

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES

AMÉLIORATION DES PERFORMANCES DES MODULES SOLAIRES
PHOTOVOLTAÏQUES PAR L'UTILISATION DE TECHNOLOGIES ÉMERGENTES

MÉMOIRE PRÉSENTÉ
COMME EXIGENCE PARTIELLE DE LA
MAÎTRISE EN GÉNIE ÉLECTRIQUE

PAR
MOUSSA TOURÉ

MARS 2025

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire, de cette thèse ou de cet essai a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire, de sa thèse ou de son essai.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire, cette thèse ou cet essai. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire, de cette thèse et de son essai requiert son autorisation.

UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES
MAÎTRISE EN GÉNIE ÉLECTRIQUE (M. Sc. A.)

Direction de recherche :

Mamadou Lamine DOUMBIA,
Directeur de recherche

Université du Québec à Trois-Rivières

Jury d'évaluation

Abdeldjebar Hazzab, Évaluateur

École de Technologie Supérieure, Montréal

Olivier Thierry Sosso Mayi, Évaluateur

École Normale Supérieure d'Enseignement
Technique, Douala, Cameroun

Mamadou Lamine DOUMBIA,
Directeur de recherche

Université du Québec à Trois-Rivières

Résumé

L'exploitation de l'énergie solaire à travers les cellules photovoltaïques en silicium constitue aujourd'hui une solution largement répandue pour la production d'électricité. Toutefois, cette technologie présente des limites notables. Le silicium, bien qu'efficace, atteint un rendement théorique maximal d'environ 25 %, et les meilleures cellules en laboratoire peinent à dépasser les 22 %. Cette contrainte de performance, combinée à des coûts d'investissement élevés liés à l'augmentation de la surface nécessaire pour répondre à des besoins énergétiques croissants, freine l'adoption massive de cette technologie, en particulier dans les contextes où l'espace ou les ressources sont limités.

Face à ces limites, l'objectif de ce mémoire est de proposer une solution innovante visant à améliorer les performances des cellules photovoltaïques grâce à l'architecture tandem. Cette approche consiste à associer deux types de matériaux complémentaires : une cellule supérieure à pérovskites, capable d'absorber la lumière visible à haute énergie, et une cellule inférieure en silicium, optimisée pour capter la lumière infrarouge à plus faible énergie. En exploitant plus efficacement le spectre solaire, cette configuration permet d'augmenter le rendement global de conversion de l'énergie lumineuse en électricité à plus de 30 % sur des surfaces d'exploitation identiques.

Pour atteindre cet objectif, une méthodologie rigoureuse a été mise en place, reposant sur l'utilisation de plusieurs outils scientifiques de simulation avancés. Le logiciel SCAPS-1D a été utilisé pour modéliser le comportement électrique des différentes couches actives des cellules, tandis que SETFOS a permis d'analyser les propriétés optiques des films minces et leurs impacts sur l'absorption de la lumière. En complément, MATLAB/Simulink a été

mobilisé aussi bien pour le traitement des données issues des simulations et l'optimisation des paramètres physiques influençant les performances de la cellule tandem, que pour la construction des modules solaires photovoltaïques afin d'évaluer les gains concrets de l'implémentation de telles technologies.

Les résultats obtenus à l'issue de ces simulations sont particulièrement prometteurs. La cellule tandem pérovskites-silicium modélisée a atteint un rendement de conversion de 30.8725 %, dépassant ainsi les performances des cellules à simple jonction en silicium. Ce gain d'efficacité confirme l'intérêt de l'approche tandem pour surmonter les limites actuelles des technologies photovoltaïques classiques.

Enfin, ce travail apporte une contribution scientifique significative en proposant une structure multicouche optimisée, capable de maximiser l'absorption du spectre solaire tout en minimisant les pertes énergétiques. L'étude met en lumière l'influence de paramètres clés tels que l'épaisseur des couches, la mobilité des porteurs de charge et les bandes d'énergie sur les performances globales de la cellule. Ces résultats ouvrent des perspectives intéressantes pour le développement de cellules photovoltaïques plus performantes, durables et adaptées aux enjeux énergétiques actuels.

Mots-clés : Photovoltaïque, Silicium, Pérovskites, Cellule tandem, Rendement énergétique, Simulation numérique, SCAPS-1D, SETFOS, MATLAB/Simulink, Absorption spectrale, Structure multicouche, Optimisation, Conversion solaire, Énergie renouvelable, Innovation technologique.

Remerciements

En premier lieu, je tiens à exprimer ma profonde gratitude ainsi que ma pleine reconnaissance envers mon directeur de recherche monsieur Mamadou Lamine DOUMBIA, Directeur du département de génie électrique et génie informatique à l'Université du Québec à Trois-Rivières, qui en sa qualité de directeur de recherche s'est toujours montré disponible pour me soutenir et m'accompagner tout au long de mes travaux de recherche.

En second lieu, je tiens à remercier tous les professeurs du département de génie électrique et génie informatique de l'Université du Québec à Trois-Rivières dont l'implication dans les différents cours que j'ai suivis, a aidé au bon déroulement de mon cursus. Je me remercie donc tout particulièrement messieurs Alben CARDENAS, Adam SKOREK, Loïc BOULON et Abdeldjebbar HAZZAB.

En troisième lieu, je remercie tous les professeurs-chercheurs qui ont accepté de corriger mon mémoire : le professeur Abdeldjebbar HAZZAB de l'ÉTS à Montréal et le professeur Olivier Thierry SOSSO MAYI de l'ENSET de Douala au Cameroun.

Je termine cette partie en remerciant tout particulièrement mes parents, Mohammad A. TOURÉ et Adjaratou PITROIPA, dont la confiance inébranlable et le soutien indéfectible m'ont permis d'en arriver là.

Table des matières

Résumé.....	iii
Remerciements.....	v
Table des matières.....	vi
Liste des figures	xi
Liste des abréviations, sigles et acronymes.....	xv
Liste des symboles	xix
Chapitre 1 - INTRODUCTION	1
1.1 Mise en contexte.....	1
1.2 Problématique.....	2
1.3 Objectifs	2
1.4 Méthode.....	3
1.5 Organisation du mémoire	4
Chapitre 2 - Revue de la littérature	6
2.1 Historique	6
2.2 Effet photovoltaïque dans les cellules organiques.....	8
2.3 Jonction.....	10
2.3.1 Contact ohmique	10
2.3.2 Contact Schottky	12

2.3.3 Jonction p-n.....	14
2.4 Spectre solaire	15
2.5 Absorption de la lumière	18
2.6 Modélisation de la cellule solaire photovoltaïque	21
2.7 Caractéristiques courant-tension	24
2.8 Rendement de conversion.....	26
2.9 Rendement quantique externe	27
2.10 Pérovskites.....	28
2.11 Cellules photovoltaïques à pérovskites	30
2.12 Cellules tandem	36
2.13 Conclusion.....	40
Chapitre 3 - Étude de la cellule solaire à pérovskites par simulation	42
3.1 Introduction	42
3.2 Étude des configurations multicouches	42
3.2.1 Ordre n ou p	43
3.3 Simulation des différentes configurations inverses de la cellule à pérovskites.....	45
3.3.1 Présentation et explication du fonctionnement des logiciels utilisés	45
3.3.2 Étude des effets de la nature des électrodes sur le PCE.....	61

3.3.3 Étude des effets des couches de transport de charges ETL et HTL sur le PCE.	69
3.3.4 Étude des effets de l'épaisseur de la pérovskite sur le PCE.....	79
3.4 Conclusion.....	85

Chapitre 4 - Optimisation de la structure de la cellule à pérovskites pour

association en tandem avec une cellule à silicium cristallin.....	86
4.1 Introduction	86
4.2 Optimisation des couches de la cellule solaire à pérovskites	86
4.2.1 Étude des différents effets de la variation de la bande interdite de la couche active de la cellule.....	87
4.2.2 Optimisation de l'épaisseur de la couche active de la cellule solaire à pérovskites pour une bande interdite de 1.80 eV.....	88
4.3 Étude de la cellule tandem pérovskites-silicium	91
4.3.1 Optimisation de l'agencement des différentes couches du tandem de cellule à pérovskites et de cellule à silicium cristallin. 91	
4.3.2 Optimisation des performances de la cellule tandem.....	92
4.4 Conclusion.....	100

Liste des tableaux

Tableau 2-1 : Performances d'une cellule solaire classique à silicium.	24
Tableau 3-1 : Étude comparative des simulateurs de cellules solaires photovoltaïques [44].	46
Tableau 3-2 : Paramètres des différentes couches de la cellule sur SETFOS.	52
Tableau 3-3: Paramètres des différentes couches étudiées sur SCAPS-1D.	59
Tableau 3-4 : Paramètres des caractéristiques physiques des différentes interfaces.	60
Tableau 3-5 : Paramètres physiques des électrodes Au et Ag [50].	64
Tableau 3-6 : Effets de l'épaisseur de la couche CdS pour une structure ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /CdS/Ag/Verre.	71
Tableau 3-7 : Effets de l'épaisseur de la couche ZnS pour une structure ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ZnS/Ag/Verre.	72
Tableau 3-8 : Effets de l'épaisseur de la couche TiO ₂ sur la structure ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /TiO ₂ /Ag/Verre.	73
Tableau 3-9 : Effets de l'épaisseur de la couche PEDOT : PSS sur la structure ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ZnS/Ag/Verre.	76
Tableau 3-10 : Effets de l'épaisseur de la couche Spiro-OMe-TAD sur la structure ITO/Spiro-OMe-TAD/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ZnS/Ag/Verre.	77
Tableau 3-11 : Effets de l'épaisseur de la couche active CH ₃ NH ₃ PbI ₃ sur la structure ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /ZnS/Ag/Verre.	79
Tableau 3-12 : Performances d'une cellule solaire à pérovskites Verre/Ag/ZnS (10 nm)/Pérovskite (700 nm)/PEDOT-PSS (60 nm)/ITO.	81
Tableau 4-1 : Performances de la cellule à pérovskites hybridés au chlore avec une bande interdite de 1.80 eV.	90
Tableau 4-2 : Paramètres des différentes couches de la cellule solaire tandem Verre/ITO/ZnS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ /PEDOT :PSS/c-Si(n)/c-Si(p)/c-Si BSF(p+)/Ag.	93
Tableau 4-3 : Performances de la cellule tandem étudiée dans sa configuration sus décrite.	94

Tableau 4-4 : Comparaison des performances en termes de puissance de différents types de modules solaires photovoltaïques pour une même surface d'exposition aux rayonnement lumineux dans les conditions STC.	96
Tableau 4-5 : Récapitulatif des performances des différents types de modules étudiés.	98

Liste des figures

Figure 2-1 : Schéma équivalent d'une cellule PV modèle à une diode: Illustration de l'effet photovoltaïque [9].	8
Figure 2-2 : Illustration schématique de la production d'énergie dans les cellules solaires organiques [13].	9
Figure 2-3 : Niveaux d'énergie d'un contact ohmique de type n, entre métal et semiconducteur, de gauche à droite, avant et après contact [14].	11
Figure 2-4 : Symbole de la diode à jonction PN.	11
Figure 2-5 : Caractéristique $I(V)$ d'un contact ohmique	11
Figure 2-6 : Symbole d'une diode Schottky.	13
Figure 2-7 : Caractéristique électrique de la diode Schottky [16].	13
Figure 2-8 : Diagramme de bande d'une jonction p-n à l'équilibre [18].	15
Figure 2-9 : Représentation de la diffusion moléculaire de Rayleigh [19].	16
Figure 2-10 : Spectres d'émission et d'absorption des radiations émises par le soleil et par la terre [20].	17
Figure 2-11 : Intensité du rayonnement solaire dans l'espace et sur la terre par rapport à l'émission d'un corps noir idéal à une température de 5900 K [21].	18
Figure 2-12 : Indices d'absorption et de réfraction des pérovskites et du silicium [23].	19
Figure 2-13 : Comparaison des coefficients d'absorption des pérovskites et du silicium sur les longueurs d'ondes du spectre solaire [23].	20
Figure 2-14 : Circuit électrique équivalent d'une cellule PV selon le modèle à une diode [24].	22
Figure 2-15 : Effets des résistances $R_S(a)$ et $R_P/R_{sh}(b)$ sur la caractéristique J-V sur la cellule solaire [26].	23
Figure 2-16 : Caractéristique électrique (J-V) d'une cellule solaire à silicium.	25
Figure 2-17 : Rendement quantique externe de la cellule à silicium.	28
Figure 2-18 : Structure hybride des pérovskites [30].	29

Figure 2-19 : Configuration multicouche.....	31
Figure 2-20 : De gauche à droite l'architecture p-i-n et n-i-p d'une cellule solaire.	32
Figure 2-21 : Diagramme de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux [32].	32
Figure 2-22 : Structure d'une cellule organique monocouche (à gauche). Représentation des niveaux d'énergie d'un contact ITO/HTL/Pérovskites/ETL/Ag (à droite) [4].	34
Figure 2-23 : L'évolution dans le temps de l'efficacité des différentes technologies de cellules solaires [40].	38
Figure 2-24 : Cellule tandem pérovskites/silicium; a) architecture 4T, b) architecture 2T [41].	39
Figure 2-25 : Limite d'efficacité des cellules tandem à deux et quatre terminaisons en fonction de la bande interdite de la cellule supérieure et de l'intensité d'illumination [37].	40
Figure 3-1 : Circuit équivalent de la cellule solaire à pérovskites [48].	55
Figure 3-2 : Représentation paramétrique du panneau solaire photovoltaïque développée sur MATLAB/Simulink.	55
Figure 3-3 : Organigramme du processus de simulation sur SCAPS-1D.	57
Figure 3-4 : Algorithme d'estimation des éléments parasites [48].	58
Figure 3-5 : Représentation des niveaux d'énergie des couches de matériaux étudiées pour notre cellule à pérovskites.....	61
Figure 3-6 : Représentation du modèle de Bohr de l'atome.	62
Figure 3-7 : Les indices d'absorption et de réfraction de Ag et de Au.[23]	65
Figure 3-8 : Comparaison des coefficients d'absorption de Ag et de Au.[23]	66
Figure 3-9 : Comparaison des indices de réfraction de Ag et de Au [23].....	67
Figure 3-10 : Évolution de la transmittance de ITO sur le spectre solaire en fonction de son épaisseur [45].	68
Figure 3-11 : Représentation de l'évolution du spectre de transmission des photons dans la structure Verre/ITO/PEDOT : PSS/CH ₃ NH ₃ PbI ₃ avec une épaisseur de 60 nm de la couche PEDOT : PSS.	68

Figure 3-12 : Indices d'absorption et de réfraction de l'ITO [23].....	69
Figure 3-13 : Représentation des structures monolithiques étudiées dans cette partie.	70
Figure 3-14 : Comparaison de l'effet des couches CdS, ZnS et TiO ₂ sur le PCE.	74
Figure 3-15 : Les indices d'absorption et de réfraction de la PEDOT-PSS et du Spiro-OMe-TAD [23].....	75
Figure 3-16 : Représentation des structures monolithiques abordées dans cette étude.	76
Figure 3-17 : Comparaison de l'effet des couches Spiro-OMe-TAD et PEDOT- PSS sur le PCE.	78
Figure 3-18 : Représentation de la vitesse de génération des charges sur les différents niveaux d'énergie des couches de la cellule sur le diagramme des bandes d'énergie [23].....	78
Figure 3-19 : Détermination de l'épaisseur optimale de la couche active à pérovskites étudiée.	80
Figure 3-20 : Représentation des performances réalisées par la cellule solaire à pérovskites.	81
Figure 3-21 : Comparaison des performances réalisées avec des cellules à pérovskites et à silicium.	82
Figure 3-22 : Évolution de EQE et de l'énergie photonique de la cellule à pérovskites sur ses longueurs d'ondes d'absorption en fonction de l'épaisseur de sa couche dans la cellule.	83
Figure 3-23 : Comparaison des variations de la conversion des photons incidents en énergie suivant les variations du spectre solaire.	84
Figure 4-1 : Étude des effets de la variation de la bande interdite de la couche active.....	88
Figure 4-2 : Optimisation de l'épaisseur de la couche active pour une bande interdite de 1.80 eV.	89
Figure 4-3 : Comparaison des performances de la cellule à pérovskites pour différentes valeurs de la bande interdite.	90
Figure 4-4 : Représentation de la structure monolithique tandem de cellule étudiée.....	92
Figure 4-5 : Caractéristique J-V de la cellule tandem étudiée.	94

Figure 4-6 : Comparaison des performances des (03) trois cellules.	95
Figure 4-7 : Comparaison de la puissance de différents modules en fonction de leur envergure.	97
Figure 4-8 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à silicium monocristallin classique en fonction de l'irradiation croissante.....	98
Figure 4-9 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à pérovskites en fonction de l'irradiation croissante.	99
Figure 4-10 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à cellules tandems pérovskites-silicium en fonction de l'irradiation croissante.....	99

Liste des abréviations, sigles et acronymes

Abréviations

A : Accepteur

BG : Band Gap

D : Donneur

EQE : Extern Quantum Efficiency

ETL : Electron Transport Layer

FF : Fill Factor/Facteur de forme

GES : Gaz à Effets de Serre

HF : Haute Fréquence

HOMO: Highest Occupied Molecular Orbital

HTL: Hole Transport Layer

LUMO: Lowest Unoccupied Molecular Orbital

NREL: National Renewable Energy Laboratory

SETFOS : Semiconducting Emisive Thin Film Optics Simulation

SCAPS-1D: Solar cell Capacitance Simulator

PCE : Power Conversion Efficiency

PV : Photovoltaïque

ZCE : Zone de Charge d'Espace

n-i-p : négatif-intrinsèque-positif

p-i-n : positif-intrinsèque-négatif

IDL : Interface Defect Layer

TCO : Transparent Conductive Oxides

Éléments chimiques

Ag : Argent

AgBr : Bromure d'argent

AgCl : Chlorure d'argent

Al : Aluminium

Au : Or

Br: Brome

C₄H₁₀ : Anthracène

C₆₀ : Fullerène

CaTiO₃ : Pérovskite

CH₃NH₃PbI₃ : Methylammonium lead halide

Cl : Chlore

CO₂ : Gaz carbonique

Cs : Césium

I : Iode

ITO : Oxyde d'indium-étain

MoO₃ : Trioxyde de molybdène

O₂ : Dioxygène

O₃ : Ozone

Pb : Plomb

PCBM : (6,6)-phényl-C61-butanoate de méthyle

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

Si : Silicium

TiO₂ : Dioxyde de titane

ZnO : Oxyde de zinc

Liste des symboles

Électrique

e : charge élémentaire (C)

I_{ph} : photocourant (A)

I_s : courant de saturation (A)

I_{SC} : courant de court-circuit (A)

J_{SC} : densité de courant de court-circuit (mA/cm²)

R_P : résistance parallèle (Ω)

R_S : résistance série (Ω)

T : température absolue (K)

V_{OC} : tension en circuit ouvert (V)

μ_n : mobilité des électrons (cm²/V.s)

μ_p : mobilité des trous (cm²/V.s)

E : champ électrique (mV/m)

J_n : densité de courants des électrons (mA/cm²)

J_p : densité de courants des trous (mA/cm²)

Autres

k : constante de Boltzmann (J/K)

h : constante de Planck (J.s)

K : indice complexe de réfraction

n : indice de réfraction (u.a.)

R : réflectance (u.a.)

T : transmittance (%)

λ : longueur d'onde (nm)

Chapitre 1 - INTRODUCTION

1.1 Mise en contexte

L'énergie solaire photovoltaïque est une source d'énergie renouvelable très prometteuse pour l'avenir. En effet, contrairement à l'exploitation des ressources d'énergie fossiles qui polluent énormément, celle de l'énergie solaire photovoltaïque est beaucoup plus respectueuse de l'environnement car elle utilise des modules solaires photovoltaïques recyclables (à 85% en fin de vie) n'émettant pas de gaz à effets de serre (GES) et dont la fonction consiste à capter les rayonnements directs du soleil afin de produire de l'électricité. Cela s'explique par le fait que le principal impact environnemental réside dans la production, le transport, l'installation et le recyclage de ces infrastructures. Le processus de transformation de l'énergie solaire en énergie électrique ne génère aucune pollution. [1]

Le silicium monocristallin est le matériau le plus largement utilisé dans les panneaux solaires photovoltaïques du marché. En effet, il représente à peu près 85% du marché mondial et ses rendements sont proches de 22% voire 25% dans les meilleures conditions avec une durée de vie d'environ 30 ans.[2] Néanmoins, les coûts d'investissement motivent les chercheurs à proposer des alternatives plus intéressantes en termes de performances électriques et de coûts.

1.2 Problématique

Le silicium a tiré parti de plusieurs décennies de recherche, ce qui a rendu sa technologie plus compétitive et a permis à ses panneaux d'atteindre une durée de vie moyenne de 30 ans. Cependant, son efficacité maximale est limitée et parmi les raisons de cette limite, on peut noter sa capacité d'absorption de la lumière mais aussi les pertes par thermalisation. Ces dernières sont dues à l'absorption de photons dont l'énergie est plus grande que celle de la bande interdite du silicium. Une des méthodes employées pour diminuer ces pertes par thermalisation consiste à créer des cellules multi jonctions (composées de cellules de bandes interdites différentes). La disposition de ces cellules est faite de sorte que les jonctions avec des bandes interdites (BG) plus élevées soient situées à l'avant, ce qui permet d'accroître l'efficacité de la cellule sur une plage plus étendue du spectre solaire. Toutefois, les méthodes classiques employées pour produire les cellules multi jonctions sont onéreuses, ce qui restreint considérablement leur production à grande échelle. Afin de réduire les coûts de fabrication, on utilise la technique d'impression à partir de solution. Il s'agit de créer une cellule polymère à grande bande d'énergie en utilisant une impression au-dessus d'une cellule de silicium. Grâce à cette méthode, on peut accroître l'efficacité de conversion entre la cellule silicium et la cellule imprimée, tout en réduisant les coûts de fabrication de la cellule multi jonction.

1.3 Objectifs

Afin de correctement traiter notre sujet, nous le décomposerons de sorte à aborder plusieurs objectifs dans le but d'atteindre un objectif général. Ainsi, on étudiera, dans un premier temps, les pérovskites, leurs caractéristiques physiques et chimiques puis leur utilisation dans l'exploitation solaire.

Ensuite, dans la résolution de la problématique de notre sujet de recherche, nous étudierons différentes architectures de cellules multi jonctions telles que les cellules tandem pérovskites-silicium afin de déterminer celle qui convient le mieux aussi bien à une utilisation domestique qu'à une centrale.

Enfin, on finira par aborder les effets pratiques de l'implémentation des technologies et topologies des cellules étudiées dans des modules et champs solaires photovoltaïques. Cela permettra de concrétiser l'apport d'une telle orientation dans l'exploitation solaire photovoltaïque.

De façon générale, ce sujet de recherche vise à proposer des solutions d'amélioration des performances des modules solaires photovoltaïques par l'utilisation de nouveaux matériaux.

1.4 Méthode

Le but de ces travaux de recherche étant d'améliorer les performances des modules solaires photovoltaïques, on commencera par une recherche bibliographique sur les pérovskites et les cellules tandems, leurs caractéristiques et leurs applications dans le solaire photovoltaïque.

Puis, nous modéliserons les différents types de modules solaires avec les logiciels SETFOS, SCAPS-1D et MATLAB/Simulink. Cela dans l'objectif de procéder à des tests et évaluations des performances en tenant compte des facteurs environnementaux tels que l'exposition aux intempéries.

Enfin, nous réaliserons une analyse comparative des résultats obtenus lors des simulations dans le but d'identifier celles donnant les meilleures performances et constituant

le meilleur choix pour une amélioration des caractéristiques des systèmes solaires photovoltaïques.

1.5 Organisation du mémoire

Le contenu de ce mémoire est structuré comme suit :

Le chapitre 1 est consacré à l'introduction au projet de recherche, par la présentation en premier lieu du projet de recherche dans son contexte, puis de la problématique suscitée et enfin des objectifs attendus et de la méthodologie adoptée.

La revue bibliographique est présentée dans le chapitre 2. Cette partie illustrera différentes technologies de modules solaires photovoltaïques en termes de compositions et de performances. Ce chapitre permettra de décrire plus précisément les impacts des différentes couches composant la cellule sur la performance de cette dernière.

Le chapitre 3 présentera différents modèles d'architectures de cellules solaires à pérovskites (agencement et fonction des couches, paramètres techniques et performances). Dans ce chapitre, on étudiera également par le biais de simulations l'impact de l'épaisseur des couches de pérovskites (couches de transport de trous HTL, couche active, couche de transport d'électrons ETL, le taux de recombinaison des charges, la mobilité électronique et l'effet du BG des pérovskites), les effets des anodes et des cathodes sur l'efficacité de la conversion de la puissance incidente (PCE), les effets du travail de sortie de ITO sur le PCE.

Le chapitre 4 quant à lui présentera une optimisation de la couche de pérovskites pour la cellule multi jonction tandem Pérovskites-Silicium. Les résultats ainsi obtenus permettront de valider les objectifs initiaux.

On conclura le mémoire en abordant les résultats, les recommandations et les perspectives de cette étude.

Chapitre 2 - Revue de la littérature

2.1 Historique

L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien Alexandre Edmond BECQUEREL. En éclairant des électrodes de platines recouvertes de chlorure ou de bromure d'argent (AgCl-AgBr) dans un liquide, il a observé la présence d'un courant photoélectrique [3]. Entre 1873 et 1876, Smith et Adam ont été les premiers à écrire des rapports sur la photoconductivité du matériau sélénium [4].

En 1905, le phénomène photoélectrique a été expliqué par Albert Einstein, ce qui lui a valu d'être récompensé par le prix Nobel de physique en 1921. La photoconductivité a été détectée pour la première fois dans l'anthracène par Pochettino en 1906 et Volmer en 1913, respectivement. La première cellule au silicium cristallin a été produite par les équipes de Bell Laboratories en 1954, avec un rendement de 4 %. Avec le temps, cette performance a atteint 24 % dans les laboratoires [4].

De nos jours, les panneaux solaires en silicium constituent 99 % du marché du photovoltaïque [4]. Elles occupent une position dominante sur le marché des cellules solaires photovoltaïques en raison de leur efficacité accrue, de leur stabilité exceptionnelle et de leurs faibles coûts de production. La progression dans les travaux de recherche portant sur la technologie photovoltaïque basée sur le silicium a entraîné une baisse significative des coûts de production, ce qui a conduit à une augmentation significative des modules solaires photovoltaïques à silicium sur le marché mondial au cours des 20 dernières années. L'une des

possibilités pour diminuer encore les dépenses et améliorer l'efficacité consiste à combiner le silicium avec les pérovskites dans une configuration tandem qui peut fournir de biens meilleurs rendements. En effet, les pérovskites ont la capacité de se coupler aisément avec le silicium grâce à sa bande interdite variable. La technologie des cellules à pérovskites est séduisante pour diverses raisons dont sa technologie à basse température, son coût de production abordable, ses dispositifs souples et sa diversité de matières premières abordables [5, 6].

Des études menées aux États-Unis en 2017 établissent les coûts directs de production pour un module solaire photovoltaïque standard à pérovskites à \$31.7/m² et un prix minimum soutenable (MSP) de \$0.41/W_p. Ceci pourrait, à l'échelle d'une centrale, produire une énergie dont le coût au kilowattheure varierait entre 4.93¢ et 7.90¢ [7] . Ceux-ci, nous le rappelons, restent inférieurs aux coûts de l'énergie obtenu avec les modules solaires à silicium actuel (soit 6.8¢ par kilowattheure en 2019) tout en n'ayant pas profité des mêmes efforts employés dans la recherche et le développement du silicium pour cette application. Donc, on peut dire que la pérovskite dispose de gros atouts dans le contexte actuel [8].

Cependant, bien que des avancées et progrès remarquables aient été réalisés, la technologie photovoltaïque multi jonction organique-inorganique est encore en phase de recherche et de développement. Néanmoins, la mise en vente de cette technologie sur le marché sera principalement conditionnée par la création de procédés abordables, une conversion plus efficace de l'énergie et une meilleure adaptabilité aux conditions environnementales (les variations de température et la sensibilité à l'humidité).

2.2 Effet photovoltaïque dans les cellules organiques

La figure 2-1 illustre l'effet photovoltaïque, qui consiste à convertir l'énergie lumineuse en électricité grâce à un matériau semi-conducteur chargé de transporter les charges électriques.

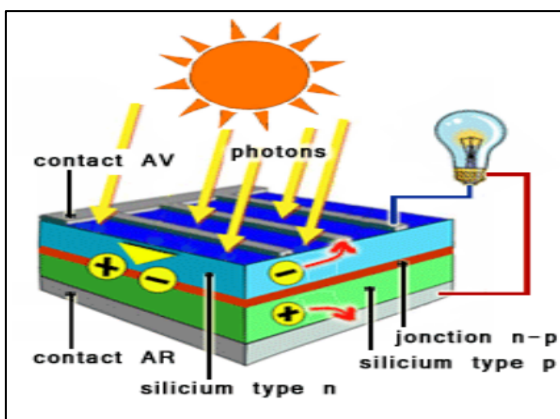


Figure 2-1 : Schéma équivalent d'une cellule PV modèle à une diode: Illustration de l'effet photovoltaïque [9].

Un semi-conducteur est donc défini comme un matériau qui, dans certaines conditions, a les mêmes caractéristiques électriques qu'un matériau conducteur d'électricité ou autrement se comporte comme un isolant.

Ce processus de conversion nécessite un ensemble de procédés physiques :

- Absorption des photons incidents et génération d'excitons : À la différence des cellules inorganiques, le matériau organique absorbe les photons et produit des excitons fortement liés. Un exciton est composé d'une paire d'électrons et de trous qui sont rapprochés par une attraction électrostatique dans un espace [10, 11] ;
- Diffusion et dissociation des excitons : La diffusion de l'exciton dans le matériau se fait d'une molécule à une autre (transferts de Dexter ou de Förster) jusqu'à un point de dissociation permettant de séparer les porteurs de charges. Cette

séparation peut être réalisée selon diverses techniques : excitation thermique, présence d'impuretés, formation d'un champ électrique, et selon les structures, par la jonction de deux semi-conducteurs de nature et de type différents (hétérojonction) ou par la création d'une barrière de potentiel entre un métal et un semi-conducteur (diode Schottky) [11, 12] ;

- Transport et collection des charges : Les charges sont déplacées vers les électrodes grâce à la mobilité des porteurs dans les couches organiques. Elle est influencée par la recombinaison des charges et les interactions avec les atomes et les charges du milieu. La différence entre les travaux de sortie des électrodes est due au champ électrique qui permet de recueillir les porteurs de charges sur leurs électrodes respectives (électrons sur la cathode et trous sur l'anode) [11].

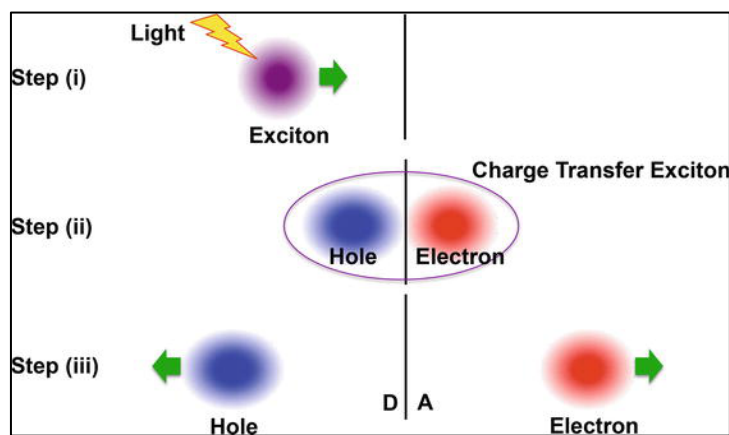


Figure 2-2 : Illustration schématique de la production d'énergie dans les cellules solaires organiques [13].

La figure 2-2 nous montre les différentes étapes allant de la formation de l'exciton chargé à la dissociation effective du trou et de l'électron. L'Exciton de Transfert de Charge (ETC), entouré d'une ellipse, comprend l'électron et le trou au niveau de l'accepteur et du donneur, respectivement. Il est crucial dans les processus d'absorption de la lumière et de séparation

des charges dans les cellules solaires. Les régions du donneur et de l'accepteur sont abrégées par D et A respectivement.

2.3 Jonction

Toutes les formes de cellules solaires organiques et inorganiques nécessitent l'interposition d'une ou de plusieurs couches minces entre les électrodes métalliques. Le rôle du contact métal-semiconducteur est crucial pour le transfert de charges. La nature du contact est déterminée par le matériau utilisé et la position du niveau de Fermi du semiconducteur par rapport à l'électrode métallique.

Le contact ohmique et le contact Schottky sont les phénomènes les plus répandus à l'interface métal-semiconducteur [14].

2.3.1 Contact ohmique

Sur la figure 2-3, on peut observer un contact ohmique de type-n entre un semiconducteur et un métal lorsque le travail de sortie de ce dernier ϕ_m est inférieur à celui du semiconducteur ϕ_{sc} . Après le contact entre les deux matériaux, les électrons se déplacent du métal vers le semiconducteur afin d'atteindre l'équilibre thermodynamique c'est-à-dire l'égalesation des niveaux de Fermi des deux matériaux. Cela crée une zone d'accumulation de porteurs majoritaires des trous dans le type n à l'interface. En raison de la mobilité des charges dans les deux directions, cette zone demeure de faible épaisseur, sans qu'il y ait de barrière de potentiel [15].

La loi d'ohm règle le courant de ce contact et la courbe du courant-tension est linéaire.

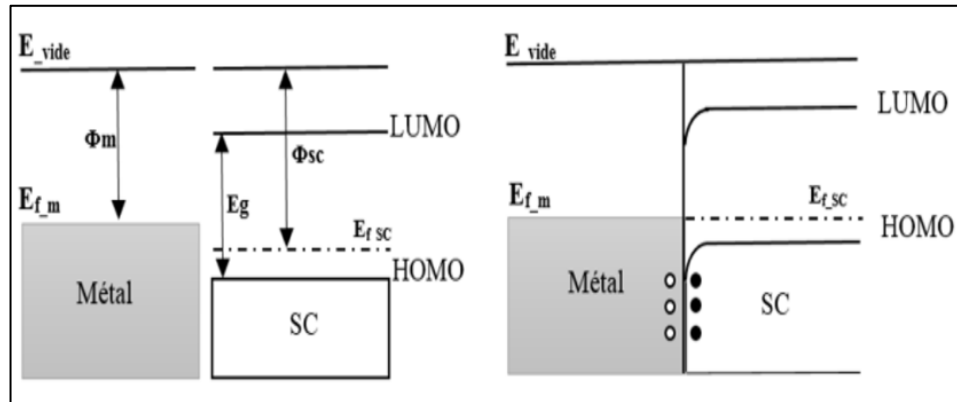


Figure 2-3 : Niveaux d'énergie d'un contact ohmique de type n, entre métal et semiconducteur, de gauche à droite, avant et après contact [14].

En revanche, dans le cas d'un semiconducteur de type p, le contact ohmique se produit lorsque le travail de sortie du métal ϕ_m dépasse celui du semiconducteur ϕ_{sc} . Les électrons de valence se propagent du semiconducteur vers le métal, jusqu'à ce que les niveaux de Fermi des deux matériaux soient alignés [14].

La relation entre le courant et la tension $I(V)$ est linéaire et suit la loi d'Ohm comme présentée par la figure 2-5.



Figure 2-4 : Symbole de la diode à jonction PN.

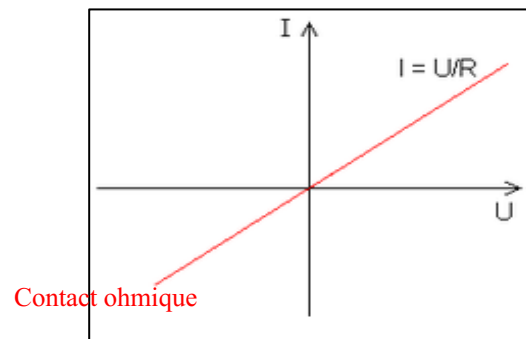


Figure 2-5 : Caractéristique $I(V)$ d'un contact ohmique

2.3.2 *Contact Schottky*

Le contact Schottky, nommé ainsi d'après Walter H. Schottky, est une barrière d'énergie potentielle pour les électrons formés à la jonction métal-semiconducteur. Sa commutation rapide, sa faible tension de seuil et ses caractéristiques redresseuses le rendent aussi bien utilisable en tant que diode en électronique de haute ou de faible puissance, que pour la détection des signaux HF.

Le contact Schottky de type n se produit lorsque le travail de sortie du métal ϕ_m dépasse celui du semiconducteur ϕ_{sc} , tandis que le contact Schottky de type p se produit lorsque le travail de sortie du métal ϕ_m est inférieur à celui du semiconducteur ϕ_{sc} . Lorsque ces deux matériaux se rencontrent, les électrons se déplacent du métal vers le semiconducteur ou vice versa jusqu'à ce que les niveaux de Fermi soient alignés, ce qui entraîne l'équilibre thermodynamique.

Au niveau du contact ohmique, la relation entre le courant et la tension $I(V)$ n'est pas linéaire, comme illustré dans la figure 2-7 [14].

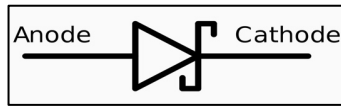


Figure 2-6 : Symbole d'une diode Schottky.

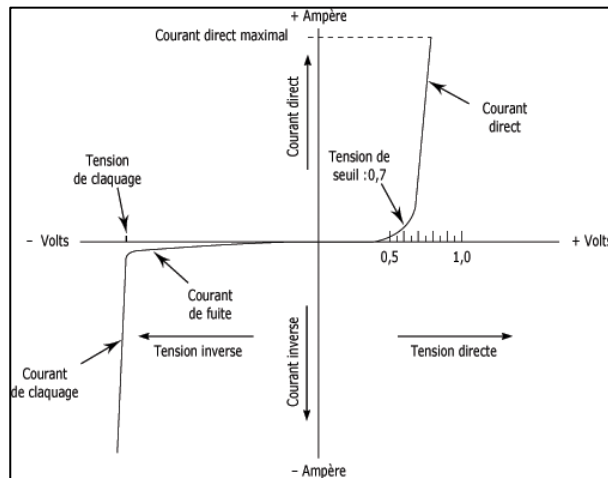


Figure 2-7 : Caractéristique électrique de la diode Schottky [16].

Cependant, quand il n'y a pas de contact ohmique, on observe principalement deux (02) mécanismes permettant aux porteurs de charges de surmonter les barrières d'interface et ce sont [4] :

- Effet thermoélectronique : par cet effet, l'agitation thermique des charges permet le franchissement de la barrière. La loi de Dushman-Richardson définit la densité de courant par la relation suivante :

$$J = A^* \cdot T^2 \cdot e^{-\psi/kT} \quad (2.1)$$

Avec :

A^* : la constante Richardson effective;

T : la température absolue;

k : la constante de Boltzmann;

ψ : la différence entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique du semi-conducteur.

- Effet de champ : le champ électrique E appliqué à l'interface de l'électrode conduit à l'augmentation de l'émission thermoélectronique à la suite de l'abaissement de la barrière. La loi de Dushmann-Richardson devient alors :

$$J = A^* \cdot T^2 \cdot e^{-(\psi - \Delta W)/kT} \quad (2.2)$$

Avec :

$$\Delta W = \frac{q^3 E}{4\pi\epsilon} \quad (2.3)$$

Cependant, plus l'intensité du champ augmente, plus la barrière vue par les porteurs de charges rétrécit. Ce qui permet son franchissement par effet tunnel. La densité du courant d'émission est régie par l'équation de Fowler-Nordheim :

$$J = \frac{q^3 E^3}{8\pi h \psi} \cdot e^{-\frac{4}{3} \left(\frac{2m}{h^{-2}} \right)^{1/2} \cdot \frac{\psi^{3/2}}{qE}} \quad (2.4)$$

2.3.3 Jonction p-n

Il s'agit d'une configuration qui découle de la rencontre de deux zones de matériaux semiconducteurs, une zone dopée n (avec une majorité d'électrons) et l'autre dopée p (avec une majorité de trous). Les deux zones sont électriquement neutres. Une fois que les deux régions se mettent en contact, un flux d'électrons et de trous se propage respectivement vers les zones p et n, afin d'uniformiser la distribution des concentrations des porteurs de charges dans la structure. La figure 2-8 présente une zone de déplétion, également connue sous le nom de zone de charge d'espace (ZCE), d'une épaisseur W . Dans la zone de déplétion, un champ électrique \vec{E} est généré, se dirigeant de la région de type n vers la région de type p.

Ce champ établira une barrière de potentiel (V_0) qui empêchera la propagation des porteurs d'électrons et de trous respectivement vers les régions p et n [17]. Dans le même temps, un courant de saturation inverse, I_s , est créé par les porteurs de charges minoritaires lorsqu'ils sont capturés par le champ électrique de la ZCE.

$$I_s = I_0 \cdot \exp\left(\frac{-eV_0}{kT}\right) \quad (2.5)$$

$$V_0 = \frac{kT}{q} \cdot \ln\left(\frac{N_A N_D}{n_i^2}\right) \quad (2.6)$$

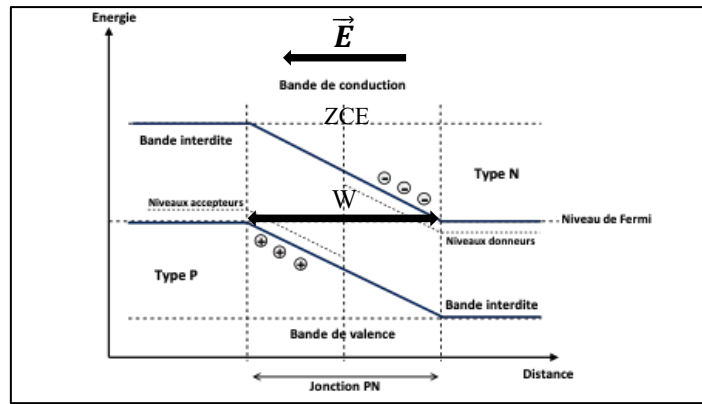


Figure 2-8 : Diagramme de bande d'une jonction p-n à l'équilibre [18].

2.4 Spectre solaire

On considère le soleil comme un élément noir car il absorbe toutes les radiations électromagnétiques et émet en conséquence une large gamme de rayonnements solaires allant des rayons gamma aux ondes radio en passant par le domaine du visible, on parle ainsi de spectre solaire. La plage d'intensité maximale du spectre solaire se trouve à 500 nm (figure 2-11).

Cependant, l'atmosphère filtre les émissions néfastes des rayonnements solaires afin de préserver la terre et ses habitants. Ces raies d'absorption spécifiques à chaque élément

chimique apparaissent sous forme de lignes noires dans le spectre solaire. Différents éléments exercent une influence sur le spectre solaire :

- Diffusion moléculaire de Rayleigh : Elle désigne la dispersion de la lumière par les particules dont le rayon est très faible par rapport à la longueur d'onde du rayonnement solaire. D'après Rayleigh, la longueur d'onde est inversement proportionnelle à l'intensité diffusée (d'un facteur à la puissance quatre). Pour cette raison, la lumière bleue (450 nm) est nettement plus diffusée dans l'atmosphère que la lumière rouge (650 nm). Elle ne peut cependant plus être valide en présence de gouttes d'eau ou d'aérosols [18];

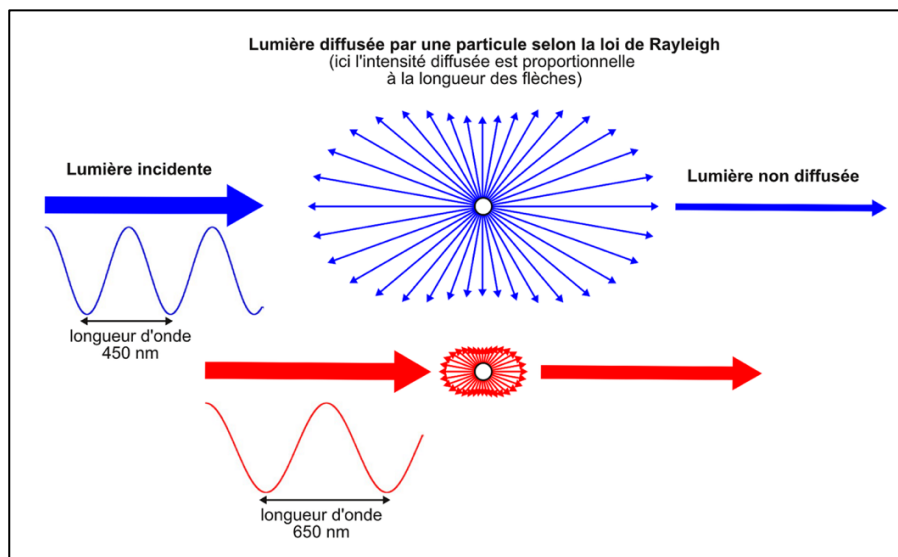


Figure 2-9 : Représentation de la diffusion moléculaire de Rayleigh [19].

- Absorption des molécules de l'air : Le dioxygène (O_2), le diazote (N_2) et l'ozone O_3 s'absorbent [14] ;

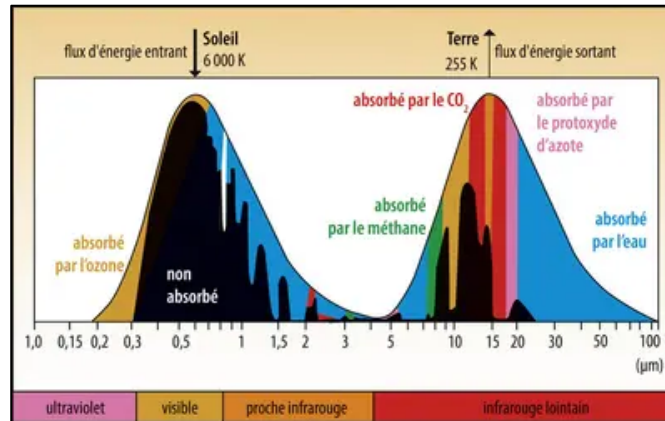


Figure 2-10 : Spectres d'émission et d'absorption des radiations émises par le soleil et par la terre [20].

- Réfraction due aux variations de l'indice de réfraction avec la température et la pression [14].

La réduction de l'intensité du rayonnement solaire sur Terre est due aux pertes causées par l'absorption de l'air, connue sous le nom de masse d'air (AM). Le terme AM0 fait référence à la quantité d'air qui atteint l'atmosphère, tandis que le terme AM1.5 désigne un spectre solaire incliné de 48.2° par rapport au zénith, ce qui correspond à un flux énergétique de puissance de 1000 W/m^2 (150 mW/cm^2) [14].

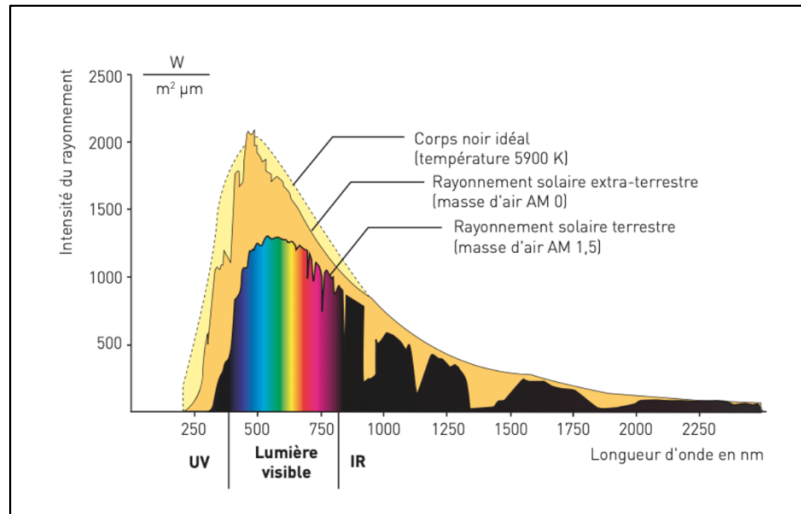


Figure 2-11 : Intensité du rayonnement solaire dans l'espace et sur la terre par rapport à l'émission d'un corps noir idéal à une température de 5900 K [21].

2.5 Absorption de la lumière

Le fonctionnement des cellules solaires repose sur le principe essentiel de l'absorption des rayons solaires afin de les transformer en énergie électrique. En effet, en absorbant la lumière, le matériau semiconducteur génère des paires électrons-trous qui se séparent sous l'influence du champ électrique de la jonction p-n. Ensuite, ces charges sont transportées vers les électrodes où elles sont collectées [22]. Ainsi, pour augmenter le rendement, il est nécessaire que le matériau présente un coefficient d'absorption plus élevé et un faible coefficient de réflexion. En outre, chaque rayon lumineux qui traverse un matériau solide d'une épaisseur l , génère un rayon transmis conformément à la loi Beer-Lambert suivant l'expression 2.7 :

$$I = I_0 e^{-\alpha l} \quad (2.7)$$

I_0 : Faisceau incident

α : Coefficient d'absorption

l : Épaisseur du matériau

La transmittance T et l'absorbance A sont exprimés comme suit :

$$T = \frac{I}{I_0} = e^{-\alpha l} \quad (2.8)$$

$$A = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) = -\log_{10}(T) \quad (2.9)$$

L'indice de réfraction est exprimé par la relation suivante :

$$n = \frac{c}{v} \quad (2.10)$$

Avec :

c : la vitesse de la lumière dans le vide;

v : la vitesse de la lumière dans le matériau qui est fonction de la longueur d'onde.

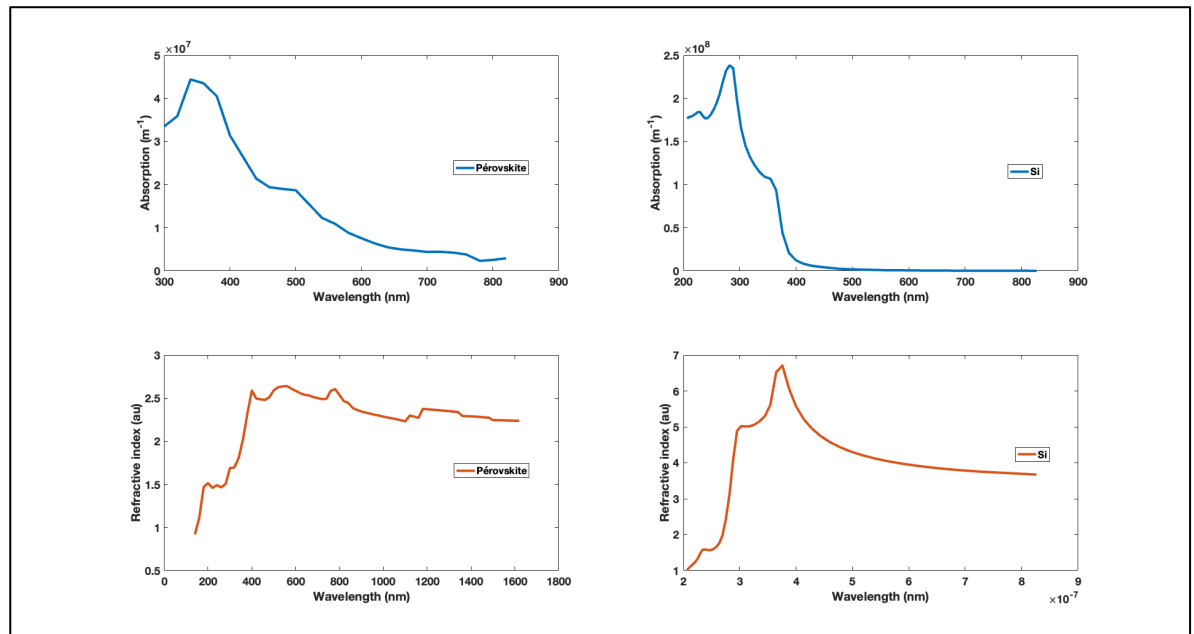


Figure 2-12 : Indices d'absorption et de réfraction des pérovskites et du silicium [23].

On observe sur la figure 2-12 que le silicium possède un indice de réfraction du rayonnement solaire plus élevé que celui des pérovskites sur des longueurs d'ondes allant de 200 nm à 900 nm. Ce qui traduit une plus grande capacité à dévier les rayons lumineux. Par ailleurs, on remarque que les pérovskites possèdent un coefficient d'absorption du rayonnement solaire plus stable et étendu sur le spectre solaire. Aussi, la figure 2-13 montre que le coefficient d'absorption du silicium varie énormément pour des longueurs d'ondes allant au-delà de 280 nm matérialisé par le point 1. À partir de 300 nm, les pérovskites, malgré un écart Δ_1 , évoluent au point d'être mieux performant que le silicium à partir de 380 nm matérialisé par le point 2. Ainsi, son coefficient d'absorption reste plus élevé d'une variation Δ_2 sur toutes les longueurs d'ondes allant au-delà. Cela confirme le fait que, les pérovskites sont capables d'absorber les longueurs d'ondes allant du domaine du visible aux infrarouges.

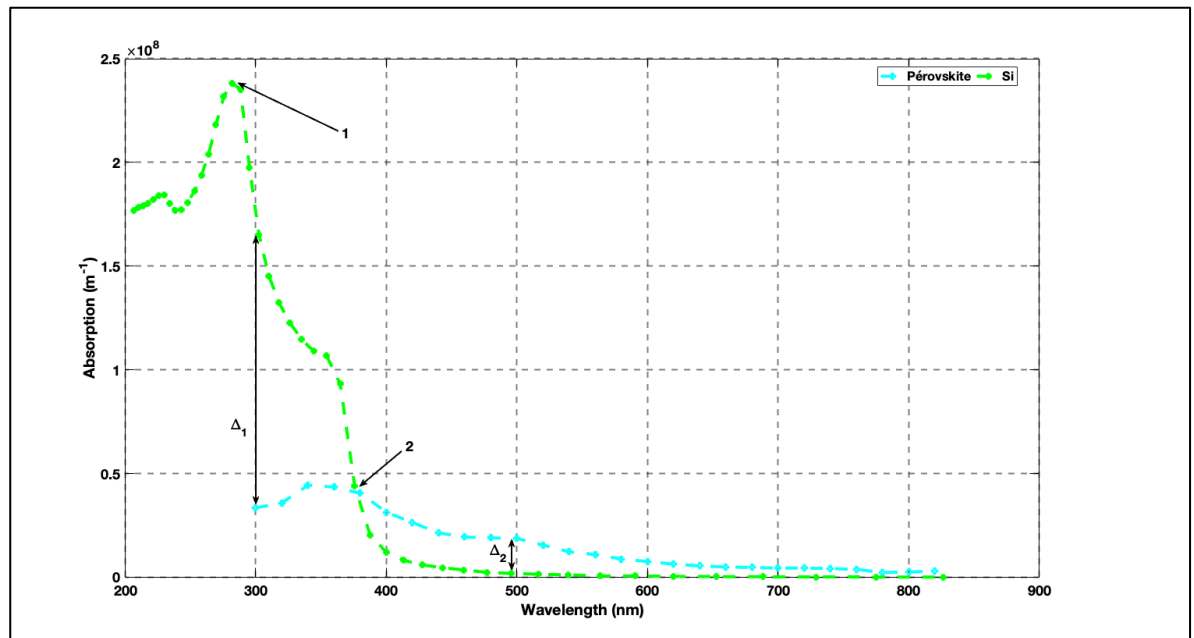


Figure 2-13 : Comparaison des coefficients d'absorption des pérovskites et du silicium sur les longueurs d'ondes du spectre solaire [23].

Il est alors possible d'établir une relation entre l'indice de réfraction et l'énergie d'un photon absorbé par le matériau telle que :

$$E_g = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.11)$$

Où h est la constante de Planck, c la vitesse de la lumière dans le vide et λ la longueur d'onde.

On définit également la densité optique obtenu par les expressions suivantes :

$$DO = -\log_{10} \left(\frac{I}{I_0} \right) \quad (2.12)$$

$$DO = 0.43 \cdot \alpha \cdot l \quad (2.13)$$

Dans l'expression 2.13, on utilise la densité DO pour mesurer la réduction de l'intensité du faisceau lumineux pendant son passage dans un matériau solide absorbant. Elle est principalement influencée par le coefficient α et l'épaisseur l du matériau.

2.6 Modélisation de la cellule solaire photovoltaïque

La conception de la cellule solaire photovoltaïque repose sur le choix du circuit électrique correspondant. Différents modèles mathématiques sont employés afin de représenter le comportement non linéaire des connexions semiconductrices. Le modèle à une diode et celui à deux diodes sont parmi les plus utilisés. La représentation de la cellule photovoltaïque à l'aide du modèle à une seule diode est illustrée sur la figure 2-14. Les résistances série R_s et parallèle (shunt) R_{sh} représentent les résistances parasites de la cellule photovoltaïque, tandis que le flux lumineux est modélisé par la source de courant (I_{ph}) [24].

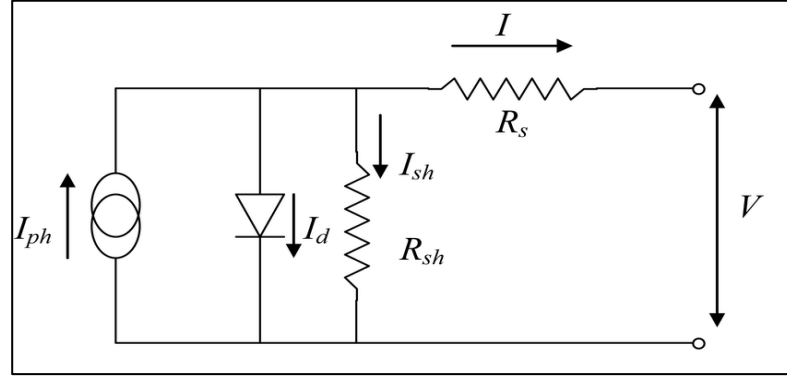


Figure 2-14 : Circuit électrique équivalent d'une cellule PV selon le modèle à une diode [24].

La résistance R_s représente la résistance du matériau et des contacts ohmiques lorsque la cellule est connectée à un circuit externe, tandis que la résistance R_{sh} représente la résistance causée par la recombinaison des porteurs de charges à l'interface donneur/accepteur (D/A) ainsi qu'à l'interface des électrodes [25].

L'influence de ces paramètres sur la caractéristique (J-V) de la cellule solaire peut être étudiée en utilisant le schéma électrique équivalent présenter sur la figure 2-14. La caractéristique J-V du circuit électrique équivalent à une diode, les résistances R_s et R_{sh} est donnée par l'équation 2.14 :

$$J = J_0 \left\{ \exp \left[\frac{e(V - AJR_s)}{kT} \right] - 1 \right\} + \frac{V - AJR_s}{R_{sh}} - J_{ph} \quad (2.14)$$

Où A représente la surface de la cellule solaire.

L'effet des résistances R_s et R_{sh}/R_p sur la caractéristique J-V est illustré sur la figure ci-dessous :

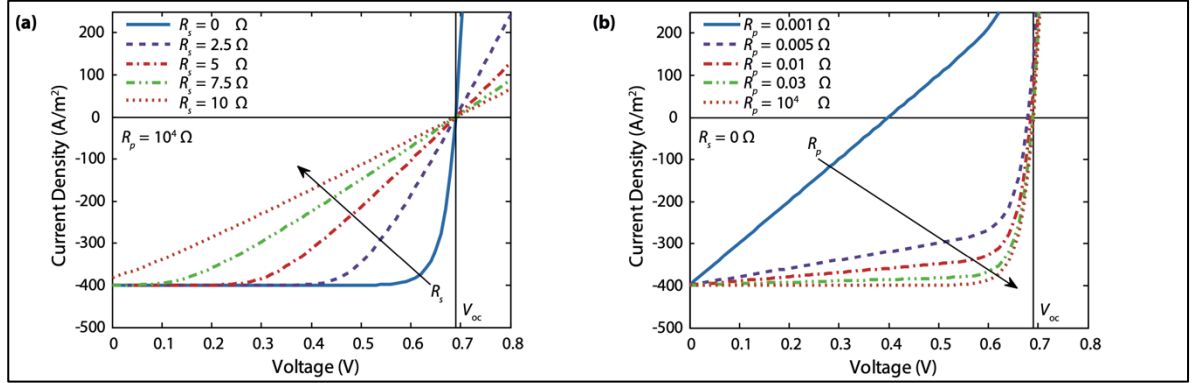


Figure 2-15 : Effets des résistances R_s (a) et R_p/R_{sh} (b) sur la caractéristique J-V sur la cellule solaire [26].

On en déduit les résistances R_s et R_{sh} fournies par les expressions 2.15 et 2.16 en prenant les pentes inverses respectivement au point V_{oc} et I_{sc} .

$$R_s = \left(\frac{dV}{dI} \right)_{V_{oc} (I=0)} \quad (2.15)$$

$$R_{sh} = \left(\frac{dV}{dI} \right)_{I_{sc} (V=0)} \quad (2.16)$$

Sous une irradiation I_{ph} , le courant I produit par la cellule est obtenu par l'équation 2.17:

$$I = I_s \cdot \left(e^{\frac{e \cdot V}{K_b \cdot T}} - 1 \right) - I_{ph} \quad (2.17)$$

Où :

I_s : le courant de saturation (A);

e : la charge élémentaire qui vaut $1,6 \cdot 10^{-19}$ C;

K_b : la constante de Boltzmann qui vaut $1,38 \cdot 10^{-23}$ J.K⁻¹;

T : la température en Kelvin (K);

V : la tension de polarisation appliquée en volt (V);

I_{ph} : le photo-courant en ampère (A).

2.7 Caractéristiques courant-tension

La caractéristique courant-tension montre comment le courant généré par la cellule varie en fonction de la tension appliquée comme le montre la figure 2-16. Elle permet de déterminer quelques paramètres techniques de la cellule photovoltaïque tels que la tension en circuit ouvert V_{OC} , le courant de court-circuit I_{SC} , le facteur de forme FF, le point de fonctionnement optimal et le rendement de conversion η .

Tableau 2-1 : Performances d'une cellule solaire classique à silicium.

	$V_{OC} (V)$	$J_{SC} (mA/cm^2)$	$FF (\%)$	<i>Rendement (%)</i>	$V_{MPP} (V)$	$J_{MPP} (mA/cm^2)$
C-Si	0.620463	35.76240181	83.0411	18.4262	0.537524	34.27972178

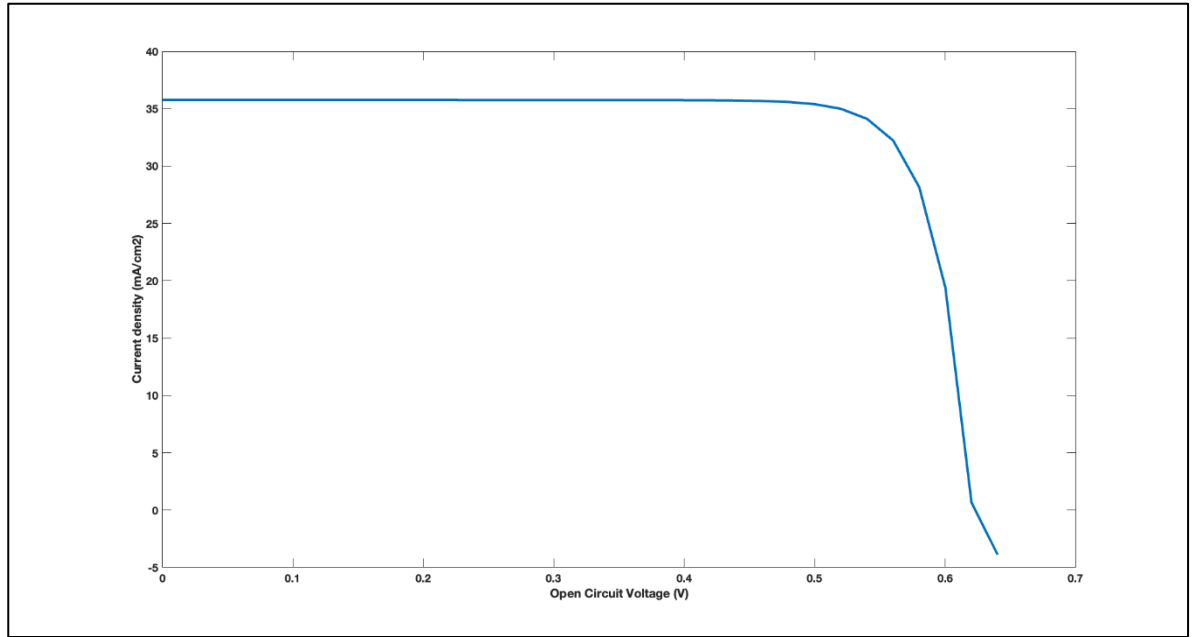


Figure 2-16 : Caractéristique électrique (J-V) d'une cellule solaire à silicium.

Tension en circuit ouvert (V_{oc}) : C'est la tension maximale que peut fournir la cellule pour un courant nul, elle correspond à la polarisation directe. Elle est influencée par le type de matériau de la cellule et les électrodes, elle est donnée par l'expression 2.18 :

$$V_{oc} = \frac{K_b \cdot T}{e} \cdot \ln \left(\frac{J_{ph}}{J_0} + 1 \right) \quad (2.18)$$

Courant de court-circuit (I_{sc}) : Il s'agit du courant circulant dans la cellule solaire quand ses bornes sont court-circuitées. Il dépend de la densité du flux incident des photons et des propriétés optiques de la cellule solaire.

Facteur de forme (FF) : Comme illustré par l'expression 2.19, il représente le rapport entre la puissance maximale $J_{max} \cdot V_{max}$ produite par la cellule solaire et le produit $J_{sc} \cdot V_{oc}$.

$$FF = \frac{P_{max}}{J_{sc} \cdot V_{oc}} = \frac{J_{max} \cdot V_{max}}{J_{sc} \cdot V_{oc}} \quad (2.19)$$

En considérant que la cellule solaire se comporte comme une diode idéale, le facteur de forme ou de remplissage s'écrit suivant l'expression 2.20 [14].

$$FF = \frac{eV_{oc} - \ln(eV_{oc} + 0.72k_bT)}{eV_{oc} + k_bT} \quad (2.20)$$

En prenant $voc = \frac{V_{oc} \cdot e}{k_b \cdot T}$, l'équation 2.21 devient :

$$FF = \frac{voc - \ln(voc + 0.72)}{voc + 1} \quad (2.21)$$

2.8 Rendement de conversion

Le rendement de conversion η dans une cellule photovoltaïque correspond à la relation entre la puissance maximale fournie par la cellule et la puissance incidente reçue, comme indiqué dans l'équation 2.22 ci-dessous :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_i} = \frac{J_{max} \cdot V_{max}}{P_i} = \frac{J_{sc} \cdot V_{oc}}{P_i} * FF \quad (2.22)$$

P_i : Puissance lumineuse incidente (W/cm^2);

P_{max} : Puissance maximale convertie en électricité (W/cm^2).

Remarque : Les puissances calculées sont obtenues en évaluant les caractéristiques électriques des cellules solaires par unité de surface couverte par les rayons incidents du soleil, ce qui permet de mener des analyses plus précises. Cependant, les surfaces d'exposition étant les mêmes, le rapport des densités de puissance est tout aussi vrai que celui des puissances.

2.9 Rendement quantique externe

Le rendement quantique externe (EQE), aussi appelé IPCE (Incident Photon to Current conversion Efficiency), est propre aux capteurs photosensibles comme les cellules solaires ou les détecteurs de lumière. Dans ces dispositifs, il évalue l'efficacité de la conversion des photons en charges électroniques en comparant le nombre de charges électroniques collectées avec le nombre de photons incidents [26]. Autrement dit, il démontre l'efficacité d'un capteur pour transformer la lumière en électricité. Cependant, il ne prend pas en compte les photons réfléchis et transmis. Comme le montre l'expression 2.23, le rendement quantique externe dépend de la longueur d'onde. En considérant $\frac{P_i}{hc}\lambda$ le nombre de photons incidents et $\frac{J_{sc}}{e}$ comme étant le nombre d'électrons collectés.

$$EQE = \frac{J_{sc}}{P_i \cdot e} * \frac{hc}{\lambda} \approx 1.242 * \frac{J_{sc}}{P_i \cdot \lambda} \quad (2.23)$$

Avec :

J_{sc} : Densité de courant de court-circuit en (A/cm²);

P_i : Puissance incidente en (W/cm²);

h : Constante de Planck qui vaut $6,63 \cdot 10^{-34}$ J.s;

λ : Longueur d'onde monochromatique en (nm);

c : La célérité de la lumière qui vaut 299 792 458 m/s.

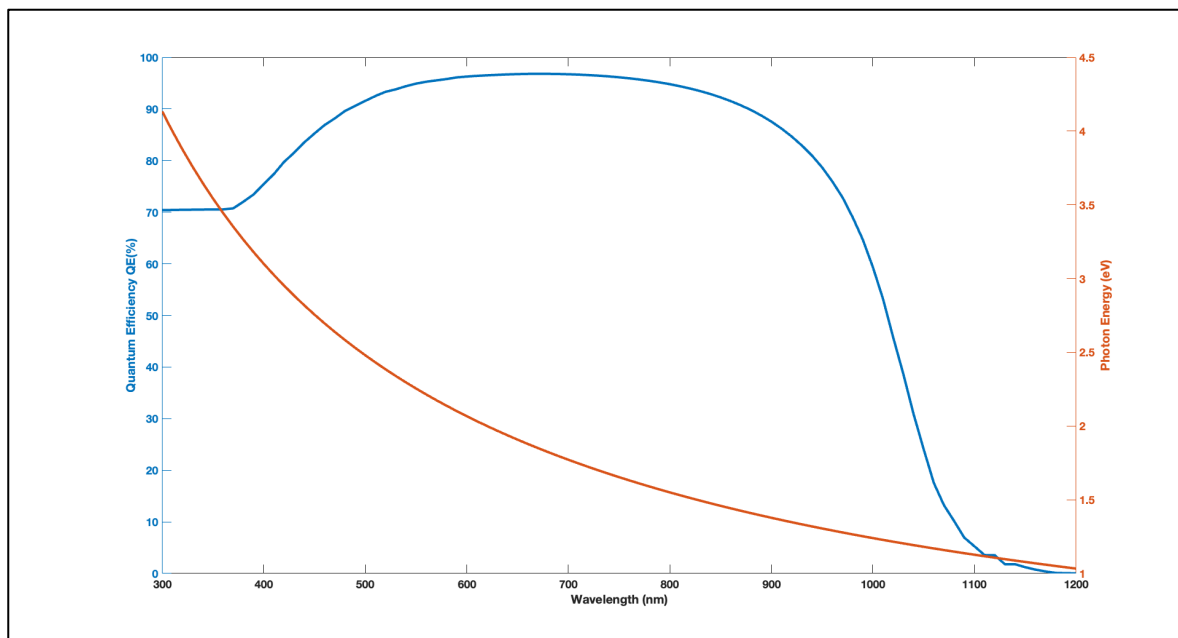


Figure 2-17 : Rendement quantique externe de la cellule à silicium.

Fort de toutes ces considérations, les pérovskites suscitent un grand intérêt auprès des chercheurs aux vues de ses propriétés physiques exceptionnelles capable de révolutionner le domaine de l'exploitation de l'énergie solaire photovoltaïque.

2.10 Pérovskites

Ce sont des composés minéraux constitués de calcium et de titane dont la formule chimique est CaTiO_3 , sa découverte a été réalisée par le minéralogiste russe Lev Alexeïevitch Perovski (1792-1856). Une cellule photovoltaïque à pérovskites est un type de cellule photovoltaïque dont la couche active est constituée d'un matériau de formule générale ABX_3 dans laquelle A est un cation, généralement du méthylammonium CH_3NH_3 (MA), du formamidium $\text{CH}(\text{NH}_2)_2$ ou du césium Cs, B est un cation d'étain Sn ou de Plomb Pb, et X est un anion halogénure tel que du Chlorure Cl, du Bromure Br ou de l'Iodure I [27].

Les pérovskites ont une très grande absorption de la lumière et une grande longueur de diffusion des charges. Effectivement, leur déclinaison hybride $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ (MAPbI_3) a un grand coefficient d'absorption qui vaut $1.87 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ à 500 nm qui se caractérise par une grande longueur de diffusion des électrons et des trous, et une grande mobilité des porteurs de charges .

Cette déclinaison hybride dopé au chlore donne $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ qui est équivalente à MAPbI_3 et ayant presque la même mobilité. En plus de son dopage au chlore, il possède une cristallinité élevée grâce aux joints de grains plus compacts. La taille des grains est un élément qui restreint la capacité de conduction des porteurs de charge, même dans les couches minces de meilleure qualité [28]. En revanche, l'utilisation du chlore dope légèrement la mobilité des charges de $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ par rapport à celle de sa voisine MAPbI_3 [29].

Les pérovskites ayant une bande interdite ajustable, leur hybridation offre la possibilité d'adapter sa bande interdite, la mobilité des charges et bien d'autres paramètres physiques aux besoins de l'étude. Cela permettrait ainsi de passer de 1.57 eV initialement à 1.9 eV.

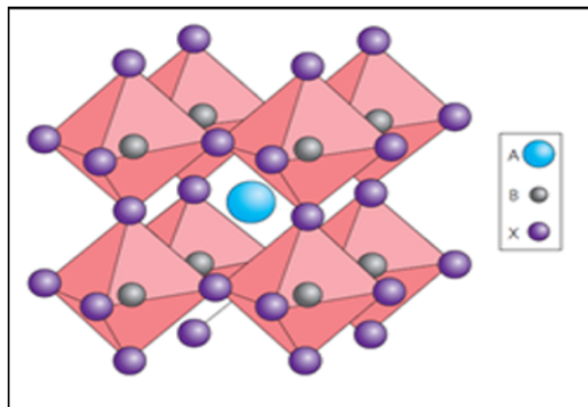


Figure 2-18 : Structure hybride des pérovskites [30].

Avec :

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

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

X : Anion (I^- , Br^- , Cl^- , ...).

2.11 Cellules photovoltaïques à pérovskites

Nous avons présenté dans la section 2.10 de façon détaillée les pérovskites et ses caractéristiques physiques qui font d'elle une alternative prometteuse aux technologies actuelles utilisées dans l'exploitation solaire photovoltaïque dépassant largement le rendement de 20 % en laboratoire.

L'évolution de la conception des cellules solaires à base de pérovskites a été considérable, de nouvelles techniques de fabrication ont été mises en œuvre. Toutefois, l'utilisation de la technique d'impression va bouleverser le secteur photovoltaïque en raison de ses multiples bénéfices, tels que sa facilité d'adaptation aux conditions climatiques et sa souplesse dans le choix des matériaux.

La configuration standard des cellules photovoltaïques à base de pérovskites est la structure multicouche. Elle fait référence à un amas de plusieurs couches minces ce qui permet de choisir une épaisseur plus étendue par rapport à la configuration bicouche, qui a une couche active plus mince (30-50 nm) qui pourrait prévenir les courts-circuits [31].

Comme indiqué sur la figure 2-19, la cellule à pérovskites étudiée est composée d'une couche active située entre les couches du donneur (D) qui correspond à la couche p et de l'accepteur (A) qui correspond à la couche n. L'ensemble est placé entre deux électrodes.

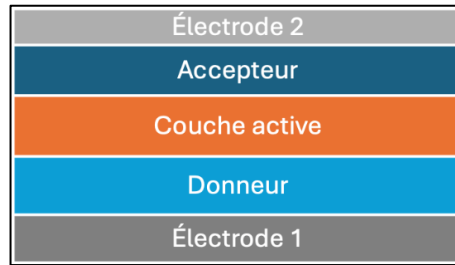


Figure 2-19 : Configuration multicouche.

Deux configurations sont utilisées pour représenter les cellules solaires pérovskites : l'architecture standard n-i-p ou l'architecture inverse p-i-n. L'expression "ordre n ou p" désigne précisément l'ordre de dépôt des couches ETL et HTL, comme le montre la figure 2-20.

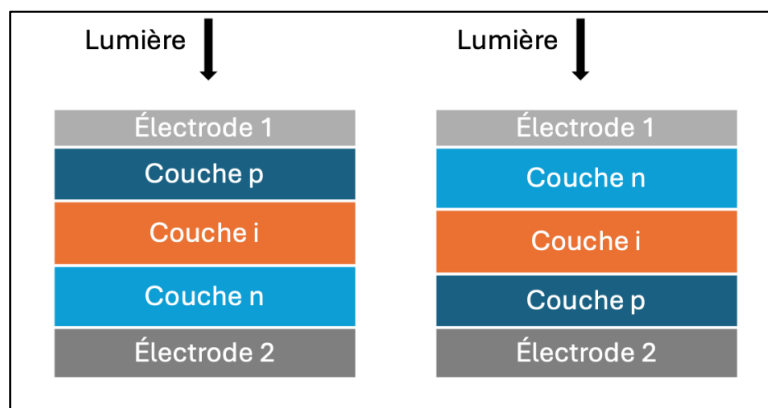


Figure 2-20 : De gauche à droite l'architecture p-i-n et n-i-p d'une cellule solaire.

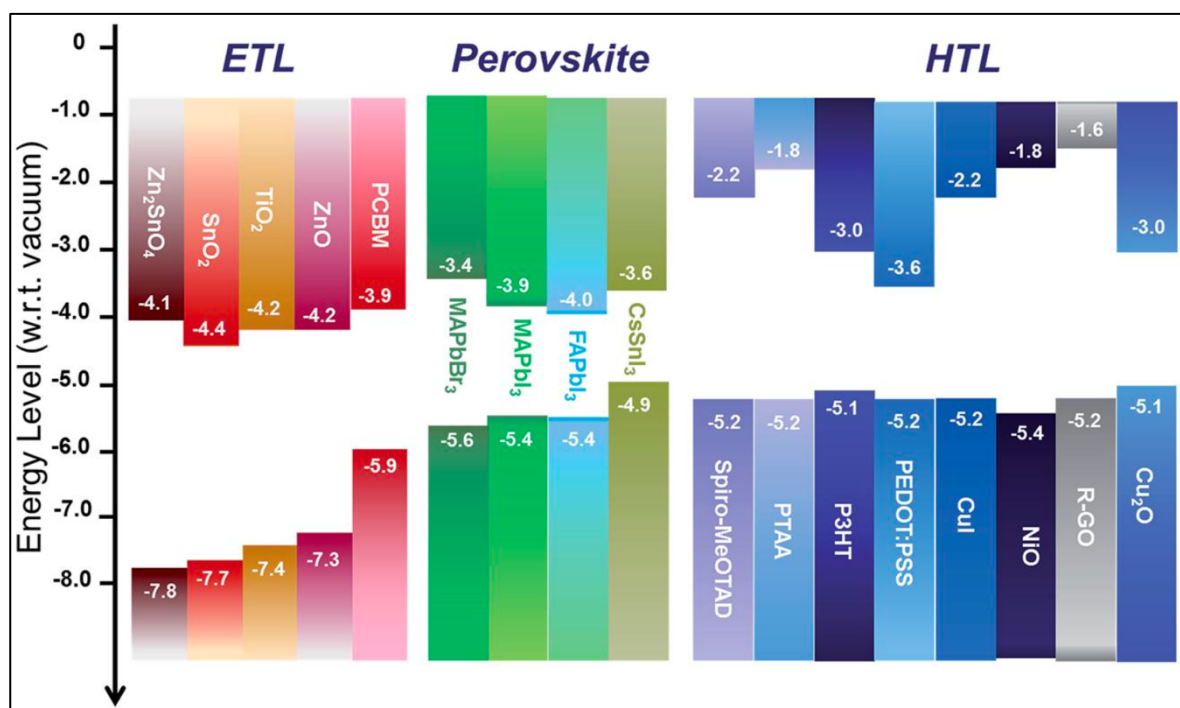


Figure 2-21 : Diagramme de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux [32].

Dans le cadre de nos travaux de recherche, la cellule étudiée correspondra à une architecture multicouche inverse n-i-p décrite comme suit :

- Électrode 1 : notre choix s'est porté sur l'ITO (oxyde d'indium-étain). Ce choix est motivé par ses nombreuses qualités telles que sa transmittance

élevée soit plus de 80 % sur toute la gamme du visible (380-780 nm), sa transparence optique plus intéressante et aussi sa faible résistivité soit $15\Omega/\text{cm}^2$. Ce sont ces caractéristiques qui ont motivé le choix de l'ITO comme anode;

- Couche de transport des trous ou Hole Transport Layer (HTL) : afin d'assurer le transport des trous P, nous avons choisi le PEDOT : PSS qui est un composé organique mélangeant deux polymères dont le poly(3,4-éthylènedioxythiophène) (PEDOT) comme donneur d'électrons (type P), et le poly (styrène sulfonate) de sodium (PSS) assurant sa solubilité. Cette structure en fait un élément populaire dans les configurations inverses des cellules solaires organiques-inorganiques. La bande de valence (conduction) et la bande passante stable du matériau transporteur de trou entraîne une augmentation de sa conductivité électrique lorsqu'il est dopé avec un solvant inerte tel que le sorbitol. [33] La PEDOT : PSS contribue à réduire la rugosité de la couche d'ITO et joue principalement le rôle de couche tampon entre l'ITO et la couche active.[34] Le choix de ce matériau est également motivé par son excellente transparence dans le domaine du visible;
- Couche active : les pérovskites constituent notre couche active dans cette configuration. Pour cela, nous étudierons les pérovskites dans sa forme de base puis quelques-unes de ses déclinaisons hybrides dopée $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ ou I). Initialement dopé à l'iode, le remplacement de l'iode par le chlore ou par le brome permet l'augmentation de la bande interdite de la

couche à pérovskites. Cependant, son hybridation iode-chlore semble encore mieux et plus adapté à nos études;

- Couche de transport des électrons ou Electron Transport Layer (ETL) : le choix du matériau qui permettra le transport des électrons de la couche active vers l'électrode métallique se fera entre le sulfure de cadmium CdS, le dioxyde de titane (TiO_2) et le sulfure de zinc (ZnS);
- Électrode 2 : à ce niveau notre choix s'est porté sur l'argent (Ag) pour des raisons de coût en lieu et place de l'or (Au).

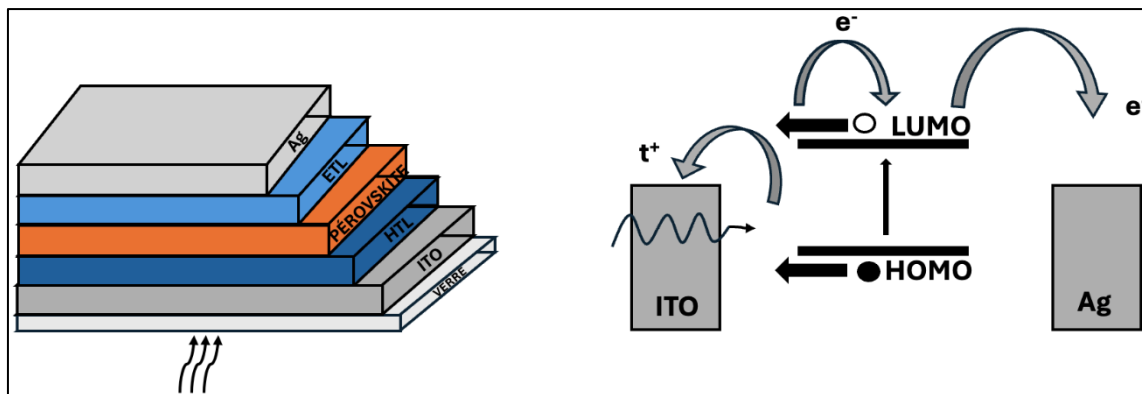


Figure 2-22 : Structure d'une cellule organique monocouche (à gauche).
Représentation des niveaux d'énergie d'un contact
ITO/HTL/Pérovskites/ETL/Ag (à droite) [4].

Le transport des charges se caractérise par la mobilité μ établissant le rapport entre la vitesse moyennes des charges et le champ électrique appliqué. La mobilité des charges est proportionnelle à la largeur de la bande de conduction, qui elle-même, est proportionnelle à l'intégrale de recouvrement des orbitales moléculaires. Ce qui nous permet d'en déduire que plus la concentration d'orbitales (π), plus la mobilité des charges est élevée (contrairement aux orbitales σ). L'équation 2.24 nous permet d'estimer la valeur minimale de la mobilité requise pour une cellule mince d'une épaisseur L donnée considérant la densité de courant délivrée par la cellule [4].

$$J = \frac{Q}{S \cdot t} = \frac{C \cdot V}{S \cdot t} \quad (2.24)$$

Q , S , t , C et V représentent respectivement la charge totale, la surface de la cellule, le temps que mettent les charges afin de traverser une couche d'épaisseur L , la capacité de la cellule et la tension fournie par la cellule.

La relation de Langevin établit le temps de transit des charges par le rapport entre l'épaisseur de la couche active (cm) et le coefficient de diffusion ($\text{cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$) comme le montre l'expression suivante :

$$t = \frac{L^2}{2D} \quad (2.25)$$

La loi d'Einstein nous permet d'obtenir le coefficient de diffusion par la formule suivante :

$$D = \frac{kT \cdot \mu}{e} \quad (2.26)$$

Ce qui permet d'obtenir une expression simplifiée en substituant le temps de transit et le coefficient de diffusion par leurs expressions dans l'équation 2.24.

$$J = \frac{C \cdot V}{S} \cdot \frac{2kT}{L^2 \cdot e} \cdot \mu \quad (2.27)$$

Avec $C = \epsilon S/L$, où ϵ est la constante diélectrique du matériau.

La relation 2.27 devient alors :

$$J = \epsilon \cdot V \cdot \frac{2kT}{L^3 \cdot e} \cdot \mu \quad (2.28)$$

On obtient ainsi l'expression de la mobilité en l'extrayant de l'équation 2.28 :

$$\mu = \frac{L^3 \cdot e}{2kT \cdot \epsilon} \cdot \frac{J}{V} \quad (2.29)$$

Le processus de conception des cellules solaires peut se faire par l'utilisation de différentes technologies. La technique d'impression Slot Die spécialement utilisée dans la fabrication de la couche à pérovskites est la technologie la plus intéressante du point de vue de sa facilité d'adaptation et de son faible coût. Elle permet d'obtenir des revêtements homogènes dépourvus de trous d'épingle (Pin-Hole) [35].

2.12 Cellules tandem

Les cellules multi jonctions ou hétérojonction sont des cellules solaires empilées mécaniquement les unes sur les autres renfermant plusieurs jonctions p-n provenant de divers matériaux semiconducteurs. Chaque cellule absorbe un spectre de la lumière particulier en fonction de sa bande interdite (BG). Ainsi, la zone active pour la conversion photoélectrique des cellules photovoltaïques se trouve à l'interface entre le donneur et l'accepteur. Le champ électrique créé à cette interface résulte de la différence entre le potentiel d'ionisation du donneur et l'affinité électronique de l'accepteur; ce qui permet la dissociation des excitons qui atteignent ce site.

Les charges libres migrent alors séparément vers leurs électrodes respectives [4]. Ce qui explique le fait que, pour maximiser l'effet photovoltaïque, l'on doit agencer les cellules de sorte que la cellule en tête ait la plus grande bande interdite de manière à avoir une plus importante absorption de la lumière. La cellule mono jonction n'absorbe que les photons dont l'énergie est supérieure ou égale à la concentration en énergie du matériau qui la compose, tandis que les photons dont l'énergie est inférieure à la concentration en énergie du matériau sont perdus [36]. Pour les photons qui ont une énergie supérieure au BG, ils perdent leur

excès d'énergie en l'évacuant sous forme de chaleur, c'est-à-dire par thermalisation. Les cellules multi jonctions peuvent être fabriquées de manière à réduire les pertes liées à la thermalisation.

Tout comme les premières technologies de cellules solaires photovoltaïques, les cellules solaires multi jonctions ont, dans un premier temps, été conçus pour le domaine spatial à cause des différents coûts élevés associé à la fabrication de ces cellules mais restaient tout de même justifiés par leur efficacité élevée. De nos jours, il est bien moins dispendieux d'investir dans ces technologies grâce aux nombreuses avancées réalisées en recherche et développement, ce qui permet d'envisager de manière plus réaliste d'étendre ces cellules solaires au marché.

La configuration en tandem de la cellule Pérovskites-Silicium est composée de deux jonctions qui relient les matériaux entre eux de manières différentes en fonction de leurs natures. Afin d'améliorer l'efficacité des cellules solaires photovoltaïques et réduire les dépenses de production, la structure en tandem reste indéniablement une solution intéressante et réaliste. Les pérovskites hybrides, grâce à leur grande capacité d'absorption, leur longueur de diffusion des porteurs de charges et leur bande interdite flexible, se présentent comme un candidat idéal qui peut aisément se combiner avec le silicium dans des configurations tandem. Cette configuration permet ainsi d'empiler deux cellules ayant des plages d'absorption qui se complètent [36, 37].

Les multiples progrès de la recherche ont permis à la cellule tandem silicium-pérovskites, dont la première déclinaison réalisée par Jonathan P. Mailoa (2014-2015) avait une efficacité de 13.7%, de dépasser le rendement record du silicium à simple jonction [38]. La société Oxford PV, une entreprise spécialisée dans la technologie des cellules solaires à pérovskites,

a récemment atteint un nouveau niveau de conversion de 28 % pour sa cellule solaire tandem en silicium-pérovskites de 1 cm² [39]. Le National Renewable Energy Laboratory (NREL) a validé ce record. En outre, on a confirmé la stabilité de la cellule tandem fabriquée en passant le test de fiabilité chaleur humide pendant 2000 heures [40].

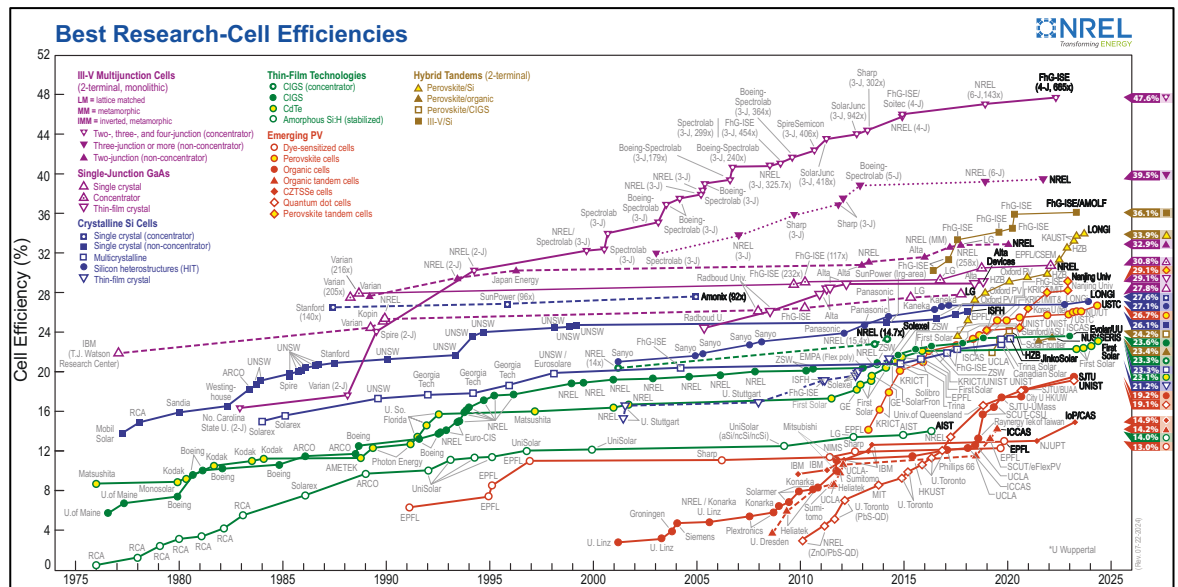


Figure 2-23 : L'évolution dans le temps de l'efficacité des différentes technologies de cellules solaires [40].

À notre connaissance, il existe comme présenté dans la figure 2-24 deux (02) configurations tandem et ce sont la structure monolithique à deux bornes (Two Terminal 2T) et l'architecture à quatre bornes (Four Terminal 4T). Toutefois, que l'on soit dans l'une ou l'autre configuration tandem silicium-pérovskites, la bande interdite (BG) de la cellule du dessus en pérovskites doit être toujours supérieur à celui de la cellule du bas en silicium [37].

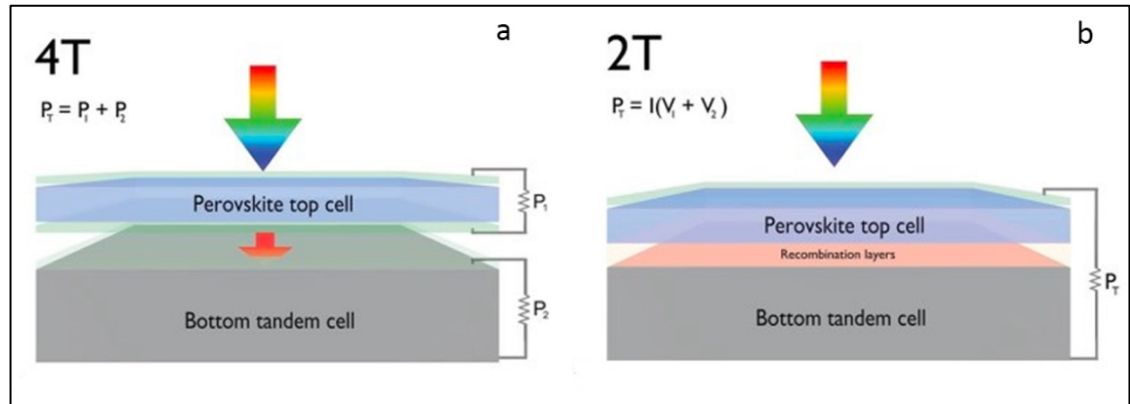


Figure 2-24 : Cellule tandem pérovskites/silicium; a) architecture 4T, b) architecture 2T [41].

L'architecture tandem 4T ou à quatre bornes comme décrit dans la figure 2-24(a) s'obtient par empilement mécanique de deux cellules fabriquées indépendamment à savoir une en silicium et l'autre en pérovskites. Étant donné qu'elle se compose de deux cellules indépendantes, elle nécessite trois contacts transparents et deux régulateurs MPPT ce qui constitue un inconvénient majeur en termes de coûts d'investissement. La puissance qui en résulte est donc la somme des puissances des différentes couches actives la composant [37].

Contrairement à l'architecture 4T, l'architecture monolithique 2T ne possède qu'un seul contact transparent comme le montre la figure 2-24(b), cela réduit l'absorption parasite des couches non actives mais, les cellules étant connectées en série à travers une couche de recombinaison des charges ou un tunnel de jonction, son inconvénient est que son photocourant est limité par la cellule ayant le courant le plus faible en cas de mauvaise conception [37, 41].

Cependant, l'optimisation du courant issu des deux cellules limite la plage de la bande interdite idéalement entre 1.6 et 2.0 eV avec une valeur optimale autour de 1.81 eV pour une architecture 4T et entre 1.7 et 1.8 eV pour une architecture 2T, ce qui entraîne une sensibilité

de la cellule tandem aux variations spectrales dans une architecture 4T, chose qui est résolu dans une architecture 2T [37].

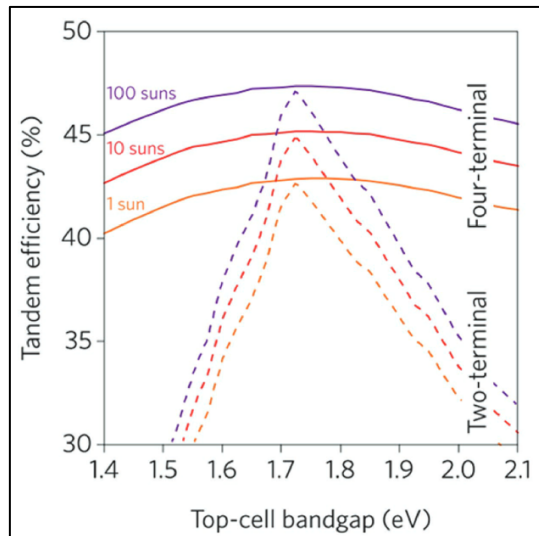


Figure 2-25 : Limite d'efficacité des cellules tandem à deux et quatre terminaisons en fonction de la bande interdite de la cellule supérieure et de l'intensité d'illumination [37].

2.13 Conclusion

L'exploitation de l'énergie solaire photovoltaïque demeure à nos jours réalisée en majeure partie par l'utilisation des technologies à silicium. Cela est motivé notamment par des raisons telles que leur coût et leur stabilité. En effet, après avoir profité de plusieurs décennies de recherche et développement, la technologie à silicium se présente actuellement comme une alternative viable dans un contexte où le besoin de développer et d'utiliser des sources d'énergies renouvelables devient urgent. On peut donc dire que cette technologie a encore de beaux jours devant elle quand bien même l'émergence de nouvelles technologies.

Au cours des dernières années bon nombre de technologies ont vu le jour promotionnant de nouveaux matériaux telles que les pérovskites. Les pérovskites sont des matériaux ayant des propriétés physiques et chimiques intéressantes avec un potentiel énorme capable de

surpasser les rendements proposés par les technologies solaires photovoltaïques actuelles. En effet, sa facilité et sa flexibilité d'adaptation à d'autres matériaux tels que le silicium dans une configuration en tandem offre des possibilités de combinaison inouïe donnant des rendements records. Cependant de gros efforts sont employés afin de pallier les inconvénients majeurs des pérovskites tels que sa sensibilité aux variations de température et de l'humidité, sa stabilité et sa toxicité. Ceci dans l'objectif d'en faire un grand concurrent du silicium.

Dans l'optique d'explicitier nos choix, configurations et matériaux précédemment réalisés, nous conduirons dans le prochain chapitre une série de simulations sur divers logiciels basés sur les modèles mathématiques des cellules étudiées.

Chapitre 3 - Étude de la cellule solaire à pérovskites par simulation

3.1 Introduction

Ce chapitre sera consacré à l'étude de la cellule solaire à pérovskites en utilisant les logiciels SCAPS-1D, SETFOS et MATLAB permettant d'étudier les différents paramètres des cellules afin d'observer leurs effets sur le rendement global de cette dernière. Cette étude a pour vocation d'optimiser les paramètres physiques tels que l'épaisseur, la bande interdite, l'absorption de la lumière, le taux de recombinaison, la mobilité des charges, le rendement de conversion, le rendement quantique externe, etc. L'objectif est d'aboutir aux configurations ayant les meilleurs rendements tout en minimisant les pertes.

3.2 Étude des configurations multicouches

L'intérêt d'une telle configuration est l'amélioration du phénomène de conversion photoélectrique. Dans les simulations présentées dans ce chapitre nous allons succinctement étudier les différences entre les architectures p-i-n et n-i-p pour la cellule à pérovskites afin de déterminer celle offrant le plus grand intérêt. Puis après avoir identifié l'architecture la plus adéquate, nous étudierons différentes configurations multicouches par itérations de la nature des électrodes (Au ou Ag), des couches de transport des électrons (CdS, ZnS et TiO₂) et des couches de transport des trous (Spiro-OMe-TAD et PEDOT-PSS).

L'objectif d'une telle étude est de déterminer les effets de la nature des anodes, des cathodes, des couches ETL et HTL sur le PCE tout en déterminant avec précision l'épaisseur optimale de la couche active.

3.2.1 *Ordre n ou p*

Les architectures n-i-p et p-i-n comme présentées sur la figure 2-14 font références à l'ordre de dépôt des couches ETL et HTL ce qui signifie que la face éclairée de la cellule diffère selon que l'on soit dans l'une ou l'autre architecture. L'objectif de ce point sera donc d'étudier les impacts que cela aura sur la cellule. Les principales différences sont notamment observées sur :

1. Efficacité et Facteur de forme (FF) :

- Les cellules n-i-p ont un meilleur PCE (10.4%) comparé aux cellules p-i-n (8.8%) [42];
- Le facteur de forme est beaucoup plus grand pour les cellules n-i-p ($63.6\% \pm 4.1\%$) comparativement aux cellules p-i-n ($54.5 \pm 3.4\%$). Cette différence est attribuée aux meilleurs contacts et à une résistivité moins importante dans l'architecture n-i-p [42].

2. La courbe d'hystérésis J-V :

- Les deux architectures présentent une hystérésis significative de la courbe J-V mais avec la configuration p-i-n l'hystérésis est plus prononcée. Cette hystérésis est due à l'accumulation des porteurs de charges aux interfaces et peut être influencée par la nature des matériaux utilisés dans la cellule [42].

3. Propriétés optiques et d'absorption

- Les couches de la cellule à pérovskite en architecture n-i-p et p-i-n ont des bandes interdites optiques et des amorces d'absorption similaires. Cependant, l'épaisseur de la couche de pérovskites dans l'une ou l'autre architecture étant

différente elle conduit à des différences dans les coefficients d'absorption [42].

- Les variations des taux de couverture et de la mouillabilité peuvent affecter l'absorbance des couches de pérovskites [42].

4. Propriétés structurelles

- Les cellules à pérovskites p-i-n et n-i-p présentent des propriétés structurelles similaires avec des proportions cristallines étroites. Bien que de légères variations dans les phases cristallines soient observées, elles n'expliquent pas les différences majeures dans les propriétés d'absorption. Les variations de la densité globale et la présence de trous d'épingle peuvent contribuer aux différences de propriétés optiques.

Ces différences architecturales, hystérésis, propriétés optiques, l'efficacité et les caractéristiques structurelles mettent en évidence les performances et le comportement distinct des cellules solaires en pérovskites n-i-p et p-i-n [42].

Le modèle théorique de Boltzmann et les interactions de Van Der Waals permettent d'évaluer théoriquement les porteurs de charges dans les structures pérovskites. Les mobilités des porteurs dépendent généralement de paramètres tels que : la phase de la matière (solide, liquide ou gazeuse), la température et l'intensité de dopage au chlore [43].

Le degré de dopage au chlore diminue légèrement la mobilité des porteurs de charges (électrons et trous).

Ainsi, nous confirmons notre choix de départ de l'architecture n-i-p pour étudier les configurations multicouches abordées précédemment.

3.3 Simulation des différentes configurations inverses de la cellule à pérovskites

Les moyens employés ainsi que leurs coûts limitent la conduite de travaux d'expérimentation. C'est ainsi que nous avons décidé de procéder à des travaux de simulations bien plus flexibles, moins coûteux et efficaces pour l'approximation mathématique des phénomènes physiques étudiés. Fort heureusement, il existe une panoplie de logiciels libres ou payants disponibles pour la conduite des travaux de simulations.

3.3.1 Présentation et explication du fonctionnement des logiciels utilisés

Le nombre élevé et la diversité de logiciels s'expliquent par de nombreuses raisons telles que les types de cellules, les caractéristiques physiques, les configurations, les architectures, etc. Cependant, leur nombre n'est pas seulement justifié par des aspects liés à la cellule directement. On distingue aussi d'autres critères tels que la dimension d'étude (1D, 2D ou 3D), la disponibilité (gratuit ou payant) et la compatibilité (versions et systèmes d'exploitation). Toutes ces différences sont synthétisées et présentées sur le tableau 3-1 ci après.

Tableau 3-1 : Étude comparative des simulateurs de cellules solaires photovoltaïques [44].

	<i>Simulateurs</i>	<i>Dimensions</i>	<i>Disponibilité</i>	<i>Compatibilité</i>	<i>Capacités</i>
1	PC1D	1D	Gratuit	Toutes les versions jusqu'à Windows 7	Capable de simuler la plupart des cellules solaires mais parfaite pour celles à silicium (C-Si).
2	ASA	1D	Payant	Windows 7 ou 8	Cellule à couches minces : a-Si:H, μ c-Si:H et a-Si:H/ μ c-Si:H cellule tandem.
3	AMPS	1D	Gratuit	MacOS 10.9 et tout Windows à partir de Windows 7	Cellules C-Si, a-Si:H, CIGS, CZTS
4	wxAMPS	1D	Gratuit	Toutes les versions de Windows jusqu'à 7, Vista	Toutes les fonctionnalités incluant celles des cellules solaires tandems.
5	SCAPS	1D	Gratuit	Compatible avec Windows et Linux	Cellule solaire à couches minces : CIGS, CdTe, GaAs, C-Si et a-Si:H.
6	SETFOS	1D	Payant	Compatible avec Windows et Linux (x86 et ARM)	Cellules organiques, pérovskites, quantum-dots, cellule tandem pérovskites/Silicium.
7	Gpvdms	1D	Payant	Windows Vista/7/8	Cellules pérovskites, polymères, C-Si, a-Si:H et CIGS.
8	AFORS-HET	1D	Gratuit	Windows XP/Vista/7/8/8.1/Linux	Cellule a-Si:H/c-Si
9	ASPIN	2D	Gratuit	Windows 7/8.1/10	Cellule hétérojonction CIGS, a-Si:H/C-Si, a-Si:H p-i-n.
10	PECSIM	N/A	Gratuit	Windows 7/8.1/10	Cellules solaires pérovskites, dye-sensitized (DSCs).
11	ADEPT	1D	Gratuit	Windows 10, Windows Server 2016, Processor : Intel Core i7 ou équivalent	Cellule solaire C-Si, GaAs, AlGaAs/GaAs tandem, CIGS, CdTe et couche mince a-Si:H.
12	TCAD	2D, 3D	Payant	Windows 7/8/8.1 and 10 (64-bit), Linux 6/7	Cellules solaires CMOS, puissance, mémoire et image sensors.
13	ATLAS	2D, 3D	Payant	Windows et Linux (aucune version mentionnée)	Cellule solaire organique, tandem et photodétecteur.
14	MSCS	1D	Gratuit	Windows/Linux, version Web très performante	Cellule multi-jonction III-V haute efficacité.

Afin de mener à bien les travaux de simulation, nous avons décidé de nous tourner vers deux (02) des logiciels les plus réputés dans ce domaine. En effet, il s'agit de logiciels que nous avons pour la plupart du temps rencontré lors de nos recherches bibliographiques. Ce qui justifie et renforce la pertinence de notre choix.

3.3.1.1 Présentation du logiciel SETFOS

SETFOS (Semiconducting Emissive Thin Film Optics Simulation) est un logiciel de simulation permettant d'étudier les propriétés optiques et électriques de la cellule solaire photovoltaïque, et de comprendre leurs effets sur l'efficacité du PCE de la cellule solaire. Ce logiciel repose sur des modèles mathématiques [45].

En effet, cela s'observe à différents niveaux. Au niveau optique, le logiciel utilise l'approximation de la matrice de transfert qui permet de déterminer la réflectance $R(\lambda)$ et la transmittance $T(\lambda)$ de la structure afin d'en déduire l'absorbance $A(\lambda)$ en considérant l'équation 3.1 [45].

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda) \quad (3.1)$$

L'équation 3.2 montre le passage de la lumière dans un matériau d'épaisseur d a un effet direct sur le coefficient d'absorption $a(\lambda)$ [45].

$$a(\lambda) = \frac{4\pi fK}{c} = \frac{4\pi K}{\lambda} \quad (3.2)$$

L'indice de réfraction, quant à elle, est représentée par une expression complexe dont K est la partie imaginaire comme l'atteste l'expression 3.3 [45].

$$n = n + iK \quad (3.3)$$

La transmittance est donnée par l'expression 3.4.

$$T = \exp(ad) \quad (3.4)$$

En remplaçant l'effet de la réflectance, l'expression de l'absorbance devient :

$$A(\lambda) = 1 - \exp(ad) \quad (3.5)$$

Pour ce qui est des propriétés électriques, SETFOS utilise deux modèles afin de décrire le déplacement des charges :

- La mobilité de Poole-Frenkel qui se caractérise par des valeurs discrètes des niveaux d'énergie. Il considère que la mobilité des charges est constante et utilise la relation d'Einstein classique pour relier la constante de diffusion à la mobilité des charges [45];
- The Extended Correlated Disorder Model (ECDM) se traduisant littéralement par « Le modèle étendu des troubles corrélés », plus précis, il considère des niveaux d'énergie dispersés et désordonnés et se base sur la relation d'Einstein généralisée pour calculer la constante de diffusion de charge en fonction de la mobilité des charges [45].

Les deux générations utilisent le même modèle d'exciton, mais ils sont mutuellement exclusifs. Ainsi, la simulation des propriétés électriques considère que les excitons générés à la suite de l'absorption de la lumière se dissocieront en électrons libres et en trous dont le phénomène de transport est décrit par les équations de continuités des charges telles qu'exprimées ci-dessous :

$$\frac{dn}{dt} = \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_n}{-q} - R - R_{nt} + g_{np} \cdot G_n \quad (3.6)$$

$$\frac{dp}{dt} = \frac{\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_p}{q} - R - R_{pt} + g_{np} \cdot G_p \quad (3.7)$$

Où n et p représentent les densités des électrons et des trous, R_{nt} et R_{pt} expriment la capture des charges par piège, g_{np} et R décrivent respectivement l'efficacité de génération et le taux de recombinaison [45].

Deux modèles dépeignent la résolution des équations de continuité des charges :

- Le modèle de première génération

On exprime les flux d'électrons et de particules sous forme de courants de dérive et de diffusion comme le montre les expressions 3.8 et 3.9 [45].

$$\vec{J}_n = -q \cdot n \cdot \vec{V}_n + q \cdot D_n \cdot \vec{\nabla}_n \quad (3.8)$$

$$\vec{J}_p = q \cdot p \cdot \vec{V}_p - q \cdot D_p \cdot \vec{\nabla}_p \quad (3.9)$$

Où la dérive des charges est donnée par les expressions 3.10 et 3.11.

$$\vec{V}_n = -\mu_n \cdot \vec{E}_n \quad (3.10)$$

$$\vec{V}_p = \mu_p \cdot \vec{E}_p \quad (3.11)$$

Où μ_n et μ_p représentent respectivement la mobilité des électrons et la mobilité des trous.

La relation classique de Einstein établit un lien entre la constance de diffusion et la mobilité des charges se traduisant par l'expression 3.12 [45].

$$D_{n,p} = \mu_{n,p} \cdot \frac{k \cdot T}{q} \quad (3.12)$$

Avec K représentant la constante de Boltzmann, q décrivant la charge élémentaire et T exprimant la température absolue.

Le modèle de première génération considère que les mobilités des charges sont constantes comme traduit l'expression 3.13 [45].

$$\mu_{0\ n,p} = \mu_{i\ n,p} \quad (3.13)$$

Avec $\mu_{0\ n,p}$ et $\mu_{i\ n,p}$ représentant respectivement la mobilité des charges correspondant au champ électrique initial E_0 et la mobilité des charges correspondant au champ électrique à tout instant E_i dans le matériau.

Comme mentionné plus haut, le déplacement des charges dans les semiconducteurs d'un état localisé à un autre suit la relation de Poole-Frenkel qui est donnée l'équation 3.14.

$$\mu_{0\ n,p} = \mu_{0\ n,p} \cdot e^{\gamma_{n,p} \cdot \sqrt{E}} \quad (3.14)$$

$$\gamma_{n,p} = \frac{1}{\sqrt{E_{0\ n,p}}} \quad (3.15)$$

L'équation 3.14 devient alors :

$$\mu_{0\ n,p} = \mu_{0\ n,p} \cdot e^{\sqrt{E/E_{0\ n,p}}} \quad (3.16)$$

- Le modèle de deuxième génération

Contrairement au modèle de première génération qui ordonne les courants d'électrons en courants de dérive et ceux des trous en courant de diffusion, le modèle de deuxième génération considère que les états d'énergie sont désordonnés et exprimés par l'expression 3.17 [45].

$$N(E) = \frac{N_0}{\sqrt{2\pi}\sigma^2} * \exp \left[- \left(\frac{E - E_0}{\sqrt{2} \cdot \sigma} \right)^2 \right] \quad (3.17)$$

Avec σ qui représente la conductivité électrique, N_0 qui représente la densité d'état et E qui représente le champ électrique.

La densité d'état des porteurs de charge est obtenue par la statistique de Fermi Dirac exprimée par la formule 3.18 [45].

$$p(x, E_f) = \int_{-\infty}^{+\infty} N(x, E) \cdot F(x, E, E_f) dE \quad (3.18)$$

Dans ce modèle, l'expression d'Einstein généralisée lie la constante de diffusion à la mobilité suivant l'expression 3.19.

$$D_{n,p} = \mu_{n,p} * \frac{K.T}{q} * g_{n,p}(\{n, p\}, T) \quad (3.19)$$

Avec $g_{n,p}(\{n, p\}, T)$ exprimé par l'expression 3.20.

$$g_{n,p}(\{n, p\}, T) = \frac{1}{K.T} * \frac{\{n, p\}}{\frac{\partial \{n, p\}}{\partial E_f}} \quad (3.20)$$

Ainsi, pour les besoins de cette étude à l'aide du logiciel SETFOS, nous utiliserons les paramètres présentés sur le tableau 3-2.

Tableau 3-2 : Paramètres des différentes couches de la cellule sur SETFOS.

Nature	Paramètres	Valeurs
Couche active (Pérovskites)	LUMO (eV)	3,9
	HOMO (eV)	5,49
	Diélectrique	25
	Épaisseur (nm)	Variable
	Mobilité des trous μ_p (cm ² /(V.s))	17
	Mobilité des électrons μ_p (cm ² /(V.s))	3
Couches de transport HTL (PEDOT :PSS/Spiro-OMe-TAD)	LUMO (eV)	3,5/2,2
	HOMO (eV)	5,2
	Épaisseur (nm)	60
Couches de transport ETL (CdS/ZnS/TiO ₂)	LUMO (eV)	4,18/3,8/4,2
	HOMO (eV)	6,58/5,4/7,4
	Épaisseur (nm)	10

3.3.1.2 Présentation du logiciel SCAPS-1D

SCAPS-1D (a Solar Cell Capacitance Simulator) est un logiciel de simulation de cellule solaire unidimensionnel développé au département d'électronique et de systèmes d'information (ELIS) de l'Université de Gent en Belgique. Il est utilisé pour réaliser la modélisation et la simulation du dispositif [46]. Les équations de continuité, de drift-diffusion et de Poisson dépendant de la position constituent l'épine dorsale de la simulation. Les trois principales équations des semi-conducteurs utilisées dans le cadre de la simulation sont les

équations de continuité pour les trous (3.21), les électrons (3.22) et l'équation de Poisson (3.23), comme indiqué ci-dessous [47] :

$$\frac{dP_n}{dt} = G_p - \frac{P_n - P_{n0}}{\tau_p} - P_n u_p \frac{dE}{dx} - u_p E \frac{dP_n}{dx} + D_p \frac{d^2 P_n}{dx^2} \quad (3.21)$$

$$\frac{dn_p}{dt} = G_n - \frac{n_p - n_{p0}}{\tau_n} - n_p u_n \frac{dE}{dx} - u_n E \frac{dn_p}{dx} + D_p \frac{d^2 n_p}{dx^2} \quad (3.22)$$

$$\frac{d}{dx} \left(\epsilon(x) \frac{d\Phi}{dx} \right) = q[p(x) - n(x) + N_{d^+}(x) - N_{a^-}(x) + p_t(x) - n_t(x)] \quad (3.23)$$

$$E_g(n) = 1,12 - 0,4n + 0,008n^2, n < 0,85 \quad (3.24)$$

$$E_g(n) = 1,86 - 1,2n, n > 0,85 \quad (3.25)$$

Où :

q : la charge élémentaire qui vaut $1,6 \cdot 10^{-19}$ C; ϵ : la permittivité diélectrique; G : le taux de génération; D : le coefficient de diffusion; Φ : le potentiel électrostatique; E : le champ électrique; E_g : le niveau d'énergie; $p(x)$: le nombre de trous libres; $p_t(x)$: le nombre de trous piégés; n : la quantité de matière du système; $n(x)$: le nombre d'électrons libres; $n_t(x)$: le nombre d'électrons piégés; N_{d^+} : la concentration du dopage ionisé par le donneur; N_{a^-} : la concentration du dopage ionisé par l'accepteur; x : l'épaisseur de la couche (nm).

Aussi, il est également nécessaire de tenir des niveaux de concentration des charges à l'équilibre thermique. Ainsi, l'équation 3.28 exprimera la concentration en électrons libres (n) et l'équation 3.29, quant à elle, exprimera la concentration en trous (p).

$$N_c = 5,3 * 10^{15} * \sqrt{T^3} \quad (3.26)$$

$$N_v = 3,5 * 10^{15} * \sqrt{T^3} \quad (3.27)$$

$$n = N_c e^{\frac{E_f - E_c}{k.T}} \quad (3.28)$$

$$p = N_v e^{\frac{E_v - E_f}{k.T}} \quad (3.29)$$

Où, E_f représente le niveau de Fermi; k est la constante de Boltzmann; T est la température absolue; N_c est l'état de la densité effective de la bande de conduction; N_v représente l'état de la densité effective de la bande de valence; E_c et E_v représentent les niveaux d'énergie sous un état d'équilibre.

Cependant, son application dans l'étude des cellules solaires à pérovskites tient compte du calcul d'éléments parasites à l'aide d'un algorithme développé sur MATLAB sur la base du circuit électrique présenté dans la figure 3-1 ci-dessous [48] :

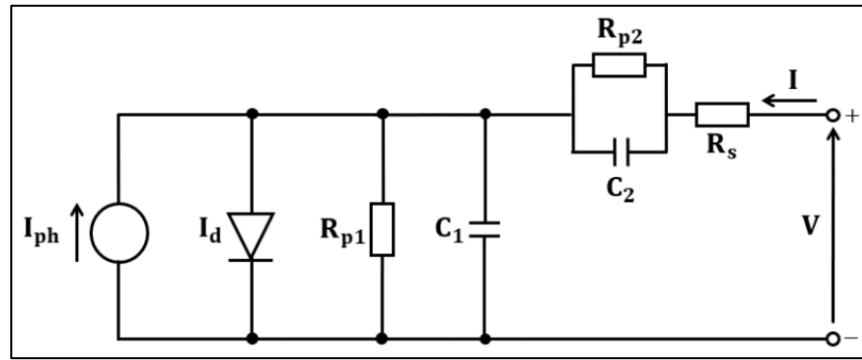


Figure 3-1 : Circuit équivalent de la cellule solaire à pérovskites [48].

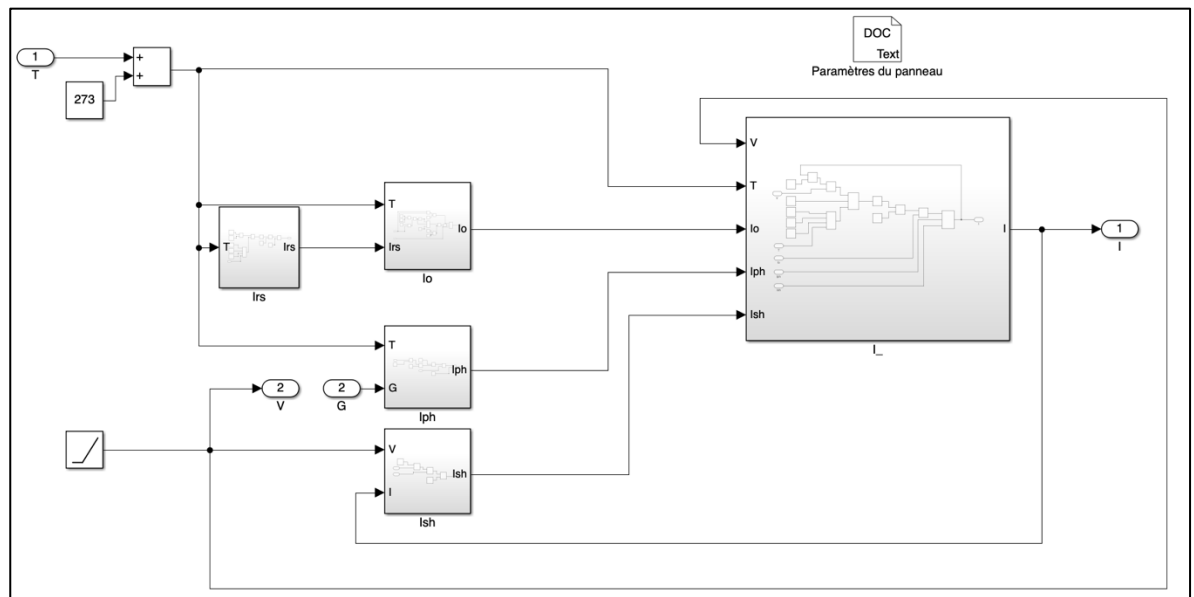


Figure 3-2 : Représentation paramétrique du panneau solaire photovoltaïque développée sur MATLAB/Simulink.

Le modèle SIMULINK/MATLAB ainsi développé sur la figure 3-2 nous permettra d'étudier le panneau solaire tout en ayant un contrôle total sur les paramètres aussi bien techniques que météorologiques.

L'analyse du circuit permet d'établir l'équation suivante :

$$J = J_{sc} - J_0 * \left(e^{\frac{V + (I_{sc} * (R_s + R_{p2} + Z_2))}{V_{th}}} - 1 \right) - \left(\frac{V + (I_{sc} * (R_s + R_{p2} + Z_2))}{R_{p1} + Z_1} \right) \quad (3.30)$$

Où :

J : la densité de courant de la cellule (mA/cm^2);

J_{SC} : la densité de courant de court-circuit (mA/cm^2);

J_0 : la densité de courant de saturation (mA/cm^2);

V : la tension de la cellule (V);

V_{TH} : la tension thermique (V);

R_S : la résistance en série induite par les parasites ($\text{m}\Omega/\text{cm}^2$);

R_{p1} et R_{p2} : les résistances en parallèle induite par les parasites ($\text{m}\Omega/\text{cm}^2$);

Z_1 et Z_2 : les impédances équivalentes induites par les parasites ($\text{m}\Omega/\text{cm}^2$);

C_1 et C_2 : les capacités équivalentes induites par les parasites (nF/cm^2).

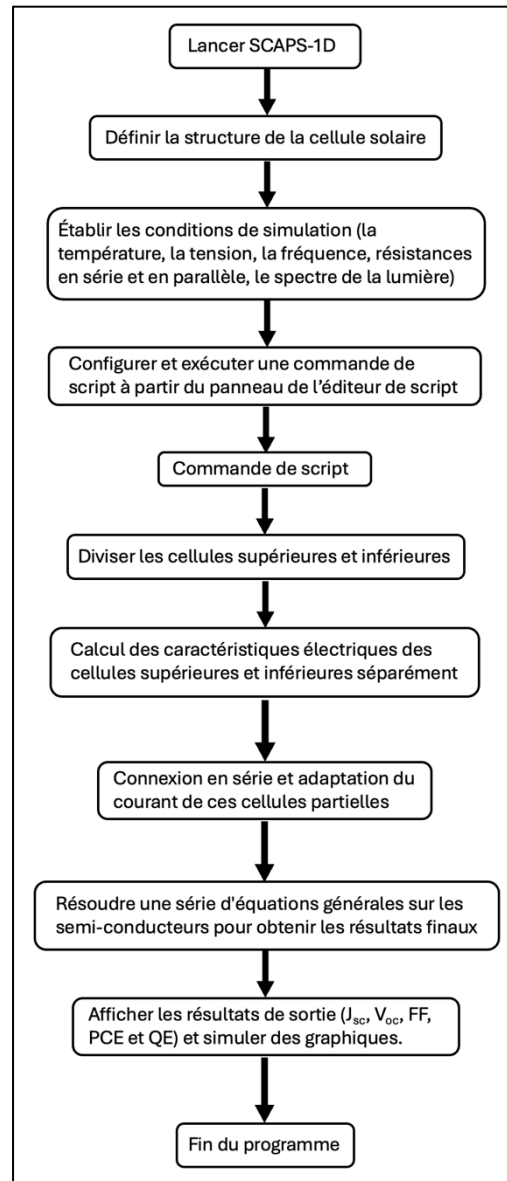


Figure 3-3 : Organigramme du processus de simulation sur SCAPS-1D.

Comme mentionné dans ce point, nous nous aiderons du logiciel SCAPS-1D. La figure 3-3 nous décrit comment se déroule une séance de simulation sur ce logiciel.

La figure 3-4 ci-dessous nous présente le processus d'estimations des éléments parasites dans le phénomène de recombinaison des charges lors du passage des photons à travers les couches intrinsèques de la cellule solaire. Ces éléments influant négativement sur la qualité

de la production, l'objectif sera donc de minimiser au maximum leurs effets théoriques grâce à un algorithme dans le contrôleur de charge MPPT.

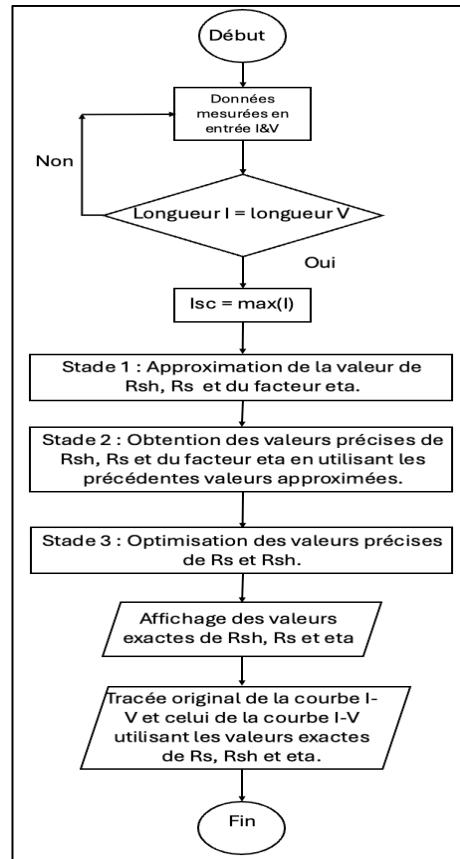


Figure 3-4 : Algorithme d'estimation des éléments parasites [48].

Afin de satisfaire aux exigences de l'étude, nous nous aiderons des paramètres physiques détaillés dans le tableau 3-3.

Tableau 3-3: Paramètres des différentes couches étudiées sur SCAPS-1D.

Paramètres	ITO	CuI	TiO ₂	CdS	ZnS	PEDOT :PSS	Spiro-OMe-TAD	CH ₃ NH ₃ PbI ₃
Épaisseur (μm)	0.05	0.02	0.05	0.01	0.01	0.03	0.03	Variable
Bandgap (eV)	3.5	3.1	3.2	2.4	3.6	1.6	2.9	1.57
Affinité des électrons (eV)	4	2.1	4	4.18	3.9	3.4	2.2	3.9
Permittivité diélectrique (relative)	9	6.5	9	10	9	4	3	25
État de la densité effective CB (1/cm ³)	2.20E+18	2.20E+19	2.20E+18	2.20E+18	1.00E+19	2.20E+15	2.50E+18	2.20E+18
État de la densité effective VB (1/cm ³)	1.80E+19	1.80E+19	1.90E+19	1.9E+19	1.00E+19	1.80E+18	1.80E+19	1.90E+19
Vélocité thermique de l'électron (cm/s)	1.10E+07	1.10E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07
Vélocité thermique du trou (cm/s)	1.10E+07	1.10E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+07
Mobilité de l'électron (cm ² /V.s)	20	1.00E+02	2.00E+00	1.00E+02	1.00E+02	1.00E+01	2.00E-04	3
Mobilité du trou (cm ² /V.s)	10	4.39E+01	1.00E+00	2.50E+01	2.50E+01	1.00E+01	2.00E-04	17
Densité uniforme et peu profonde des donneurs ND (1/cm ³)	1.00E+21	0.00	1.00E+18	1.00E+18	1.00E+18	-	-	2.00E+13
Densité uniforme et peu profonde des accepteurs NA (1/cm ³)	-	1.00E+18	-	-	-	3.17E+14	1.00E+22	-
Défaut du niveau de concentration Nt (cm ⁻³)	1.00E+15	1.00E+15	1.00E+15	1.00E+15	1.00E+15	1.00E+14	1.00E+15	8.50E+13

Par ailleurs, il faut noter qu'il existe des phénomènes physiques au niveau des interfaces de contact entre les différentes couches de matériaux dans une cellule hétérojonction. Ainsi, nous tiendrons également compte des paramètres de défauts pour les interfaces de contact

entre les différentes couches et la couche absorbante qui sont utilisés pour simuler les cellules à pérovskite (PSC) à l'aide de SCAPS-1D. Pour cela, nous nous aiderons des données présentées sur le tableau 3-4.

Tableau 3-4 : Paramètres des caractéristiques physiques des différentes interfaces.

Paramètres	Interfaces		
	CH ₃ NH ₃ PbI ₃	ETL / CH ₃ NH ₃ PbI ₃	CH ₃ NH ₃ PbI ₃ / HTL
Type de défaut	Neutre	Neutre	Neutre
Section efficace de capture pour les électrons (cm ²)	2.00E-15	2.00E-16	2.00E-14
Section efficace de capture pour les trous (cm ²)	2.00E-15	2.00E-16	2.00E-14
Distribution de l'énergie	Gaussienne	Unique	Unique
Niveau d'énergie par rapport par rapport à E _V (eV)	0.5	0.65	0.65
Énergie caractéristique (eV)	0.1	0.1	0.1
Densité totale (cm ⁻³)	8.50E+13	1.00E+18	1.00E+18

Sous l'irradiation solaire, la cellule solaire à pérovskites absorbe la lumière et produit des électrons et des trous qui sont respectivement collectés par les électrodes Ag/Au et ITO. Les couches de matériaux ETL et HTL, quant à elles, permettent le passage unidirectionnel des électrons et des trous respectivement depuis la couche active à pérovskites. La figure 3-5 présente l'agencement des différentes couches étudiées par rapport aux autres dans la cellule en fonction de leurs niveaux d'énergie (LUMO et HOMO). Elle présente également les interactions des charges avec les différents matériaux.

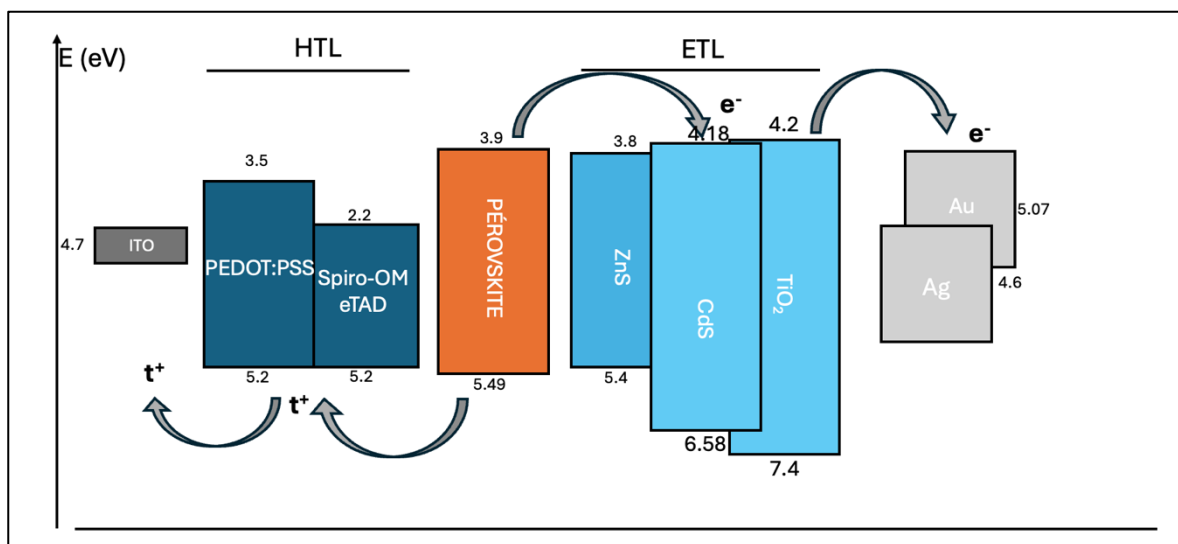


Figure 3-5 : Représentation des niveaux d'énergie des couches de matériaux étudiées pour notre cellule à pérovskites.

3.3.2 Étude des effets de la nature des électrodes sur le PCE.

L'objectif de cette étude est d'explicitier nos choix d'électrodes qui sont globalement motivés par le fait que plus le travail de sortie du matériau dont est composé l'électrode est élevée, plus le choix du matériau est à privilégier mais aussi et surtout des compatibilités structurelles au niveau des contacts. Le travail de sortie ou travail d'extraction représente l'énergie minimum nécessaire pour arracher un électron depuis le niveau de Fermi d'un métal jusqu'à un point situé à l'infini en dehors du métal (niveau du vide) [4]. De façon plus simplifiée, il représente la moitié de l'énergie d'ionisation d'un atome libre du même métal. Sur le plan photoélectrique, il consiste en une libération d'un électron lorsqu'un photon doté d'une énergie supérieure au travail de sortie arrive sur le métal. La différence entre l'énergie du photon incident et le travail de sortie est fournie à l'électron sous forme d'énergie cinétique.

Elle s'obtient par la relation suivante :

$$W = h * \nu_0 \quad (3.31)$$

Où h est la constante de Planck et ν_0 est la fréquence minimum du photon à partir de laquelle l'émission photoélectrique se produit.

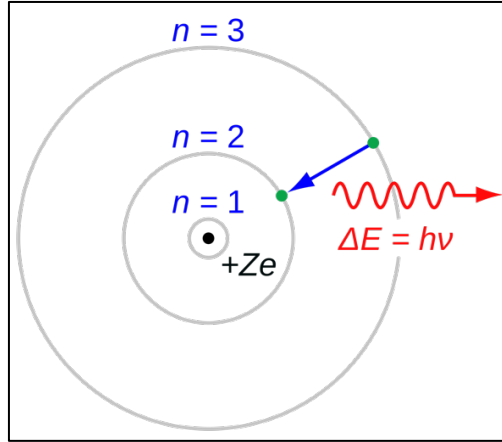


Figure 3-6 : Représentation du modèle de Bohr de l'atome.

Cependant, la nature du contact au niveau des électrodes peut influencer sur sa fonction de travail. Ainsi, les équations 3.32, 3.33 et 3.34 expriment les fonctions de travail respectives des contacts de type n, p et intrinsèque [49].

$$\phi_m = \chi + k. T. \ln \left(\frac{N_c}{N_D - N_A} \right) \quad (3.32)$$

$$\phi_m = \chi + E_{\text{gap}} - k. T. \ln \left(\frac{N_c}{N_A - N_D} \right) \quad (3.33)$$

$$\phi_m = \chi + k. T. \ln \left(\frac{N_c}{N_i} \right) \quad (3.34)$$

Où , ϕ_m représente la fonction de travail, χ est l'affinité électronique et N_c , la densité d'état effective de la bande de conduction. N_A , N_D , et N_i sont respectivement les densités uniformes et peu profondes des accepteurs (A), des donneurs (D) et des porteurs intrinsèques (i) [49].

Enfin, la détermination du niveau d'absorption de l'énergie par les couches est obtenue par le coefficient d'absorption qui se calcule dans SCAPS-1D par la formule suivante :

$$a(\lambda) = \left(A + \frac{B}{h \cdot \nu} \right) \sqrt{h \cdot \nu - E_{\text{gap}}} \quad (3.35)$$

Où, A et B représentent les constantes d'absorption.

L'étude des effets du travail de sortie de l'électrode sur les performances de la cellule nous a montré à quel point il représente un important dont il faut tenir compte dans le choix du matériau. Cependant, bien d'autres paramètres existent et, comme présenté sur le tableau 3-5, ce sont : la vitesse de recombinaison des charges (électrons et trous) et la température de la cellule.

Tableau 3-5 : Paramètres physiques des électrodes Au et Ag [50].

Contacts	<i>Contact arrière (Au)</i>	<i>Contact arrière (Ag)</i>	<i>Contact avant (Ag)</i>
Fonction de travail (eV)	5.07	4.60	4.60
Vitesse de recombinaison superficielle des électrons	1.00E+07	1.00E+07	1.00E+05
Vitesse de recombinaison superficielle des trous	1.00E+05	1.00E+05	1.00E+07
Paramètres du systèmes			
Température de la cellule	300K		

3.3.2.1 Étude des différents potentiels effets de Au et de Ag sur le PCE au niveau de la cathode.

Comme observé sur la figure 3-7, nous relevons des évolutions décroissantes des coefficients d'absorption du rayonnement solaire aussi bien du côté de Ag que de Au sur l'ensemble des longueurs d'onde du spectre solaire. Cependant, il est important de noter que celle de Au est plus stable et moins prononcée que celle de Ag.

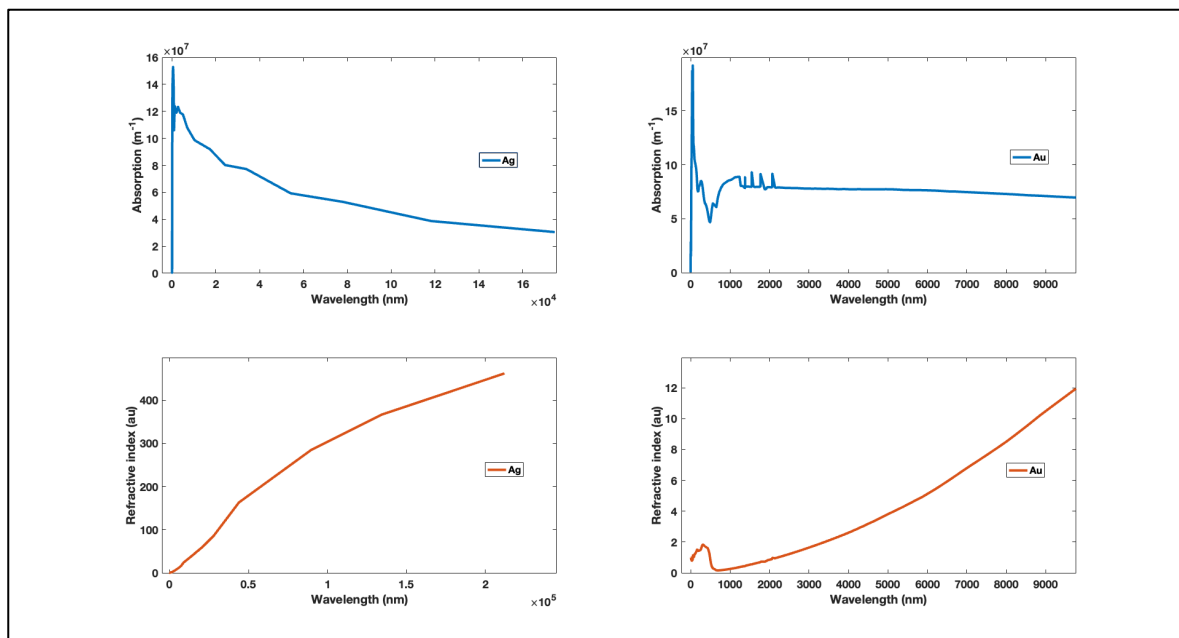


Figure 3-7 : Les indices d'absorption et de réfraction de Ag et de Au.[23]

Cela s'explique notamment par le niveau de travail photoélectrique de Au qui, de 5.07 eV, est plus élevé que celui de Ag qui est de 4.60 eV. On la traduit donc par une meilleure capacité à libérer des électrons lorsque des photons incidents dotés d'énergie supérieure au travail de sortie arrive sur le métal. À cela s'ajoute le fait que l'énergie cinétique transmise à l'électron est la résultante de la différence entre l'énergie du photon incident et le travail de sortie. La figure 3-8 soutient l'analyse faite sur l'effet du niveau de travail photoélectrique.

Cependant, en dépit de toutes ces considérations, le choix du matériau en tant que cathode repose exclusivement sur sa compatibilité avec la couche ETL de transport d'électrons. Pour les besoins de notre étude nous privilégierons l'utilisation de Ag car quand bien même qu'il possède un travail de sortie inférieur à celui de Au, il reste celui des (02) deux qui se rapproche le plus des niveaux LUMO des couches voisines ETL étudiées à savoir ZnS, CdS et TiO₂ comme le montre la figure 3-5. Cette proximité permettra d'obtenir un meilleur PCE dans une configuration utilisant Ag comme électrode métallique. Cela s'explique par le fait

que la différence entre le niveau LUMO des couches ETL et le travail de sortie de Au est plus grande que celle entre le niveau LUMO des couches ETL et le travail de sortie de Ag. Cette différence appelée “niveau de fermi” nuit au transport efficace des électrons et par voie de conséquence induit un PCE plus petit.

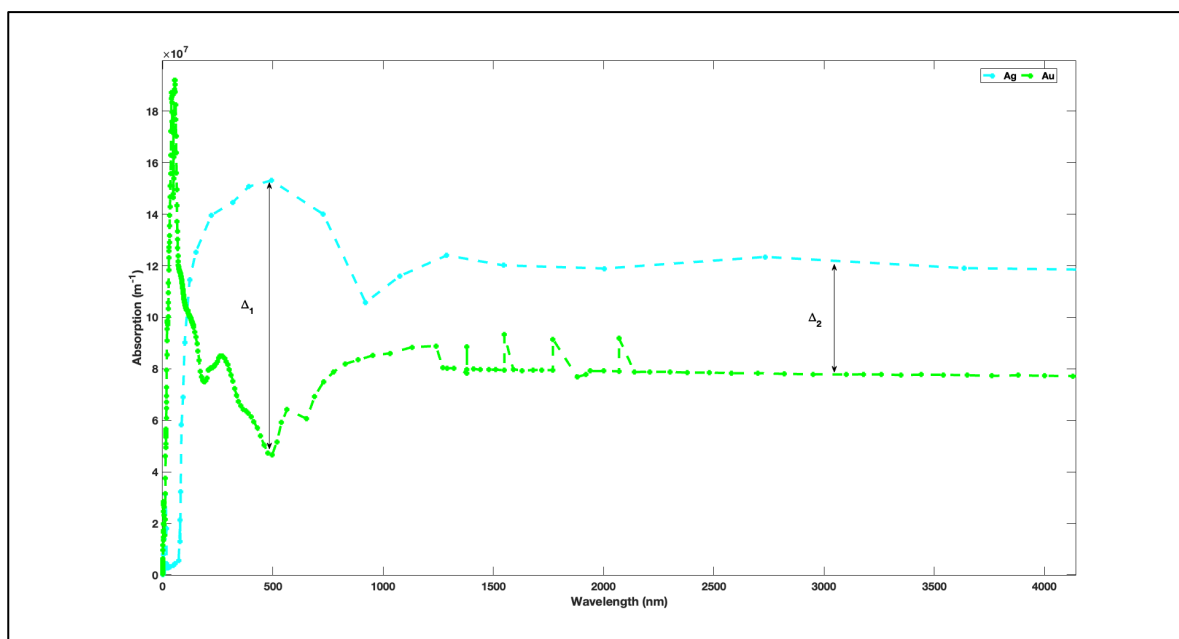


Figure 3-8 : Comparaison des coefficients d'absorption de Ag et de Au.[23]

Pour ce qui est des indices de réfraction, la figure 3-9 nous montre que sur des longueurs d'ondes allant de 0 nm à 9000 nm, l'indice de réfraction de Au a une progression bien moins prononcée que celle de Ag. Cependant, on note que sur des longueurs d'ondes allant de 0 nm à 500 nm, Au a des indices de réfraction qui croissent de façon plus prononcée par rapport à Ag. Le phénomène s'inverse au-delà de 500 nm pour laisser les indices de réfraction de Ag croître durablement et de façon exponentielle.

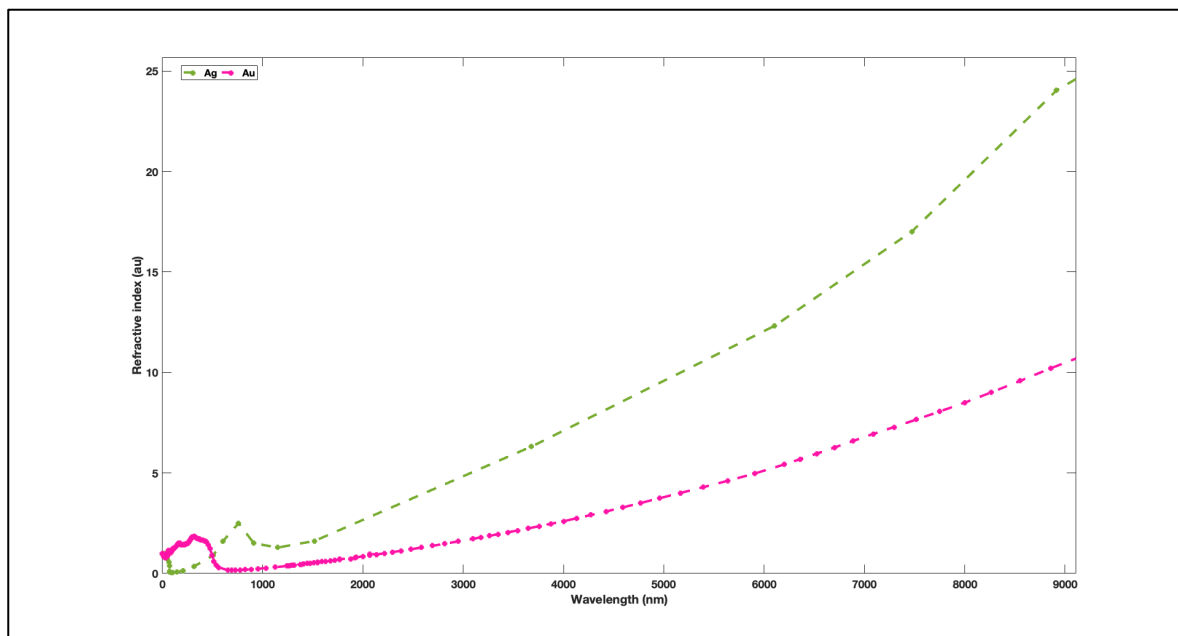


Figure 3-9 : Comparaison des indices de réfraction de Ag et de Au [23].

3.3.2.2 Étude des différents potentiels effets de ITO sur le PCE au niveau de l'anode.

En rappel, l'oxyde d'indium-étain (ITO) possède de nombreuses qualités telles que sa transmittance élevée, sa transparence optique et sa faible résistivité. En effet, comme le montre la figure 3-10, pour une épaisseur variable entre 50 nm et 200 nm, on observe que la transmittance dépasse facilement 70 % pour des longueurs d'ondes allant au-delà de 380 nm pour une épaisseur optimale de 100 nm permettant d'obtenir une transmittance stable autour de 80 %. Aussi, sa transparence optique reconnue nous assure une transmission intégrale des photons incidents aux couches inférieures (HTL) puis à la couche active de pérovskite. Son association dans la structure Verre/ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃, comme le montre la figure 3-11, n'influence en rien ses performances garantissant ainsi une amélioration de la conversion des photons incidents en charges électriques.

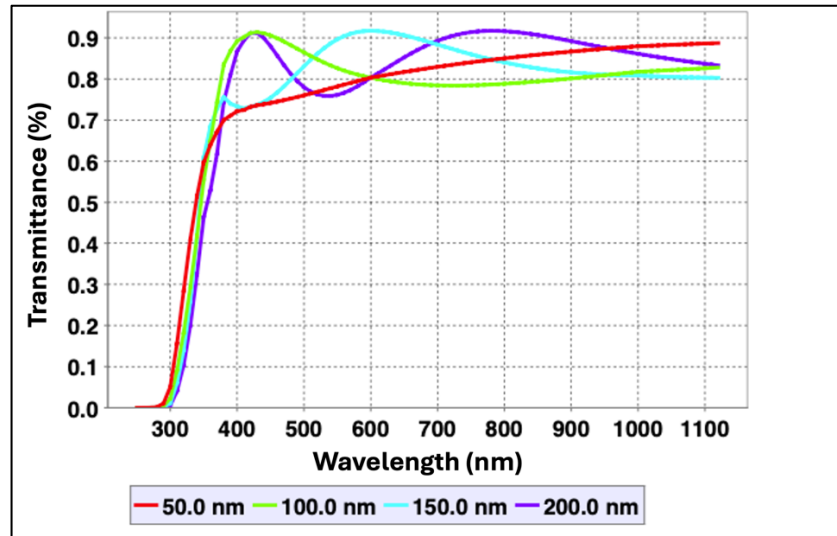


Figure 3-10 : Évolution de la transmittance de ITO sur le spectre solaire en fonction de son épaisseur [45].

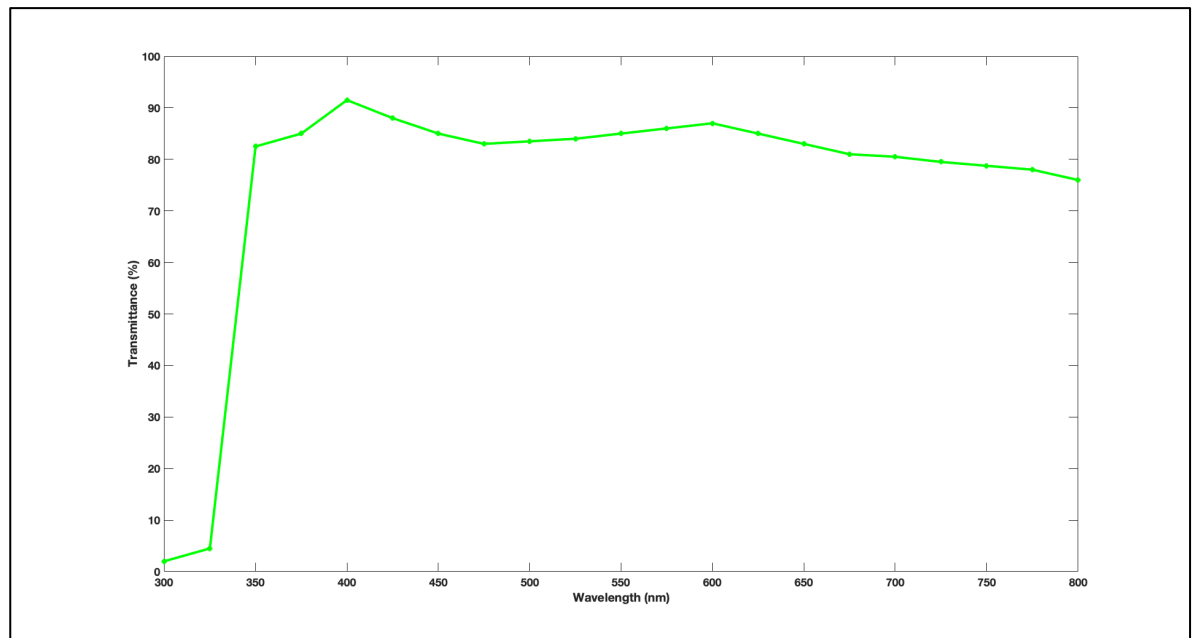


Figure 3-11 : Représentation de l'évolution du spectre de transmission des photons dans la structure Verre/ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃ avec une épaisseur de 60 nm de la couche PEDOT : PSS.

Une transmittance aussi élevée impacte immédiatement son coefficient d'absorption α suivant la relation 3.36.

$$\alpha = \frac{1}{t} * \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad (3.36)$$

Cela explique le phénomène observé sur la figure 3-12.

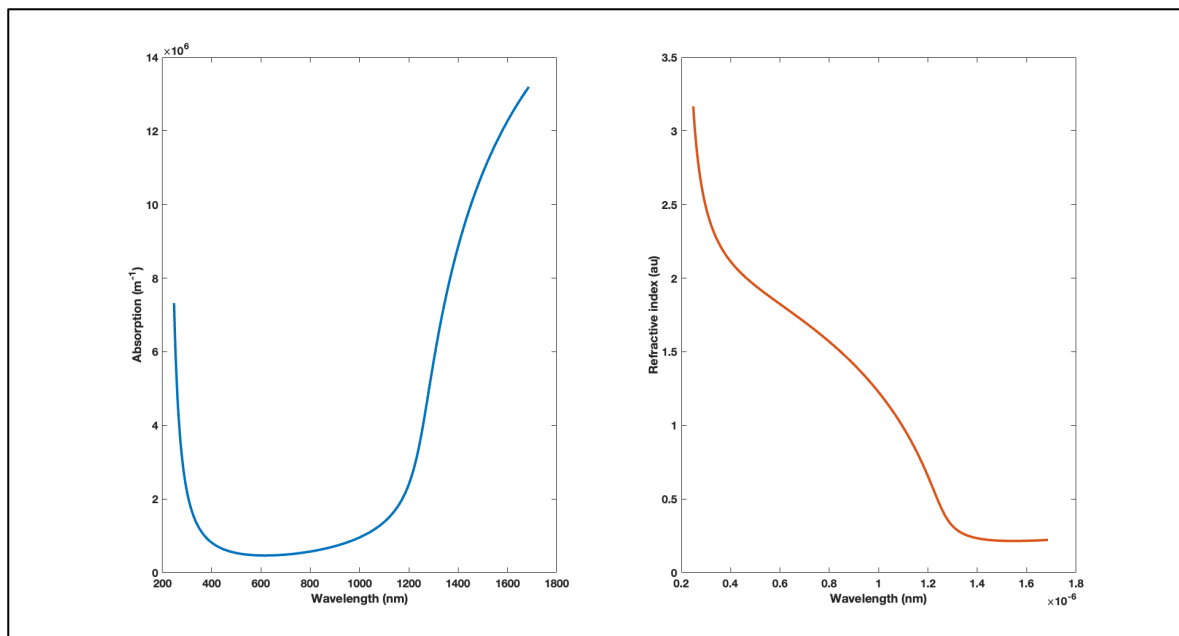


Figure 3-12 : Indices d'absorption et de réfraction de l'ITO [23].

Par ailleurs, la proximité de son travail de sortie de 4.7 eV avec le niveau HOMO des couches HTL et la possibilité de l'augmentation de son travail de sortie afin de réduire le niveau de fermi afin de faciliter le déplacement des trous vers l'anode, font de l'ITO un bon choix pour l'anode.

3.3.3 Étude des effets des couches de transport de charges ETL et HTL sur le PCE.

Cette étude aura pour objectifs de justifier nos choix de matériaux en tant que couches de transport de trous et d'électrons. En effet, l'augmentation des performances de notre cellule nécessite la combinaison de matériaux ayant des LUMO et HOMO adéquatement compatibles avec les niveaux d'énergie de la couche active. Cela se traduit pour les ETL par le fait que plus le niveau d'énergie LUMO est grand, plus il aura tendance à accepter des

électrons, ce qui facilitera leur transport vers la cathode. Le même phénomène est observé dans le cas des HTL qui facilite le transport des trous vers l'anode au fur et à mesure que leur niveau d'énergie LUMO s'accroît. Ces deux couches suivant leur fonction permettent le transport de charges tout en s'opposant au passage des charges opposées d'où l'unidirectionnalité de la conduction du courant électrique. De plus il faut noter que les couches de transport de charges doivent être séparées de la couche active par des couches intermédiaires ou IDL dont l'intérêt principal est d'éviter de modifier la composition chimique des différentes couches lors d'un contact direct tout en permettant le passage des charges électriques.

3.3.3.1 Étude des différents effets de CdS, ZnS et de TiO₂ sur le PCE en tant que ETL.

Nous allons présenter dans un premier temps les performances des différentes configurations de cellules en faisant varier l'épaisseurs de la couche ETL dans chaque cas de structure. Cela permettra aussi bien de déterminer l'épaisseur optimale de la couche que de comparer les performances de la cellule pour les différentes couches ETL.

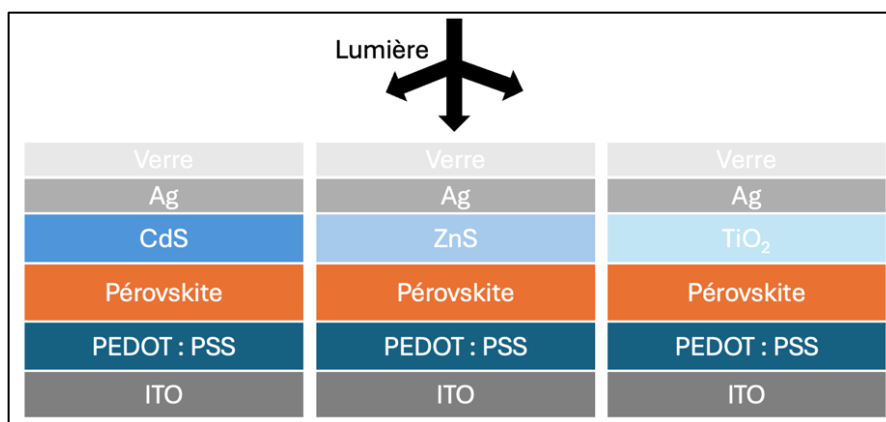


Figure 3-13 : Représentation des structures monolithiques étudiées dans cette partie.

Tableau 3-6 : Effets de l'épaisseur de la couche CdS pour une structure ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/CdS/Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} ()	FF (%)	η (%)
10	1,183011	23,73043	81,096	22,7664
20	1,182972	23,7302652	81,1044	22,7678
30	1,182974	23,7294491	81,1072	22,7679
40	1,182977	23,7285204	81,1104	22,7679
50	1,18298	23,7273492	81,1135	22,7677
60	1,182982	23,7258654	81,1165	22,7672
70	1,182983	23,7240079	81,1191	22,7662
80	1,182983	23,7217202	81,1216	22,7647
90	1,182982	23,7189502	81,124	22,7627
100	1,182979	23,7156497	81,1261	22,76

Le tableau 3-6 nous montre que les résultats obtenus de nos simulations de la cellule ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/CdS/Au/Verre nous montrent une baisse générale des grandeurs électriques étudiées pour une variation de l'épaisseur de la couche CdS de 10 nm à 100 nm, ce qui établit pour cet ordre une épaisseur optimale à 30 nm.

Tableau 3-7 : Effets de l'épaisseur de la couche ZnS pour une structure ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} ()	FF (%)	η (%)
10	1,182777	23,7382136	82,7424	23,2316
20	1,182563	23,7393524	82,7149	23,2208
30	1,182548	23,7392864	82,7128	23,2199
40	1,182547	23,7392251	82,7127	23,2197
50	1,182547	23,7391585	82,7127	23,2197
60	1,182547	23,739086	82,7127	23,2196
70	1,182547	23,7390077	82,7127	23,2195
80	1,182547	23,7389236	82,7127	23,2194
90	1,182546	23,7388337	82,7127	23,2193
100	1,182546	23,738738	82,7127	23,2192

On remarque sur le tableau 3-7 que tout comme la structure ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/CdS/Ag/Verre, la simulation de la cellule ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/Ag/Verre nous montre également une baisse des grandeurs électriques et donc établit l'épaisseur de la couche ZnS à 10 nm.

Tableau 3-8 : Effets de l'épaisseur de la couche TiO_2 sur la structure ITO/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ / TiO_2 /Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} ()	FF (%)	η (%)
10	1,182873	23,7329805	80,9825	22,7343
20	1,182873	23,7328976	80,9826	22,7342
30	1,182874	23,7328173	80,9827	22,7342
40	1,182874	23,7327393	80,9827	22,7342
50	1,182874	23,7326635	80,9828	22,7341
60	1,182875	23,7325899	80,9829	22,7341
70	1,182875	23,7325185	80,983	22,734
80	1,182875	23,732449	80,9831	22,734
90	1,182875	23,7323815	80,9831	22,734
100	1,182876	23,7323159	80,9832	22,7339

Sans surprise, comme on le voit sur la figure 3-8 le résultat reste le même et établit qu'importe la nature de la couche ETL, l'épaisseur optimale se situe à 10 nm. Cependant, comme le montre la figure 3-14 les matériaux ne se valent pas et en comparant les trois (03) différentes structures, on déduit que le ZnS représente le matériau le plus performant pour le transport des électrons.

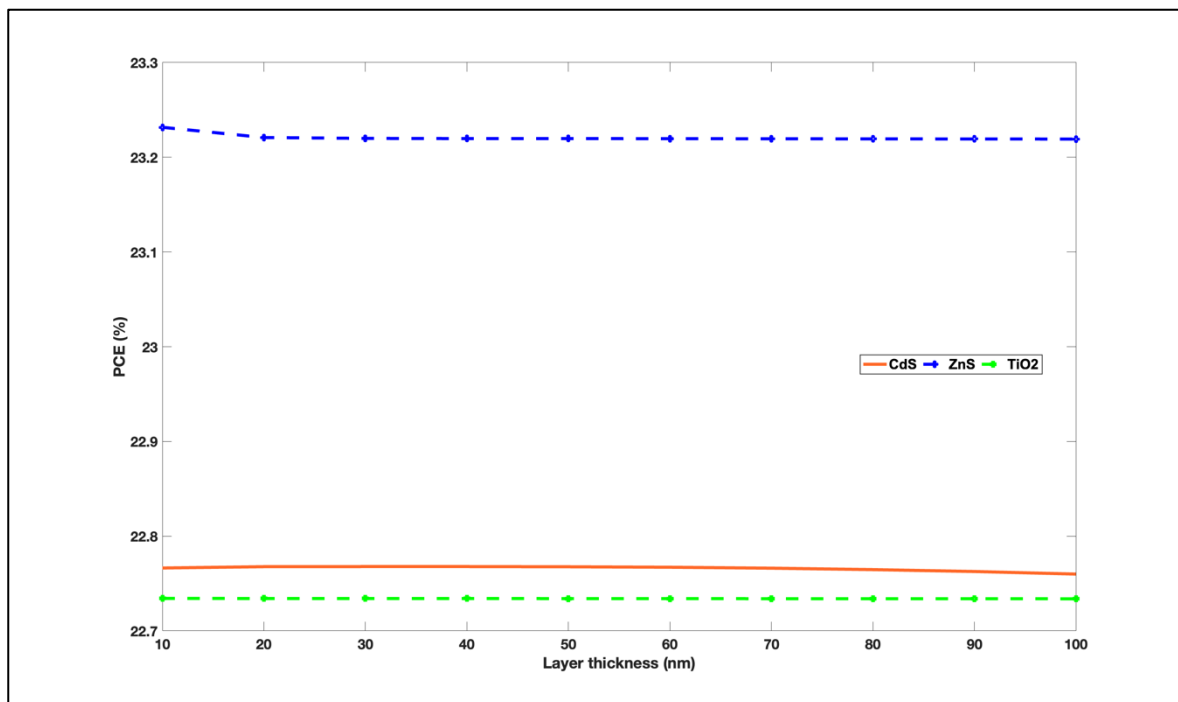


Figure 3-14 : Comparaison de l'effet des couches CdS, ZnS et TiO₂ sur le PCE.

3.3.3.2 Étude des différents effets de PEDOT : PSS et de Spiro-OMe-TAD sur le PCE en tant que HTL.

La PEDOT : PSS et le Spiro-OMe-TAD sont (02) deux matériaux polymères ayant des caractéristiques très proches pour le rôle de HTL. En effet, ils ont les mêmes niveaux HOMO (5.2 eV) proches de celui des pérovskites bénéficiant ainsi de la facilité du déplacement des trous de la couche active vers l'anode. Cependant, la différence principale vient de l'envergure de la bande interdite. Assurément, dans une association de couches minces ayant pour objectif d'améliorer la conversion des photons incidents en charges électriques de la couche active, il faut que les associations de matériaux de bandes interdites concourent à valoriser celle de la couche principale active. Comme le montre la figure 3-15, les coefficients d'absorption des deux matériaux sont relatives proches alors que les indices de

réfraction nous montrent que la PEDOT : PSS dévia bien moins les rayons lumineux incidents que le Spiro-OMe-TAD.

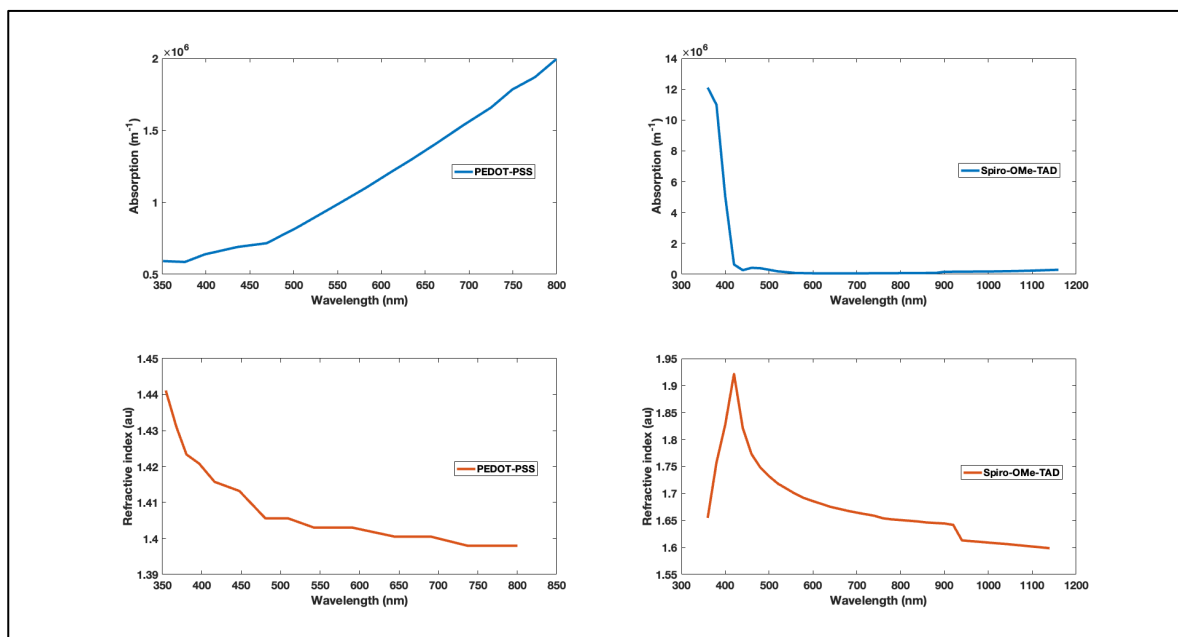


Figure 3-15 : Les indices d'absorption et de réfraction de la PEDOT-PSS et du Spiro-OMe-TAD [23].

Nous allons, tout comme dans le point abordé précédemment, présenter dans un premier temps présenter les performances des différentes configurations de cellules en faisant varier l'épaisseurs de la couche HTL dans chaque cas. Cela permettra de déterminer l'épaisseur optimale de la couche et de comparer les performances de la cellule pour les différentes couches HTL.

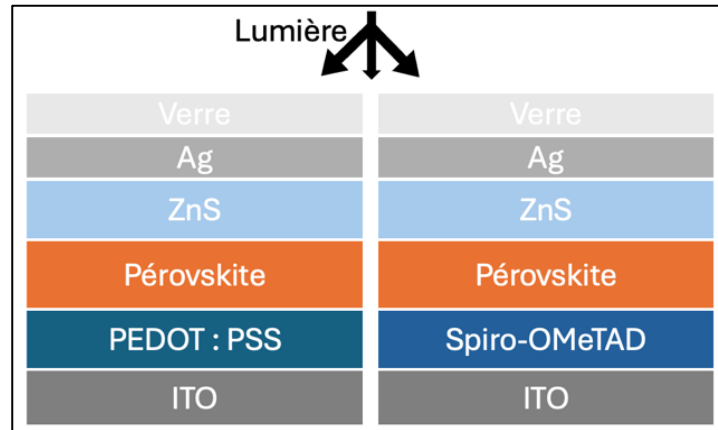


Figure 3-16 : Représentation des structures monolithiques abordées dans cette étude.

Tableau 3-9 : Effets de l'épaisseur de la couche PEDOT : PSS sur la structure ITO/PEDOT : PSS/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{OC} (V)	J_{SC} ()	FF (%)	η (%)
10	0,956533	25,974048	74,7909	18,5818
20	0,956574	25,9738731	74,9466	18,6212
30	0,956581	25,9737285	74,977	18,6288
40	0,956583	25,9736088	74,9859	18,6309
50	0,956584	25,9735096	74,989	18,6317
60	0,956585	25,9734274	74,99	18,6319
70	0,956585	25,9733593	74,99	18,6318
80	0,956586	25,973303	74,9895	18,6317
90	0,956586	25,9732566	74,9886	18,6314
100	0,956586	25,9732186	74,9875	18,6311

Tableau 3-10 : Effets de l'épaisseur de la couche Spiro-OMe-TAD sur la structure ITO/Spiro-OMe-TAD/CH₃NH₃PbI₃/ZnS/Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{oc} (V)	J_{sc} ()	FF (%)	η (%)
10	1,299571	16,3751382	84,131	17,9036
20	1,299573	16,3756124	84,131	17,9042
30	1,299574	16,375755	84,131	17,9043
40	1,299575	16,3757922	84,131	17,9044
50	1,299573	16,375802	84,131	17,9044
60	1,299573	16,3758042	84,1311	17,9044
70	1,299571	16,3758057	84,1298	17,9032
80	1,299569	16,3758075	84,1297	17,9028
90	1,299567	16,3758102	84,12968	17,9026
100	1,299564	16,3758132	84,131	17,9017

Les résultats présentés dans les tableaux 3-9 et 3-10 nous montrent dans un premier temps qu'à épaisseurs égales, la PEDOT : PSS offre de meilleurs rendements que la Spiro-OMe-TAD en tant que couche de transport de trous. Dans un second temps, on observe sur la figure 3-17 que le rendement est optimal aux alentours de 60 nm.

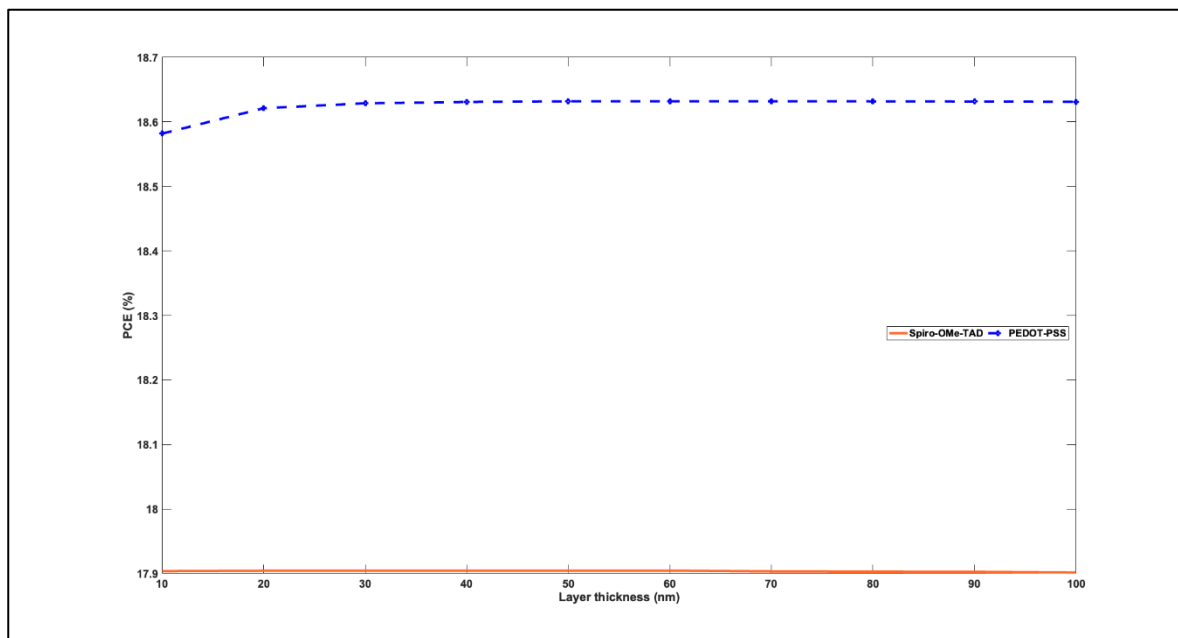


Figure 3-17 : Comparaison de l'effet des couches Spiro-OMe-TAD et PEDOT-PSS sur le PCE.

En rappel, la vitesse de génération des charges est directement liée à l'intensité et au spectre de la lumière incidente. Cependant, comme le montre la figure 3-18, elle est également influencée par les niveaux d'énergie des matériaux.

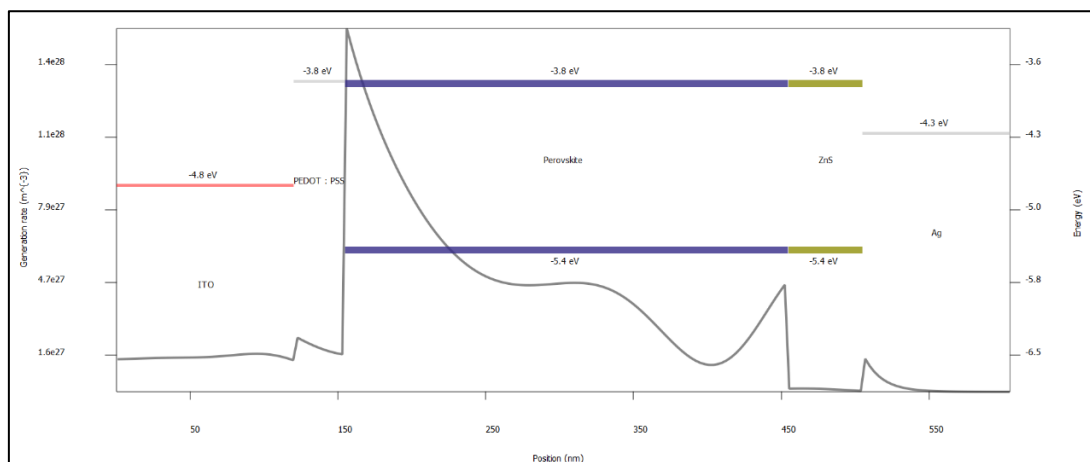


Figure 3-18 : Représentation de la vitesse de génération des charges sur les différents niveaux d'énergie des couches de la cellule sur le diagramme des bandes d'énergie [23].

3.3.4 Étude des effets de l'épaisseur de la pérovskite sur le PCE.

Après avoir démontré la pertinence du choix des différentes couches et de leurs épaisseurs respectives, l'objectif visé par cette étude sera de déterminer avec précision l'épaisseur pour lequel la couche active à pérovskites offre le meilleur rendement.

Tableau 3-11 : Effets de l'épaisseur de la couche active $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sur la structure ITO/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/Ag/Verre.

Épaisseurs (nm)	V_{OC} (V)	J_{SC} ()	FF (%)	η (%)
100	1,227198	15,91835	70,6012	13,7919
200	1,234008	19,35191	78,0656	18,6424
300	1,230621	21,23559	80,8531	21,1293
400	1,225939	22,41444	81,9542	22,52
500	1,221301	23,19932	82,1205	23,2675
600	1,216652	23,73929	81,682	23,5918
700	1,212219	24,11721	80,9543	23,6673
800	1,208097	24,3885	80,0556	23,5873
900	1,204261	24,58659	79,2246	23,4574
1000	1,20068	24,73131	78,5308	23,3192

Les résultats présentés dans le tableau 3-11 nous montrent que la cellule ayant la structure ITO/PEDOT : PSS/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ /ZnS/Ag/Verre offre des performances maximales pour une épaisseur optimale de la couche active de 700 nm. En effet, comme présenté sur la figure 3-19, on remarque que les rendements décroissent au-delà de cette valeur. Même si cette décroissance reste légère, elle est continue et maintient sa tendance baissière.

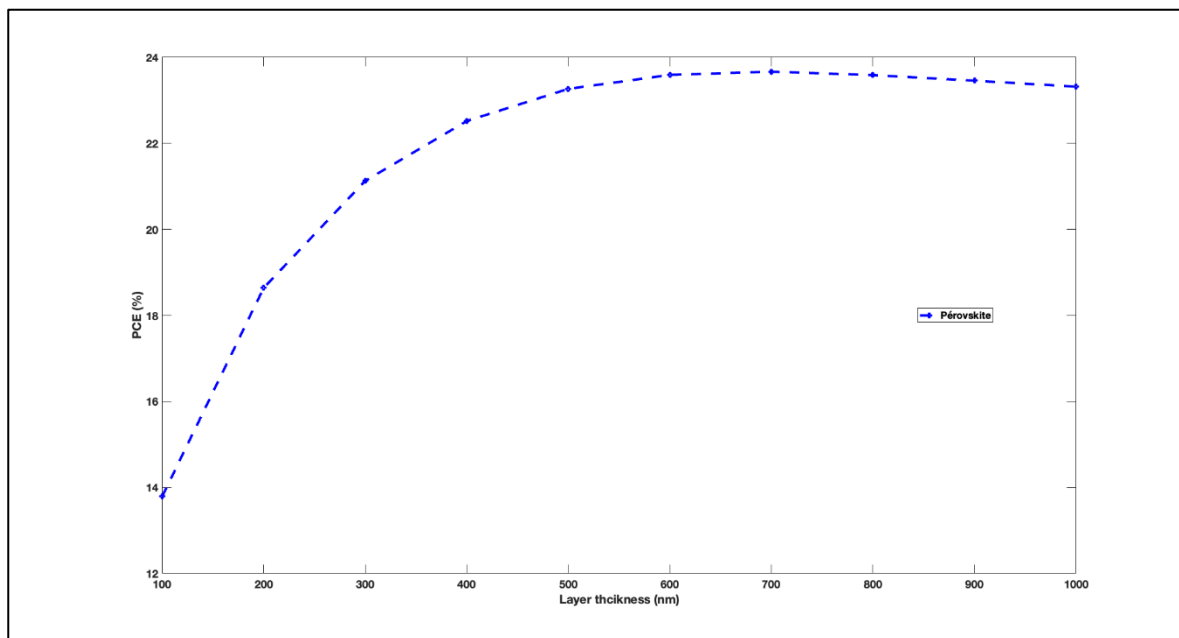


Figure 3-19 : Détermination de l'épaisseur optimale de la couche active à pérovskites étudiée.

La figure 3-20 confirme notre approche qui est d'étudier les effets des différents paramètres abordés dans notre étude sur le PCE. En effet, on remarque que malgré la variation de l'épaisseur de la couche active à pérovskite, la tension en circuit ouvert (V_{OC}) varie très peu. Un constat identique est fait sur l'évolution des grandeurs telles que la densité de courant de court-circuit (J_{SC}) et le facteur de forme (FF). Le PCE nous permet ainsi d'évaluer précisément la capacité de la cellule à convertir efficacement l'énergie.

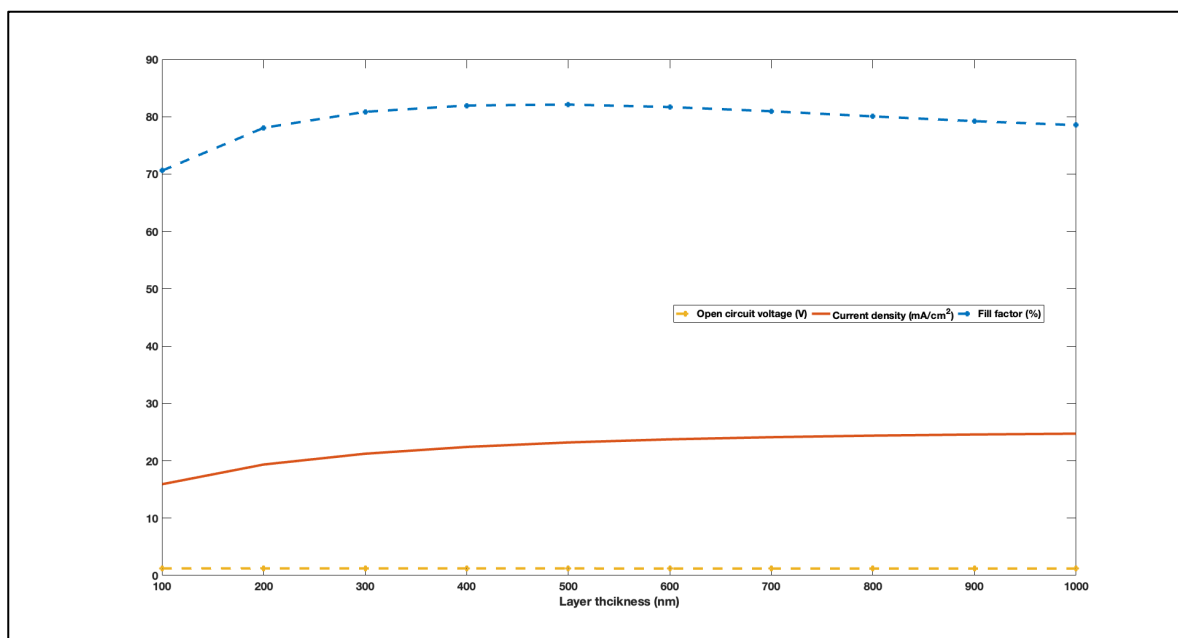


Figure 3-20 : Représentation des performances réalisées par la cellule solaire à pérovskites.

L'agencement des différentes couches à paramètres optimaux permet à notre cellule d'atteindre un rendement de 23.6673 % comme le montre le tableau 3-12.

Tableau 3-12 : Performances d'une cellule solaire à pérovskites Verre/Ag/ZnS (10 nm)/Pérovskite (700 nm)/PEDOT-PSS (60 nm)/ITO.

	V_{OC} (V)	J_{SC} (mA/cm ²)	FF (%)	Rendement (%)	V_{MPP} (V)	J_{MPP} (mA/cm ²)
Pérovskite	1,212219	24,11721	80,9543	23,6673	1,052709	22,482265

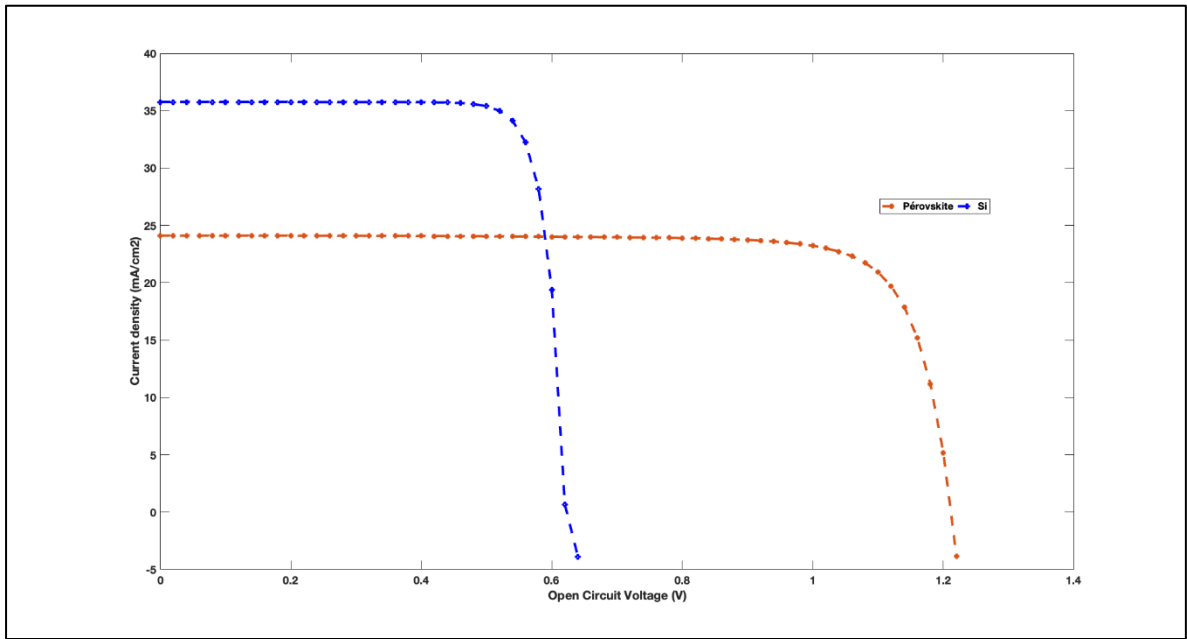


Figure 3-21 : Comparaison des performances réalisées avec des cellules à pérovskites et à silicium.

Comme présenté sur la figure 3-21, la cellule à pérovskites a démontré une tension intégrée plus élevée, en tant que tension en circuit ouvert (V_{OC}), qu'une simple jonction C-Si de silicium dans le spectre du visible grâce à sa bande interdite de 1.6 eV surpassant celle du silicium à 1.124 eV. Rappelons que la figure 2-13 nous montrait déjà la capacité des pérovskites à mieux absorber les rayons lumineux du domaine du visible et des infrarouges.

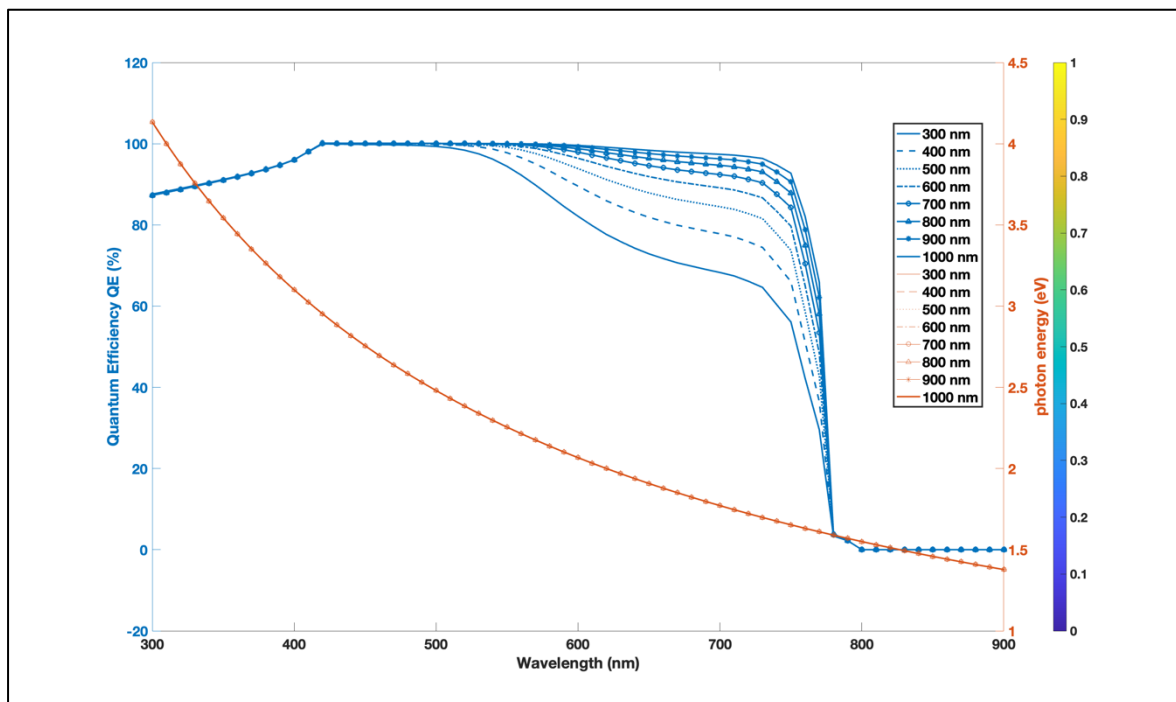


Figure 3-22 : Évolution de EQE et de l'énergie photonique de la cellule à pérovskites sur ses longueurs d'ondes d'absorption en fonction de l'épaisseur de sa couche dans la cellule.

La figure 3-22 nous montre que l'efficacité quantique croît avec l'évolution de l'épaisseur de la couche active. Cependant, nos précédents tests nous ont montré que l'épaisseur optimale de la couche active pour notre cellule se situe aux alentours de 700 nm. On pourrait expliquer cela par le fait qu'étant en sandwich entre plusieurs couches minces dont celles HTL et ETL, l'épaisseur de plus en plus prépondérante de la couche active surchargerait les couches de transport de charges qui se retrouveraient contraintes à limiter l'efficacité globale de la cellule et donc du PCE.

Aussi, on remarque que peu importe la variation de l'épaisseur de la couche active l'énergie photonique ne varie pas et garde toujours la même allure. On pourrait expliquer cela par le fait même que le photon est le résultat d'un échange d'énergie élémentaire lors de l'absorption ou de l'émission de lumière par la matière et donc peu importe la nature où

l'épaisseur de cette dernière, ceci reste vrai et décroît en fonction des longueurs d'exposition aux rayonnements solaires (cela ne tient pas compte des IR).

En somme, on en retient que l'optimisation de ces structures repose en grande partie sur les équilibres d'association des différentes couches composant la cellule mais aussi et surtout de leur agencement.

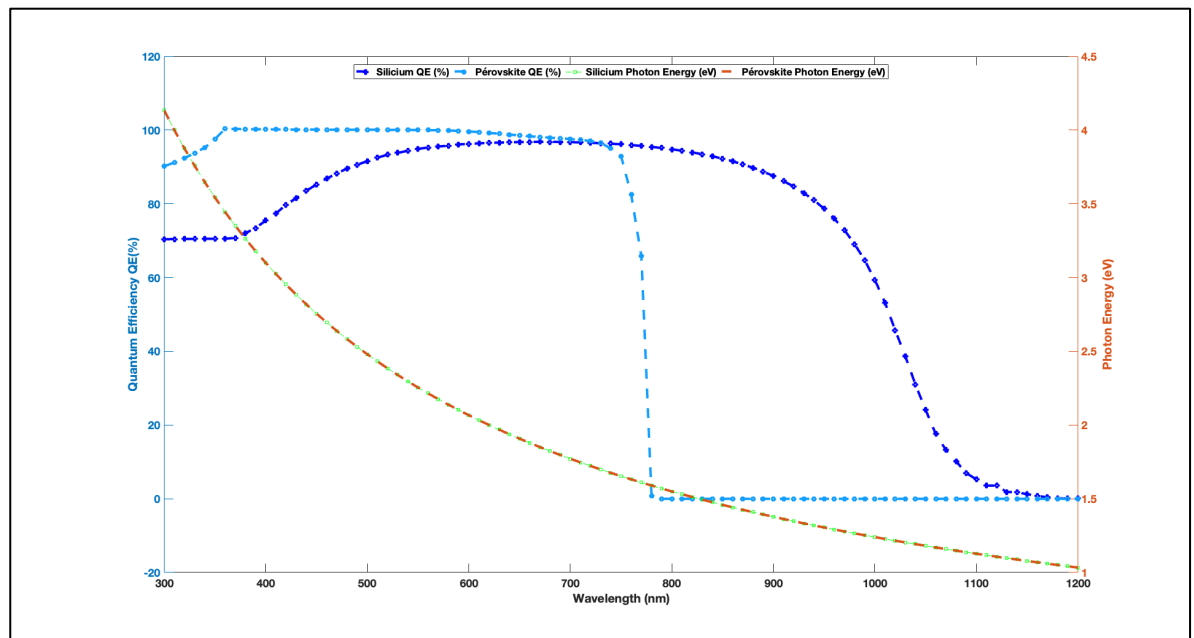


Figure 3-23 : Comparaison des variations de la conversion des photons incidents en énergie suivant les variations du spectre solaire.

La figure 3-23 confirme le fait que l'évolution de l'énergie photonique est commune aux deux cellules solaires photovoltaïques. Dans le même temps, elle nous montre clairement l'impact qu'aurait l'association en tandem d'une cellule à silicium et d'une à pérovskites. En effet, on entend par là une compensation de la chute QE (%) au-delà des longueurs d'ondes spectrales de 750 nm pour la cellule à pérovskites; et une amélioration de QE (%) sur les longueurs d'ondes allant de 300 nm à 700 nm pour la cellule solaire au silicium.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons conduit une série d'études par simulation numérique de la cellule à pérovskites avec les logiciels SETFOS, SCAPS-1D et MATLAB. Ces études avaient pour objectifs de comprendre le fonctionnement des cellules solaires et d'optimiser bon nombre de paramètres physiques afin d'obtenir un meilleur rendement théorique avec une cellule solaire à pérovskites qu'avec une cellule solaire à silicium.

C'est ainsi qu'après bon nombres de comparaisons des performances des différentes couches et électrodes, des configurations et architectures des cellules à pérovskites, nous avons procédé à pléthore de choix dont la configuration appropriée, l'architecture adéquate mais aussi et surtout la nature des couches et électrodes.

Par ailleurs, la flexibilité de la simulation numérique nous a permis de comprendre les rôles des différents paramètres abordés, les effets du niveau des bandes interdites et de l'épaisseur des couches, la fonction de travail des électrodes, la mobilité électronique et le taux de recombinaison des charges sur le PCE.

Le prochain chapitre portera sur l'optimisation de l'association d'une cellule solaire à silicium et d'une autre en pérovskites pour obtenir une cellule tandem avec des performances se rapprochant le plus possible de celles des deux cellules à savoir des niveaux de V_{OC} et de J_{SC} élevés tout en veillant à obtenir un rendement global (PCE) le plus élevé possible.

Chapitre 4 - Optimisation de la structure de la cellule à pérovskites pour association en tandem avec une cellule à silicium cristallin

4.1 Introduction

Dans ce chapitre, il sera question d'optimiser les paramètres des différentes couches de notre cellule solaire photovoltaïque à pérovskites afin que ses effets combinés à ceux d'une cellule solaire photovoltaïque à silicium cristallin donnent un meilleur rendement global. Les critères d'optimisation seront étudiés, comme les précédentes études, à l'aide des logiciels SCAPS-1D et MATLAB.

4.2 Optimisation des couches de la cellule solaire à pérovskites

Quelques-unes des caractéristiques intéressantes des pérovskite sont, nous le rappelons : une absorption optique élevée, de petites masses effectives d'électrons et de trous, une faible température de traitement et des joints de grains sans espace, entre autres. Les cellules solaires pérovskites offrent une alternative unique aux cellules solaires photovoltaïques en raison de leur rentabilité et de leur facilité de fabrication et mieux, dû à ses propriétés physiques et chimiques flexibles, la pérovskite avec une bande interdite de $\sim 1,6$ eV est un matériau compatible avec la cellule supérieure dans une configuration en tandem avec le silicium pouvant offrir des rendements élevés.

Nous avons vu dans le chapitre 3 que le niveau élevé de V_{OC} était dû à sa bande interdite variable pouvant aller de 1.6 eV à 1.9 eV avec des modifications structurales (hybridation) par le remplacement d'halogénures ou par l'échange de cations [51]. En général, le niveau de

fermi de la bande interdite est intrinsèquement lié à l'épaisseur de la couche active de pérovskites.

Cependant, l'hybridation n'a pas pour seuls objectifs d'améliorer les performances de la cellule solaire à pérovskites et optimiser son association avec une cellule à silicium. En effet, cela permettra de pallier bons nombres de problèmes que l'on rencontre généralement avec les cellules à pérovskites.

4.2.1 Étude des différents effets de la variation de la bande interdite de la couche active de la cellule.

L'intérêt de cette étude est d'adapter notre cellule à pérovskites à la structure d'une cellule à silicium classique. Les structures étant déjà connus, on devra agir sur des grandeurs physiques telles que l'épaisseur et, dans certains cas, changer de matériaux afin que les BG, LUMO et HOMO correspondent.

La figure 4-1 nous montre les différents effets de la variation de la bande interdite des pérovskites sur les différents paramètres électriques de la cellule. L'épaisseur de la couche restant constante, on constate une évolution du PCE pour atteindre une valeur optimale à 1.80 eV pour laquelle on observe des valeurs élevées de V_{OC} , de J_{SC} et de V_{MPP} . Cependant, on remarque que le facteur de forme et le J_{MPP} sont optimales autour de 1.6 eV. On rappelle que les pérovskites restent un matériau donc la bande interdite demeure ajustable de 1.1 eV à 2.3 eV.

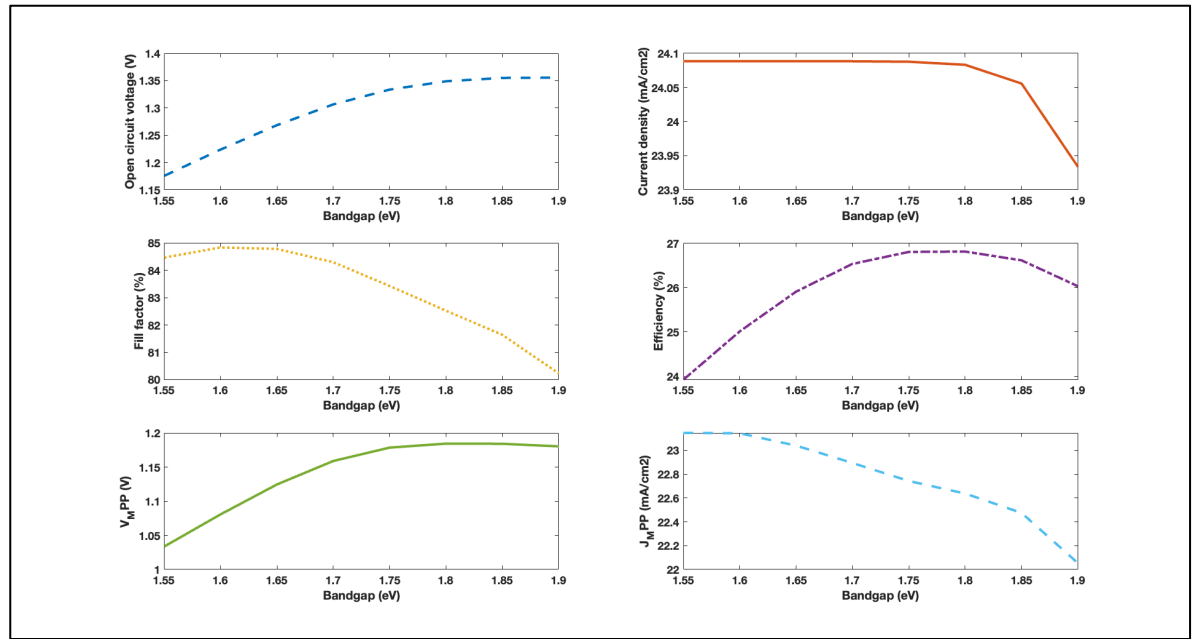


Figure 4-1 : Étude des effets de la variation de la bande interdite de la couche active.

4.2.2 Optimisation de l'épaisseur de la couche active de la cellule solaire à pérovskites pour une bande interdite de 1.80 eV.

On observe sur la figure 4-2 que l'épaisseur optimale pour une bande interdite de la couche active à pérovskites de 1.80 eV se situe aux alentours de 800 nm pour des performances alliant à la fois des valeurs élevées de PCE, de V_{OC} , de J_{SC} et de FF.

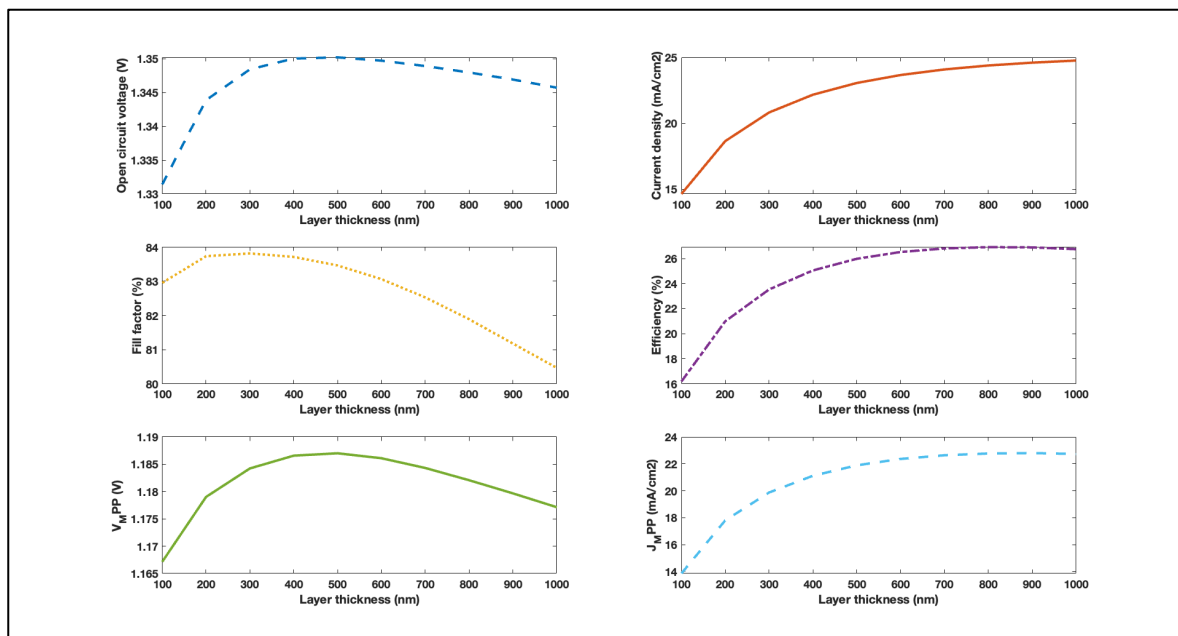


Figure 4-2 : Optimisation de l'épaisseur de la couche active pour une bande interdite de 1.80 eV.

Cependant, les études faites sur une couche à pérovskite de 1.57 eV nous ont donné des performances optimales pour une épaisseur située plutôt autour de 700 nm. On en déduit donc que plus la bande interdite est élevée, moins on a besoin d'une couche active d'épaisseur élevée.

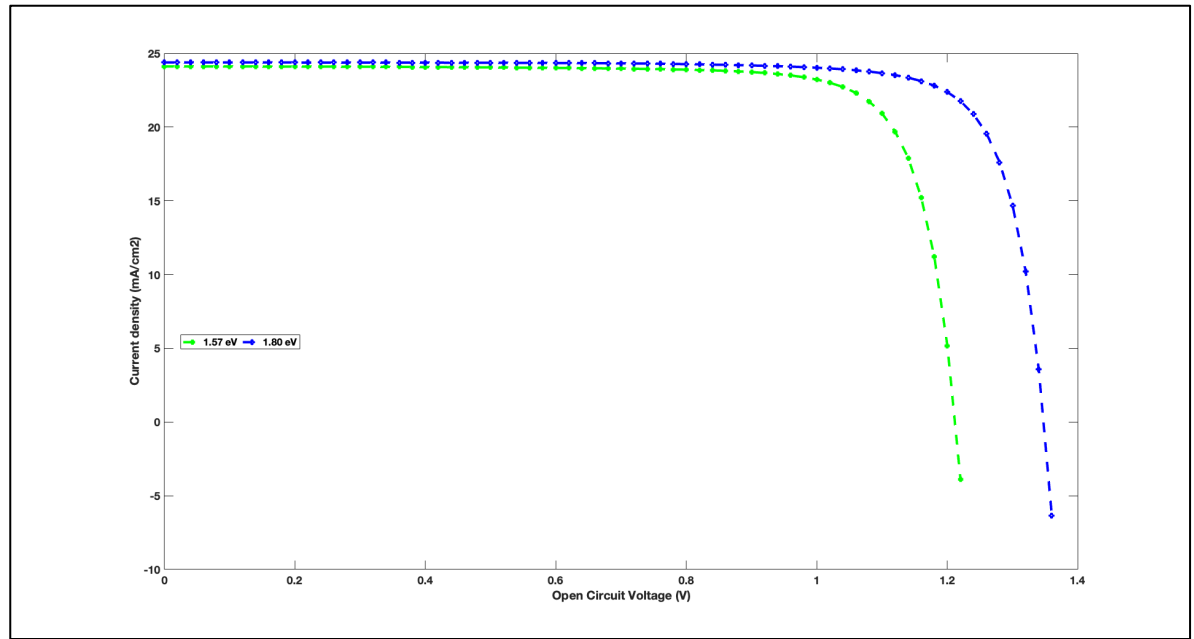


Figure 4-3 : Comparaison des performances de la cellule à pérovskites pour différentes valeurs de la bande interdite.

Tableau 4-1 : Performances de la cellule à pérovskites hybridés au chlore avec une bande interdite de 1.80 eV.

	V_{OC} (V)	J_{SC} (mA/cm ²)	FF (%)	Rendement (%)	V_{MPP} (V)	J_{MPP} (mA/cm ²)
Pérovskites	1,347971	24,38341300	81,8876	26,9149	1,182075	22,76923200

Nous remarquons sur la figure 4-3 que la principale différence entre les deux cellules vient de la valeur de la tension en circuit ouvert V_{OC} . En effet, on a évolution de 1.212219 V à 1.347971 V pour une variation de la bande interdite de 1.57 eV à 1.80 eV. On attribue exclusivement cela à l'augmentation de la bande interdite qui permet entre autres à la couche active d'absorber un plus grand spectre de la lumière. L'ajustement du BG est crucial dans l'ingénierie des cellules solaires photovoltaïques à pérovskites, étant donné que son impact joue un rôle déterminant dans l'efficacité de la cellule solaire.

4.3 Étude de la cellule tandem pérovskites-silicium

Dans cette section, nous décrirons la structure du dispositif et la méthodologie utilisée pour obtenir les caractéristiques de la cellule solaire tandem Pérovskites/Si. Pour un système à deux bandes interdites, il est connu que la bande interdite du matériau de la cellule supérieure doit être plus élevée que celle de la cellule inférieure pour un fonctionnement optimal. En effet, pour que la cellule de dessous puisse opérer sur ses longueurs d'ondes d'absorption, il faut que la cellule dessus puisse absorber un plus grand spectre de rayons lumineux. L'inverse aura pour conséquence de réduire le rendement de l'ensemble de la cellule [52].

4.3.1 Optimisation de l'agencement des différentes couches du tandem de cellule à pérovskites et de cellule à silicium cristallin.

Comme soutenu précédemment, la cellule possédant la plus grande bande interdite devrait constituer la partie supérieure de la cellule tandem. Aussi, tenant compte du fait que la configuration n-i-p soit celle offrant les meilleures performances, nous devrions organiser la cellule tandem de la façon suivante à savoir Verre/ITO/ZnS/CH₃NH₃PbI₃/PEDOT : PSS/c-Si (n)/c-Si (p)/c-Si BSF (p+)/Ag dans une architecture monolithique 2T ne possédant qu'un seul contact transparent. Les courants résultants suivent les relations 4.1, 4.2 et 4.3.

Pour la cellule (1) :

$$I_{ph1} = q \int_{E_{g1}}^{\infty} N_{ph}(E_{ph}) dE_{ph} \quad (4.1)$$

Pour la cellule (2) :

$$I_{ph2} = q \int_{E_{g2}}^{E_{g1}} N_{ph}(E_{ph}) dE_{ph} \quad (4.2)$$

Pour la cellule tandem, comme le montre l'équation 4.3, le courant total débité est la résultante de l'imposition du courant par la cellule en produisant le moins.

$$I_{ph} = \min(I_{ph1}, I_{ph2}) \quad (4.3)$$

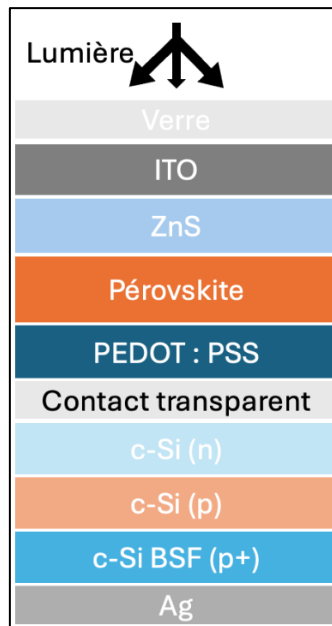


Figure 4-4 : Représentation de la structure monolithique tandem de cellule étudiée.

4.3.2 Optimisation des performances de la cellule tandem.

L'association de cellules solaires de bandes interdites différentes nécessite une adaptation optimale des paramètres physiques pour une conversion optimale de la lumière en électricité. Pour les besoins de l'étude, nous nous aiderons des paramètres détaillés dans le tableau 4-2.

Tableau 4-2 : Paramètres des différentes couches de la cellule solaire tandem
Verre/ITO/ZnS/CH₃NH₃PbI₃/PEDOT :PSS/c-Si(n)/c-Si(p)/c-Si
BSF(p+)/Ag.

Paramètres	<i>c-Si(n)</i>	<i>c-Si(p)</i>	<i>c-Si</i> <i>BSF</i> <i>(p+)</i>	<i>ZnS</i>	<i>PEDOT</i> : <i>PSS</i>	<i>IDL</i>	<i>CH₃NH₃PbI₃</i>
Épaisseur (μm)	0.05	280	0.03	0.1	0.3	0.01	Variable
Bandgap (eV)	1.124	1.124	1.124	3.6	2.2	1.55	1.57
Affinité des électrons (eV)	3.9	4.05	3.9	3.9	2.9	3.9	3.9
Permittivité diélectrique (relative)	11.9	11.9	11.9	9	3	18	25
État de la densité effective CB (1/cm ³)	2.80E +19	2.80E +19	2.84E +19	1.00E +19	2.20E+1 5	2.20E +18	2.20E+18
État de la densité effective VB (1/cm ³)	2.60E +19	2.60E +19	2.68E +19	1.00E +19	1.80E+1 8	1.90E +19	1.90E+19
Vélocité thermique de l'électron (cm/s)	1.10E +07	1.00E +07	1.00E +07	1.00E +07	1.00E+0 7	1.00E +07	1.00E+07
Vélocité thermique du trou (cm/s)	1.10E +07	1.00E +07	1.00E +07	1.00E +07	1.00E+0 7	1.00E +07	1.00E+07
Mobilité de l'électron (cm ² /V.s)	1.25E +03	1.01E +03	1.212 E+03	1.00E +02	1.00E+0 1	3.00E +00	3
Mobilité du trou (cm ² /V.s)	4.43E +02	4.43E +02	4.21E +02	2.50E +01	1.00E+0 1	1.70E +01	17
Densité uniforme et peu profonde des donneurs ND (1/cm ³)	8.00E +20	0	0	1.00E +18	0	2.00E +13	2.00E+13
Densité uniforme et peu profonde des accepteurs NA (1/cm ³)	0	5.00E +18	9.50E +20	0	3.17E+1 4	0	0
Défaut du niveau de concentration Nt (cm ⁻³)	1.00E +15	1.00E +15	1.00E +15	1.00E +15	1.00E+1 4	1.00E +15	8.50E+13

La figure 4-5 nous montre le résultat de la simulation de la cellule tandem. Comme attendu, on remarque une hausse du rendement global par rapport aux rendements obtenus individuellement avec les cellules solaires à pérovskites et au silicium.

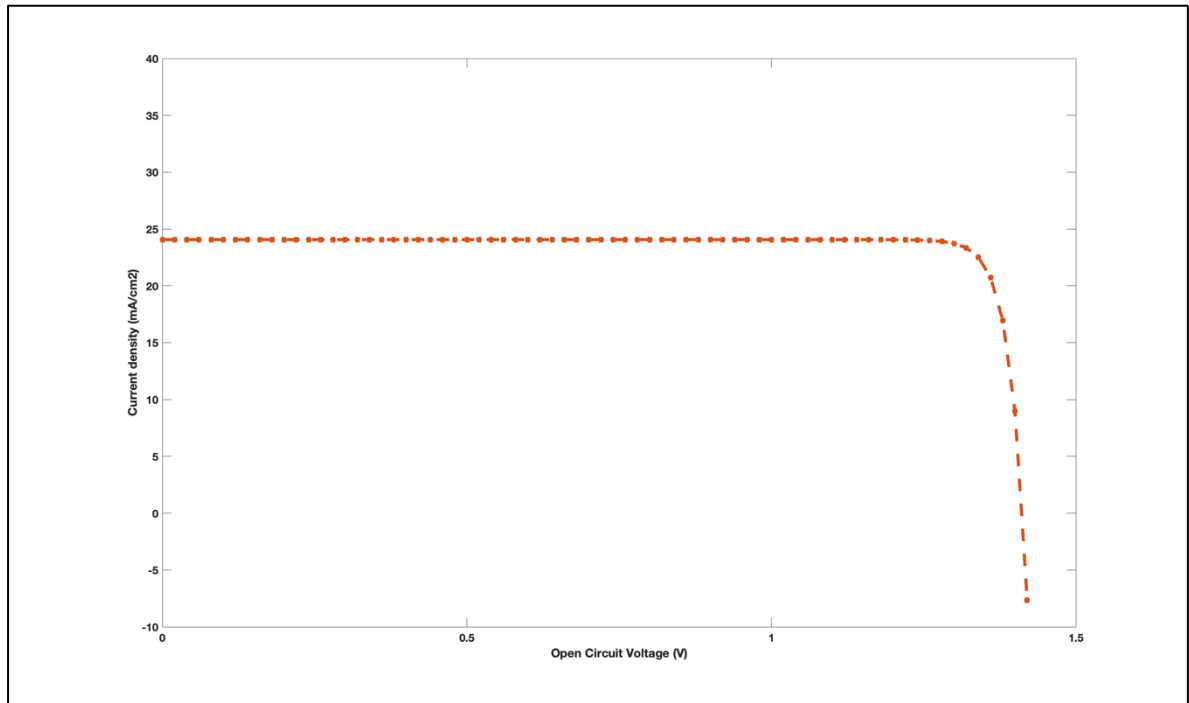


Figure 4-5 : Caractéristique J-V de la cellule tandem étudiée.

Tableau 4-3 : Performances de la cellule tandem étudiée dans sa configuration sus décrite.

	V_{OC} (V)	J_{SC} (mA/cm ²)	FF (%)	Rendement (%)	V_{MPP} (V)	J_{MPP} (mA/cm ²)
Pérovskites-Si	1.4120	24.0701	90.8348	30.8725	1.307456	23.61267235

Une superposition des performances des différentes cellules étudiées nous montre que l'association de pérovskites et de silicium permet de couvrir un plus large spectre de la lumière et donc une meilleure conversion des photons incidents en charges électriques. Aussi, la présence des couches de transport de charges améliore le processus de conversion en facilitant le transit des charges vers les électrodes aussi bien au niveau des électrodes que du contact transparent.

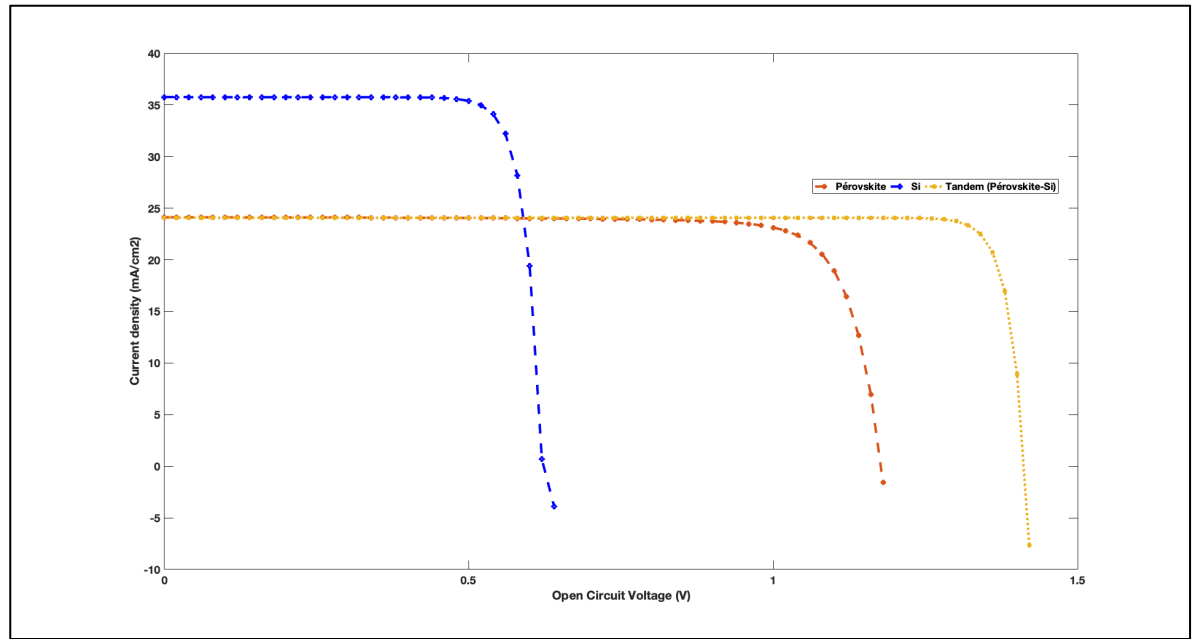


Figure 4-6 : Comparaison des performances des (03) trois cellules.

Ainsi, comme le montre la figure 4-7, un module à base des cellules à pérovskites permettrait d'obtenir environ 30 % de puissance en plus au point maximal de fonctionnement par rapport à un module à base de silicium monocristallin. Un constant similaire et plus élevé de 40 % est fait sur la différence des performances entre le module à cellules solaires tandems et celui à cellules solaires à silicium monocristallin. Ces simulations ont été réalisés dans les conditions STC tout en veillant à conserver les mêmes paramètres de température (25°C) et d'irradiation (1000 W/m²). Il faut aussi noter que pour des besoins de faciliter l'étude, nous avons fait varier les surfaces d'exposition des modules de 0.1 m² à 1 m².

Tableau 4-4 : Comparaison des performances en termes de puissance de différents types de modules solaires photovoltaïques pour une même surface d'exposition aux rayonnement lumineux dans les conditions STC.

Surface (m2)	Puissance C-Si (W)	Puissance Pérovskites (W)	Puissance Tandem (W)
0.1	18.43	26.91	30.87
0.2	36.85	53.83	61.75
0.3	55.28	80.74	92.62
0.4	73.70	107.66	123.49
0.5	92.13	134.57	154.36
0.6	110.56	161.49	185.24
0.7	128.98	188.40	216.11
0.8	147.41	215.32	246.98
0.9	165.84	242.23	277.85
1.0	184.26	269.15	308.73

Le tableau 4-4 nous montre que la production des différents types de modules solaires photovoltaïques augmente avec la surface d'exploitation. Cependant on remarque, qu'à surfaces égales, la croissance de la production des modules solaires photovoltaïques à pérovskites et à tandem pérovskites-silicium est bien plus rapide qu'avec un module solaire photovoltaïque à silicium classique. Cela est clairement démontré sur la figure 4-7 qui se traduit par une divergence plus prononcée des droites de progression de la production des modules solaires à pérovskites et à tandem pérovskite-silicium.

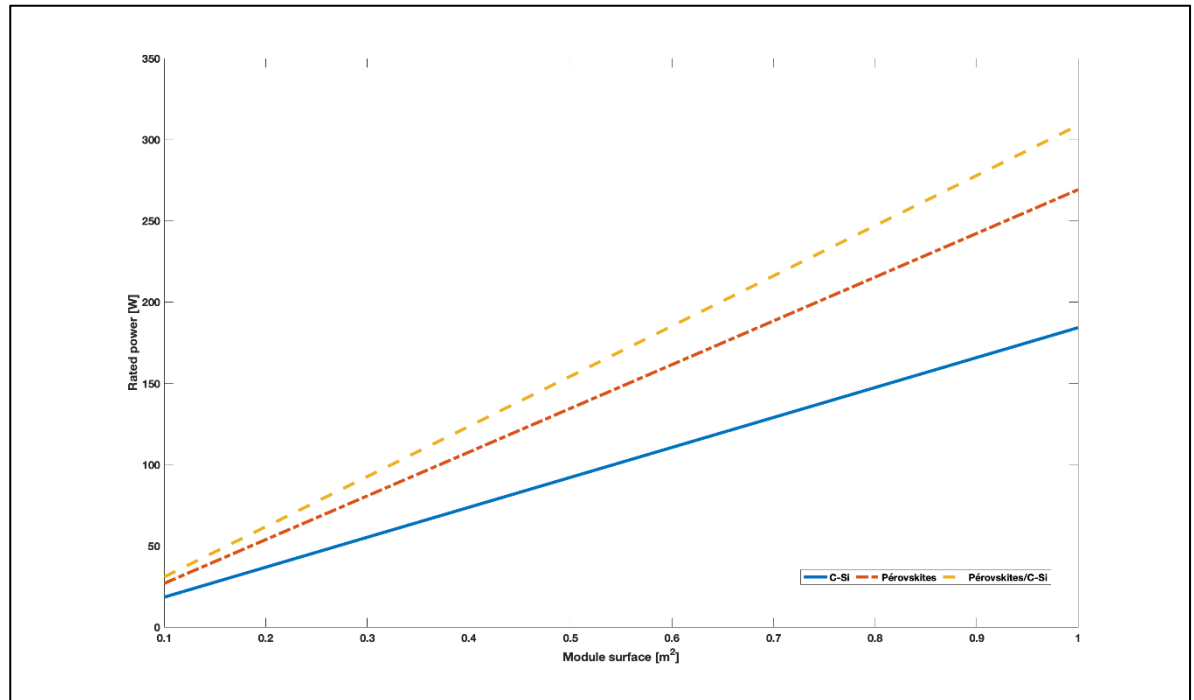


Figure 4-7 : Comparaison de la puissance de différents modules en fonction de leur envergure.

À l'échelle d'une installation domestique ou commerciale, les bénéfices réalisés sont d'autant plus importants que l'économie réalisée sur les surfaces nécessaires pour l'exploitation est moins élevée. On parle de gains de puissance de 44.445 % et de 66.667 % dans des cas d'utilisation de modules solaires photovoltaïques à pérovskites ou à tandem pérovskites-silicium respectivement en lieu et place de modules classiques à silicium polycristallin. Le tableau 4-5 rend compte de ces gains dans des cas d'utilisation concrets de différents modules solaires photovoltaïques en démontrant aussi bien le gain d'espace que de puissance obtenue.

Tableau 4-5 : Récapitulatif des performances des différents types de modules étudiés.

	V _{oc} (V)	I _{sc} (A)	N _s	N _p	Dimension (m ²)	P (W)
C-Si	12.41	8.703	20	1	0.5	90
Pérovskites	26.96	5.934	20	1	0.5	130
Tandem	28.24	5.857	20	1	0.5	150

Les figures 4-8, 4-9 et 4-10 nous montrent qu'en plus des gains de performance, les allures des courbes changent légèrement en fonction du type de module choisi. En effet, on note que même si le module solaire photovoltaïque à cellules tandem pérovskites-silicium est obtenu en associant mécaniquement des cellules à pérovskites et à silicium, les pentes aux points de fonctionnement maximal y sont abruptes tandis qu'elles restent douces dans le cas des modules solaires à cellules à silicium et à pérovskites individuellement.

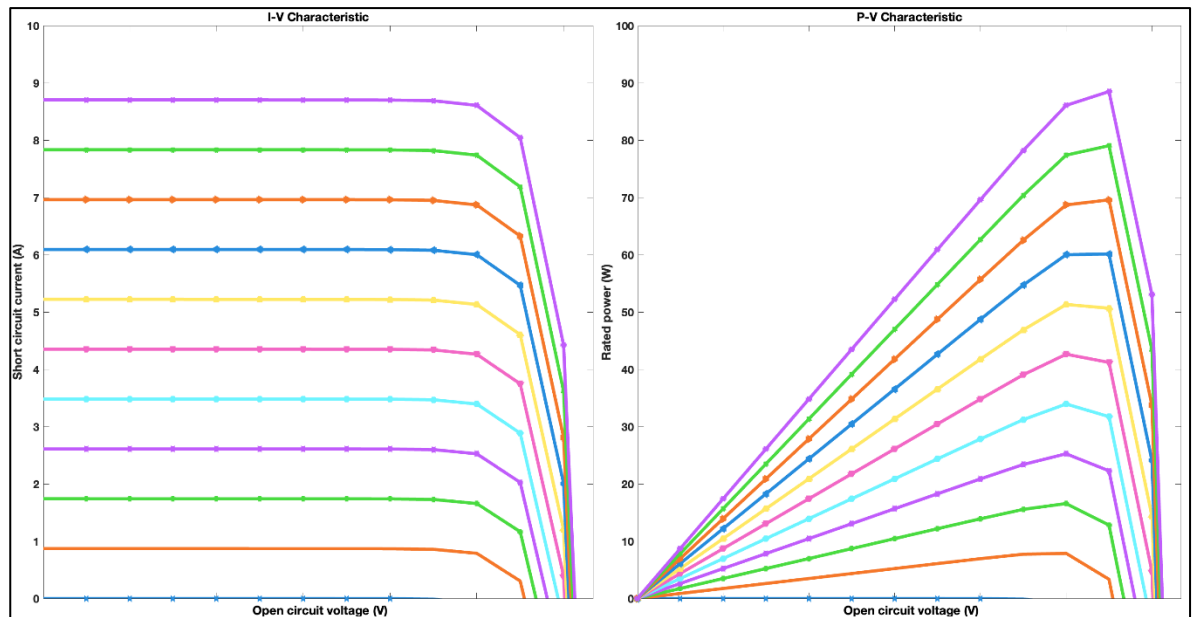


Figure 4-8 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à silicium monocristallin classique en fonction de l'irradiation croissante.

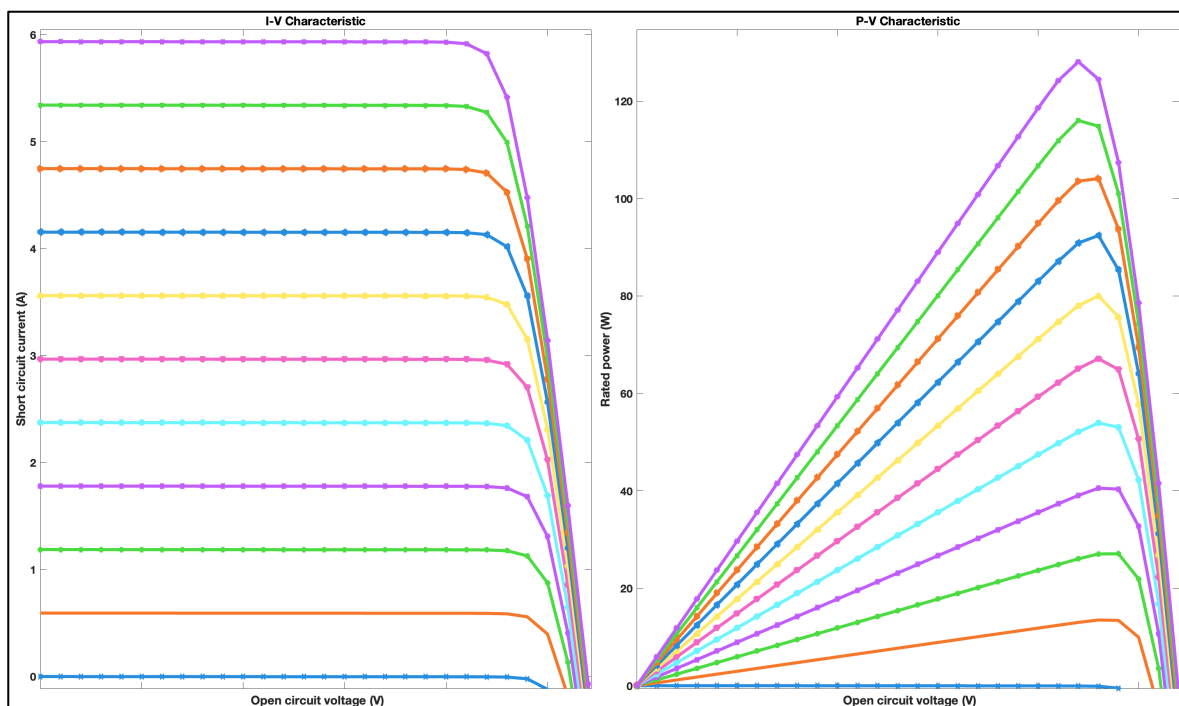


Figure 4-9 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à pérovskites en fonction de l'irradiation croissante.

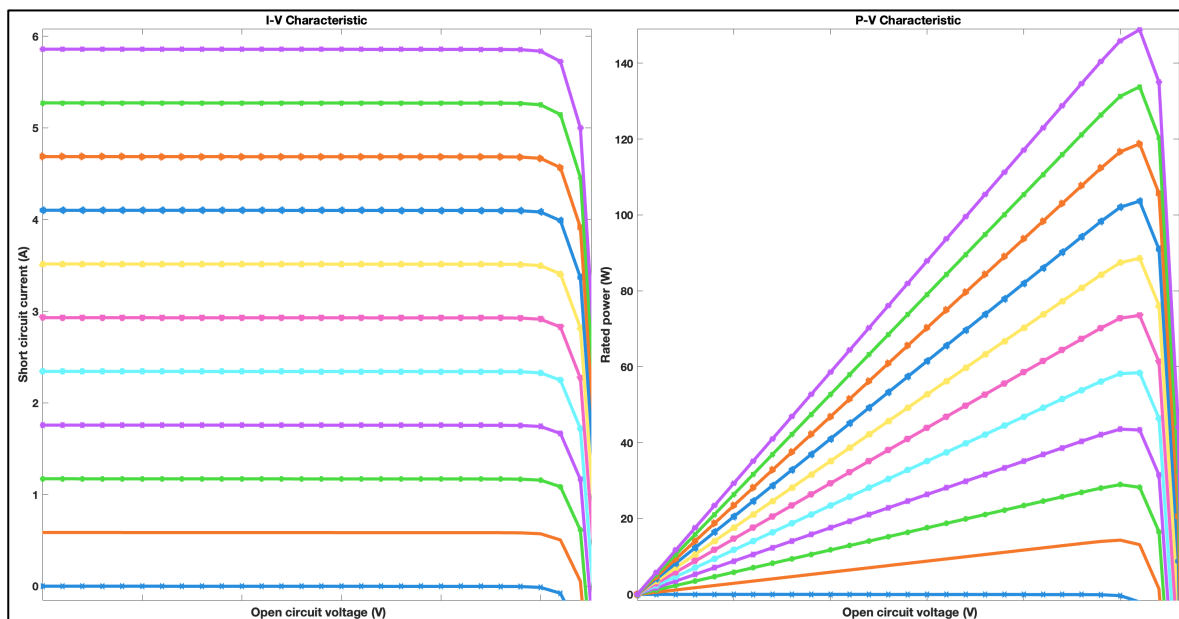


Figure 4-10 : Évolution des caractéristiques I-V et P-V d'un module solaire photovoltaïque à cellules tandems pérovskites-silicium en fonction de l'irradiation croissante.

Une autre étude des différentes caractéristiques I-V et P-V des modules solaires photovoltaïques nous montre que la production électrique d'un module doté de cellules solaires photovoltaïques tandem pérovskite-silicium est plus soutenue dans la durée peu importe la variation de l'irradiation. Bien que la production soit stable avec les modules à cellules tandem, elle décroît drastiquement au-delà d'une tension V_{OC} de 1.35 V alors que cette pente de décroissance est douce avec les modules dotés de cellules à silicium et à pérovskites individuellement. Ceci pourrait être attribué à la capacité de la cellule à pérovskite à couvrir un spectre plus large de la lumière.

4.4 Conclusion

Ce chapitre a abordé l'évaluation de l'effet de la bande interdite et de l'épaisseur de la couche active sur la cellule solaire à pérovskites. Ainsi, son association avec une cellule solaire au silicium a été beaucoup plus intéressante du point de vue du rendement global de la cellule. Cela nous a permis de construire des modules solaires photovoltaïques à pérovskites et à cellules tandem pérovskites-silicium offrant 30 à 40 % de plus d'efficacité pour une même surface qu'un module solaire photovoltaïque à silicium classique. Ces études ont eu pour objectif de simuler une cellule tandem pérovskites-silicium.

C'est ainsi que l'on a pu atteindre un rendement de 30.8725 %, une tension en circuit ouvert V_{OC} de 1.4120 V, une densité de courant J_{SC} de 24.0701 mA/cm² et un facteur de forme de 90.8348 %.

Ce chapitre met fin à notre mémoire et ouvre la porte sur bons nombres de perspectives dans la même optique.

Conclusion générale, recommandations et travaux futurs

Ce mémoire est un recueil de travaux qui ont été menés dans l'objectif d'étudier en profondeur les cellules solaires photovoltaïques, leur composition et leur fonctionnement afin de proposer un nouveau type de cellules prometteuses. Pour cela, un ensemble de travaux de simulations numériques ont été réalisés. Les étapes, phénomènes et résultats ont été analysés et interprétés.

Le chapitre 1 nous a introduit aux cellules solaires photovoltaïques ainsi qu'à leur rôle dans la transition énergétique vers la promotion de moyens d'exploitation d'énergie plus respectueuse de l'environnement. Il nous a aussi permis d'explorer de nouveaux types de cellules solaires photovoltaïques.

Le chapitre 2 quant à lui a été consacré à de la recherche bibliographique portant sur la conversion de la lumière du soleil en électricité grâce à l'effet photovoltaïque et sur les différents phénomènes se produisant. On y a aussi exploré les différents modèles de caractérisation mathématique du fonctionnement de la cellule ainsi que divers outils logiciels spécialisés dans le domaine. Enfin, nous avons pu aborder l'intérêt de l'utilisation de nouveaux matériaux tels que la pérovskite et de ses caractéristiques physiques faisant d'elle une alternative prometteuse offrant des rendements très intéressants et une plus grande facilité d'association au silicium afin d'atteindre des rendements plus élevés bien que des défis subsistent en termes de stabilité et sensibilité.

Les travaux de caractérisation numérique réalisés dans le chapitre 3, via des outils tel que SETFOS, SCAPS et MATLAB, nous a permis d'optimiser nos choix d'électrodes (ITO pour l'anode et Ag pour la cathode), nos choix de couches de transport de charges électriques (ZnS pour la couche ETL et PEDOT : PSS pour la couche HTL), nos choix de la couche active au pérovskite en fonction de sa bande interdite ajustable, ainsi que la conception et la performance des cellules au pérovskite et au silicium en simulant leur comportement sous diverses conditions. Les cellules solaires à pérovskites, avec des rendements dépassant 23 %, offrent des avantages prometteurs tels qu'une absorption efficace de la lumière et donc une meilleure conversion de la lumière en électricité.

Le quatrième et dernier chapitre a porté sur l'optimisation de la cellule solaire à la pérovskite pour une intégration optimale dans une cellule solaire tandem avec une cellule solaire au silicium. Cela a permis d'atteindre un rendement de conversion de la lumière de 30.8725 %. Par ailleurs, la construction de modules solaires photovoltaïques à pérovskites et à cellules tandem pérovskites-silicium nous a permis de confirmer l'intérêt de l'utilisation de ces modules en lieu et place de modules solaires photovoltaïques à silicium classique. En effet, nous avons pu constater des gains de 30 à 40 % sur la puissance électrique produite pour une même surface d'exploitation.

Ainsi, bien que les rendements obtenus soient motivants, il reste bon nombre de défis techniques à relever. Ce sont entre autres des défis comme la stabilité et la toxicité liée à la présence de plomb dans les pérovskites. En effet, les cellules solaires à pérovskites sont très sensibles à l'humidité et aux variations de température bien que diverses déclinaisons hybrides tendent de résoudre le problème. Aussi, la présence de plomb dans la structure chimique des pérovskites représente un danger pour l'environnement. Bon nombre de

recherches, d'avancées technologiques continues dans ce domaine sont cruciales pour maximiser le potentiel des technologies solaires photovoltaïques afin de répondre aux besoins énergétiques mondiaux de manière durable.

Par ailleurs, des travaux expérimentaux devront être réalisés afin de confirmer les choix réalisés dans nos analyses numériques ainsi que les théories émises afin d'expliquer des phénomènes observés.

Références

- [1] Science, Q.; Quels sont les impacts de l'énergie solaire sur l'environnement?, 2015; Available from: <https://www.quebecscience.qc.ca/pose-ta-colle/quels-sont-les-impacts-de-energie-solaire-sur-environnement/>.
- [2] PanneauSolaire, Produire de l'électricité verte avec des panneaux solaires monocristallins; 2023; Available from: <https://www.panneausolaire.com/installation/monocristallin/>.
- [3] Spanggaard, H. and F. C. Krebs, A brief history of the development of organic and polymeric photovoltaics. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 2004. 83(2): p. 125-146.
- [4] Alem-Boudjemline, S., Réalisation et caractérisation des cellules photovoltaïques plastiques. 2004, Université d'Angers. p. 152.
- [5] Zhang, C. and Park, N-G., Materials and methods for cost-effective fabrication of perovskite photovoltaic devices. *Communications materials*, 2024.
- [6] Čulík, P., et al., Design and Cost Analysis of 100 MW Perovskite Solar Panel Manufacturing Process in Different Locations. *ACS Energy Letters*, 2022. 7(9): p. 3039-3044.
- [7] Song, Z., et al., A technoeconomic analysis of perovskite solar module manufacturing with low-cost materials and techniques. *Energy & Environmental Science*, 2017. 10(6): p. 1297-1305.
- [8] IRENA, Coût de production des énergies renouvelables en 2019. 2020; Available from: https://www.irena.org/-/media/Files/IRENA/Agency/Publication/2020/Jun/IRENA_Costs_2019_FR.PDF.
- [9] Institut de l'Énergie et de l'Efficacité Énergétique en Côte d'Ivoire, 2 Septembre 2021; Available from: <https://www.facebook.com/Institut-de-lEnergie-et-de-lEfficacité-Energétique-en-Côte-dIvoire-106414621761922/photos/112598961143488/>.
- [10] Wiebke Bennecke, A.W., David Schmitt, Jan Philipp Bange, Ralf Hemm, Christian S. Kern, Gabriele D'Avino, Xavier Blase, Daniel Steil, Sabine Steil, Martin Aeschlimann, Benjamin Stadtmüller, Marcel Reutz, Peter Puschnig, G. S. Matthijs Jansen & Stefan Mathias Disentangling the multiorbital contributions of excitons by photoemission exciton tomography. *Nature communications*, 2024.
- [11] Mehdizadeh Rad, H.Z., Furong; Singh, Jai, Profiling exciton generation and recombination in conventional and inverted bulk heterojunction organic solar cells. *Journal of Applied Physics*, 2018.
- [12] Böer, K.W. and U.W. Pohl, Excitons, in *Semiconductor Physics*, K.W. Böer and U.W. Pohl, Editors. 2023, Springer International Publishing: Cham. p. 529-591.
- [13] Shota, O. and O. Kaoru, Origin of Charge Transfer Exciton Dissociation in Organic Solar Cells, in *Excitons*, L.P. Sergei, Editor. 2017, IntechOpen: Rijeka. p. Ch. 4.

- [14] Slimani, M.A., Cellules solaires pérovskites imprimées et optimisation des couches pérovskites pour les cellules tandems., in Mémoire, É.d.T.S.U.d. Québec, Editor. 2019. p. 136.
- [15] Derbal-Habak, H., Cellules solaires photovoltaïques plastiques nanostructurées. 2009, Université d'Angers.
- [16] maxicours, m. Electronique/Caractéristique d'une diode au silicium. Available from: <https://www.maxicours.com/se/cours/diode-1/>.
- [17] Verrier, C., Fabrication et caractérisation avancée de cellules photovoltaïques à base de nanofils de ZnO. 2017, Université Grenoble Alpes.
- [18] L. Taurel, J.P.C., Diffusion Rayleigh de la lumière par les solides. Journal de Physique et le Radium, 2008: p. pp.817-822.
- [19] 123 Couleurs!, Les couleurs de diffusion. Available from: <https://www.123couleurs.fr/explications/explications-matiere/tm-couleursdiffusion/>.
- [20] Sadourny, R., Le Climat de la Terre, in Flammarion. 1994, Editions Flammarion: ATMOSPHERE-La couche atmosphérique terrestre.
- [21] Glaströsch. Éléments physiques de base relatifs à la construction. Available from: <https://www.glaströsch.com/ch/fr/services/connaissances-specialisees/le-verre-et-ses-applications/elements-physiques-de-base-relatifs-a-la-construction/soleil-et-lumiere>.
- [22] Bekale, L.A., Élaboration de cellules solaires organiques à base de tétra-tert-butyl-phthalocyanine de zinc (ttb-znpc), in mémoire, u.d.q.à. trois-rivières, editor. 2012.
- [23] MacKenzie, R.C.I., Understanding OghmaNano. 2024. p. 185.
- [24] Berrian, D. and S. Bouzaghrou, Developpement des modeles mathematiques d'un generateur photovoltaïque defectueux. 2015.
- [25] Brousse, B., Réalisation et caractérisation de cellules photovoltaïques organiques obtenues par dépôt physique, in Faculté de Sciences et Techniques de Limoges. 2004, Université de Limoges. p. 294.
- [26] Klaus Jäger, O.I., Arno H. M. Smets, René A. C. M. M. van Smaaij, Miro Zeman, Solar Energy : Fundamentals, Technology and Systems. 2014, UIT Cambridge: Delft University of Technology. 401.
- [27] Hasan, M.N., et al. Modeling of high efficient perovskite-Si tandem solar cell. in 2017 3rd International Conference on Electrical Information and Communication Technology (EICT). 2017.
- [28] Herz, L.M., Charge-Carrier Mobilities in Metal Halide Perovskites: Fundamental Mechanisms and Limits. ACS Energy Letters, 2017. 2(7): p. 1539-1548.
- [29] Carlo Motta, F.E.-M.S.S., Charge carrier mobility in hybrid halide perovskites. 2015: Scientific Reports. p. 8.
- [30] Alexandre Gheno, S.V., Bernard Ratier and Johann Bouclé, π -Conjugated Materials as the Hole-Transporting Layer in Perovskite Solar Cells. MDPI, 2016.

- [31] Drechsel, J., et al., High efficiency organic solar cells based on single or multiple PIN structures. *Thin Solid Films*, 2004. **451-452**: p. 515-517.
- [32] Dally, P., Cellules Solaires à base de Matériaux Pérovskites : De la caractérisation des matériaux à l'amélioration des rendements et de la stabilité. 2019.
- [33] Crispin, X., et al., The Origin of the High Conductivity of Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)–Poly(styrenesulfonate) (PEDOT–PSS) Plastic Electrodes. *Chemistry of Materials*, 2006. **18**(18): p. 4354-4360.
- [34] Rousseau, T., Elaboration et caractérisation de cellules solaires organiques à base de nouvelles classes de matériaux actifs. 2011, Université d'Angers.
- [35] Burkitt, D., et al. Sequential Slot-Die Deposition of Perovskite Solar Cells Using Dimethylsulfoxide Lead Iodide Ink. *Materials*, 2018. **11**, DOI: 10.3390/ma11112106.
- [36] Pavu, K.S. and J. Jacob. Evaluation of Performance Parameters of 2T Perovskite/Si Tandem Solar Cells. in 2022 IEEE 19th India Council International Conference (INDICON). 2022.
- [37] Werner, J., B. Niesen, and C. Ballif, Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells: Marriage of Convenience or True Love Story? – An Overview. *Advanced Materials Interfaces*, 2018. **5**(1): p. 1700731.
- [38] Mailoa, J.P., et al., A 2-terminal perovskite/silicon multijunction solar cell enabled by a silicon tunnel junction. *Applied Physics Letters*, 2015. **106**(12).
- [39] OXFORD PV, T.P.C., Perovskite solar cell achieves 28% efficiency. 2018.
- [40] ENERGY, N.R.E.L.N.T. Best Research Cell Efficiency Chart. Photovoltaic Research 2019 [cited 2019; Available from: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>].
- [41] Muhammad, S.A.a.M., Recent Progress in Perovskite Tandem Solar Cells. *MDPI*, 2023: p. 44.
- [42] Thibault Lemerrier, L.P., Emilie Planès, Solenn Berson and Lionel Flandin, A Comparison of the Structure and Properties of Opaque and Semi-Transparent NIP/PIN-Type Scalable Perovskite Solar Cells. *ResearchGate*, 2020: p. 18.
- [43] Brenner, T.M., et al., Are Mobilities in Hybrid Organic–Inorganic Halide Perovskites Actually “High”? *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2015. **6**(23): p. 4754-4757.
- [44] Kowsar, A., et al. Comparative Study on Solar Cell Simulators. in 2019 2nd International Conference on Innovation in Engineering and Technology (ICIET). 2019.
- [45] AG, F., SETFOS Tutorial 2006-2024, Fluxim AG: Online. p. 423.
- [46] Gent, U.o., SCAPS manual. 2021, Department of Electronics and Information Systems (ELIS): Online. p. 155.
- [47] Hossain, M.K., et al., Combined DFT, SCAPS-1D, and wxAMPS frameworks for design optimization of efficient Cs₂BiAgI₆-based perovskite solar cells with different charge transport layers. *RSC Advances*, 2022. **12**(54): p. 35002-35025.

- [48] Eid, A.A., Z.S. Ismail, and S.O. Abdellatif. Optimizing SCAPS model for perovskite solar cell equivalent circuit with utilizing Matlab-based parasitic resistance estimator algorithm. in 2020 2nd Novel Intelligent and Leading Emerging Sciences Conference (NILES). 2020.
- [49] Chaïma, B., Évaluation et simulation des performances d'une cellule solaire pérovskite pour des différents matériaux en couches de transport d'électrons et de trous., in Faculté des sciences-Département de physique. 2021, Université ABOU-BEKR BELKAID - TLEMCEN. p. 72.
- [50] Gezgin, S.Y. and H.Ş. Kiliç, The Effect of Ag and Au Contacts on the Efficiency of CZTS/n-Si Solar Cell: the Confirmation of Experimental and Theoretical Results by SCAPS Simulation. Brazilian Journal of Physics, 2022. **52**(4): p. 148.
- [51] Albrecht, S., et al., Monolithic perovskite/silicon-heterojunction tandem solar cells processed at low temperature. Energy & Environmental Science, 2016. **9**(1): p. 81-88.
- [52] Ramli, N., et al., Model development of monolithic tandem silicon-perovskite solar cell by SCAPS simulation. Vol. 1838. 2017. 020006.