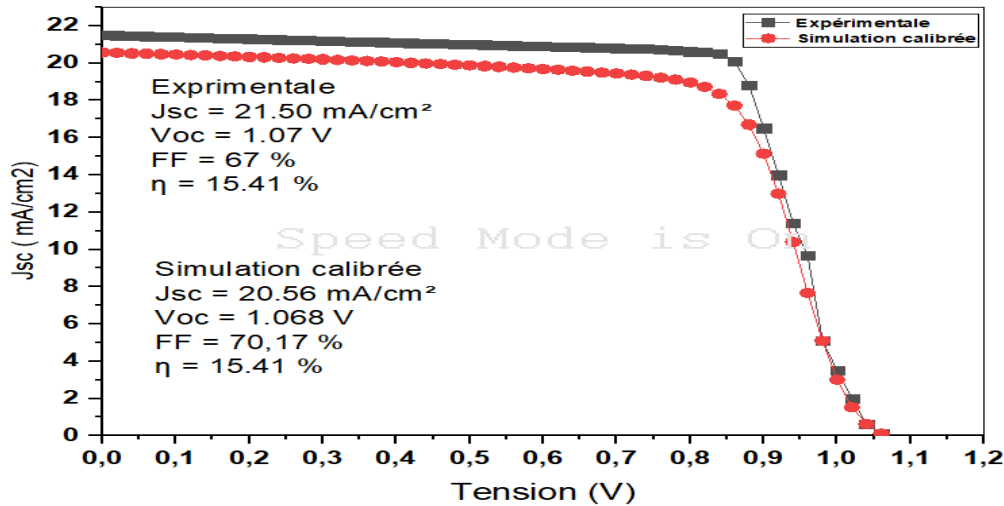


Figure III. 11: Courbes de densité-tension (J_{sc} - V) du calibrage et d'expérimentation [38] de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée sous SILVACO ATLAS

Tableau III. 11: Caractéristique PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée

	J_{sc} (mA.cm ⁻²)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
Expérimental [38]	21.50	1.07	67	15.41
Simulation	20.56	1.068	70.17	15.41

III.6.1.2. Comparaison aux données expérimentales

En comparant les résultats expérimentaux aux résultats du calibrage par simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) obtenus sous SILVACO ATLAS, nous observons une légère différence. Les valeurs obtenues pour la densité de courant de court-circuit (J_{sc}) et la tension en circuit ouvert (V_{oc}) sont légèrement inférieures dans la simulation par rapport aux valeurs expérimentales. En revanche, le facteur de forme (FF) est un peu plus élevé dans la simulation que celui obtenu expérimentalement. Quant au

rendement de conversion (η), il est identique à celui obtenu expérimentalement. Cette légère différence entre les résultats de simulation et les données expérimentales valide la véracité des résultats obtenus par simulation numérique de la structure de la cellule solaire calibrée sous SILVACO ATLAS. Ces résultats ouvrent la voie pour son optimisation.

Dans la section suivante, nous présenterons les résultats de l'optimisation de cette cellule solaire en agissant sur les paramètres des concentrations et des épaisseurs des différentes couches. L'optimisation numérique permet d'identifier les leviers d'amélioration des performances avant de procéder à des étapes expérimentales coûteuses[31].

III.6.2. Résultat de l'optimisation

Pour maximiser l'absorption de la lumière, ainsi qu'améliorer le processus de création des paires électrons trous, et la collecte des porteurs de charge au sein la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2(PSC2), nous avons agi sur les différentes couches par action sur les concentrations et les épaisseurs. Le principe étant basé sur la variation d'un seul de ces paramètres tout en gardant les autres paramètres invariants. Dans les paragraphes qui suivent, nous présenterons en détails les résultats de l'optimisation de ces différentes couches.

III.6.2.1. L'impact de la concentration du dopage de la région TiO₂ (ETL₂) sur les performances de la cellule solaire

Les résultats issus de simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque à base de la Pérovskite2(PSC2) par variation de la concentration du dopage de la région TiO₂ (ETL₂) sont présentés au tableau III.12. Ce tableau offre un aperçu sur les caractéristiques de cette dernière par variation de la concentration du dopage de la région TiO₂ (ETL₂). La concentration la mieux optimisée pour cette région est celle de $2 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ qui nous a permis d'atteindre un rendement de 16.18%. La figure III.12 présente les graphes du rendement (η), de facteur de forme (FF), de tension en circuit ouvert (Voc) et de la densité du courant de court-circuit (Jsc) en fonction de la concentration, montrant ainsi que ces caractéristiques essentielles de la cellule solaire photovoltaïque peuvent être influencées par variation de la concentration de dopage de la région TiO₂ (ETL₂). Ces résultats soulignent l'importance de la concentration de TiO₂ (ETL₂) en tant que paramètre essentiel pour optimiser l'efficacité de conversion. L'oxyde de titane (TiO₂) est couramment utilisé comme couche de transport des électrons (ETL) dans les cellules solaires à base de pérovskite. Son dopage adéquat permet d'améliorer la conductivité électrique et de faciliter l'extraction des électrons photogénérés vers l'électrode, réduisant ainsi les pertes par recombinaison [32]. La

Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVAO-ATLAS

concentration optimale de dopage de TiO₂ (ETL₂) résulte d'un équilibre entre l'augmentation de la conductivité électrique et la minimisation des recombinaisons non radiatives induites par les défauts introduits par le dopage. Une concentration trop élevée ou trop faible peut dégrader les performances de la cellule[32-34].. Les résultats obtenus ici mettent en évidence l'importance de l'optimisation de ce paramètre pour maximiser l'efficacité de conversion de la cellule PSC2.

Tableau III. 12: Résultats de simulation obtenus de la cellule solaire PSC2 par variation de la concentration du dopage de la région TiO₂(ETL₂)

Concentration (/cm³)	Isc(A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc(mA/cm²)	EFF (%)
0.80×10 ¹⁸	2.05671×10 ⁻⁰¹⁰	1.06807	70.1749	20.5671	15.4154
0.85×10 ¹⁸	2.05392×10 ⁻⁰¹⁰	1.06961	70.0648	20.5392	15.3925
1.00 ×10 ¹⁸	2.06071×10 ⁻⁰¹⁰	1.07332	70.4069	20.6071	15.5726
1.50×10 ¹⁸	2.07467×10 ⁻⁰¹⁰	1.08114	71.1509	20.7467	15.9592
2.00×10¹⁸	2.08252×10⁻⁰¹⁰	1.08684	71.4935	20.8252	16.1816
0.50×10 ¹⁸	2.02372×10 ⁻⁰¹⁰	1.05776	68.4959	20.2372	14.6623
0.60×10 ¹⁸	2.03592×10 ⁻⁰¹⁰	1.06197	69.1374	20.3592	14.9481
0.75×10 ¹⁸	2.04807×10 ⁻⁰¹⁰	1.06717	69.7567	20.4807	15.2463
0.80×10 ¹⁸	2.05116×10 ⁻⁰¹⁰	1.06846	69.9193	20.5116	15.3234
0.90×10 ¹⁸	2.0564×10 ⁻⁰¹⁰	1.07088	70.1816	20.564	15.4551
0.95×10 ¹⁸	2.05865×10 ⁻⁰¹⁰	1.07216	70.2971	20.5865	15.516
0.975×10 ¹⁸	2.05971×10 ⁻⁰¹⁰	1.07275	70.3531	20.5971	15.5449

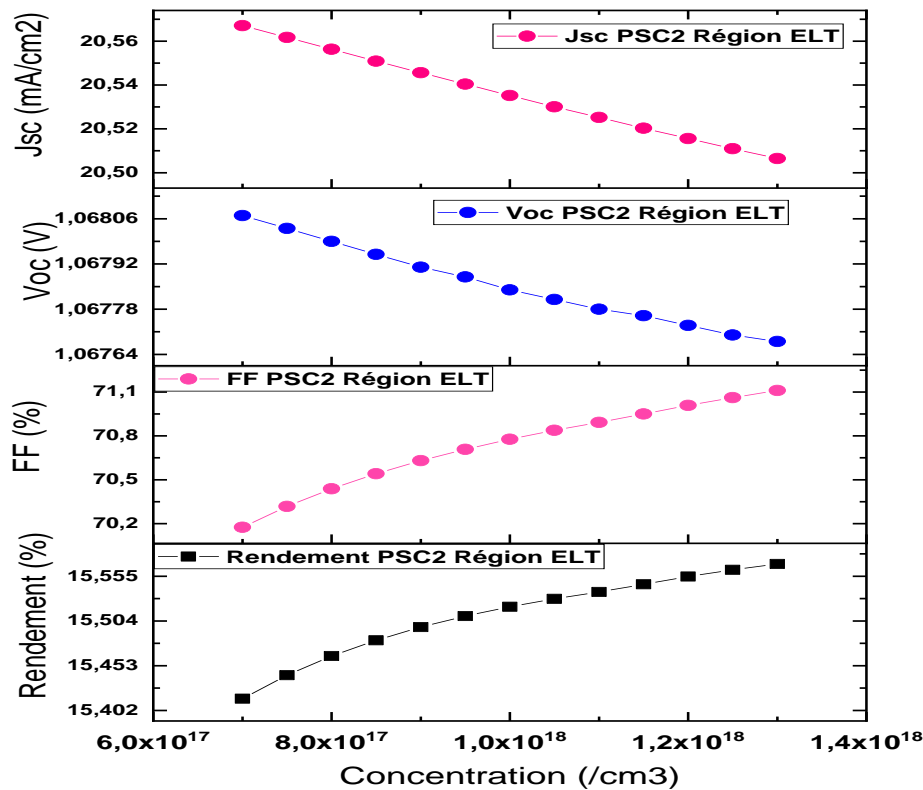


Figure III. 12: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région TiO_2 (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2

III.6.2.1.1. Analyse et interprétation

Les graphes présentés à la figure III.12 montrent que le rendement (η) et le facteur de forme (FF) augmentent d'une manière quasi-linéaire avec l'augmentation de la concentration (/cm³) de dopage de la couche TiO_2 (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). Quant à la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et la densité du courant de court-circuit (J_{sc}), elles montrent une tendance décroissante avec l'augmentation de la concentration (/cm³) de dopage de la couche TiO_2 (ETL2).

Nous interprétons que l'augmentation des concentrations de dopage de la couche TiO_2 (ETL2) a un effet positif sur le rendement (η) et le facteur de forme (FF) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). En d'autres termes, une concentration de dopage plus élevée peut améliorer l'efficacité globale de la cellule solaire photovoltaïque à

base de la pérovskite 2 (PSC2) en convertissant davantage de la lumière solaire en courant électrique. Cet effet bénéfique peut être attribué à une meilleure [35] conductivité électrique de la couche TiO₂, facilitant ainsi le transport et la collecte des électrons photogénérés vers l'électrode. Cependant, cette amélioration est contrebalancée par une diminution de la tension en circuit ouvert (Voc) et de la densité de courant de court-circuit (Jsc), ce qui suggère qu'une concentration de dopage excessive peut également entraîner une perte d'efficacité dans d'autres aspects du fonctionnement de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). La diminution de Voc peut être attribuée à l'augmentation des recombinaisons non radiatives induites par les défauts introduits par le dopage excessif de TiO₂[35]. Ces défauts agissent comme des pièges pour les porteurs de charge, réduisant ainsi la tension de circuit ouvert. Quant à la diminution de Jsc, elle peut être liée à une absorption optique réduite ou à une collecte inefficace des porteurs de charge photogénérés en raison d'une épaisseur inappropriée de la couche TiO₂ [36].

Ces résultats soulignent l'importance d'un équilibre optimal entre la concentration de dopage de la couche TiO₂ (ETL2) et les autres paramètres de la cellule solaire. Un dopage modéré peut améliorer le rendement en augmentant la conductivité électrique, mais un dopage excessif peut introduire des recombinaisons non radiatives et d'autres pertes d'efficacité. L'optimisation de ce paramètre, en conjonction avec d'autres facteurs tels que les épaisseurs des couches, est cruciale pour maximiser les performances de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2).

III.6.2.2. L'effet de la concentration du dopage de la région Pérovskite2

Les résultats d'optimisation par variation de la concentration de dopage de la région pérovskite 2 sont présentés dans le tableau III.13. La concentration la mieux optimisée pour la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 est celle de 2×10^{17} (/cm³), qui nous a permis d'atteindre un rendement de 15,90 %. Les graphes du rendement (η), du facteur de forme (FF), de la tension en circuit ouvert (Voc) et de la densité du courant de court-circuit (Jsc) sont présentés à la figure III.13, illustrant les tendances de ces paramètres par variation de la concentration de dopage de la région pérovskite 2.

La pérovskite est le matériau clé dans les cellules solaires à base de pérovskite, où elle joue le rôle de couche absorbante de la lumière et de génération des paires électron-trou [19-37]. Le dopage de cette couche peut influencer de manière significative les performances de la cellule solaire en modifiant les propriétés optoélectroniques de la pérovskite. Le dopage approprié de

Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVAO-ATLAS

la couche de pérovskite peut améliorer la conductivité électrique, facilitant ainsi le transport des porteurs de charge photogénérés vers les électrodes. Cependant, un dopage excessif peut introduire des défauts et des centres de recombinaison non radiative, réduisant ainsi l'efficacité de la cellule solaire. Les résultats obtenus montrent qu'une concentration de dopage de 2×10^{17} (/cm³) dans la région pérovskite 2 permet d'optimiser le rendement de la cellule solaire. Cette concentration semble être un compromis optimal entre l'amélioration de la conductivité électrique et la minimisation des recombinaisons non radiatives induites par les défauts.

Tableau III. 13: Résultat de l'effet du dopage sur la région Pérovskite2 de la PSC2

Concentration (/cm ³)	Isc(A)	Voc(V)	FF(%)	Jsc(mA/cm ²)	EFF(%)
0.70×10^{16}	2.05988×10^{-10}	1.06782	69.8879	20.5988	15.3724
0.65×10^{16}	2.06835×10^{-10}	1.06711	69.8528	20.6835	15.4176
0.75×10^{16}	2.05671×10^{-10}	1.06807	70.1749	20.5671	15.4154
0.60×10^{16}	2.07644×10^{-10}	1.06635	69.8185	20.7644	15.4593
0.55×10^{16}	2.08395×10^{-10}	1.06552	69.7994	20.8395	15.4989
0.50×10^{16}	2.09068×10^{-10}	1.06462	69.8501	20.9068	15.5471
0.45×10^{16}	2.09637×10^{-10}	1.06364	69.9817	20.9637	15.6044
0.40×10^{16}	2.10082×10^{-10}	1.06259	70.2026	21.0082	15.6714
0.35×10^{16}	2.10393×10^{-10}	1.06144	70.5066	21.0393	15.7455
0.30×10^{16}	2.10579×10^{-10}	1.06021	70.8432	21.0579	15.8163
0.25×10^{16}	2.10662×10^{-10}	1.05919	71.147	21.0662	15.8751
0.20×10^{16}	2.10669×10^{-10}	1.05816	71.3561	21.0669	15.9068

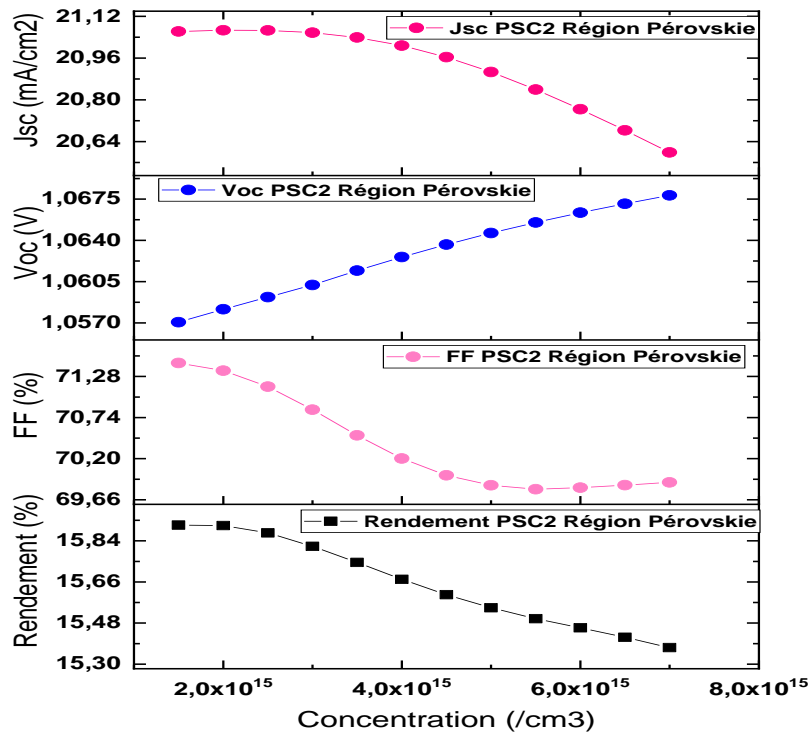


Figure III. 13: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration de la région Pérovskite2 de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2)

III.6.2.2.1. Analyse et interprétation

Les graphes présentés à la figure III.13 montrent que le rendement (η) diminue de manière quasi linéaire au fur et à mesure que la concentration de dopage de la région pérovskite 2 augmente de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). Le facteur de forme montre une tendance décroissante progressive et assez uniforme avant de devenir relativement constant lorsque la concentration de dopage de la couche pérovskite 2 de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) devient suffisamment importante. La tension en circuit ouvert (V_{oc}) croît de manière linéaire avec l'augmentation de la concentration. Quant à la densité du courant de court-circuit, au début elle était presque constante, mais avec l'augmentation de la concentration de dopage de la région pérovskite 2, elle montre une tendance décroissante de manière parabolique.

De cette analyse, nous interprétons qu'une concentration accrue de dopage de la région pérovskite 2 de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) favorise une

Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVAO-ATLAS

meilleure séparation des charges électriques, ce qui améliore la tension en circuit ouvert (V_{oc}). Cette augmentation est bénéfique du point de vue des performances de la cellule solaire à pérovskite 2, car elle permet d'exploiter plus efficacement la lumière solaire captée. Cependant, lorsqu'on dépasse une certaine valeur de concentration, les effets positifs s'inversent. Des concentrations excessives peuvent provoquer une recombinaison accrue des charges [34], ce qui réduit l'efficacité de la conversion énergétique, entraînant ainsi une baisse du rendement global et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}).

Le dopage de la couche de pérovskite est un processus complexe qui implique un équilibre délicat entre plusieurs facteurs[23-24]. D'un côté, une concentration modérée peut améliorer la conductivité électrique de la pérovskite, facilitant ainsi le transport de charges photogénérées vers les électrodes. Cela se traduit par une augmentation de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et du rendement de la cellule solaire. Cependant, un dopage excessif peut introduire des défauts et des centres de recombinaison non radiative, qui piègent les charges et favorisent leur recombinaison avant qu'elles ne puissent être collectées [24]. Cette recombinaison accrue des charges se manifeste par une diminution du facteur de forme (FF) et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}). En effet, le FF est un indicateur de la qualité de la jonction et des résistances parasites présentes dans la cellule solaire. Une diminution du FF suggère une augmentation des recombinaisons et des pertes résistives, ce qui réduit l'efficacité de la collecte des charges [23]. Quant à la diminution de J_{sc} , elle est directement liée à une réduction du nombre de charges collectées aux électrodes, résultant de la recombinaison accrue des porteurs de charge dans la couche de pérovskite dopée de manière excessive.

Ces résultats soulignent l'importance cruciale d'optimiser soigneusement la concentration de dopage dans la couche de pérovskite afin d'atteindre un équilibre optimal entre la conductivité électrique améliorée et la minimisation des recombinaisons non radiatives. Une concentration de dopage appropriée peut maximiser les performances de la cellule solaire en exploitant pleinement le potentiel de la pérovskite en tant que matériau absorbant de la lumière et générateur de charges.

III.6.2.3. L'impact du dopage de la région Spiro (HTL₂) sur les performances de la cellule solairePSC2

Les résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 par variation de la concentration de dopage de la région Spiro (HTL₂) sont présentés dans le tableau III.14. Pour cette couche, la valeur la mieux optimisée pour la concentration est celle de $1,25 \times 10^{18}$ (/cm³), qui nous a permis d'obtenir un rendement de 15,56 %. Les graphes du rendement (η), du facteur de forme (FF), de la tension en circuit ouvert (Voc) et de la densité du courant de court-circuit (Jsc) sont présentés à la figure III.14, illustrant les tendances de ces paramètres par variation de la concentration de dopage de la région Spiro (HTL₂).

La couche Spiro (HTL₂) est la couche de transport des trous dans la structure de la cellule solaire à base de pérovskite[19-25]. Son rôle est de faciliter l'extraction efficace des trous photogénérés dans la couche de pérovskite vers l'électrode positive (anode). Le dopage de cette couche peut influencer les propriétés de transport des trous et, par conséquent, les performances globales de la cellule solaire.

Le dopage approprié de la couche Spiro (HTL₂) peut augmenter sa conductivité électrique, améliorant ainsi le transport et la collecte des trous vers l'anode.

Les résultats obtenus montrent qu'une concentration de dopage de $1,25 \times 10^{18}$ (/cm³) dans la région Spiro (HTL₂) permet d'optimiser le rendement de la cellule solaire à base de pérovskite 2. Cette concentration semble être un compromis optimal entre l'amélioration de la conductivité électrique et la minimisation des recombinaisons non radiatives induites par les défauts. Ces résultats soulignent l'importance cruciale de l'optimisation du dopage dans la couche Spiro (HTL₂) pour maximiser les performances de la cellule solaire à base de pérovskite 2. Un équilibre judicieux entre la conductivité électrique améliorée et la minimisation des recombinaisons non radiatives est essentiel pour exploiter pleinement le potentiel de cette couche dans le transport et la collecte efficace des trous[24].

Tableau III. 14: Résultat de l'effet du dopage sur la région Spiro (HTL2) de la PSC2

Concentration (/cm ³)	Isc(A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc(mA/cm ²)	EFF (%)
0.7×10 ¹⁸	2.05671×10 ⁻¹⁰	1.06807	70.1749	20.5671	15.4154
0.75×10 ¹⁸	2.05617×10 ⁻¹⁰	1.06803	70.318	20.5617	15.4422
0.8×10 ¹⁸	2.05563×10 ⁻¹⁰	1.06799	70.4384	20.5563	15.464
0.85×10 ¹⁸	2.05509×10 ⁻¹⁰	1.06795	70.5416	20.5509	15.482
0.9×10 ¹⁸	2.05456×10 ⁻¹⁰	1.06791	70.6308	20.5456	15.497
0.95×10 ¹⁸	2.05404×10 ⁻¹⁰	1.06788	70.7081	20.5404	15.5096
1.0×10 ¹⁸	2.05352×10 ⁻¹⁰	1.06784	70.777	20.5352	15.5202
1.05×10 ¹⁸	2.05301×10 ⁻¹⁰	1.06781	70.8381	20.5301	15.5293
1.1×10 ¹⁸	2.05252×10 ⁻¹⁰	1.06778	70.8926	20.5252	15.5371
1.15×10 ¹⁸	2.05203×10 ⁻¹⁰	1.06776	70.9505	20.5203	15.5458
1.2×10 ¹⁸	2.05156×10 ⁻¹⁰	1.06773	71.009	20.5156	15.5546
1.25×10¹⁸	2.0511×10⁻¹⁰	1.0677	71.062	20.511	15.5623

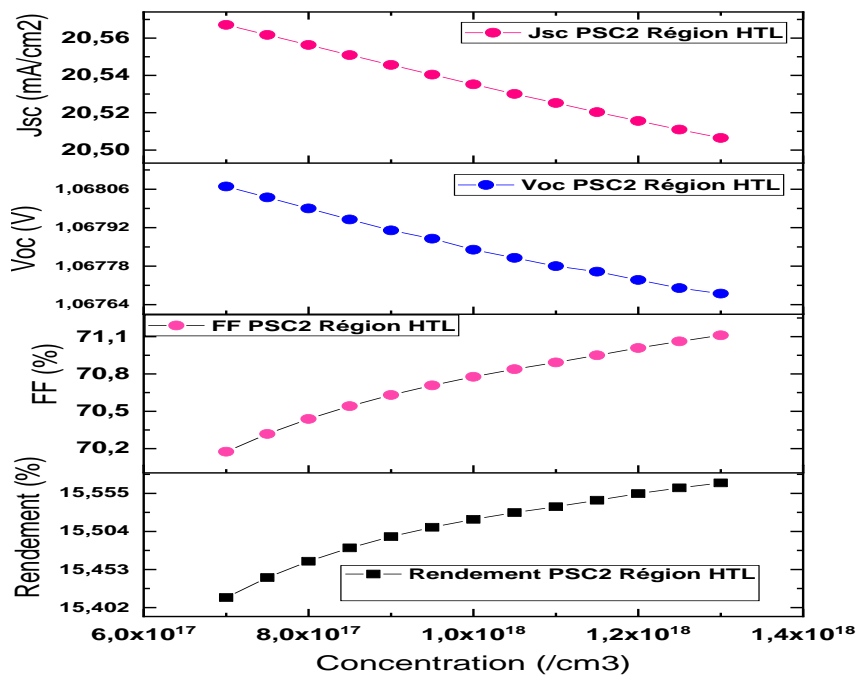


Figure III. 14: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de la concentration dans la région (HTL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2).

III.6.2.3.1. Analyse et interprétation

Les graphes présentés à la figure III.14 montrent que le rendement (η) et le facteur de forme (FF) augmentent d'une manière quasi-linéaire avec l'augmentation de la concentration de dopage (/cm³) de la couche Spiro (HTL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). Quant à la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et la densité de courant de court-circuit (J_{sc}), elles montrent une tendance décroissante avec l'augmentation de la concentration (/cm³) de la couche Spiro (HTL2).

Nous interprétons, comme pour le cas de l'optimisation de la couche TiO₂ (ETL2), que l'augmentation des concentrations dans la couche Spiro (HTL2) a un effet positif sur le rendement (η) et le facteur de forme (FF) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). En d'autres termes, une concentration plus élevée des porteurs de charges peut améliorer l'efficacité globale de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) en convertissant davantage des photons en courant électrique. Cependant, cette amélioration est contrebalancée par une diminution de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité de courant de court-circuit (J_{sc}), ce qui suggère qu'une concentration excessive des porteurs de charges peut également entraîner une perte de l'efficacité dans d'autres aspects du fonctionnement de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2). L'augmentation du rendement (η) et du facteur de forme (FF) avec l'augmentation de la concentration des porteurs de charge dans la couche Spiro (HTL2) peut être attribuée à une meilleure conductivité électrique de cette couche, facilitant ainsi le transport et la collecte des trous photogénérés vers l'électrode positive (anode)[34].

Cependant, comme observé précédemment pour les autres couches, une concentration excessive de porteurs de charge peut introduire des défauts et des centres de recombinaison non radiative, piégeant les trous et réduisant leur extraction efficace. Ces recombinaisons non radiatives se manifestent par une diminution de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité de courant de court-circuit (J_{sc}). La diminution de V_{oc} peut être attribuée à l'augmentation des recombinaisons non radiatives induites par les défauts introduits par le dopage excessif dans la couche Spiro (HTL2)[27]. Ces défauts agissent comme des pièges pour les porteurs de charge, réduisant ainsi la tension de circuit ouvert. Quant à la diminution de J_{sc} , elle peut être liée à une collecte inefficace des trous photogénérés en raison d'une concentration inappropriée de porteurs de charge dans la couche Spiro (HTL2). Ces résultats soulignent l'importance d'un équilibre optimal entre la concentration des porteurs de charges dans la couche Spiro (HTL2) et les autres paramètres de la cellule solaire. Un dopage modéré

peut améliorer le rendement en augmentant la conductivité électrique, mais un dopage excessif peut introduire des recombinaisons non radiatives et d'autres pertes d'efficacité. L'optimisation de ce paramètre, en conjonction avec d'autres facteurs tels que les épaisseurs des couches, est cruciale pour maximiser les performances de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2).

III.6.2.4. L'effet de l'épaisseur de la région $\text{TiO}_2(\text{ETL}_2)$

Les résultats d'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 par variation de l'épaisseur de la région TiO_2 (ETL2) sont présentés dans le tableau III.15. Pour cette couche, la valeur de l'épaisseur la mieux optimisée est celle de 0,07 μm , qui nous a permis d'obtenir un rendement de 15,44 %. Les graphes du rendement (η), du facteur de forme (FF), de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) sont présentés à la figure III.15, illustrant les tendances de ces paramètres par variation de l'épaisseur de la région TiO_2 (ETL2).

L'épaisseur de la couche TiO_2 (ETL2), qui joue le rôle de la couche de transport des électrons, est un paramètre crucial pour optimiser les performances de la cellule solaire à base de pérovskite[19-26]. Une épaisseur trop faible peut entraîner une extraction inefficace des électrons photogénérés, tandis qu'une épaisseur trop élevée peut augmenter la résistance série de la cellule et favoriser les recombinaisons non radiatives.

Les résultats obtenus montrent qu'une épaisseur de 0,07 μm pour la région TiO_2 (ETL2) permet d'optimiser le rendement de la cellule solaire à base de pérovskite 2. Cette épaisseur semble être un compromis optimal entre une extraction efficace des électrons et une minimisation des pertes résistives et des recombinaisons non radiatives.

Ces résultats soulignent l'importance cruciale de l'optimisation de l'épaisseur de la couche TiO_2 (ETL2) pour maximiser les performances de la cellule solaire à base de pérovskite 2. Une épaisseur appropriée permet d'extraire efficacement les électrons photogénérés tout en minimisant les pertes résistives et les recombinaisons non radiatives, résultant en une amélioration du rendement global de la cellule solaire.

Tableau III. 15: Résultat de l'effet de l'épaisseur de la région TiO₂(ETL2) de la PSC2

Concentration (/cm ³)	Isc(A)	Voc(V)	FF(%)	Jsc(mA/cm ²)	EFF (%)
0,01	2.08788×10 ⁻¹⁰	1,12721	60,7254	20,8788	14,2916
0,03	2.02145×10 ⁻¹⁰	1,07228	67,4929	20,2145	14,6295
0,04	2.05179×10 ⁻¹⁰	1,07126	69,7188	20,5179	15,3242
0,05	2.05671×10 ⁻¹⁰	1,06807	70,1749	20,5671	15,4154
0,055	2.05742×10 ⁻¹⁰	1,06629	70,3367	20,5742	15,4305
0,06	2.05854×10 ⁻¹⁰	1,06435	70,4471	20,5854	15,435
0,065	2.05956×10 ⁻¹⁰	1,06242	70,5492	20,5956	15,437
0,07	2.05969×10 ⁻¹⁰	1,06067	70,6909	20,5969	15,4435
0,075	2.06059×10 ⁻¹⁰	1,05922	70,7499	20,6059	15,442
0,08	2.06138×10 ⁻¹⁰	1,05796	70,7877	20,6138	15,4378
0,085	2.06105×10 ⁻¹⁰	1,05673	70,8806	20,6105	15,4376
0,09	2.0616×10 ⁻¹⁰	1,05527	70,9156	20,616	15,428

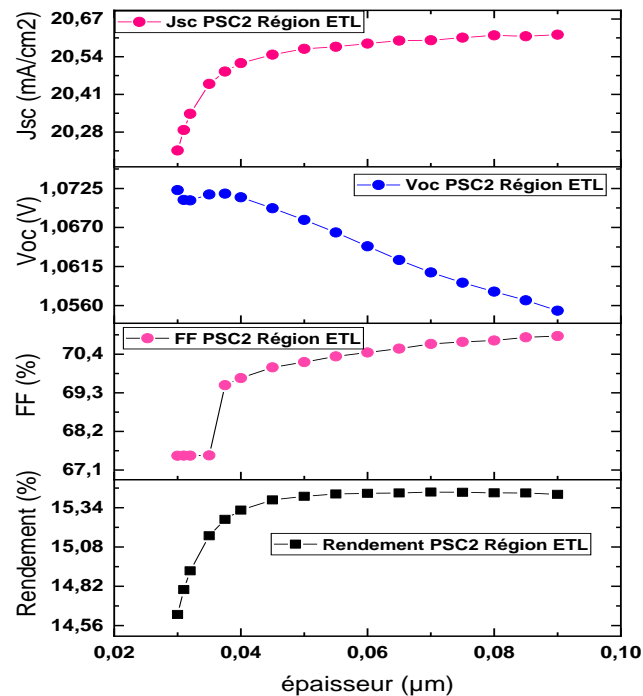


Figure III. 15: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur dans la région TiO₂ (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2).

III.6.2.4.1. Analyse et interprétation

Nous observons sur la figure III.15 que le rendement (η), le facteur de forme (FF) et la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) augmentent progressivement jusqu'à atteindre des valeurs maximales, puis deviennent constants au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche TiO₂ (ETL2) augmente. Quant à la tension en circuit ouvert (V_{oc}), elle diminue légèrement avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche TiO₂ (ETL2).

Nous interprétons que l'augmentation du rendement (η) avec l'épaisseur de la couche TiO₂ (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) est cohérente avec l'amélioration de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) et du facteur de forme (FF). Un optimum est atteint où les avantages de l'épaisseur accrue de la couche TiO₂ (ETL2) maximisent l'absorption et la collecte des porteurs de charges tout en minimisant les pertes. Au-delà de cette épaisseur optimale, le rendement pourrait stagner ou diminuer en raison des effets néfastes tels que la recombinaison accrue[35], qui pourrait aussi affecter la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) et le facteur de forme (FF). Quant à la tension en circuit ouvert (V_{oc}), l'augmentation progressive de l'épaisseur de la couche TiO₂ (ETL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 (PSC2) peut augmenter les pertes résistives et la recombinaison des porteurs de charges, entraînant une diminution progressive de la tension en circuit ouvert (V_{oc})[32].

III.6.2.5. L'effet de l'épaisseur de la région Pérovskite2

Les résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite 2 par variation de l'épaisseur de la région pérovskite 2 (Absorbeur) sont présentés dans le tableau III.16. Pour cette couche, la valeur de l'épaisseur la mieux optimisée est celle de 0,37 μm , qui nous a permis d'obtenir un rendement de 15,52 %. Les graphes du rendement (η), du facteur de forme (FF), de la tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) sont présentés à la figure III.16, illustrant les tendances de ces paramètres en fonction de l'épaisseur de la région pérovskite 2 (Absorbeur).

La couche de pérovskite est le cœur de la cellule solaire à base de pérovskite, jouant le rôle crucial d'absorbeur de la lumière et de génération des paires électron-trou. L'épaisseur de cette couche est un paramètre clé à optimiser pour maximiser l'absorption de la lumière tout en assurant une collecte efficace des porteurs de charge photogénérés[19-32-34]. Les résultats

Chapitre III : Résultats de simulation numérique sous SILVAO-ATLAS

obtenus montrent qu'une épaisseur de 0,37 μm pour la région pérovskite 2 (Absorbeur) permet d'optimiser le rendement de la cellule solaire. Cette épaisseur semble être un compromis optimal entre une absorption suffisante de la lumière et une minimisation des pertes par recombinaison des porteurs de charge dans la couche de pérovskite.

Ces résultats soulignent l'importance cruciale de l'optimisation de l'épaisseur de la couche de pérovskite pour maximiser les performances de la cellule solaire. Une épaisseur appropriée permet d'absorber efficacement la lumière incidente tout en minimisant les pertes par recombinaison des porteurs de charge dans la couche absorbante, résultant en une amélioration du rendement global de la cellule solaire à base de pérovskite.

Tableau III. 16: Résultat obtenus par variation de l'épaisseur de la région Pérovskite2 de la PSC2

Concentration (/cm ³)	Isc(A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc(mA/cm ²)	EFF (%)
0,5	2.04548×10^{-10}	1,06697	69,8458	20,4548	15,2436
0,55	2.02462×10^{-10}	1,06583	69,6163	20,2462	15,0225
0,6	1.99735×10^{-10}	1,06456	69,3971	19,9735	14,7559
0,4	2.05535×10^{-10}	1,06912	70,617	20,5535	15,5175
0,375	2.05084×10^{-10}	1,06944	70,8018	20,5084	15,5286
0,37	2.04942×10^{-10}	1,06949	70,848	20,4942	15,5287
0,365	2.04779×10^{-10}	1,06955	70,8981	20,4779	15,5282
0,36	2.04596×10^{-10}	1,06961	70,9534	20,4596	15,5273
0,355	2.0439×10^{-10}	1,06966	71,0166	20,439	15,5262
0,35	2.04162×10^{-10}	1,06972	71,0841	20,4162	15,5245
0,345	2.03827×10^{-10}	1,06982	71,0841	20,3827	15,5185
0.340	2.03554×10^{-10}	1.06987	71.2414	20.3554	15.5147
0.335	2.03258×10^{-10}	1.06993	71.3237	20.3258	15.5109

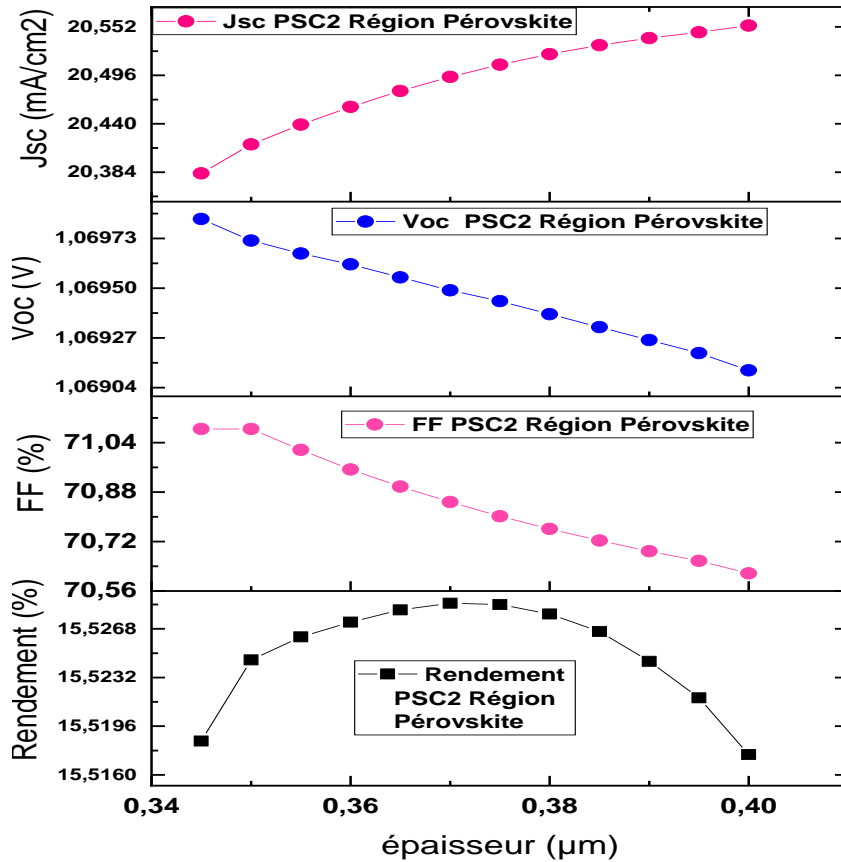


Figure III. 16: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région pérovskite2 de la cellule solaire photovoltaïque (PSC2).

III.6.2.5.1. Analyse et interprétation

Nous observons que sur la figure III.16, le rendement (η) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2) augmente avec l'épaisseur de la région Pérovskite2(Absorbeur) jusqu'à une valeur d'épaisseur de 0.37μm, puis il décroît au fur et à mesure que l'épaisseur accrue. Le facteur de forme (FF) et la tension en circuit ouvert (V_{oc}) décroissent progressivement de manière presque linéaire avec l'augmentation de l'épaisseur. Quant à la densité du courant de court-circuit, elle augmente d'une manière presque parabolique au fur et à mesure que l'épaisseur de la couche Pérovskite2(Absorbeur) augmente.

Nous interprétons que l'augmentation de l'épaisseur de la couche pérovskite2 a un impact crucial sur la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2). Il existe une épaisseur optimale qui maximise le rendement en équilibrant l'absorption de la lumière et les

pertes internes. Au-delà de cette épaisseur, les effets négatifs comme la recombinaison des porteurs de charges et l'augmentation de la résistance série réduisant le rendement (η), le facteur de forme (FF) et la tension en circuit ouvert (V_{oc}), malgré une augmentation de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}).

III.6.2.6. Effet de l'épaisseur de la région Spiro (HTL₂)

Les résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite₂ par variation de l'épaisseur de la région Spiro (HTL₂) sont présentés au tableau III.17. Pour cette couche, la valeur la mieux optimisée est celle de 0.2 μ m, qui nous a permis d'obtenir un rendement de 15.73 %. Les graphes du rendement (η), de facteur de forme (FF), de tension en circuit ouvert (V_{oc}) et de la densité du courant de court-circuit (J_{sc}) sont présentés à la figure III.17, présentant les allures de ces derniers par variation de l'épaisseur de la région Spiro (HTL₂).

Tableau III. 17: Résultat obtenus lors de la variation de l'épaisseur de la région Spiro (HTL₂) de la PSC2

Concentration (/cm³)	Isc(A)	Voc (V)	FF (%)	Jsc(mA/cm²)	EFF (%)
0.35	2.05417e $\times 10^{-10}$	1.06829	70.1552	20.5417	15.3952
0.4	2.05121 $\times 10^{-10}$	1.06849	69.9216	20.5121	15.3247
0.45	2.05036 $\times 10^{-10}$	1.06853	69.6015	20.5036	15.2488
0.2	2.06974$\times 10^{-10}$	1.06745	71.2311	20.6974	15.7374
0.55	2.04866 $\times 10^{-10}$	1.06861	68.9415	20.4866	15.0928
0.33	2.05671 $\times 10^{-10}$	1.06807	70.1749	20.5671	15.4154
0.6	2.0478 $\times 10^{-10}$	1.06864	68.6135	20.478	15.0151
0.65	2.04694 $\times 10^{-10}$	1.06868	68.2694	20.4694	14.9341
0.7	2.04608 $\times 10^{-10}$	1.06872	67.9626	20.4608	14.8613
0.3	2.06008 $\times 10^{-10}$	1.06783	70.2504	20.6008	15.4538
0.25	2.06517 $\times 10^{-10}$	1.0675	70.6365	20.6517	15.5723
0.275	2.06274 $\times 10^{-10}$	1.06763	70.386	20.6274	15.5007

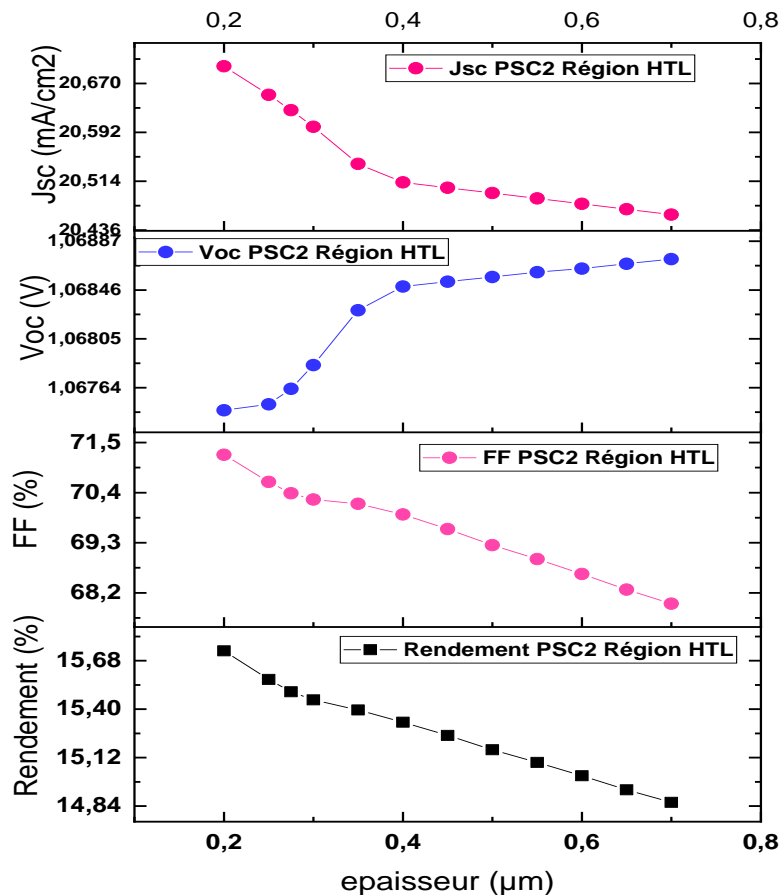


Figure III. 17: La densité du courant de court-circuit (J_{sc}), la tension en circuit ouvert (V_{oc}), le facteur de forme (FF) et le rendement (η) en fonction de l'épaisseur de la région Spiro (HTL2) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2).

III.6.2.6.1. Analyse et interprétation

Nous observons sur la figure III.17 que le rendement (η) et le facteur de forme (FF) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2) décroissent de manière presque linéaire avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche pérovskite2. La densité du courant de court-circuit (J_{sc}) décroît aussi mais d'une manière un peu parabolique et au bout d'une certaine valeur de l'épaisseur de la couche (pérovskite2), elle devient presque constante. Quand la tension en circuit ouvert (V_{oc}), elle augmente progressivement jusqu'à la valeur maximale et, elle reste constante au fur et à mesure que l'épaisseur augmente.

III.7. Récapitulation des résultats de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 (PSC2)

Le résultat de l'optimisation de la structure (Figure III.10) de la cellule solaire photovoltaïque à base de la pérovskite2 que nous avons obtenus par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS, nous a permis d'obtenir les caractéristiques telles que présentées au tableau III.18 ainsi que, la caractéristique de densité-tension (J_{sc} -V)(Figure III.18). Pour obtenir ce résultat, nous l'avons simulé en utilisant les valeurs les plus optimales pour les concentrations et les épaisseurs de chaque couche présentée dans les étapes précédentes. En comparant ce résultat à celui du calibrage et d'expérimentation, nous constatons que les caractéristiques PV de sortie ainsi que, la caractéristique de densité-tension (J_{sc} -V)de la cellule solaire photovoltaïque sont beaucoup plus améliorées en optimisant les différentes couches par action sur les concentrations et les épaisseurs.

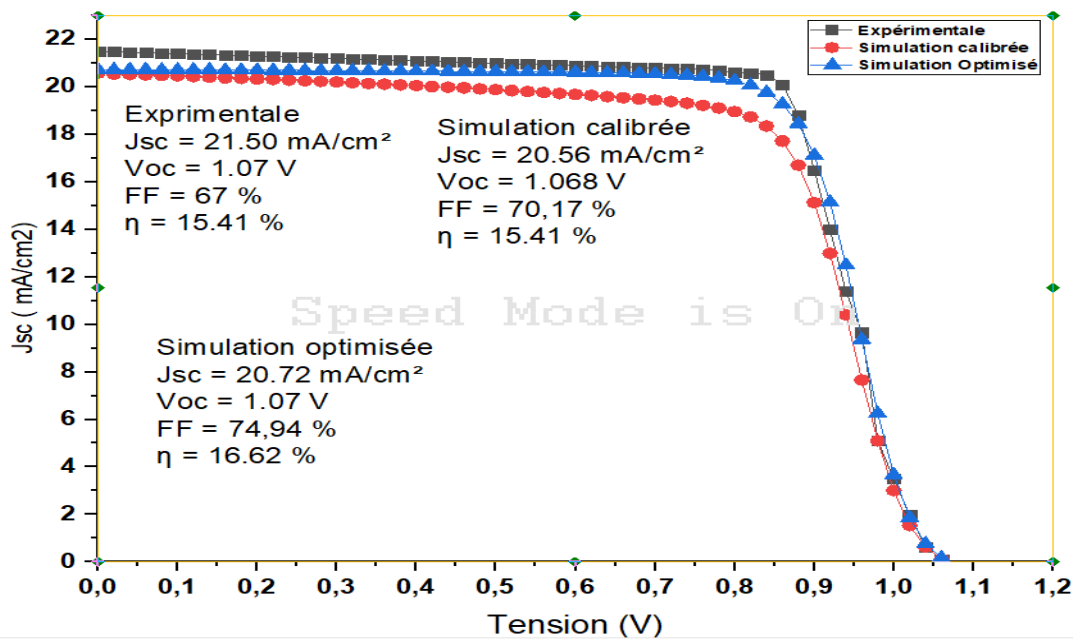


Figure III. 18: Courbes de densité-tension (J_{sc} -V) du calibrage, d'optimisation et d'expérimentation [38] de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 simulée

Tableau III. 18: Récapitulation des caractéristiques PV de sortie de la structure de la cellule solaire Pérovskite2 optimisée par simulation numérique

	J_{sc} ($\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$)	V_{oc} (V)	FF (%)	η (%)
Simulation optimisée	20.72	1.07	74.94	16.62

Conclusion

Cette partie du chapitre présente les résultats de la simulation numérique et de l'optimisation de la cellule solaire à pérovskite 2 (PSC2) à l'aide du logiciel SILVACO ATLAS. Après un calibrage précis avec les données expérimentales (rendement de 15,41%), l'optimisation des concentrations de dopage et des épaisseurs des différentes couches a permis d'atteindre un rendement optimal simulé de 16,62%. Cette amélioration significative souligne l'importance cruciale de l'optimisation des paramètres clés pour maximiser les performances. Pour que les simulations numériques soient efficaces pour guider l'optimisation, une validation expérimentale reste essentielle compte tenu des limites inhérentes des modèles théoriques.

III.8. Résultat du calibrage et de l'optimisation de la cellule solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite

Dans cette partie de chapitre, nous avons effectué une simulation numérique de la cellule solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite en utilisant le logiciel SILVACO-ATLAS. Cette simulation visait à calibrer et optimiser les performances de la cellule solaire afin de maximiser son efficacité énergétique. Ces résultats du calibrage et d'optimisation de cette dernière ont été obtenus en combinant les paramètres des épaisseurs et des concentrations de la cellule solaire à base de la pérovskite1 et pérovskite2 présentés dans les parties 2 et 3 de ce chapitre. La figure 19, présente la structure de celle-ci simulée sous SILVACO-ATLAS. Les courbes de la densité du courant de courant en fonction de la tension V_{oc} sont présentées à la figure III.20 ainsi que les caractéristiques de ces dernières sont résumées dans les tableaux III.19 III.20. Dans la suite de cette section, nous allons analyser ces résultats obtenus.

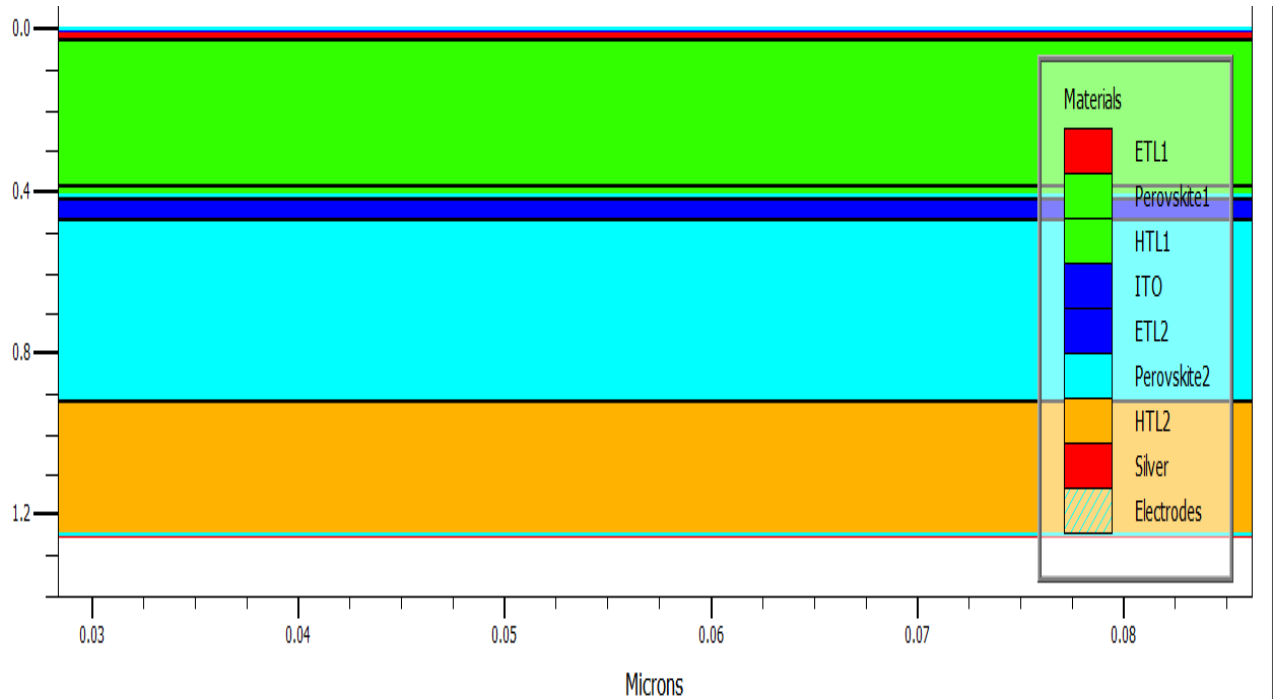


Figure III. 19: Structure de la cellule solaire tandem simulée sous SILVACO-ATLAS

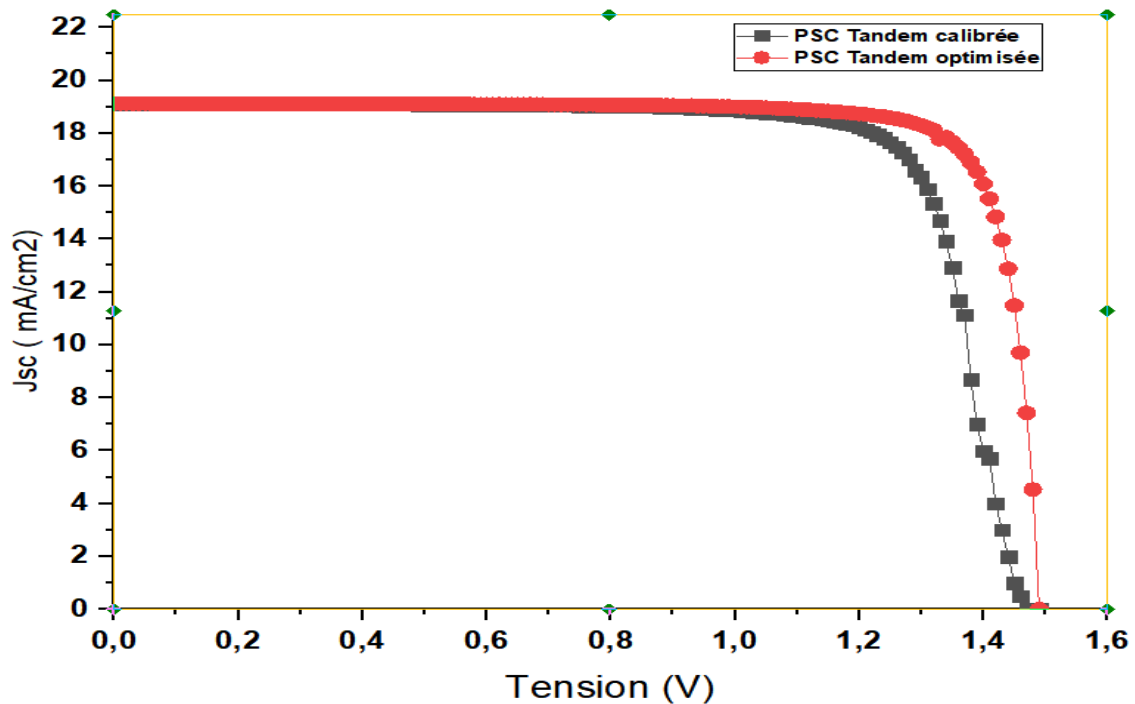


Figure III. 20: Caractéristiques de courant-tension (I - V) de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite calibrée et optimisée par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS

III.8.1. Résultats du Calibrage de la PSC Tandem

Le calibrage initial de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite a permis d'établir une base de référence avant l'application des optimisations. Les paramètres obtenus suite à cette phase de calibrage sont résumés dans le tableau III.19.

Tableau III. 19: Résultat du calibrage de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite obtenu par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS

EFF (%)	23.3451
FF (%)	82.7195
Js (mA/cm ²)	19.1101
Voc(V)	1.47681
P _m (W)	2.33451×10 ⁻¹⁰
V _m (V)	1.31
I _m (A)	1.78207×10 ⁻¹⁰
Isc (A)	1.91101×10 ⁻¹⁰
Opt_in (%)	0.100037
EQE	0.802182

Ces résultats montrent que la cellule solaire calibrée présente déjà une efficacité remarquable de 23,3451 %, avec un facteur de forme de 82,7195 % et une densité de courant de court-circuit de 19,1101 mA/cm². La tension de circuit ouvert et la puissance maximale obtenues sont également prometteuses pour cette configuration initiale.

III.8.2. Résultats de l'optimisation de la PSC Tandem

Suite aux optimisations apportées, les performances des cellules solaires ont été significativement améliorées. Les paramètres optimisés obtenus sont présentés dans le tableau III.20.

Tableau III. 20: Résultat de l'optimisation de la cellule solaire tandem pérovskite/pérovskite obtenu par simulation numérique sous SILVACO-ATLAS

EFF (%)	23.9296
FF (%)	83.8559
Jsc (mA/cm ²)	19.126
Voc (V)	1.49203
P _m (W)	2.39296×10 ⁻¹⁰
V _m (V)	1.32999
I _m (A)	1.79923×10 ⁻¹⁰
Isc (A)	1.9126×10 ⁻¹⁰
Opt_in (%)	0.100037
EQE	0.816596

Les résultats après optimisation révèlent une amélioration notable de l'efficacité, atteignant 23,9296 %. Le facteur de forme a également augmenté, atteignant 83,8559 %, tandis que la densité de courant de court-circuit est passée à 19,126 mA/cm². La tension de circuit ouvert a légèrement augmenté pour atteindre 1,49203 V, et la puissance maximale a également été optimisée, démontrant ainsi l'efficacité des améliorations apportées.

Conclusion

En conclusion, les efforts de calibration et d'optimisation réalisés dans cette étude ont permis de franchir une étape importante vers l'amélioration des cellules solaires tandem pérovskite/pérovskite, ouvrant la voie à de futures recherches et développements dans ce domaine prometteur.

*Chapitre IV : Résultat de simulation numérique sous
MATLAB SIMULINK*

Introduction

Ce chapitre explore en détail les performances des panneaux solaires photovoltaïques tandem pérovskite/pérovskite, en utilisant des simulations numériques sous MATLAB Simulink. L'objectif principal est de comprendre comment les différentes conditions d'éclairement et de température influencent les caractéristiques électriques de ces panneaux solaires. En particulier, nous examinons comment la tension et le courant générés par le panneau varient en fonction de ces paramètres externes.

Nous commençons par une présentation des paramètres du panneau solaire utilisé pour les simulations. Ensuite, nous analysons les résultats des simulations effectuées dans des conditions standards, fournissant une base pour comparer les performances du panneau dans des environnements typiques. Par la suite, nous étudions l'impact de l'éclairement sur les performances du panneau, en simulant diverses intensités lumineuses. Enfin, nous évaluons l'effet de la température sur le panneau solaire, en maintenant l'éclairement constant et en variant la température.

IV.1 Présentation des paramètres du panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/ pérovskite simulé

Dans le chapitre III, nous avons obtenu une tension de circuit ouvert (V_{oc}) de 1.49 V et un courant de court-circuit (I_{sc}) de $1,9 \times 10^{-10}$ A pour la cellule solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite optimisée. Pour le cas de notre travail, nous avons choisi de simuler un panneau constitué de N_T cellules série et parallèle possédant les caractéristiques suivantes :

Un panneau de surface $S=1.3m^2$

La tension en circuit ouvert V_{oc} égale à 24V

Le courant de court-circuit I_{sc} égal à 1A

Sous SILVACO ATLAS, la simulation numérique se fait à l'échelle microscopique, et la cellule tandem que nous avons simulée à une surface de $1 \mu m^2$, alors que sur le logiciel MATLAB Simulink, la simulation numérique se fait à l'échelle macroscopique. Pour obtenir une cellule solaire tandem avec un courant de 1A, nous allons d'abord calculer la surface nécessaire en nous appuyant sur les résultats issus de la simulation numérique sous SILVACO ATLAS.

D'après les résultats du troisième chapitre, pour $1\mu\text{m}^2$ nous avons un courant $1.9 \times 10^{-10}\text{A}$, pour atteindre un courant de 1A, nous avons obtenu après tout calcul fait, pour le panneau solaire la configuration série parallèle suivante
un ensemble de cellules série au nombre de 16 qui sera mis en parallèle $291 \cdot 10^3$ fois horizontalement et verticalement :

IV.2.Résultats de simulation numérique des performances d'un panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite sous MATLAB SIMULINK

Dans cette deuxième partie du chapitre, nous examinons les performances d'un panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite dans un éventail de conditions. Nous commencerons par explorer les résultats de simulation sous MATLAB Simulink dans les conditions standards, fournissant ainsi une base pour la comparaison et la compréhension des performances du dispositif dans des environnements typiques.

Par la suite, nous analyserons l'impact de l'éclairement sur les performances du panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite. En étudiant les résultats de simulation numérique sous MATLAB Simulink sous différentes intensités lumineuses, nous apporterons des éclaircissements cruciaux sur la manière dont le système se comporte face aux variations de luminosité.

Enfin, nous examinerons les résultats de simulation numérique sous MATLAB Simulink concernant l'effet de la température sur les performances de ce panneau

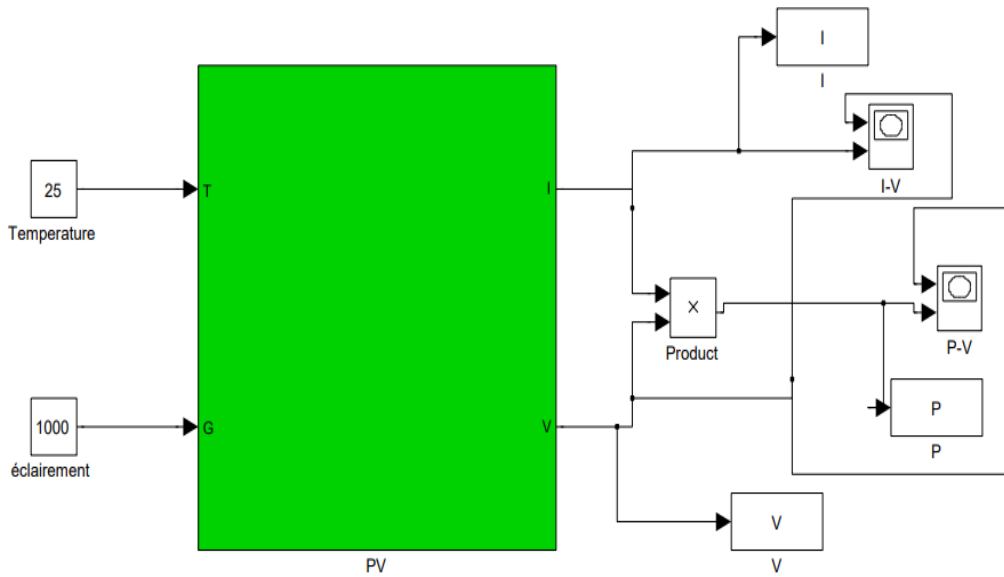


Figure IV. 1: Schéma block de simulation d'un panneau photovoltaïque sous MATALAB SIMULINK

IV.2.1. Résultats de simulation dans les conditions standard

Les figures IV.2 et IV.3 présentent respectivement les courbes des caractéristiques courant-tension (I-V) et puissance-tension (P-V) du panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite que nous avons simulé dans les conditions standards.

Paramètres d'entrée dans les conditions standards: $\begin{cases} T = 25^{\circ} \text{C} \\ G = 1000 \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^2} \right] \end{cases}$

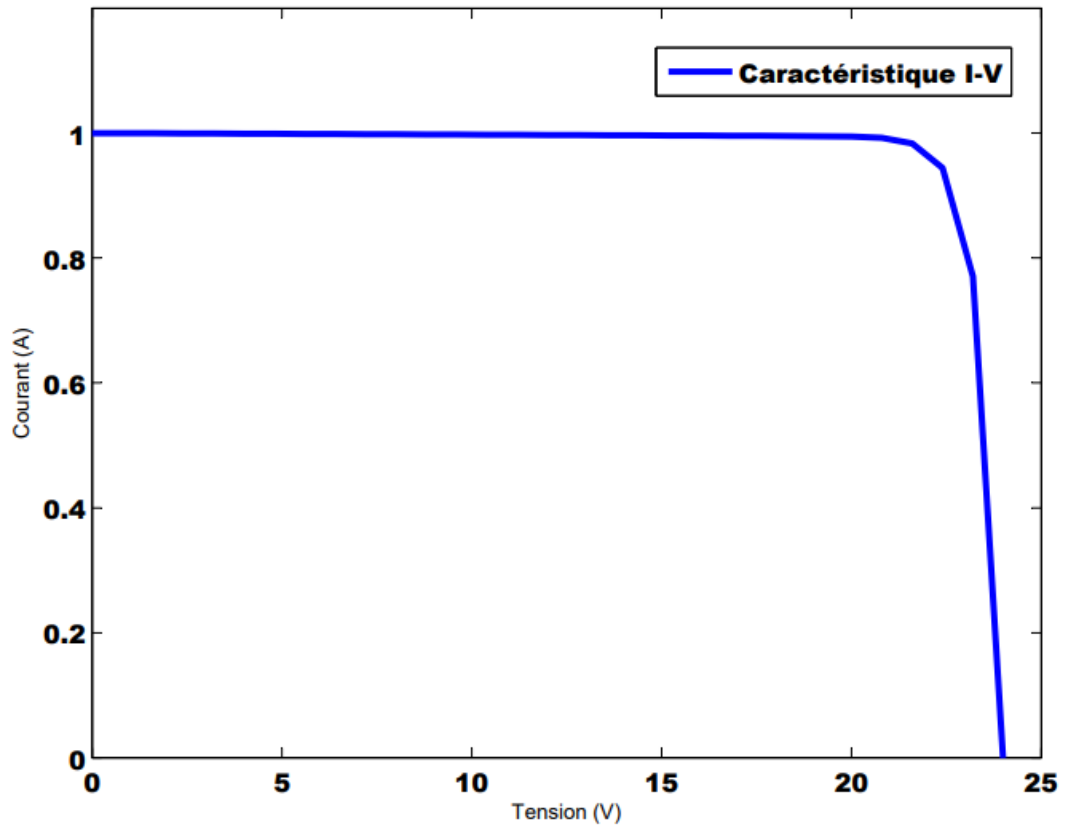


Figure IV. 2: Caractéristique courant- tension (I-V) dans les conditions standard du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

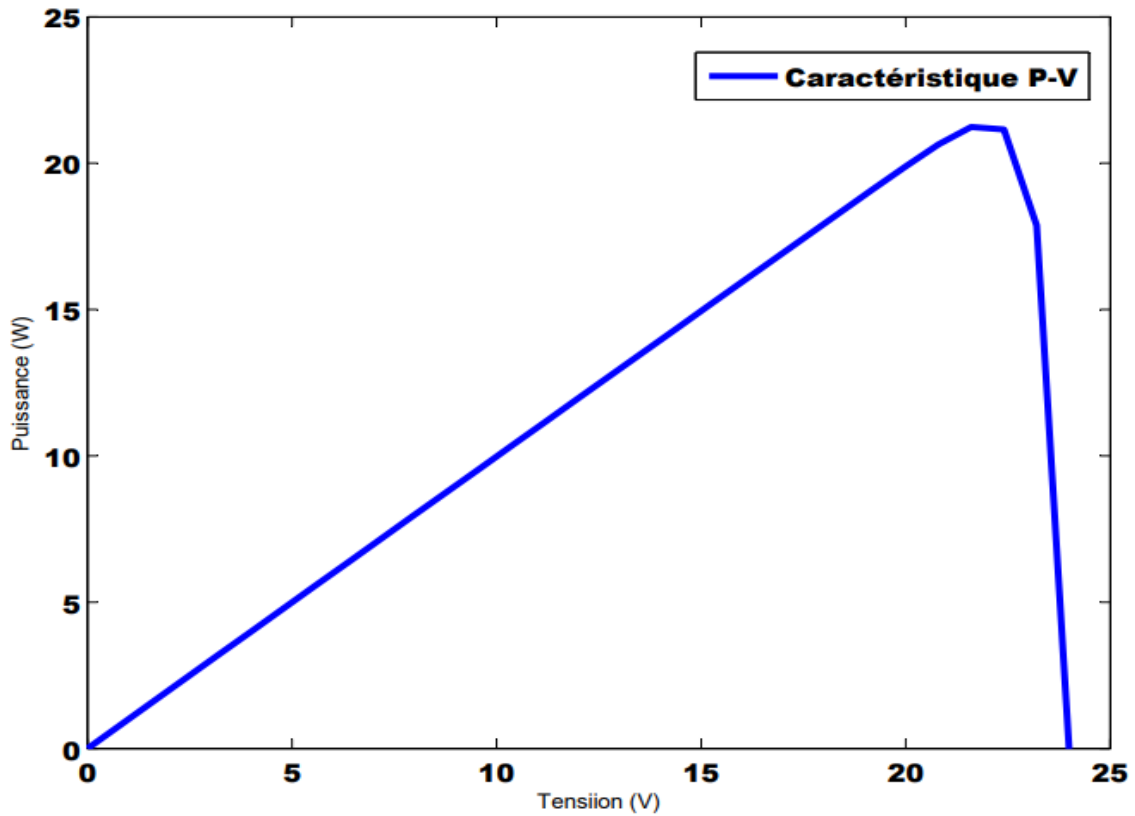


Figure IV. 3: Caractéristique puissance-tension- (P-V) dans les conditions standard du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

IV.2.1.1. Analyse et interprétation

Nous observons que la caractéristique courant-tension (I-V) du panneau solaire photovoltaïque tandem pérovskite/pérovskite obtenue par simulation numérique présente une tendance constante avec l'évolution de la tension avant d'atteindre la tension maximale (V_m), puis diminue de manière parabolique jusqu'à la tension de circuit ouvert (V_{oc}). De même que, la caractéristique puissance-tension (P-V) croît de manière exponentielle et atteint le point de puissance maximale correspondant à la tension maximale (V_m), puis décroît de manière exponentielle jusqu'à la tension de circuit ouvert (V_{oc}). Les allures de ces caractéristiques obtenues sont similaires à celles d'un panneau solaire photovoltaïque testé dans les conditions standards de simulation [28].

IV.2.2. Résultats de simulation de l'effet d'éclairement sous le panneau solaire tandem Pérovskite/Pérovskite

Pour observer le comportement de notre module photovoltaïque face à la variation de l'éclairement, nous l'avons simulé en maintenant la température constante et faire varier l'irradiation. La figure IV.4 et La figure IV.5 présentent respectivement les courbes des caractéristiques de tension-courant (I-V) et tension-puissance (V-P) avec les paramètres ci-dessous :

$$\text{Paramètres d'entrée} \begin{cases} T = 25^\circ \text{C} \\ G = [1000 \ 800 \ 600 \ 400 \ 200] \left[\frac{\text{W}}{\text{m}^2} \right] \end{cases}$$

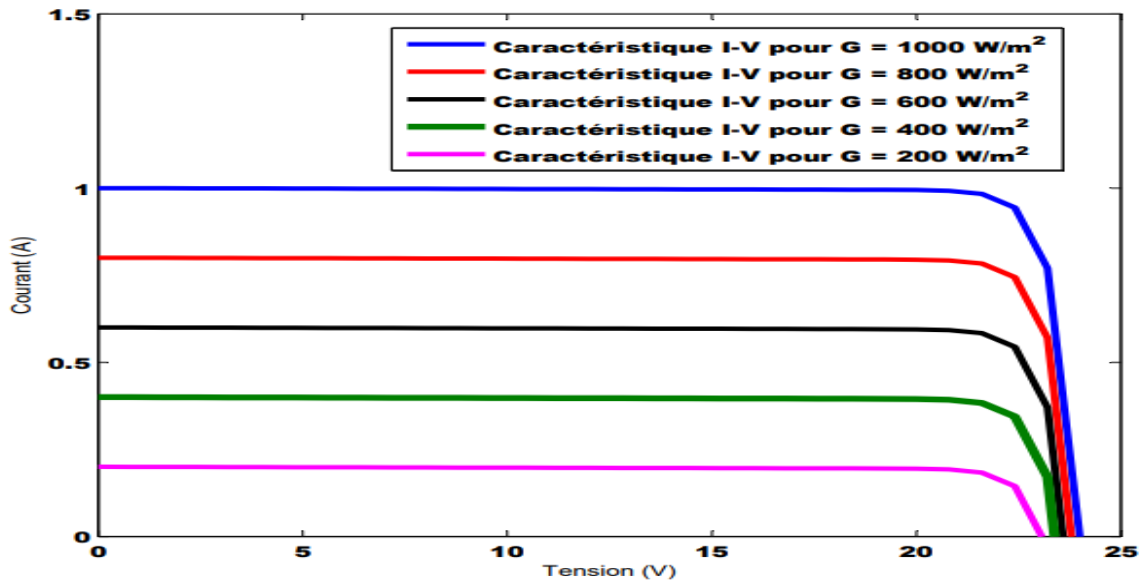


Figure IV. 4 : Caractéristiques de courant-tension (I-V) à température constante et l'irradiations variables du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

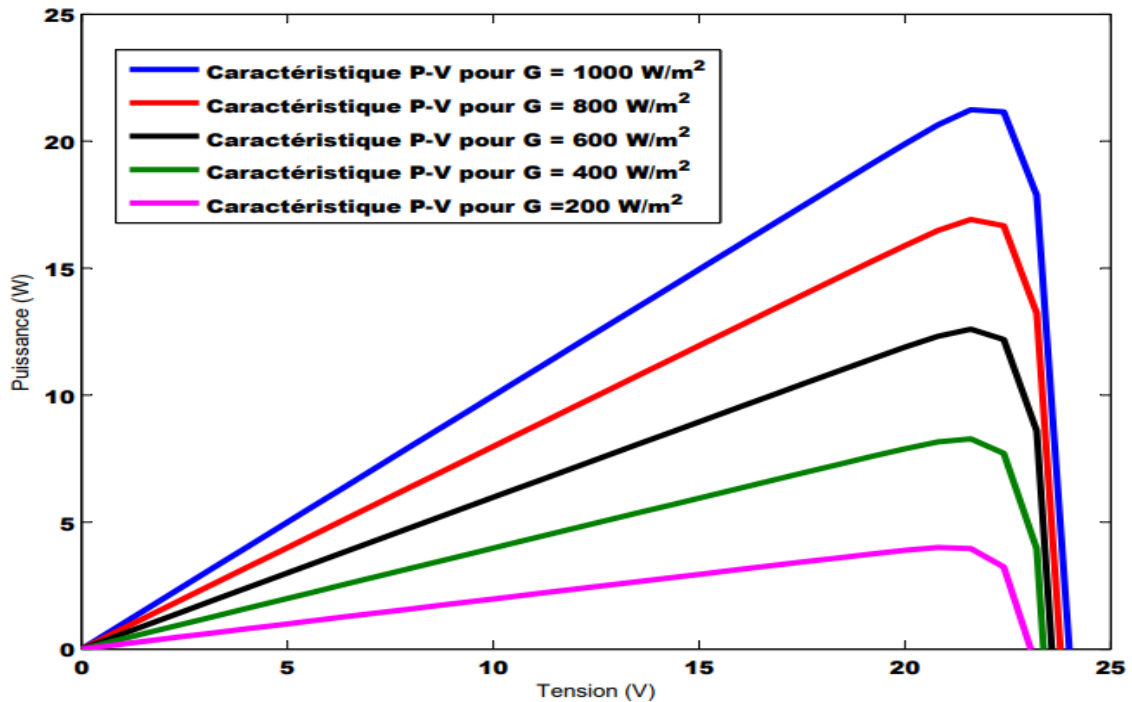


Figure IV. 5: Caractéristiques puissance tension- (P-V) à température constante et l'irradiation variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

IV.2.2.1. Analyse et interprétation

D'après les caractéristiques des courants/tension et puissances/tension que nous avons obtenues, nous constatons qu'à température constante, plus l'ensoleillement augmente, plus le courant débité par le générateur photovoltaïque est important et, par contre la valeur de la tension varie peu. De cette observation, nous concluons que la variation de l'ensoleillement à température constante n'a de l'influence que sur le courant débité par le générateur photovoltaïque et presque pas d'influence considérable sur la tension issue de ce dernier.

IV.2.3. Résultats de simulation de l'effet de température sur le panneau solaire tandem Pérovskite/Pérovskite

Pour observer le comportement de notre module photovoltaïque face à la variation de la température, nous l'avons simulé en maintenant l'irradiation constante et en variant la température. La figure IV.5 et La figure IV.6 présentent respectivement les courbes des caractéristiques (I-V) et (P-V) du panneau solaire photovoltaïque que nous avons simulé avec les paramètres ci-dessous :

Paramètres d'entrée $\left[\begin{array}{l} G = 1000 \left[\frac{W}{m^2} \right] \\ T = [25 \ 30 \ 35 \ 40 \ 45] [^{\circ}C] \end{array} \right.$

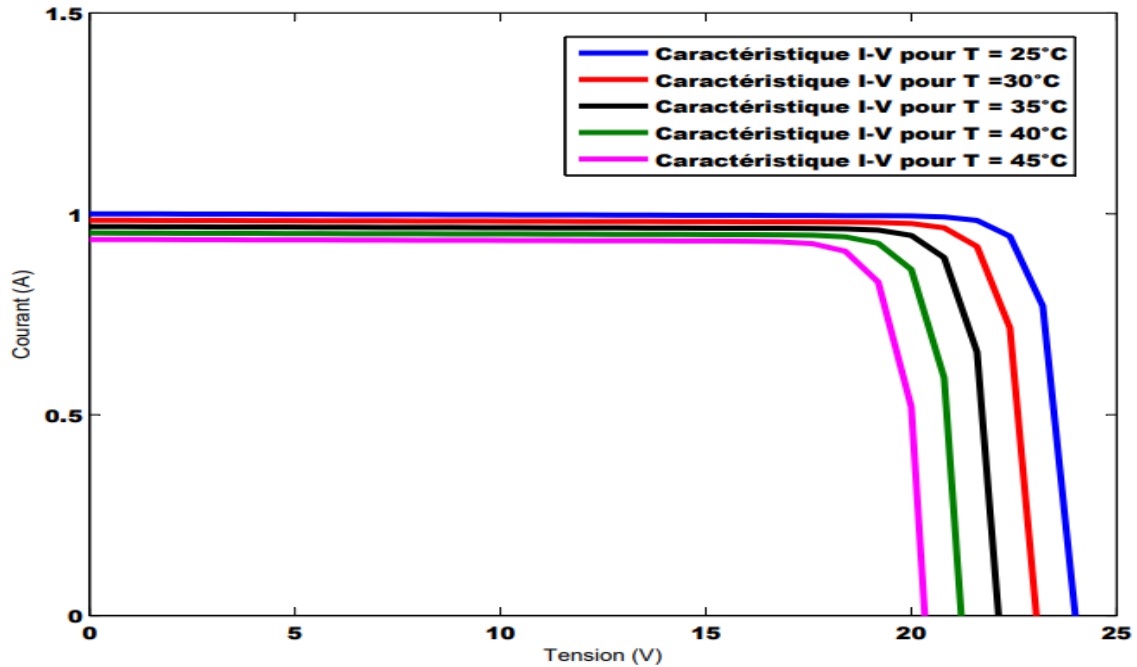


Figure IV. 6: Caractéristiques de courant-tension (I-V) à l'irradiation constante et température variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

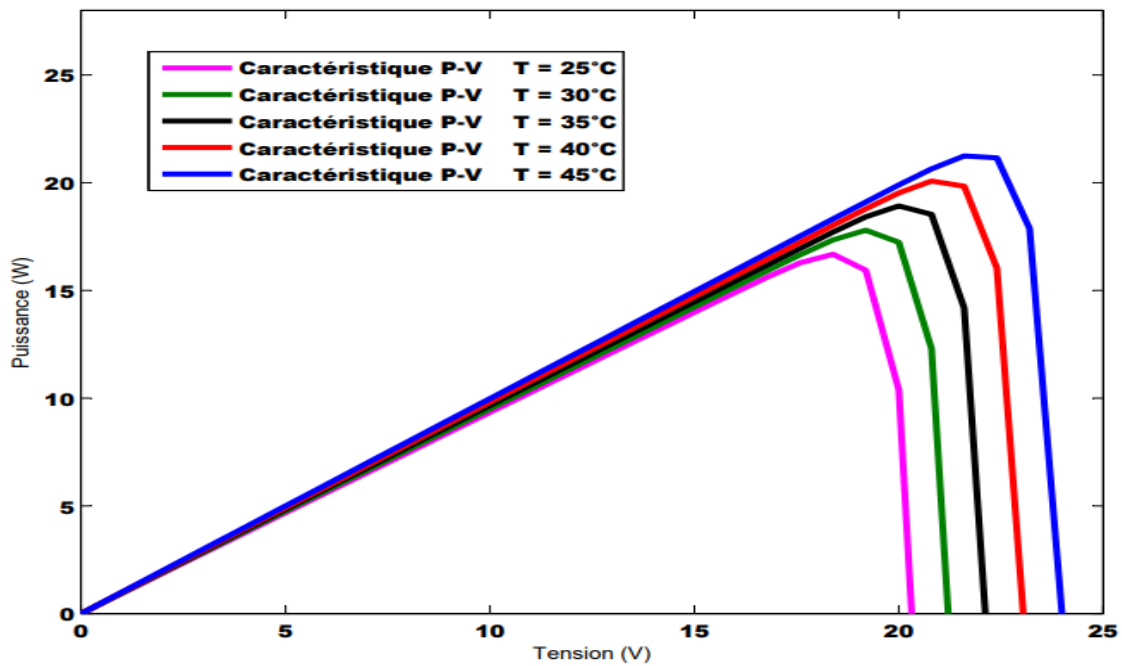


Figure IV. 7: Caractéristiques de puissance-tension (P-V) à l'irradiation constante et température variable du panneau solaire photovoltaïque tandem Pérovskite/Pérovskite

IV.2.3.1. Analyse et interprétation

D'après les caractéristiques I-V et P-V obtenues des figures IV.6 et IV.7, nous constatons qu'à éclairement constant, lorsque la température augmente, la tension diminue tandis que le courant débité par le générateur photovoltaïque reste presque invariable. De cette observation, nous concluons que la variation de la température à éclairement constant n'a d'influence que sur la tension fournie par le générateur photovoltaïque et presque pas d'influence sur le courant débité par ce dernier.

Conclusion

Ce chapitre a offert une analyse détaillée des performances des panneaux solaires tandem pérovskite/pérovskite en conditions météorologiques variées à travers des simulations numériques sous MATLAB Simulink. Les résultats obtenus montrent que les conditions d'éclairement et de température ont des effets distincts sur les caractéristiques électriques du panneau solaire.

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce mémoire a exploré en profondeur les cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite, mettant en avant leur potentiel exceptionnel dans le domaine des énergies renouvelables. À travers une série de simulations numériques détaillées, nous avons analysé et optimisé les performances de ces cellules, en étudiant divers paramètres tels que le dopage, l'épaisseur des couches et les conditions environnementales. L'étude a d'abord abordé les fondements théoriques des jonctions PN et des cellules solaires idéales, fournissant une base solide pour comprendre les mécanismes de fonctionnement et les défis liés aux pertes de performance. Les cellules solaires à pérovskite, en tant que technologie émergente, ont été présentées en détail, avec une attention particulière portée sur l'architecture des dispositifs et les méthodes de caractérisation des performances.

Les simulations effectuées sous SILVACO-ATLAS ont permis d'optimiser les cellules solaires tandem pérovskite/pérovskite, révélant des améliorations significatives en termes d'efficacité, de facteur de forme et de densité de courant de court-circuit. Les résultats ont montré que l'optimisation du dopage et de l'épaisseur des différentes régions de la cellule solaire peut conduire à des performances nettement supérieures. De plus, les simulations numériques sous MATLAB Simulink ont mis en évidence l'impact des conditions environnementales, telles que l'éclairement et la température, sur les performances des panneaux solaires. Il a été démontré que l'intensité de l'éclairement influence directement le courant généré, tandis que la température affecte principalement la tension produite. Ces résultats soulignent l'importance de la gestion thermique et de l'optimisation de l'exposition à la lumière pour maximiser l'efficacité des panneaux solaires.

En somme, cette étude a permis de mieux comprendre les nombreux facteurs qui influencent les performances des cellules solaires à pérovskite et a posé des bases solides pour leur optimisation. Cependant, pour aller au-delà des résultats obtenus et continuer à progresser dans ce domaine, il est nécessaire de considérer les perspectives futures, tant théoriques qu'expérimentales.

D'un point de vue théorique, il serait pertinent de développer des simulations plus sophistiquées intégrant des effets secondaires complexes, tels que les interactions photon-phonon et les dégradations à long terme des matériaux. Explorer l'incorporation de nouveaux matériaux dans les couches actives des cellules solaires pourrait également offrir des avenues prometteuses pour améliorer l'efficacité et la stabilité. L'application de techniques

d'optimisation multi-objective pourrait aider à trouver un équilibre optimal entre l'efficacité, le coût et la durabilité des cellules solaires à pérovskite.

Sur le plan expérimental, la fabrication de prototypes basés sur les configurations optimisées et leur test dans des conditions réelles s'avère crucial pour vérifier les résultats des simulations et ajuster les modèles en conséquence. Des études expérimentales sur la caractérisation des matériaux, incluant des techniques telles que la microscopie électronique à balayage (SEM) et la spectroscopie de photoluminescence, pourraient offrir des insights précieux sur les mécanismes de défaillance et les voies d'amélioration. Par ailleurs, innover dans les procédés de fabrication, tels que la technique de dépôt par couches atomiques, pourrait améliorer la qualité et la performance des cellules solaires pérovskites.

En conclusion, ce mémoire a non seulement approfondi la compréhension des cellules solaires à pérovskite mais a également ouvert la voie à de futures recherches et développements dans ce domaine prometteur. Les avancées réalisées grâce à cette étude représentent une étape importante vers l'amélioration continue des technologies photovoltaïques, contribuant ainsi à un avenir plus durable et exo-énergétique. Les perspectives théoriques et expérimentales proposées fourniront des directions clés pour poursuivre cette recherche et renforcer l'impact des cellules solaires à pérovskite sur le marché des énergies renouvelables.

References bibliographiques

Références

- [1] Parion, Jonathan Master in Electrical Engineering Opto-electrical characterization and modelling of defects in thin-film Cu(In,Ga)Se₂ solar cells oxide passivation layers at the front and window interface. Ecole polytechnique de Louvain 2021-202
- [2] J.-P. Colinge and C. A. Colinge, Physics of Semiconductor Devices, Springer-Verlag New York Inc., Ed. Kluwer Academic Publishers, 2002.
- [3] S. M. Sze and K. N. Kwok, Physics of Semiconductor Devices. John Wiley & sons, Inc, 2007
- [4] M. Theristis, V. Venizelou, G. Makrides, and G. E. Georghiou, Energy yield in photovoltaicsystems, in Handbook of Photovoltaics.Elsevier, 2018, pp. 671 713.
- [5] Y.-K. Liao, S.-Y.Kuo, M.-Y.Hsieh, F.-I.Lai, M.-H.Kao, S.-J.Cheng, D.-W.Chiou, T.-P. Hsieh,and H.-C. Kuo, A look into the origin of shunt leakage current of Cu(In,Ga)Se₂ solar cells viaexperimental and simulation methods, Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 117, pp.145 151, oct 2013
- [6] M. Ochoa, S. Buecheler, A. N. Tiwari, and R. Carron, Challenges and opportunities for an e-ciency boost of next generation Cu(In,Ga)Se₂ solar cells: prospects for a paradigm shift, Energy and Environmental Science, vol. 13, no. 7, pp. 2047 2055, 2020.
- [7] T. D. Lee and A. U. Ebong, A review of thin lm solar cell technologies and challenges, Renewable and Sustainable Energy Reviews, vol. 70, pp. 12861297, apr 2017
- [8] Thomas CAMPOS Étude d'hétérostructures de pérovskites 2D/3D pour cellules photovoltaïques *Study of 2D/3D perovskites heterostructures for solar cells* Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay soutenue à Paris-Saclay, le 16 mai 2023
- [9] Green, M. A. (1982). Solar Cell Efficiency Tables (Version1). Solar Cells, 7(3), 198-201.
- [10] Nadja Isabelle Désirée KLIPFEL Investigation in Crystal Growth/Morphology and Interface Engineering of Perovskite Solar Cells by Different Deposition Methods These de doctorat en chimie et génie chimique Présentée le 18 mars 2022 Ecole polytechnique federale de Lausanne
- [11]. Kim, D.; Lee, D.-K.; Kim, S.M.; Park, W.; Sim, U. Photoelectrochemical Water Splitting Reaction System Based on Metal-Organic Halide Perovskites. *Materials*.**2020**, 13, 210.
- [13] Li C, Wang Y, Choy WCH. Efficient Interconnection in Perovskite Tandem Solar Cells. *Small Methods*, 2020, 4(7): 1–19

- [14] I. Hussain, H. P. Tran, J. Jaksik, J. Moore, N. Islam, M. J. Uddin, *Emergent Mater.* 2018, 1, 133–154.
- [15] T. Liu, K. Chen, Q. Hu, R. Zhu, Q. Gong, *Adv. Energy Mater.* 2016, 6, 1–17.
- [16] S. Li, Y. L. Cao, W. H. Li, Z. S. Bo, *Rare Met.* 2021, 40, 2712–2729
- [17] A. Smets, K. Jäger, I. Olindo, R. Van Swaij, M. Zeman, *Solar Energy The Physics and Engineering of Photovoltaic Conversion Technologies and Systems*, UIT Cambridge Ltd, Cambridge, 2016.
- [18] J. Huang, Y. Yuan, Y. Shao, Y. Yan, *Nat. Rev. Mater.* 2017, 2, 17042.
- [19] BRAHMI, A., & ROUIFA, C. (2023). Simulation des propriétés optoélectriques des panneaux photovoltaïques tandem à base de cellules en pérovskite. Mémoire de Master en Génie Électrique, spécialité Énergies Renouvelables en Électrotechnique, Université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem.
- [20] Boukortt, Nour El I., et al. "Electrical and Optical Investigation of 2T-Perovskite/u-CIGS Tandem Solar Cells With ~30% Efficiency." **IEEE Transactions on Electron Devices**, 2022, doi: 10.1109/TED.2022.3176591
- [21] P. Cui et al., "Planar p–n homojunction perovskite solar cells with efficiency exceeding 21.3%," *Nat Energy*, vol. 4, pp. 150–159, Feb. 2019.
- [22] Q. Chen, N. De Marco, Y. Michael, T. Song, C. Chen, and H. Zhao, "Under the spotlight: The organic – inorganic hybrid halide perovskite for optoelectronic applications," vol. 10, p. 355, 2015.
- [23] L. Kranz et al., "High-efficiency polycrystalline thin film tandem solar cells," *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 6, no. 14, pp. 2676– 2681, 2015.
- [24] Amin, A., Burn, P. L., Meredith, P., & Pivrikas, A. (2020). Measurement of charge carrier mobility in organic semiconductor thin films. *Nature Materials*, 19(1),19-31.
- [25] Snaith, H. J. (2018). Present status and future prospects of perovskite photovoltaics. *Nature Materials*, 17(5),372-376.
- [26] Zhao, J., Wang, A., Green, M. A., & Ferrazza, F. (2019). 19.8 % efficient "honeycomb" textured multicrystalline and 24.4 % monocrystalline silicon cells. *Applied Physics Letters*, 73(14),1991-1993.
- [27] Snaith, H. J.(2013). Perovskite : The Emergence of a new Era for Low-Cost,High-Efficiency Solar Cells. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 4(21), 3623-3630.
- [28] Leijtens, T., Eperon, G. E., Noel, N. K., Habisreutinger, S. N., Petrozza, A., & Snaith H. J. (2015). Stability of Metal Halide Perovskite Solar Cells. *Advanced Energy Materials* 5(20), 1500963.

- [29] Y. Li, X. Wu, J. Lu, et al., "Modeling and simulation of solar cells based on ATLAS," 2016 12th International Conference on Natural Computation, Fuzzy Systems and Knowledge Discovery (ICNC-FSKD), Changsha, 2016, pp. 1295-1299, doi: 10.1109/FSKD.2016.7603316.
- [30] Y. Li, " Numerical Simulation of Simiconductor Divices Using SILVACO ATLAS," 2015 International Conference on Simulatiopn of Simiconducto Processes and Divices (SISPASD), Washington, DC, USA, 2015, pp.219-222, doi: 10.1109/SISPASD.2015.7292344.
- [31] Burhanettin Can "Numerical Simulation of Solar Cells Using Silvao ATLAS,"2017 International Conference on Computer Science and Engineering(UBMK),Antalya, 2017,pp.1-5,doi:10.1109/UBMK.2017.8093421
- [32]. S. De Wolf, "Surface Recombination Velocity of Phosphorus Diffusion Sources on Silicon Solar Cells", IEEE Journal of Photovoltaics, Volume 5, Issue 3, 2015, Pages 757-761.
- [33]. A. Martí, L. Cuadra, "Auger recombination in InGaP/(In)GaAs/Ge multijunction solar cells", Solar Energy Materials and Solar Cells, Volume 90, Issue 18-19, 2006, Pages 3320-3325.
- [36] Yang, W. S., Park, B. W., Jung, E. H., Jeon, N. J., Kim, Y. C., Lee, D., & Seo, J.-H. (2017). Iodide management in formamidinium-lead-halide-based perovskite layers for efficient solar cells. *Science*, 356(6345), 1376-1379.
- [37] Correa-Baena, J.-P., Saliba, M., Buonassisi, T., Gratzel, M., Abate, A., Tress, W., & Hagfeldt, A. (2017). Promises and challenges of perovskite solar cells. *Science*, 358(6364).
- [38] Sidhik, S., Wang, Y., De Siena, M., Asadpour, R., Torma, A. J., Terlier, T., Ho, K., Li, W., Puthirath, A. B., Shuai, X., Agrawal, A., Traore, B., Jones, M., Giridharagopal, R., Ajayan, P. M., Strzalka, J., Ginger, D. S., Katan, C., Alam, M. A., ... Mohite, A. D. (2022). Deterministic fabrication of 3D/2D perovskite bilayer stacks for durable and efficient solar cells. *Science*, 377(6611), 1425-1430.
- [39] Siraj Sidhik, et al. (2022). Deterministic fabrication of 3D/2D perovskite bilayer stacks for durable and efficient solar cells. *Science*, 377, 1425.

Résumé

Résumé

Ce mémoire explore en profondeur les cellules solaires photovoltaïques à base de pérovskite, mettant en avant leur potentiel exceptionnel dans le domaine des énergies renouvelables. À travers une série de simulations numériques détaillées, nous avons analysé et optimisé les performances de ces cellules, en étudiant divers paramètres tels que le dopage, l'épaisseur des couches et les conditions environnementales. L'étude commence par une présentation des bases théoriques des jonctions PN et des cellules solaires idéales, permettant de comprendre les mécanismes de fonctionnement et les défis liés aux pertes de performance. Ensuite, les cellules solaires à pérovskite, en tant que technologie émergente, sont analysées en détail, en insistant sur l'architecture des dispositifs et les méthodes de caractérisation des performances. Les simulations effectuées avec SILVACO-ATLAS ont permis d'optimiser les cellules solaires tandem pérovskite/pérovskite, révélant des améliorations significatives en termes d'efficacité, de facteur de forme et de densité de courant de court-circuit. En outre, les simulations numériques sous MATLAB Simulink ont mis en évidence l'impact des conditions environnementales, telles que l'éclairement et la température, sur les performances des panneaux solaires. Les résultats obtenus soulignent l'importance de la gestion thermique et de l'optimisation de l'exposition à la lumière pour maximiser l'efficacité des panneaux solaires.

Abstract

This thesis explores perovskite-based photovoltaic solar cells, highlighting their exceptional potential in the field of renewable energy. Through a series of detailed numerical simulations, we analyzed and optimized the performance of these cells by studying various parameters such as doping, layer thickness, and environmental conditions. The study begins with a presentation of the theoretical foundations of PN junctions and ideal solar cells, providing a basis for understanding the operating mechanisms and performance loss challenges. Next, perovskite solar cells, as an emerging technology, are analyzed in detail, with a focus on device architecture and performance characterization methods.

Simulations performed with SILVACO-ATLAS allowed us to optimize perovskite/perovskite tandem solar cells, revealing significant improvements in efficiency, fill factor, and short-circuit current density. Additionally, numerical simulations with MATLAB Simulink highlighted the impact of environmental conditions, such as illumination and temperature, on the performance of solar panels. The results emphasize the importance of thermal management and optimal light exposure to maximize the efficiency of solar panels.

ملخص

يستكشف هذا الأطروحة الخلايا الشمسية الكهروضوئية المعتمدة على مادة البيروفسكايت، مسلطاً الضوء على إمكاناتها من خلال سلسلة من المحاكاة العددية التفصيلية، قمنا بتحليل وتحسين أداء هذه الخلايا. الاستثنائية في مجال الطاقة المتجددة تبدأ الدراسة بعرض الأسس النظرية. عن طريق دراسة مختلف العوامل مثل التطعيم، وسمك الطبقات، والظروف البيئية بعد ذلك، يتم تحليل. والخلايا الشمسية المثالية، مما يوفر أساساً لفهم آليات التشغيل وتحديات فقدان الأداء PN لوصلات الخلايا الشمسية البيروفسكايتية، كتكنولوجيا ناشئة، بالتفصيل، مع التركيز على هندسة الأجهزة وطرق توصيف الأداء.

تحسين الخلايا الشمسية الترادفية SILVACO-ATLAS أتاحت المحاكاة التي تم إجراؤها باستخدام بالإضافة إلى. بيروفسكايت، مما كشف عن تحسينات كبيرة في الكفاءة، وعامل الملء، وكثافة التيار القصير/بيروفسكايت تأثير الظروف البيئية مثل الإضاءة ودرجة الحرارة على MATLAB Simulink ذلك، أبرزت المحاكاة العددية باستخدام تؤكد النتائج على أهمية الإدارة الحرارية والتعرض الأمثل للضوء لتعظيم كفاءة الألواح الشمسية. أداء الألواح الشمسية

Mots clefs :

Panneaux solaires, photovoltaïque, cellules tandem, pérovskite, simulation numérique, SILVACO ATLAS, MATLAB SIMULINK, Calibrage, efficacité de conversion, optimisation, caractérisation des performances, courbes courant-tension (J_{sc} -V), spectre solaire, transport des porteurs de charge, énergies renouvelables, développement durable

