

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البليدة
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا
Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك
Département d'Électronique



Mémoire de Master

Filière Électronique
Spécialité Microélectronique
Code Micro6

présenté par

Bahmed Selma

&

Gaad Fatma Zohra

Etude et simulation d'une cellule solaire à base de pérovskite sans plomb $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

Proposé par : Nacer Said

Année Universitaire 2024-2025

Remerciement

D'abord nous remercions le bon dieu de nous avoir donné la volonté et le courage d'élaborer ce travail.

Nous tenons à exprimer nos sincères remerciements à toutes les personnes qui nous ont accompagnés et soutenus tout au long de la réalisation de ce projet de fin d'études.

Nous adressons nos remerciements les plus chaleureux à notre encadrant, **Mr NACER SAID**, pour sa disponibilité, ses conseils avisés et son suivi tout au long de ce projet. Son expertise et ses orientations ont été d'une grande aide dans l'aboutissement de notre travail.

Nos remerciements vont également aux membres du jury pour l'intérêt qu'ils portent à notre projet et pour le temps consacré à l'évaluation de notre mémoire.

DEDICACES

Je dédie ce projet fin d'étude :

À l'homme, ce précieux cadeau de Dieu, à qui je dois ma vie, ma réussite et tout mon respect
: mon cher père, BAHMED AHMED.

À la femme qui a souffert sans jamais me laisser souffrir, qui n'a jamais dit non à mes
exigences et qui n'a ménagé aucun effort pour me rendre heureuse : mon adorable mère,
MORSLI HOURIA.

Un grand merci à ma grande sœur, ZINEB, pour sa présence, son écoute et ses conseils
toujours justes, ainsi qu'à son fils, DJAMEL ELDINE, dont la joie de vivre et l'énergie
apportent chaque jour une touche de bonheur à ma vie.

À ma précieuse petite sœur, KHAOULA, qui sait toujours comment apporter de la joie et du
bonheur à toute la famille.

Je tiens également à adresser mes remerciements à mon frère ZAKARIA, pour sa
bienveillance, ses encouragements et sa présence rassurante, ainsi qu'à sa femme RANIA et
leur fils NAIL, dont l'innocence et la joie ont souvent illuminé mes journées et apporté un
souffle d'optimisme dans les moments difficiles.

Je remercie aussi mes deux frères, HICHEM et ZOHEIR, toujours présents pour me motiver,
me soutenir et croire en moi.

Enfin, je remercie tout particulièrement ma binôme, GAAD FATMA ZOHRA, avec qui j'ai
partagé cette belle aventure. Merci pour ta collaboration, ton sérieux, ta patience et ton esprit
d'équipe, qui ont rendu cette expérience plus enrichissante et agréable.

À toutes ces personnes chères à mon cœur, merci du fond du cœur.

BAHMED SELMA

DEDICACES

Je dédie ce projet fin d'étude :

À ma mère, DJERMOUNI ASSIA,
Femme au cœur infini, à la patience d'or et à l'amour inconditionnel.
Tu es mon pilier, mon refuge et ma première source de lumière.
Ce travail porte en lui les reflets de ton sacrifice silencieux et de ton regard
bienveillant.

Je ne trouverai jamais assez de mots pour te remercier.

À la mémoire de mon beau-père, AYACHI AMOR LAKHDER,
Qu'Allah t'accorde Sa miséricorde et t'ouvre les portes de Son
paradis.
Ton souvenir m'accompagne à chaque étape. Tu restes à jamais vivant dans mon
cœur.

À mon oncle BENZAAD YOUNES,
Merci pour votre présence constante, votre générosité d'âme et votre affection
sincère. et ma tante DJERMOUNI FATIHA et leurs enfants, LINDA,
OUMAIMA, ZOHIR et HAKIM,
Vous êtes pour moi comme des frères et sœurs de cœur. Que la vie vous comble de
bonheur.

À mon oncle DJERMOUNI ABDALLAH et ses filles MERIEM et HAFSSA,
Merci pour votre gentillesse et votre chaleur humaine, qui m'ont toujours fait me
sentir entourée.

À mon oncle BENZAAD RAOUF, son épouse
HOUDA, Et leurs enfants MARAM,
MOHAMED et AKRAM,
Votre tendresse et vos encouragements ont toujours compté plus que vous ne pouvez
l'imaginer.

À ma sœur MEZMAZ CHAHINEZ, son mari
ABDALLI, Et leurs enfants ADEM et INES,
Merci pour votre amour, votre soutien fraternel et votre fierté qui m'ont portée bien
plus loin que vous ne le croyez.

À ma binôme et amie de cœur, BAHEMD SELMA,
Dans ce long voyage, tu as été ma force tranquille, mon éclat de rire, mon double.
Merci d'avoir partagé cette aventure avec moi, avec une loyauté rare.

À ma belle-famille, LES CHEROUATI,
Votre accueil, votre foi en moi et votre appui discret mais sincère m'ont
profondément touchée.
Merci d'avoir cru en moi comme l'une des vôtres.

À toutes celles et ceux qui, par un mot, un regard ou une prière, ont participé à cette
réussite : Je vous en suis profondément reconnaissante.

GAAD FATMA ZOHRA

ملخص: تهيمن خلايا السيليكون البلورية حاليًا على قطاع الطاقة الكهروضوئية. ومع ذلك، تُعتبر الخلايا الشمسية الهجينة العضوية-غير العضوية القائمة على البيروفسكايت بديلاً واعدًا للغاية، خاصةً للتطبيقات المتزامنة مع السيليكون، نظرًا لكفاءتها العالية وعمليات تصنيعها البسيطة والفعالة من حيث التكلفة. في هذا العمل، درسنا محاكاة خلية شمسية مصنوعة من مادة البيروفسكايت $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ ، باستخدام برنامج COMSOL وقد خُلل تأثير مختلف المعايير الهيكلية، مثل سُمك الطبقة ودوبنج الطبقات، وعمر الناقل، ودرجة الحرارة، على أداء الخلية (تيار القصر، وجهد الدائرة المفتوحة، والقدرة القصوى، وكفاءة التحويل) لتحديد الظروف المثلى لهذا الهيكل. وتم الحصول على كثافة تيار تبلغ $16 \text{ cm}^2/\text{mA}$ وجهد دائرة مفتوحة يبلغ 1.3 V ، وكفاءة قصوى تقارب حوالي 17%

كلمات مفتاحية: الطاقة الكهروضوئية، البيروفسكايت، $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ ، COMSOL

Résumé : Le secteur du photovoltaïque est actuellement dominé par les cellules en silicium cristallin. Toutefois, les cellules solaires hybrides organiques-inorganiques à base de pérovskite représentent une alternative très prometteuse, notamment pour des applications en tandem avec le silicium, en raison de leur rendement élevé et de leurs procédés de fabrication simples et économiques. Dans ce travail, nous avons étudié et simulé une cellule solaire à base de matériau pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, en utilisant le logiciel COMSOL. L'influence de différents paramètres structuraux, tels que l'épaisseur et le dopage des couches, la durée de vie des porteurs et la température sur les performances de la cellule (courant de court-circuit, tension de circuit ouvert, puissance maximale et rendement de conversion) a été analysée afin de déterminer les conditions optimales pour cette structure. Une densité de courant de 16 mA/cm^2 , une tension de circuit ouvert de 1.3 V et un rendement optimal de l'ordre de 17% ont été obtenus.

Mots-clés : Photovoltaïque ; Pérovskite ; $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$; COMSOL

Abstract : The photovoltaic sector is currently dominated by crystalline silicon cells. However, perovskite-based organic-inorganic hybrid solar cells represent a very promising alternative, especially for applications in tandem with silicon, due to their high efficiency and simple and cost-effective manufacturing processes. In this work, we studied and simulated a solar cell based on $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ perovskite material, using COMSOL software. The influence of different structural parameters, such as layer thickness and doping, carrier lifetime, and temperature on the cell performance (short-circuit current, open-circuit voltage, maximum power, and conversion efficiency) was analyzed to determine the optimal conditions for this structure. A current density of 16 mA/cm^2 , an open-circuit voltage of 1.3 V , and an optimal efficiency of around 17% were obtained.

Keywords: Photovoltaic; Perovskite; $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$; COMSOL.

Sommaire

Introduction générale	10
Chapitre 1 : Généralités sur les cellules photovoltaïques	12
1.1 Introduction	12
1.2 Historique du photovoltaïque	13
1.3 L'énergie solaire	15
1.3.1 Le rayonnement solaire	15
1.3.2 Le spectre solaire	17
1.4 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	19
1.4.1 Effet photovoltaïque	19
1.4.2 Structure d'une cellule solaire	20
1.5 Caractéristiques électriques des cellules photovoltaïques	21
1.5.1 Courbe I-V	21
1.5.2 Rendement et facteurs influents	22
Chapitre 2 : Les cellules solaires à base de pérovskite	25
2.1 Introduction aux pérovskites	25
2.2 Structure cristalline et propriétés optoélectroniques	27
2.2.1 Structure cristalline	27
2.2.2 Propriétés optiques	28
2.2.3 Propriétés électroniques	29
2.3 Pérovskites sans plomb : $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$	30
2.3.1 Composition et avantages	30
2.3.2 Stabilité et toxicité	31
2.4 Matériaux et architecture de la cellule solaire étudiée	33
2.4.1 Description des couches	33
2.4.2 Schéma de la structure	34
Chapitre 3 : Étude et simulation de la cellule solaire $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$	37
3.1 Méthodologie de simulation avec COMSOL	37
3.1.1 Modélisation physique	37
3.1.2 Paramètres de simulation	38
3.2 Influence des paramètres structurels (épaisseur, dopage)	40
3.2.1 Effet de l'épaisseur des couches	40
3.2.2 Impact du dopage	41
3.3 Effet de la durée de vie des porteurs et de la température	43
3.3.1 Durée de vie des porteurs	43
3.3.2 Influence de la température	44
3.4 Résultats et analyse des performances électriques	46
3.4.1 Courbes I-V simulées	46
3.4.2 Calcul du rendement	48
Conclusion générale	50
Bibliographie	52

Liste des figures

Figure 1.1 : Spectre solaire	13
Figure 1.2 : Composantes du rayonnement solaire	16
Figure 1.3 : Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire	19
Figure 1.4 : Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	21
Figure 1.5 : Schéma équivalent de la cellule photovoltaïque PV	23
Figure 1.6 : Caractéristique I(V) d'une cellule solaire	25
Figure 1.7 : Semi-conducteurs de type n	28
Figure 1.8 : Semi-conducteur type p	29
Figure 1.9 : Jonction PN	33
Figure 2.1 : Augmentation de l'efficacité des cellules à pérovskite	38
Figure 2.2 : Structure cristalline ABX ₃ des pérovskites	39
Figure 2.3 : Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskite	41
Figure 2.4 : Matériaux HTM	43
Figure 2.5 : Matériaux ETM	45
Figure 2.6 : Schéma d'une cellule à Cs ₂ AgBiBr ₆	49
Figure 3.1 : Interface COMSOL Multiphysics	51
Figure 3.2 : Structure de la cellule solaire Cs ₂ AgBiBr ₆	52
Figure 3.3 : Caractéristiques J-V pour différentes épaisseurs de la couche pérovskite (W ₂)	53
Figure 3.4 : Caractéristiques P-V pour différentes épaisseurs de la couche pérovskite	54
Figure 3.5 : Variation de la puissance maximale et du rendement selon l'épaisseur (W ₂).....	55
Figure 3.6 : Caractéristiques J-V pour différents dopages de la couche ZnO	56
Figure 3.7 : Caractéristiques J-V pour différents dopages de la couche pérovskite	57
Figure 3.8 : Caractéristiques P-V selon le dopage de la couche pérovskite	58
Figure 3.9 : Variation du rendement en fonction du dopage NA ₂	59
Figure 3.10 : Caractéristiques J-V selon le dopage de la couche NiO	60
Figure 3.11 : Caractéristiques P-V selon le dopage de la couche NiO	61
Figure 3.12 : Rendement en fonction du dopage NA ₃ dans NiO	62
Figure 3.13 : Caractéristiques J-V selon la durée de vie des porteurs	63

Figure 3.14 : Caractéristiques P-V selon la durée de vie des porteurs	64
Figure 3.15 : Variation du rendement en fonction de la durée de vie des porteurs	65
Figure 3.16 : Caractéristiques I(V) pour différentes températures	66
Figure 3.17 : Caractéristiques P(V) et rendement selon la température	67
Figure 3.18 : Courbes I(V) et P(V) de la cellule optimisée	68

Liste des tableaux

Tableau 3.1 : Paramètres utilisés dans la simulation	34
Tableau 3.2 : Paramètres de la structure optimisée	49

Liste des symboles

B : Constante liée au matériau

D_n, D_p : Coefficients de diffusion

E : Champ électrique ou énergie du photon selon le contexte

FF : Facteur de forme

G : Taux de génération

I_{ph} : Courant photo-induit

J_{cc} : Courant de court-circuit

J_n, J_p : Densités de courant des électrons et des trous

P_{inc} : Puissance solaire incidente

P_{max} : Puissance maximale

R : Coefficient de réflexion ou taux de recombinaison

R_n, R_p : Taux de recombinaison pour les électrons et trous

T : Température

V_{co} : Tension de circuit ouvert

a : Exposant selon la nature du gap (1/2 pour direct, 2 pour indirect)

c : Vitesse de la lumière

h : Constante de Planck

k : Constante de Boltzmann

n, p : Concentration d'électrons et de trous

n_e, p_e : Concentrations à l'équilibre

q : Charge élémentaire

ν : Fréquence

Δ_n, Δ_p : Excès de porteurs

α : Coefficient d'absorption

ϵ : Permittivité

λ : Longueur d'onde

μ_n, μ_p : Mobilité des électrons et des trous

ρ : Densité de charge

τ_n, τ_p : Durée de vie des porteurs

φ : Potentiel électrostatique

Liste des abréviations principales

AM 1.5 : Air Mass 1.5 (standard d'ensoleillement)

COMSOL : Logiciel de simulation multiphysique

$\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$: Pérovskite sans plomb étudiée dans le projet

ETL : Electron Transport Layer (couche de transport d'électrons)

E_g : Bande interdite

HTL : Hole Transport Layer (couche de transport de trous)

PV : Photovoltaïque

TCO : Transparent Conductive Oxide (oxyde conducteur transparent)

Introduction Générale

La transition énergétique mondiale, motivée par la nécessité de réduire les émissions de gaz à effet de serre et de dépendre moins des combustibles fossiles, a fortement stimulé le développement des technologies photovoltaïques. Depuis plusieurs décennies, les cellules solaires à base de silicium dominent le marché grâce à leur maturité technologique, leur rendement élevé et leur stabilité à long terme. Toutefois, leur coût de production relativement élevé et leur rigidité structurelle ont ouvert la voie à l'exploration de matériaux alternatifs plus flexibles, plus économiques et plus faciles à fabriquer.

Parmi ces matériaux émergents, les cellules solaires à base de pérovskites ont suscité un intérêt considérable en raison de leurs excellentes propriétés optoélectroniques, telles qu'un fort coefficient d'absorption, une faible énergie de bande interdite et une longue diffusion des porteurs de charge. En particulier, les pérovskites à base de plomb ont démontré un rendement de conversion de puissance impressionnant, atteignant plus de 29 %, rivalisant ainsi avec les meilleures cellules au silicium.

Cependant, malgré ces performances prometteuses, l'utilisation du plomb (Pb) dans la composition des pérovskites soulève de graves préoccupations environnementales et sanitaires. Le plomb est un métal lourd hautement toxique, non biodégradable, qui peut contaminer l'air, l'eau et le sol. Son exposition prolongée présente des risques critiques pour la santé humaine, en particulier chez les enfants, en affectant le système nerveux et les organes vitaux comme les reins et le foie. Ces préoccupations ont limité l'acceptabilité commerciale des cellules solaires au plomb.

Face à ces enjeux, la recherche s'oriente de plus en plus vers des alternatives respectueuses de l'environnement, notamment les pérovskites sans plomb. Parmi les composés les plus prometteurs figure la double pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, qui offre non seulement une solution non toxique, mais aussi une stabilité chimique et thermique améliorée. Bien que les rendements actuels des cellules à base de pérovskites sans plomb restent inférieurs à ceux de leurs homologues au plomb, les avancées récentes en matière d'ingénierie des matériaux et de simulation numérique ouvrent de nouvelles perspectives pour optimiser leurs performances.

Dans ce contexte, ce travail de fin d'études a pour objectif d'étudier et de simuler le comportement d'une cellule solaire à base de $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, dans le but de contribuer à l'essor d'une technologie photovoltaïque à la fois performante et durable, exempte de plomb.

Chapitre 1

Généralités sur les cellules Photovoltaïques

1.1 Introduction

L'énergie solaire représente aujourd'hui une source d'énergie renouvelable essentielle, au cœur des solutions envisagées pour répondre aux enjeux énergétiques mondiaux. L'exploitation de cette énergie passe principalement par les cellules photovoltaïques, qui transforment directement la lumière du soleil en électricité.

Dans ce premier chapitre, nous allons poser les bases nécessaires pour comprendre le fonctionnement des cellules photovoltaïques. Nous commencerons par explorer les caractéristiques de l'énergie solaire et de son rayonnement. Ensuite, nous introduirons les principes fondamentaux de la conversion photovoltaïque, en mettant en lumière le rôle crucial des matériaux semi-conducteurs.

Nous aborderons aussi le concept de jonction PN, qui constitue le cœur du fonctionnement des cellules solaires, ainsi que les principales caractéristiques électriques qui permettent d'évaluer leurs performances, comme le courant de court-circuit, la tension de circuit ouvert ou encore le rendement.

Enfin, ce chapitre fournira les notions essentielles sur les phénomènes physiques impliqués, tels que l'absorption de la lumière, la génération de charges et leur collecte, qui sont à la base de la production d'électricité dans une cellule solaire.

1.2 Historique du photovoltaïque

L'histoire du photovoltaïque commence en 1839 avec la découverte de l'effet photovoltaïque par le physicien français Alexandre Edmond Becquerel. En expérimentant avec des électrodes plongées dans une solution conductrice, il observe pour la première fois la génération d'un courant électrique sous l'effet de la lumière. C'est le point de départ de cette technologie [1].

Quelques décennies plus tard, en 1875, l'Allemand Werner von Siemens met en évidence le comportement des semi-conducteurs exposés à la lumière, mais le phénomène reste encore peu exploité jusqu'au XXe siècle [2].

Le véritable tournant a lieu en 1954, quand les chercheurs américains Chapin, Fuller et Pearson, travaillant chez Bell Labs, développent la première cellule solaire au silicium capable de produire un courant significatif avec un rendement d'environ 6%. Cette innovation marque le début de l'ère moderne du photovoltaïque [3].

Dès 1958, la technologie est utilisée dans le domaine spatial, notamment pour alimenter les premiers satellites artificiels, tel que Vanguard. Ces cellules atteignent un rendement d'environ 9 %, ce qui démontre leur potentiel pour des applications réelles [2][4].

En 1973, l'université de Delaware construit la première maison alimentée en électricité grâce à des cellules photovoltaïques. Puis, en 1983, la première voiture solaire parcourt 4000 kilomètres en Australie, illustrant les capacités prometteuses de cette énergie [2].

Aujourd'hui, le photovoltaïque est devenu une technologie mature, disponible aussi bien pour les particuliers que pour les grandes installations industrielles. Les rendements des cellules classiques ont atteint en moyenne 20 à 25 %, et de nombreuses recherches se poursuivent pour améliorer encore ces performances [2].

1.3 L'énergie solaire

L'énergie solaire est l'une des ressources renouvelables les plus prometteuses pour répondre aux besoins énergétiques croissants de l'humanité. Elle provient du rayonnement électromagnétique émis par le Soleil, dont une infime fraction atteint la Terre, mais cela représente tout de même environ 170 000 térawatts, soit plus de 10 000 fois la consommation énergétique mondiale actuelle [5].

Cette énergie peut être exploitée principalement de deux manières :

- Thermiquement, à travers des capteurs solaires qui convertissent l'énergie en chaleur,
- Photovoltaïquement, par des cellules solaires qui la transforment directement en électricité.

L'énergie solaire présente de nombreux avantages :

- Elle est gratuite, abondante, et disponible dans toutes les régions du monde,
- Elle est durable et inépuisable à l'échelle humaine,
- Elle ne produit pas de gaz à effet de serre ni de déchets polluants lors de son exploitation [6].

Cependant, pour pouvoir en tirer parti efficacement, il est essentiel d'étudier les caractéristiques du rayonnement solaire, sa distribution spectrale, ainsi que les matériaux et technologies permettant de le convertir en électricité.

1.4 Spectre solaire

Le spectre solaire correspond à la répartition de l'énergie du rayonnement solaire en fonction de la longueur d'onde. Le rayonnement émis par le Soleil couvre un large domaine de l'électromagnétisme, allant des rayons ultraviolets (UV) aux infrarouges (IR), en passant par la lumière visible. Toutefois, lorsque cette lumière traverse l'atmosphère terrestre, une partie est absorbée ou diffusée, modifiant la composition du spectre reçu au sol.

Le spectre solaire peut être représenté selon différentes conditions d'ensoleillement. Le plus couramment utilisé est le spectre AM1.5G (Air Mass 1.5 Global), qui simule la lumière solaire atteignant la surface terrestre avec un angle de 48°, correspondant à un ensoleillement moyen dans les zones tempérées. Ce spectre est utilisé comme standard de test pour évaluer les performances des cellules photovoltaïques [7].

La répartition typique de l'énergie solaire à la surface de la Terre est la suivante :

- Environ 5 à 9 % dans l'ultraviolet (< 400 nm),
- Environ 40 à 47 % dans la lumière visible (400 – 800 nm),
- Environ 44 à 55 % dans l'infrarouge (> 800 nm) [8].

L'énergie transportée par les photons dépend de leur longueur d'onde selon la relation :

$$E = h\nu = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.1)$$

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

Cette énergie photonique est essentielle dans le fonctionnement des cellules photovoltaïques, car seuls les photons ayant une énergie supérieure à la largeur de bande interdite du matériau (gap énergétique) peuvent produire un courant électrique.

La figure 1.1 montre le spectre d'émission solaire.

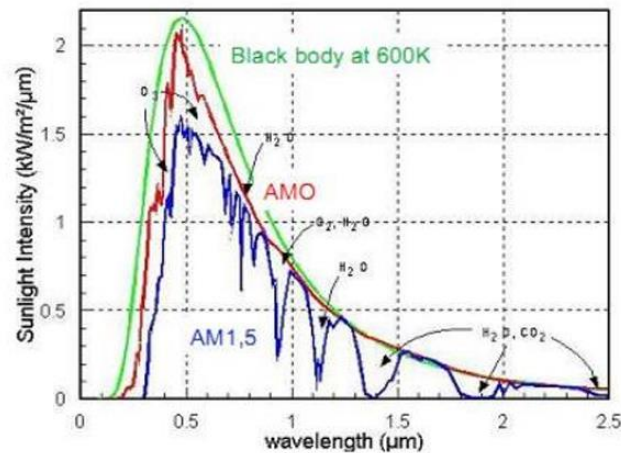


Figure 1.1 : Spectre solaire. AM0 : spectre solaire hors atmosphère, AM 1.5 : spectre solaire traversé de l'atmosphère, le soleil faisant un angle de 48° environ par rapport à sa position au zénith. [9]

1.5 Rayonnement solaire

Le rayonnement solaire est l'ensemble de l'énergie électromagnétique émise par le Soleil. Cette énergie voyage dans l'espace sous forme de photons et atteint la Terre en une dizaine de minutes. Bien que notre planète ne reçoive qu'une infime partie de cette énergie, cela représente environ $1\,367\text{ W/m}^2$ à la limite de l'atmosphère, ce que l'on appelle la constante solaire [10].

Cependant, en traversant l'atmosphère terrestre, une partie de cette énergie est absorbée, réfléchiée ou diffusée par les gaz (comme la vapeur d'eau, le dioxyde de carbone ou l'ozone), les nuages et les particules. Ainsi, l'énergie réellement disponible à la surface de la Terre est plus faible, de l'ordre de $1\,000\text{ W/m}^2$ par temps clair à midi. Cette valeur est utilisée comme standard d'ensoleillement pour évaluer les performances des dispositifs solaires [11].

Le rayonnement solaire se divise en trois composantes principales :

- Le rayonnement direct : il atteint la surface terrestre en ligne droite sans être diffusé.
- Le rayonnement diffus : il est dispersé par l'atmosphère et provient de toutes les directions.
- Le rayonnement réfléchi : il est renvoyé par le sol ou les objets environnants vers la surface exposée.

Les scientifiques utilisent la notion de masse d'air (AM) pour caractériser l'épaisseur d'atmosphère traversée par la lumière. Une masse d'air AM1.5 correspond à un angle solaire d'environ 48° et représente les conditions moyennes d'ensoleillement utilisées dans les tests des cellules photovoltaïques [12].

Comprendre la nature et la composition du rayonnement solaire est essentiel, car les cellules photovoltaïques sont sensibles à la quantité et à la qualité spectrale de cette lumière. Par exemple, les longueurs d'onde dans la zone visible (400–800 nm) sont les plus efficaces pour produire de l'électricité, car elles correspondent à l'énergie optimale pour exciter les électrons dans les matériaux semi-conducteurs utilisés dans les cellules [13].

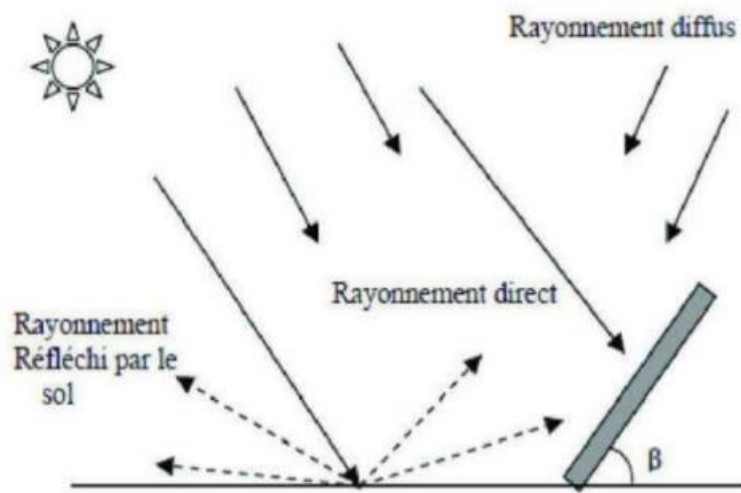


Figure 1.2 : les composantes du rayonnement solaire [14]

1.6 Cellule Photovoltaïque

Une cellule photovoltaïque, aussi appelée photopile, est un dispositif électronique qui convertit directement l'énergie lumineuse du Soleil en électricité grâce à l'effet photovoltaïque. Ce phénomène repose sur les propriétés des matériaux semi-conducteurs, comme le silicium, qui peuvent absorber la lumière et générer des charges électriques mobiles (électrons et trous) [15].

La cellule est généralement constituée de deux couches de semi-conducteurs dopés différemment :

- Une couche de type n (riche en électrons),

- Une couche de type p (riche en trous).

Lorsque ces deux couches sont mises en contact, elles forment une jonction PN, au niveau de laquelle un champ électrique interne se crée. Ce champ joue un rôle crucial : lorsqu'un photon frappe la cellule et est absorbé, il peut libérer un électron, créant ainsi une paire électron-trou. Le champ interne sépare ces charges et les dirige vers des contacts métalliques placés aux extrémités, générant un courant électrique continu utilisable [16].

Pour maximiser les performances d'une cellule photovoltaïque, il faut optimiser plusieurs paramètres : la qualité du matériau, l'épaisseur des couches, la réduction des pertes par réflexion ou recombinaison, et l'alignement spectral avec la lumière solaire.

Aujourd'hui, les cellules au silicium cristallin sont les plus répandues, atteignant des rendements commerciaux de 20 à 25 % [17]. Cependant, de nouvelles technologies, comme les cellules à base de pérovskite, suscitent un grand intérêt pour leur potentiel en efficacité et leur coût de fabrication réduit [18].

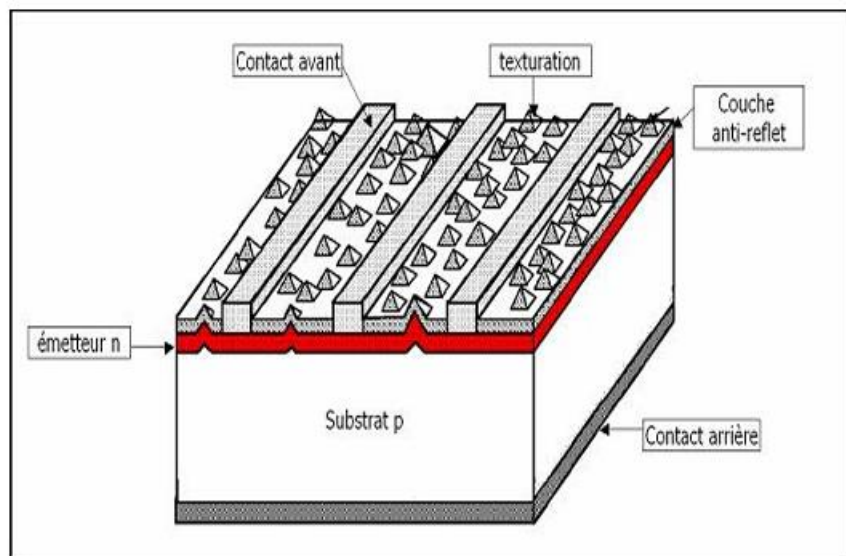


Figure 1.3 : Schéma simplifié illustratif d'une cellule solaire [19]

1.7 Principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque

Le fonctionnement d'une cellule photovoltaïque repose sur l'effet photovoltaïque, un phénomène physique par lequel la lumière (photons) est convertie en électricité dans un matériau semi-conducteur. Ce processus met en jeu plusieurs étapes clés, coordonnées au sein d'un composant simple mais ingénieux (Figure 1.4).

- **Absorption de la lumière**

Lorsqu'un photon solaire atteint la surface de la cellule et possède une énergie supérieure à la largeur de la bande interdite (E_g) du matériau, il peut être absorbé. Cette absorption permet de libérer un électron depuis la bande de valence vers la bande de conduction du semi-conducteur, créant ainsi une paire électron-trou.

- **Séparation des charges**

La cellule est constituée de deux couches dopées différemment :

- Une couche de type n (excès d'électrons),
- Une couche de type p (excès de trous).

À l'interface entre ces deux couches se forme une jonction PN. Cette jonction génère un champ électrique interne qui pousse les électrons vers la couche n et les trous vers la couche p. Ce mouvement ordonné évite la recombinaison des charges et assure leur séparation.

- **Collecte des charges**

Les électrons et les trous séparés sont collectés par des contacts métalliques placés sur les faces opposées de la cellule. Cela crée une différence de potentiel (tension) entre les deux faces. Si on relie ces contacts à un circuit électrique externe, un courant électrique est établi : c'est l'énergie solaire transformée en électricité utilisable.

Ce fonctionnement simple mais efficace permet aux cellules photovoltaïques de produire de l'électricité de manière silencieuse, sans émission, et à partir d'une source inépuisable : le Soleil. L'ensemble du processus dépend fortement des propriétés optoélectroniques du matériau semi-conducteur utilisé (comme le silicium ou la pérovskite), ainsi que de la qualité de la jonction et de l'architecture de la cellule [20][21].

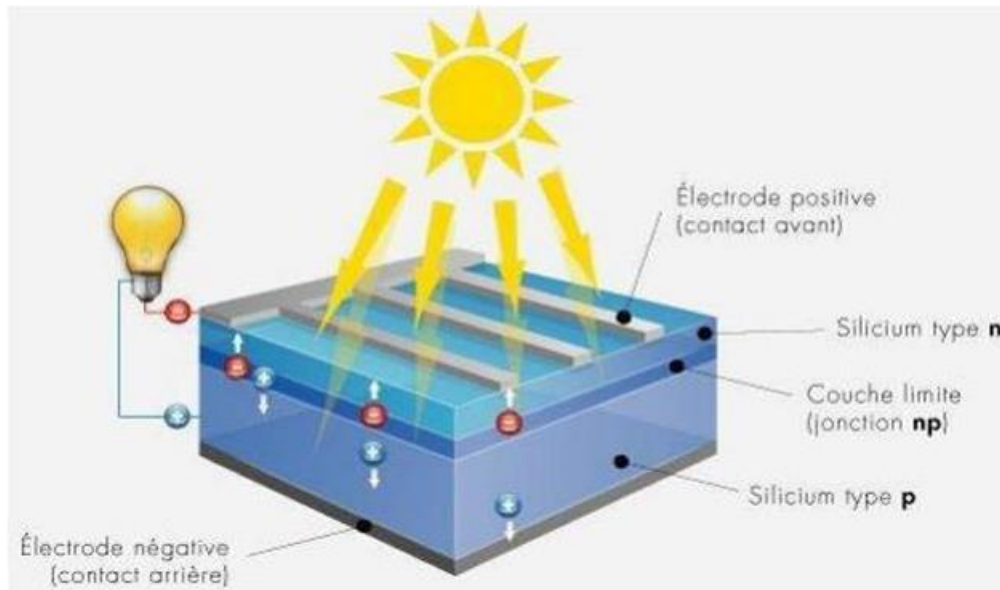


Figure 1.4 Principe de fonctionnement d'une cellule solaire [22]

1.8 Caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

La figure (1.5) présente le schéma équivalent d'une cellule photovoltaïque soumise à un éclairage. Ce modèle est essentiellement constitué, d'un générateur de courant photo-induit (I_{ph}), connecté en parallèle avec une diode, à laquelle sur est rajoutées deux résistances parasites.

- De manière similaire, la résistance de série R_s , qui représente la résistance interne de la cellule, dépend principalement aussi bien de la résistance du semi-conducteur que de la résistance de contact entre les grilles métalliques collectrices et le semi-conducteur et de la résistivité de ce même métal.
- En revanche, la résistance de shunt R_{sh} modélise les courants de fuite au niveau de la jonction PN correspondant à une cellule de qualité donnée et est fonction de la qualité de fabrication de celle - ci [23].

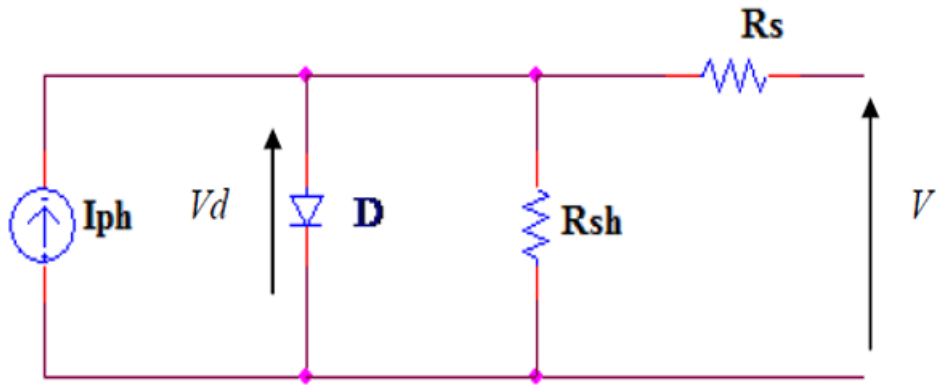


Figure 1.5 : Schéma équivalent de la cellule photovoltaïque PV

1.9 Paramètres d'une cellule photovoltaïque

Ces paramètres peuvent être déterminés à partir des courbes courant-tension (Figure 1.6), ou de l'équation caractéristique.

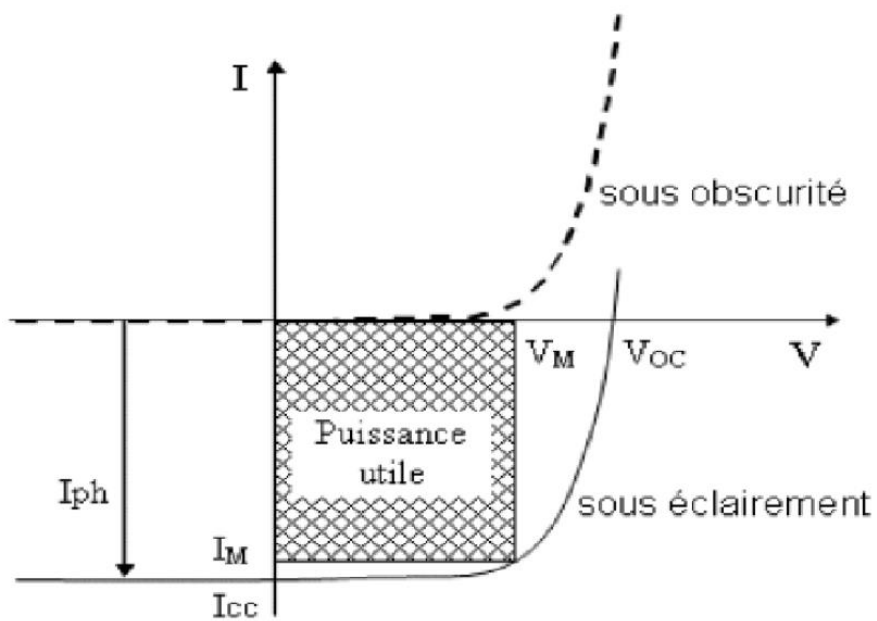


Figure 1.6 : Caractéristique $I(V)$ d'une cellule solaire sous obscurité et éclaircissement [24]

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

Le courant de court-circuit, est le courant qui traverse la cellule lorsque les bornes de la cellule sont court-circuitées et soumises à la lumière. Il augmente linéairement avec l'intensité lumineuse incidente sur la cellule, et dépend de plusieurs facteurs : la surface éclairée, la longueur d'onde du rayonnement, la mobilité des porteurs de charge et la température [23].

En idéalisant les conditions de fonctionnement ($R_s = 0$ et $R_{sh} \rightarrow \infty$) , le courant de court - circuit équivaut au photo courant I_{ph} . Dans des conditions réelles, il peut être obtenu en annulant la tension V dans l'équation : [22]

$$I_{cc} = \frac{I_{ph}}{[1 + \frac{R_s}{R_{sh}}]} \quad (1.2)$$

1.9.2 Tension de circuit-ouvert (V_{co})

Le potentiel de circuit ouvert V_{co} , est le potentiel maximum de la cellule, à vide, c'est -à- dire en l'absence d'une circulation de courant. Comme le potentiel est mesuré à vide, il est inversement proportionnel à la température et proportionnel à l'intensité lumineuse du flux lumineux incident [25].

Elle est donnée par l'expression :

$$V_{co} = V_t * \ln\left(\frac{I_{ph}}{I_0} + 1\right) \quad (1.3)$$

Avec : $V_t = \frac{kT}{q}$ qui représente la tension thermique.

k : Constante de Boltzmann

T : Température absolue (en kelvins, K)

q : Charge élémentaire de l'électron

1.9.3 Facteur de forme

Le facteur de forme (FF) est un paramètre fondamental pour évaluer les performances d'une cellule photovoltaïque. Ce facteur est défini comme le rapport entre la puissance maximale

délivrée par la cellule, notée P_{max} , et le produit $I_{cc} \cdot V_{co}$ de l'intensité de court-circuit I_{cc} par celle de la tension de circuit ouvert V_{co} , qui représente la puissance maximale théorique d'une cellule idéale. Un facteur de forme élevé, proche de l'unité, correspond à un bon rendement de la cellule. Il est généralement de l'ordre de 0,7 pour les cellules les plus performantes. Ce facteur dépend de la température, dont il tend à diminuer avec l'élévation, et met ainsi bien en évidence l'impact des pertes dues aux résistances parasites série R_s et parallèle R_{sh} [23].

Il est exprimé comme suit :

$$FF = \frac{P_{max}}{I_{cc} \cdot V_{co}} \quad (1.4)$$

1.9.4 La puissance maximale P_{max}

La puissance délivrée par une cellule solaire est maximum quand le produit $I \cdot V$ est maximum.

$$P_{max} = I_m \cdot V_m \quad (1.5)$$

1.9.5 Rendement énergétique de conversion

C'est le rapport entre la puissance électrique maximale fournie par la cellule P_{max} et la puissance solaire incidente. Il est donné par :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{inc}} = \frac{FF \cdot V_{co} \cdot I_{cc}}{P_{inc}} \quad (1.6)$$

Avec : P_{inc} est égale au produit de l'éclairement et de la surface totale des photopiles. Ce paramètre reflète la qualité de conversion de l'énergie solaire en énergie électrique [23].

1.10 Les semi-conducteurs

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont les propriétés électriques se situent entre celles des isolants et des conducteurs. À température ambiante, leur conductivité est limitée, mais elle peut être fortement augmentée par apport thermique, lumineux ou chimique (dopage). Ces matériaux jouent un rôle central dans les composants électroniques et les cellules photovoltaïques grâce à leur capacité à générer et transporter des charges électriques [26].

1.11 Les types de semi-conducteur

Les semi-conducteurs peuvent être modifiés par dopage, une technique qui consiste à introduire des impuretés contrôlées dans le cristal pur pour améliorer sa conductivité.

1.11.1 Semi-conducteurs type n

On introduit un atome donneur (comme le phosphore) qui ajoute des électrons libres à la bande de conduction.

La densité des porteurs de charge (électrons libres) de ce matériau (figure 1.7) est alors donnée par la relation : [23]

$$n = p + N_D \quad (1.7)$$

Où : n est la concentration totale d'électrons, p est la concentration de trous, N_D est la concentration des atomes donneurs (ceux de l'arsenic).

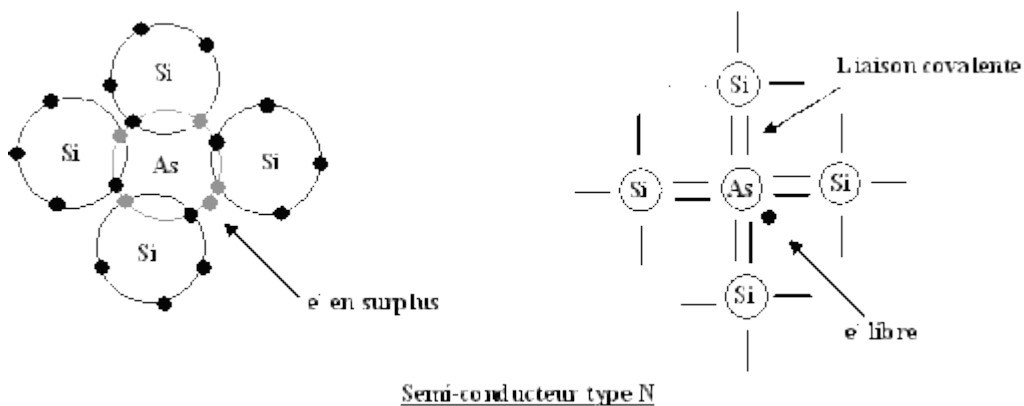


Figure 1.7 : semi-conducteurs de type n [27]

1.11.2 Semi-conducteur type p

On introduit un atome accepteur (comme le bore), ce qui crée des trous dans la bande de valence (figure 1.8).

La concentration en trous du semi-conducteur sera :

$$p = n + N_A \quad (1.8)$$

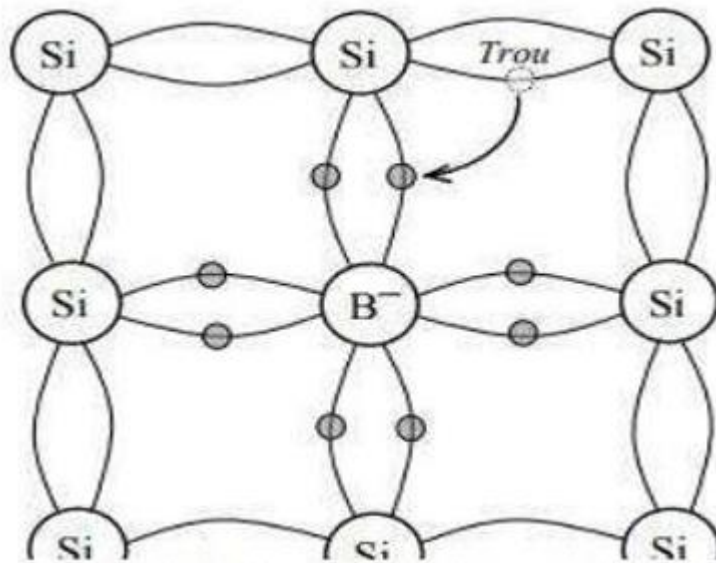


Figure 1.8 : semi-conducteur type p [28]

Ces porteurs de charge sont dits « majoritaires » dans chaque type de dopage respectif, et ils sont essentiels pour former la jonction PN des cellules solaires [29]

1.12 L'absorption

L'absorption désigne le phénomène par lequel l'énergie d'un photon est captée par une entité, comme un atome effectuant une transition entre deux niveaux d'énergie électronique. Durant ce processus, le photon cesse d'exister. Par conséquent, une caractéristique essentielle d'un matériau photovoltaïque est son coefficient d'absorption (α), qui dépend à la fois de l'énergie du gap et de celle des photons incidents [30].

1.12.1 Le coefficient d'absorption

Si l'énergie des photons est moins importante que celle du gap (E_g), le coefficient d'absorption est négligeable, permettant ainsi à la lumière de traverser le matériau sans absorption significative.

A proximité du seuil d'absorption intrinsèque, le coefficient d'absorption dépend de la différence $(h\nu - E_g)$:

$$\alpha = B.(h\nu - E_g)^a \quad (1.9)$$

L'indice a prend des valeurs différentes, selon que le matériau est à transition inter bande directe ($a=1/2$), ou indirecte ($a= 2$). Le facteur multiplicatif B dépend du matériau

1.13 Taux de génération

Les photons qui possèdent une énergie supérieure à celle du gap du matériau, en entrant dans un semi-conducteur, vont générer des paires électron-trou, sous l'hypothèse qu'un seul photon engendre une seule paire. Le taux de génération dans ce cas, G , est une fonction de la configuration géométrique de la source de lumière et de la surface soumise à l'illumination [31].

Le taux de génération s'écrit :

$$G = (1-R).\alpha.e^{(-\alpha x)} \quad (1.10)$$

Avec :

R : coefficient de réflexion

x : distance de la surface

α : coefficient d'absorption

1.14 Recombinaisons

Dans les semi-conducteurs, les paires électron-trou créées par absorption de photons ne participent pas toutes à la production d'électricité. Une partie de ces porteurs peut se recombiner, c'est-à-dire que l'électron revient dans la bande de valence pour remplir un trou, sans produire de courant. Ce phénomène s'appelle la recombinaison, et il représente une perte majeure d'efficacité dans les cellules photovoltaïques [32].

1.14.1 Recombinaison radiative

La recombinaison radiative se produit lorsqu'un électron et un trou se recombinent en libérant un photon. Ce type de recombinaison est typique des matériaux à bande interdite directe, comme le GaAs ou les pérovskites. Elle est dite "radiative" car elle restitue l'énergie sous

forme de lumière. Bien qu'elle représente une perte pour la cellule, elle est parfois partiellement récupérable via des mécanismes de recyclage photonique [33].

1.14.2 Recombinaison non radiative (SRH)

Dans une recombinaison non radiative, l'énergie libérée par la recombinaison électron-trou est convertie en chaleur plutôt qu'en photon. Ce type de recombinaison est généralement associé à des défauts cristallins, des impuretés ou des interfaces mal passivées, qui créent des niveaux d'énergie piègeurs dans la bande interdite. Ce mécanisme est aussi connu sous le nom de recombinaison de Shockley-Read-Hall (SRH) [34]

Les recombinaisons non radiatives sont plus nuisibles que les radiatives, car elles provoquent une perte directe d'énergie sans possibilité de récupération. Dans les cellules solaires à pérovskite, la qualité de la couche absorbante et de ses interfaces joue un rôle critique pour réduire ces recombinaisons et améliorer le rendement.[35]

1.14.3 Recombinaison Auger

Un troisième type de recombinaison, plus fréquent à forte densité de porteurs, est la recombinaison Auger. Elle survient lorsqu'un électron et un trou se recombinent, et que l'énergie est transférée à un autre porteur, plutôt qu'émise sous forme de lumière. Ce phénomène est rare aux faibles niveaux d'illumination, mais devient significatif dans les conditions de fort flux lumineux ou de concentration optique [36]

1.14.5 Taux de recombinaison

Lors de la génération de paires électron-trou, il est également nécessaire de prendre en compte le processus inverse, à savoir la recombinaison de ces paires, Cela permet de définir les taux de recombinaison, notés R_n pour les électrons et R_p pour les trous, selon :

$$R_{n,p} = \frac{\Delta_{n,p}}{\tau_{n,p}} \quad (1.11)$$

- $\Delta_{n,p} = n.p - n_e.p_e$: la densité des porteurs générés.
- n_e, p_e : la densité des porteurs à l'équilibre.
- $\tau_{n,p}$: la durée de vie de ces porteurs.

1.15 Les équations des semi-conducteurs

1.15.1 Équation de Poisson

L'équation de Poisson permet de déterminer le champ électrique ainsi que le potentiel électrostatique au sein des dispositifs à semi-conducteurs [34].

$$\mathbf{div. E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (1.12)$$

E est le champ électrique, ρ la densité de charges électriques, ε la permittivité

$$\mathbf{E} = -\mathbf{grad}\varphi \quad (1.13)$$

φ est le potentiel électrostatique.

$$\rho = q(p - n + Nd - Na) \quad (1.14)$$

Donc l'équation de Poisson devient :

$$\mathbf{div}(\varepsilon \mathbf{E}) = q(p - n + Nd - Na) \quad (1.15)$$

1.15.2 Les équation de continuité des électrons et des trous

$$\mathbf{div. (J_n)} = q(R - G) \quad (1.16)$$

$$\mathbf{div. (J_p)} = -q(R - G) \quad (1.17)$$

Avec : R taux de recombinaison, G taux de génération.

Les densités de courant des électrons et des trous sont données par [33] :

$$J_n = q\mu_n \frac{\partial EF_n}{\partial x} \quad (1.18)$$

$$J_p = q\mu_p \frac{\partial EF_p}{\partial x} \quad (1.19)$$

Avec :

- μ_n et μ_p : mobilités des électrons et des trous
- n et p : concentration des électrons et des trous
- E_{Fn} et E_{Fp} : quasi-niveaux de fermi des électrons et des trous

1.16 La jonction PN

La jonction PN résulte du contact entre une région dopée P et une région dopée N. Lors de l'assemblage, les porteurs de charge libres diffusent à travers la jonction et se recombinent en se déplaçant vers la zone de contact. La région contenant peu de porteurs libres est appelée zone d'appauvrissement ou région de transition (figure.19) [38].

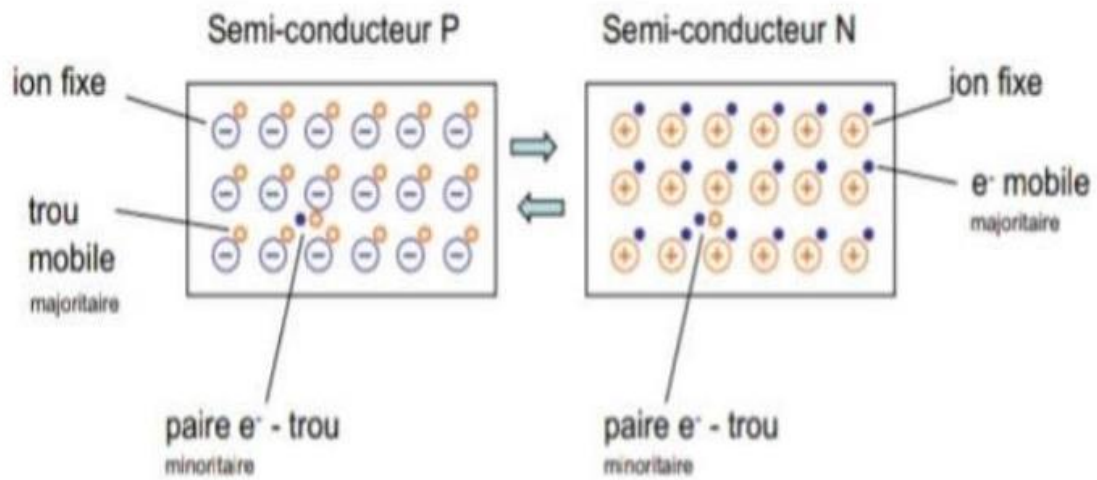


Figure 1.9 : Jonction PN [39]

1.16 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons traité les concepts du principe photovoltaïque en tant que tels et ces concepts lorsqu'ils s'appliquent aux cellules solaires. De même, les cellules photovoltaïques ont été choisies et le fonctionnement et les principales caractéristiques de ces cellules ont été expliquées. Ce qui va nous aider dans la suite de notre travail.

Chapitre 2

Les cellules solaires à base de Pérovskite

2.1 Introduction

Face aux limites des technologies photovoltaïques traditionnelles, les cellules solaires à base de pérovskite sont apparues comme une alternative prometteuse, alliant haut rendement, faible coût de fabrication et flexibilité d'utilisation. Leur développement rapide au cours de la dernière décennie s'explique par les propriétés optoélectroniques remarquables des matériaux pérovskites, qui permettent une absorption efficace de la lumière et un transport performant des charges.

Dans ce chapitre, nous présenterons d'abord les caractéristiques fondamentales des matériaux pérovskites, leur structure cristalline et leur composition chimique. Nous étudierons ensuite leur rôle au sein de l'architecture d'une cellule solaire, ainsi que les avantages et les défis liés à leur utilisation.

2.2 Les cellules solaires à base de pérovskite

2.2.1 Les pérovskites

Les pérovskites hybrides organo-métalliques constituent une famille de matériaux ayant profondément transformé le domaine du photovoltaïque. Depuis leur première utilisation en 2009, les rendements des cellules solaires à base de pérovskite sont passés de 3 % à plus de 25% (figure 2.1), en seulement une décennie. Ce bond technologique est dû aux propriétés optoélectroniques remarquables de ces matériaux, comme leur forte absorption de la lumière, leur mobilité de charge modérée, et leur possibilité d'être élaborés à basse température [40].

Ce qui rend les pérovskites uniques, c'est leur flexibilité de composition chimique. Il est possible d'adapter leurs propriétés optiques et structurales en remplaçant ou combinant différents cations et anions. Par exemple, l'introduction de brome (Br^-) en substitution partielle de l'iode (I^-) permet d'ajuster la bande interdite et d'optimiser la cellule pour des applications spécifiques. Ces matériaux peuvent être facilement déposés par des procédés peu coûteux, tels que le spin-coating ou le dépôt par solution, ce qui ouvre la voie à des dispositifs légers, souples et à haut rendement [41].

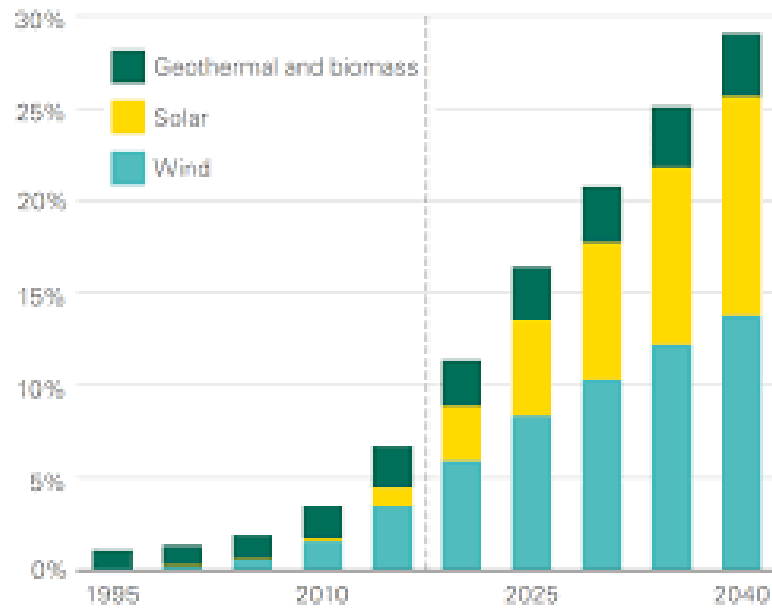


Figure 2.1 : Augmentation annuelle de l'efficacité des cellules solaires à pérovskite [42]

2.2.2 Structure cristalline de la pérovskite

Les matériaux pérovskites partagent une structure cristalline de type ABX_3 , typique de nombreux composés cristallins (figure 2.2). Cette structure est composée :

- D'un cation B (comme Pb^{2+}) situé au centre d'un octaèdre formé par six anions X (halogènes, ex : I^- , Br^-),
- Et d'un cation A (comme $CH_3NH_3^+$ ou Cs^+) occupant les interstices entre les octaèdres [43].

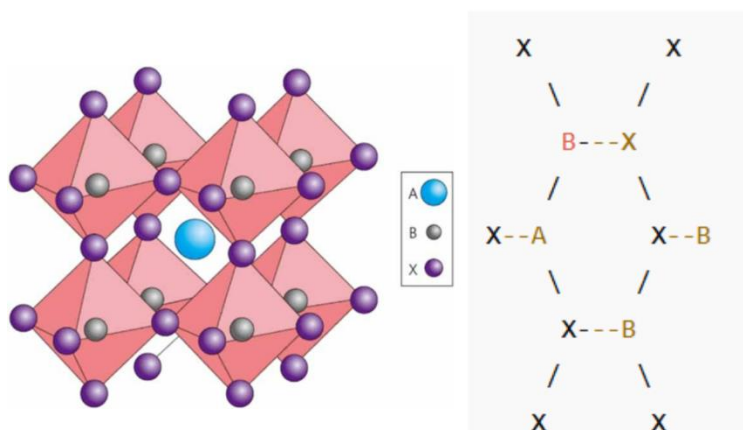


Figure 2.2 : Structure cristalline ABX_3 des matériaux pérovskites et la structure chimique [44]

2.2.3 Structure photovoltaïque d'une cellule à base de pérovskite

Une cellule solaire à base de pérovskite est formée de plusieurs couches fonctionnelles qui collaborent pour absorber la lumière, générer des charges électriques (trous et électrons), puis les diriger vers les électrodes

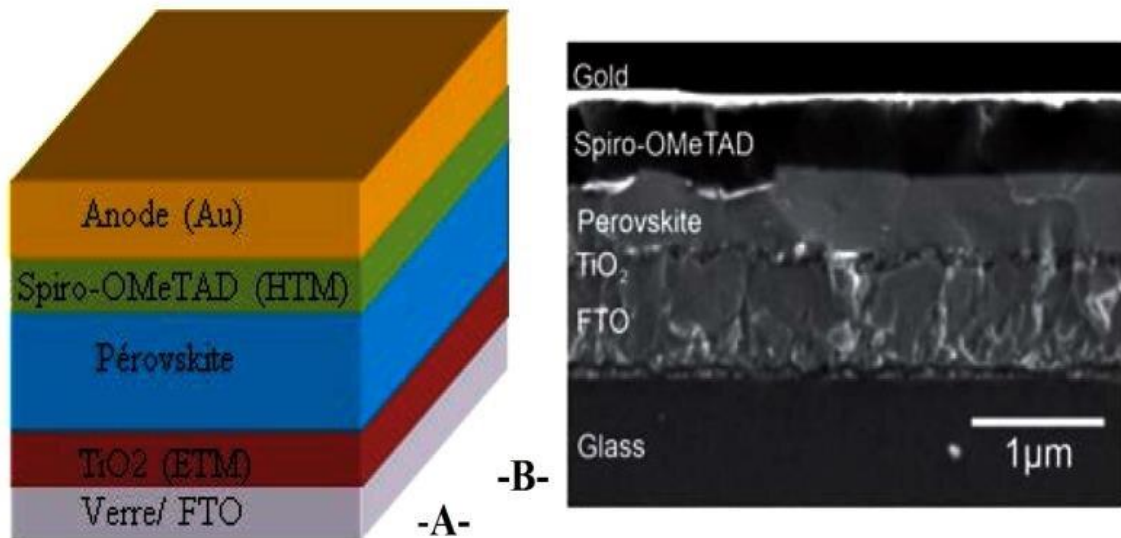


Figure 2.3 : Structure d'une cellule photovoltaïque à pérovskites [45]

1. Substrat transparent à oxyde conducteur (TCO)

Exemple : verre recouvert d'ITO (Indium Tin Oxide) ou FTO (Fluorine-doped Tin Oxide).

Fonction : conduit la lumière et fonctionne comme une électrode (anode).

2. Couche de transport d'électrons (ETL - Electron Transport Layer)

Exemple : TiO₂, SnO₂ ou PCBM.

Fonction : transporte et récupère les électrons de la pérovskite vers l'électrode transparente. Cela empêche également les trous de recombinaison.

3. Couche active pérovskite

Exemple : CH₃NH₃PbI₃ (MAPbI₃) ou variante mixtes (FA, Cs, Br, I, etc.).

Fonction : Absorbe la lumière et crée des paires électron-trou. Très bonne efficacité d'absorption et longue diffusion des porteurs de charge.

4. Couche de transport de trous (HTL - Hole Transport Layer)

Exemple : Spiro-OMeTAD, PTAA, NiOx.

Fonction : transporter les trous créés dans la pérovskite vers l'électrode métallique. Elle bloque également les électrons.

5. Electrode métallique (cathode)

Exemple : or (Au), argent (Ag), carbone.

Rôle : recueille les trous. Deuxième contact électrique [46].

a. Matériaux de transport de trous (HTM)

En effet, les matériaux de transport de trous (HTM), qui participent donc à l'extraction et au transport efficace des charges positives (trous) engendrées par la lumière, sont essentiels pour les cellules solaires à pérovskite. En revanche, ces HTM se placent entre la couche de pérovskite et l'électrode métallique et réalisent aussi la séparation physique entre ces différentes couches notamment pour éviter la recombinaison des charges mais aussi pour améliorer la stabilité de l'ensemble du dispositif [47].

Deux grandes catégories peuvent être utilisées pour classer les HTM :

- Matériaux organiques HTM : Des matériaux comme le Spiro-OMeTAD et le PTAA sont largement utilisés en raison de leur bonne compatibilité énergétique et de leur facilité de traitement. Ils peuvent cependant présenter des inconvénients tels qu'une stabilité limitée et le besoin de dopants, ce qui pourrait réduire la durabilité à long terme des cellules.
- Matériaux inorganiques HTM : Les matériaux présentant une stabilité thermique et chimique supérieure comprennent NiO_x , CuSCN et CuI . Par exemple, NiO_x est connu pour sa transparence optique, sa stabilité chimique et sa compatibilité avec les topologies inversées (p-i-n).

○

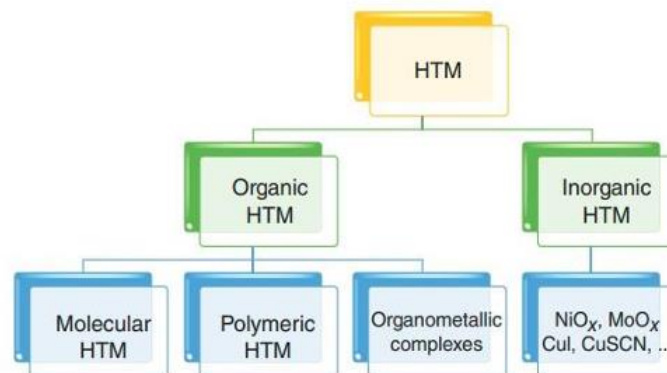


Figure 2.4 : Matériaux HTM

b. Matériaux de transport d'électron (ETM)

Dans les cellules solaires à pérovskite, les éléments de transport d'électrons (ETM) sont des pièces maîtresses. Ils favorisent la collecte et le déplacement des électrons produits par la lumière de la couche de pérovskite vers l'électrode collectrice, tout en empêchant les trous pour réduire les recombinaisons non radiatives.

Un bon ETM doit démontrer une excellente mobilité électronique, une concordance énergétique favorable avec la bande de conduction de la pérovskite, une grande transparence optique pour faciliter le passage lumineux, et une stabilité chimique et thermique pour garantir la longévité du composant.

Parmi les matériaux couramment utilisés comme ETM, on trouve :

- TiO_2 (dioxyde de titane) : un matériau couramment utilisé pour sa stabilité et son positionnement énergétique adéquat, malgré le fait que sa mobilité électronique limitée et sa vulnérabilité aux dommages UV puissent entraver ses capacités.
- SnO_2 (dioxyde d'étain) : présente une mobilité électronique supérieure au TiO_2 et une transparence améliorée, ce qui en fait une option intéressante.
- ZnO (oxyde de zinc) : présente une large bande interdite et une excellente mobilité électronique, mais sa réaction chimique avec la pérovskite peut compromettre sa stabilité.

Matériaux contenant du fullerène (tel que le PCBM) : généralement employés dans les configurations inversées (p-i-n), ces matériaux présentent une remarquable sélectivité électronique et une recombinaison faible, bien que leur prix et leur stabilité puissent constituer des obstacles.

Le matériau ETM est sélectionné en fonction de l'architecture particulière de la cellule solaire (n-i-p ou p-i-n), des techniques de production, ainsi que des critères de performance et de durabilité. Il est également primordial de concevoir les interfaces entre la pérovskite et l'ETM pour réduire au minimum les pertes dues à la recombinaison et optimiser le rendement de conversion.[48]

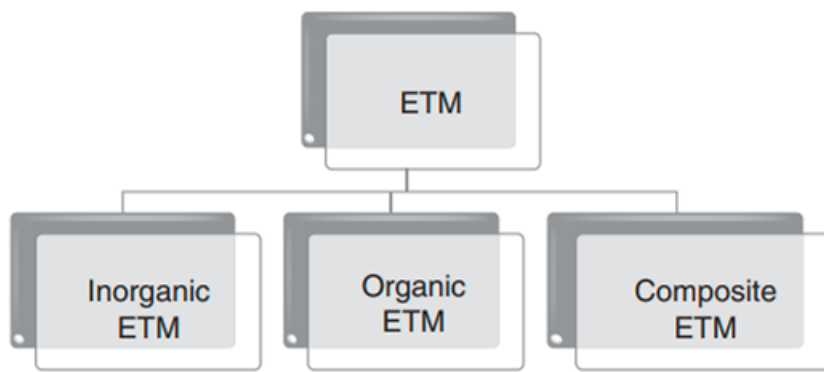


Figure 2.5 : Matériaux ETM

2.2.4. Les avantages et les inconvénients de la pérovskite

Les avantages

- Rendement élevé : En milieu de laboratoire, ces cellules ont réalisé des rendements dépassant les 25 %, se mesurant avec les meilleures cellules en silicium. Des configurations tandem pérovskite-silicium ont même réussi à atteindre une efficacité de 29,8 %.
- Coût de production réduit : La production de cellules en pérovskite exige moins d'énergie et repose sur des matériaux plus abordables que le silicium, ce qui pourrait abaisser le coût des panneaux solaires.
- Flexibilité et légèreté : Des cellules à pérovskite peuvent être fabriquées sur des substrats flexibles, versant à leur intégration dans des surfaces diverses, y compris les toitures complexes et les vêtements connectés.
- Fabrication simplifiée : Les procédés de fabrication, tels que le dépôt par spin-coating, sont plus simples et moins coûteux, facilitant une production à grande échelle.[49]

Les inconvénients

- Les pérovskites sont très sensibles à des éléments environnementaux comme l'humidité, la lumière, la chaleur et l'oxygène. Cette instabilité entraîne leur détérioration progressive, ce qui exige l'implémentation de technologies de protection et de stabilisation afin de faciliter leur déploiement à grande envergure.
- Les composés pérovskites les plus efficaces pour la conversion photovoltaïque sont souvent à base de plomb, un élément notoire pour sa nature neurotoxique. Cette

situation suscite des inquiétudes écologiques et sanitaires, poussant la recherche à chercher des options moins toxiques.

- Bien que les cellules solaires à pérovskite présentent un potentiel encourageant, elles ne sont pas encore complètement prêtes pour une production industrielle massive, du fait des défis associés à leur stabilité, leur longévité et aux processus de fabrication [50].

2.3 Les cellules solaires à base de pérovskite Sans plomb

L'énergie solaire constitue aujourd'hui l'une des principales alternatives durables aux sources d'énergie conventionnelles. Les cellules photovoltaïques au silicium, bien qu'efficaces et largement utilisées, semblent atteindre un plafond technologique en termes de rendement. Pour surmonter cette limite, l'architecture en tandem associant deux cellules solaires superposées permet d'exploiter de manière plus étendue le spectre solaire.

Dans cette optique, les pérovskites sans plomb, et plus particulièrement le composé $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, suscitent un intérêt croissant. Ce matériau combine faible toxicité, bonne stabilité chimique et compatibilité avec le silicium, ce qui en fait un candidat sérieux pour les dispositifs photovoltaïques en tandem. Le présent chapitre s'intéresse aux caractéristiques fondamentales de ce matériau, ainsi qu'à son intégration potentielle dans les cellules tandem.

2.3.1 Structure cristalline du $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

Le $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ est un composé pérovskite de formule $\text{A}_2\text{BB}'\text{X}_6$, où $\text{A} = \text{Cs}^+$, $\text{B} = \text{Ag}^+$, $\text{B}' = \text{Bi}^{3+}$ et $\text{X} = \text{Br}^-$. Il adopte une structure cristalline cubique dérivée de la structure pérovskite traditionnelle ABX_3 . Dans cette configuration, les cations Ag^+ et Bi^{3+} s'alternent dans le réseau octaédrique, réduisant la distorsion et favorisant une stabilité élevée. Sa stabilité est renforcée par l'absence d'éléments organiques volatils, contrairement aux pérovskites hybrides [51].

2.3.2 Propriétés optiques

Le $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ présente une bande interdite indirecte variant entre 1.64 eV à plus de 2 eV selon les traitements appliqués (hydrogénation, dopage, etc.). Cette bande relativement large limite quelque peu l'absorption du spectre solaire, mais elle est compensée par une forte stabilité thermique et environnementale. Des études ont montré que le courant de court-circuit (J_{sc}) et le rendement quantique externe (EQE) augmentent significativement en optimisant la couche absorbante et les couches de transport [52].

2.3.3 Propriétés électroniques

Ce matériau se distingue par une mobilité des porteurs relativement faible, autour de $9\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ pour les électrons et les trous, et une durée de vie des porteurs pouvant atteindre 40ns après traitement. La présence de défauts profonds dans la bande interdite constitue un défi pour l'amélioration du rendement, car ils favorisent la recombinaison non radiative des porteurs [53].

2.4 Architecture des cellules solaires à base de $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

2.4.1 Structure typique de la cellule

La cellule solaire typique basée sur $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ adopte une structure en couches superposées de type n-i-p, par exemple :

FTO/ ZnO / $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ / NiO / Au , où :

- FTO : oxyde conducteur transparent,
- ZnO : couche de transport d'électrons (ETL).
- $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$: Couche Pérovskite absorbante.
- NiO : couche de transport de trous (HTL).
- Au : électrode arrière.

Cette structure a été choisie pour son bon alignement des bandes et sa compatibilité énergétique [54].



Figure 2.6: Schéma d'une cellule solaire à base de pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$

2.4.2 Rôle des couches de transport

- ETL (ZnO, TiO₂, SnO₂...) : ces matériaux sont choisis pour leur mobilité électronique élevée, leur alignement favorable avec le Cs₂AgBiBr₆, et leur stabilité chimique. ZnO a montré un bon compromis entre performance et durabilité environnementale.
- HTL (NiO, Cu₂O, Spiro-OMeTAD...) : parmi ces matériaux, NiO s'est distingué par son large gap (~3.6 eV), sa stabilité et sa capacité à favoriser une bonne extraction des trous tout en bloquant les électrons [55].

2.5 Avantages et inconvénients des cellules Cs₂AgBiBr₆

- **Avantages**
 - Non-toxicité (absence de plomb)
 - Bonne stabilité thermique et chimique
 - Structure cristalline stable et bien définie
 - Compatible avec technologies tandem
- **Inconvénients**
 - Rendement inférieur aux pérovskites au plomb
 - Faible mobilité et durée de vie des porteurs
 - Présence de défauts profonds
 - Large bande interdite (>2 eV selon les conditions)

2.6 Cellules tandem Cs₂AgBiBr₆/ Silicium

L'association d'une cellule supérieure en Cs₂AgBiBr₆ (bande interdite ~2 eV) et d'une cellule inférieure en silicium cristallin ($E_g \sim 1.12$ eV) permet de couvrir une large portion du spectre solaire, optimisant ainsi la génération de porteurs [56].

Deux types de structures tandem sont couramment utilisés :

2.6.1 Architecture à quatre terminaux (4T)

Chaque cellule est fabriquée indépendamment puis empilée mécaniquement. Cette configuration facilite l'optimisation individuelle de chaque sous-cellule, mais peut entraîner des pertes optiques au niveau des interfaces [57].

2.6.2 Architecture à deux terminaux (2T)

Les deux sous-cellules sont intégrées de manière monolithique et connectées en série. Cette approche est plus compacte, mais impose un alignement précis des niveaux d'énergie et une compatibilité électrique rigoureuse entre les deux matériaux [57].

2.7 Conclusion

Les matériaux à base de pérovskite sont une avancée importante dans le photovoltaïque, en raison de leurs impressionnantes propriétés optoélectroniques, de leur bas coût de production et de leur vaste flexibilité de conception. Leur grand potentiel promet une véritable révolution dans les technologies solaires, à la fois dans la recherche que la commercialisation. Il reste cependant plusieurs verrous technologiques, notamment en termes de stabilité environnementale, d'efficacité à grande échelle et de toxicité de plomb liée à l'utilisation. Pour dépasser ces limites, des solutions telles que l'intégration en tandem dans des structures (avec cellules en silicium ou sensibilisées par des colorants), ou la recherche de nouveaux matériaux sans plomb, sont des pistes prometteuses. Ainsi, les cellules solaires à pérovskite constituent une voie d'avenir dans la quête de solutions énergétiques durables, à condition que les défis actuels relevés soient levés par des efforts concertés en recherche et développement.

Chapitre 3

Résultats de Simulation

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons les résultats de la simulation numérique d'une cellule solaire à base de pérovskite sans plomb, utilisant le composé double halogénure $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$. Ce matériau, considéré comme une alternative prometteuse aux pérovskites au plomb en raison de sa non-toxicité et de sa stabilité chimique, a été modélisé à l'aide du logiciel **COMSOL Multiphysics**.

L'objectif est d'évaluer les performances photovoltaïques de cette cellule en analysant l'impact de plusieurs paramètres structuraux telles que l'épaisseur des couches actives, la durée de vie des porteurs et les propriétés optoélectroniques des matériaux constitutifs. Les grandeurs caractéristiques étudiées sont : la densité de courant de court-circuit (J_{cc}), la tension de circuit ouvert (V_{oc}), la puissance maximale (P_{max}) et le rendement de conversion (η).

Cette analyse permettra d'identifier les configurations optimales pouvant améliorer l'efficacité des cellules solaires à base de pérovskite double sans plomb.

3.2 Présentation du logiciel COMSOL Multiphysics

COMSOL Multiphysics est un environnement de simulation numérique basé sur la méthode des éléments finis (FEM), conçu pour modéliser des phénomènes physiques complexes dans divers domaines de l'ingénierie et des sciences. Il permet d'étudier des phénomènes couplés, par exemple, l'interaction entre la thermique, l'électromagnétisme, la mécanique des structures et la chimie dans une approche dite multiphysique.

L'un des principaux atouts de COMSOL est sa flexibilité dans la création de modèles personnalisés grâce à une interface graphique intuitive et à la possibilité d'ajouter des équations physiques personnalisées. Il est largement utilisé dans les domaines de la microélectronique, des dispositifs optoélectroniques, des capteurs, et notamment dans la simulation des cellules solaires, où il permet d'analyser le transport de charge, l'absorption optique et les pertes d'énergie dans les différentes couches du dispositif [58].

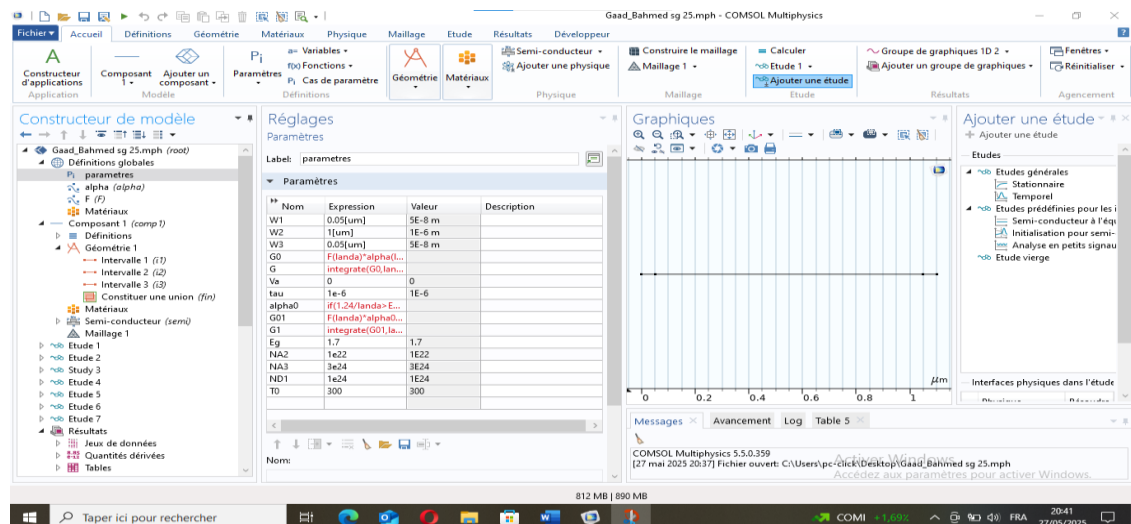


Figure 3.1 : Le logiciel de simulation COMSOL multiphasiques

3.3 Présentation de la cellule étudiée

La cellule solaire étudiée est une structure à base de pérovskite double sans plomb, plus précisément le composé $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$.

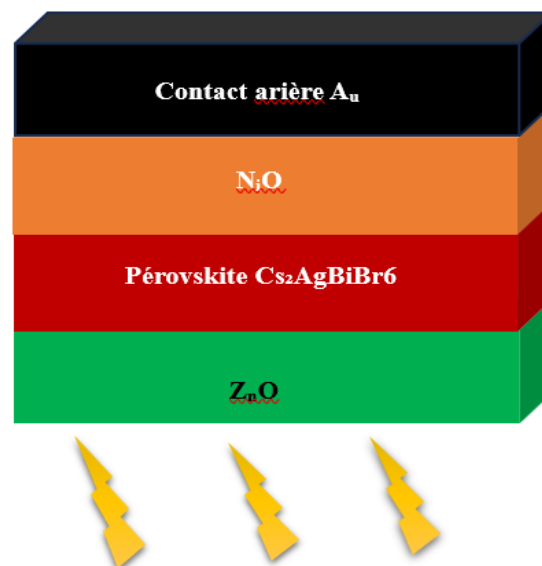


Figure 3.2 : schéma de la structure de la cellule solaire $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$.

La structure simulée dans COMSOL Multiphysics est une cellule en couches minces, comprenant principalement les éléments suivants :

- Couche de transport d'électrons (ETL) : ZnO.
- Couche absorbante : $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, où se produit l'absorption des photons et la génération des paires électron-trou.
- Couche de transport de trous (HTL) : NiO.
- Électrode arrière : souvent un métal comme l'Or (Au).

La simulation repose sur une modélisation multiphysique prenant en compte :

- Le transport des porteurs de charge (électrons et trous),
- La génération photo-induite
- Les effets de recombinaison,
- Les caractéristiques électriques sous illumination [58]

Les paramètres physiques des couches utilisées dans la simulation sont listés dans le tableau 3.1 :

Tableau 3.1 paramètres utilisés dans la simulation

Paramètre	Cs ₂ AgBiBr ₆ (Pérovskite)	NiO (HTM)	ZnO (ETL)
W (μm)	1 (variable)	0.05	0.05
E _g (eV)	1.7	3.6	3.47
χ (eV)	4.19	1.6	4.5
τ (s)	10 ⁻⁶ (variable)	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷
N _D (cm ⁻³)	–	–	10 ¹⁸
N _A (cm ⁻³)	10 ¹⁶	3.10 ¹⁸	–
μ _n (cm ² /V.s)	0.49	2.8	25
μ _p (cm ² /V.s)	11.81	2.8	100
N _C (cm ⁻³)	10 ¹⁹	2.5.10 ²¹	2.2.10 ¹⁸
N _V (cm ⁻³)	10 ¹⁹	2.5.10 ²¹	1.8.10 ¹⁹
ε _r	5.8	11.7	9

Signification des symboles

W : Epaisseur de la couche

E_g : Energie de gap

χ : Affinité électronique

τ : Durée de vie des électrons et des trous

N_A : Concentration de dopage accepteur

N_D : Concentration de dopage donneur

N_C : Densité effective d'états dans la bande de conduction

N_V : Densité effective d'états dans la bande de valence

μ_n/μ_p : Mobilité des électrons et des trous

ε_r : Permittivité relative

3.5 Influence de l'épaisseur de la couche pérovskite W

3.5.1 Caractéristiques courant-tension $J(V)$

La couche pérovskite est l'élément actif principal de la cellule solaire, responsable de l'absorption des photons. En faisant varier son épaisseur (W_2) de $0,5 \mu\text{m}$ à $4 \mu\text{m}$, on observe plusieurs comportements notables.

Les courbes courant-tension (J - V) indiquent que le courant de court-circuit (J_{cc}) augmente avec l'épaisseur. Cela s'explique par le fait qu'une plus grande épaisseur permet une absorption accrue du rayonnement solaire, générant davantage de porteurs de charge.

La tension de circuit ouvert (V_{co}), quant à elle, reste stable, ce qui indique que l'épaisseur n'a pas d'impact significatif sur le champ interne ou les recombinaisons à l'interface.

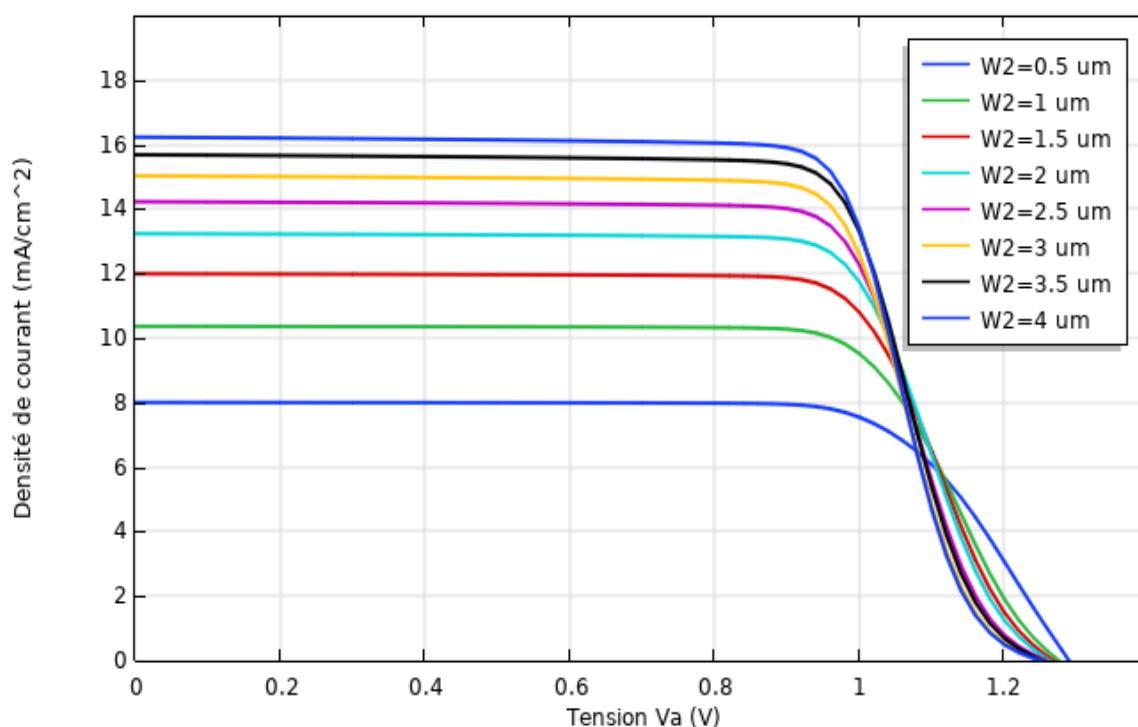


Figure 3.3 Caractéristiques J - V pour différentes épaisseurs de la couche pérovskite (W_2)

3.5.2 Caractéristiques puissance-tension P(V)

Les courbes puissance-tension (P-V) (figure 3.4) montrent que la puissance maximale ($P_{\max}$) augmente avec W_2 jusqu'à une valeur optimale autour de $3,5 \mu\text{m}$. Au-delà de cette valeur, les gains deviennent négligeables.

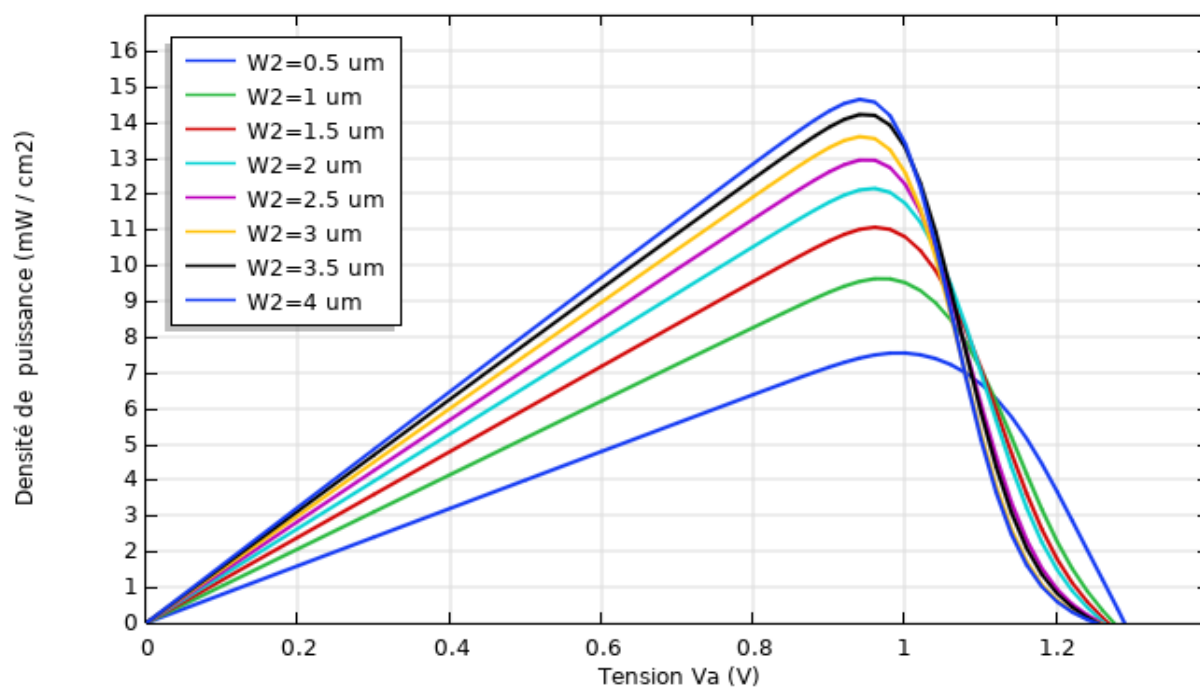


Figure 3.4 Caractéristiques puissance-tension pour différentes épaisseurs de la couche pérovskite (W_2)

3.5.3 Puissance maximale $P_{\max}$ et rendement

La figure (3.5), illustre l'évaluation du rendement de conversion de la cellule solaire en fonction de l'épaisseur de la couche de pérovskite.

Le rendement (η) passe de 7,5% à 14,7%. On note donc que l'épaisseur optimale se situe autour de $3,5 \mu\text{m}$ à $4 \mu\text{m}$, où l'absorption est quasi-complète sans introduire de recombinaisons supplémentaires liées à une couche trop épaisse.

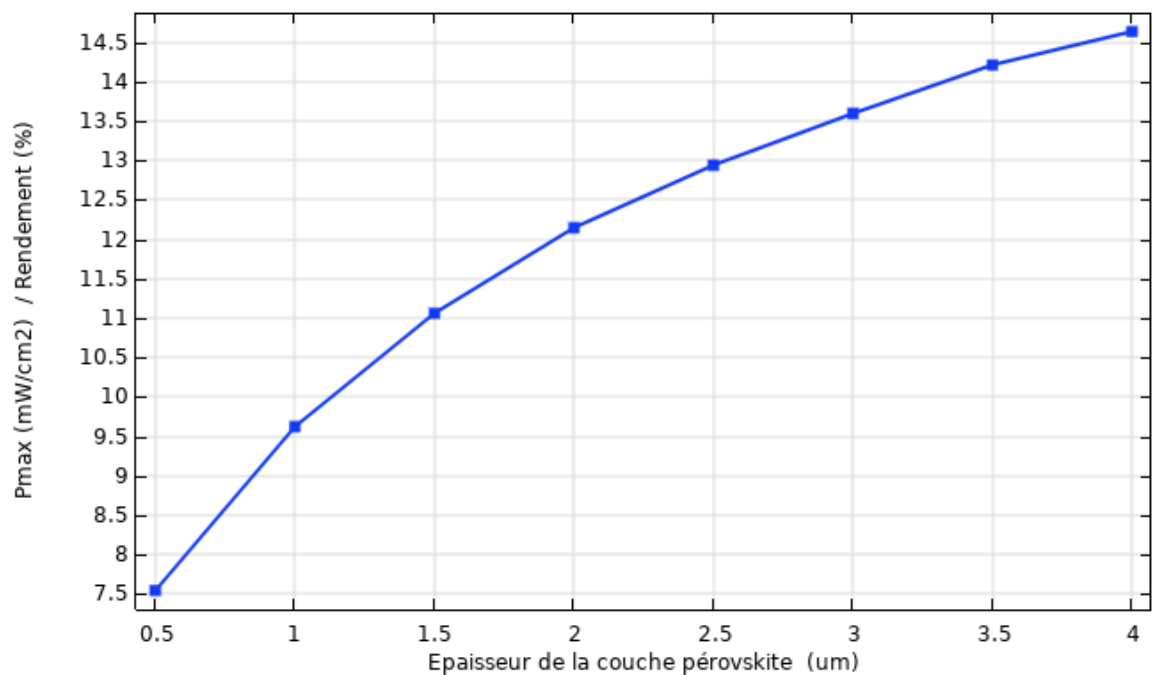


Figure 3.5 Variation de la puissance maximale et du rendement en fonction de W_2

3.6 Influence du dopage donneur dans la couche ZnO (N_{D1})

3.6.1 Caractéristiques courant-tension J(V)

ZnO joue un rôle essentiel comme couche de transport des électrons (ETL). Son dopage (N_{D1}) influence la conductivité électrique et l'extraction des électrons vers l'électrode. Dans la simulation (figure 3.6), N_{D1} est varié entre 10^{22} et 10^{25} m^{-3} . On observe que les courbes J-V restent quasiment inchangées. Ni V_{oc} ni J_{cc} ne montre de variation notable. Cela signifie que dans cette gamme de dopage, la couche ZnO n'est pas un facteur limitant. Sa capacité à transporter les électrons est déjà suffisante, et augmenter davantage le dopage ne change pas la performance globale.

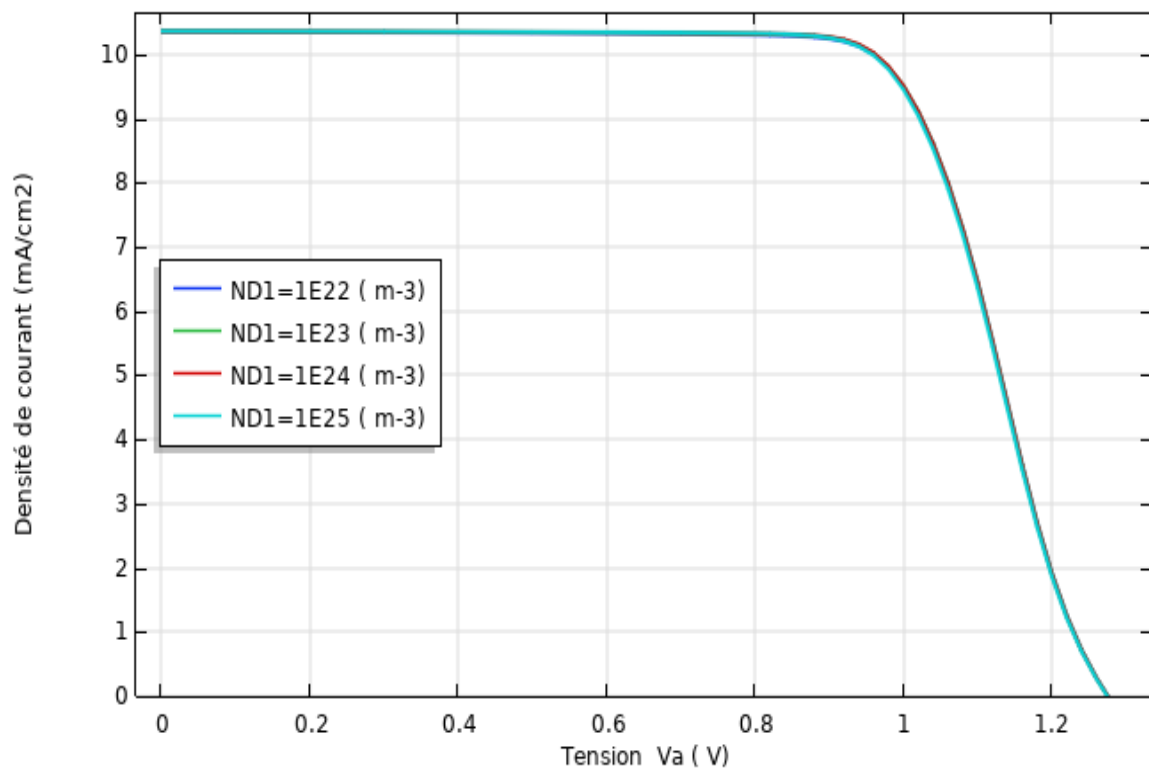


Figure 3.6 Caractéristiques J-V pour différents dopages de la couche ZnO

3.7 Influence du dopage accepteur dans la couche pérovskite

3.7.1 Caractéristiques courant-tension J(V)

La couche pérovskite $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, en tant que matériau photoactif, joue un rôle clé dans l'absorption du rayonnement lumineux et la génération des paires électron-trou. Dans le cadre de cette étude, la concentration du dopage accepteur, notée N_{A2} , a été systématiquement augmentée de 10^{20} à 10^{23} m^{-3} afin d'analyser son influence sur les performances photovoltaïques de la cellule, (figure 3.7). Le courant de court-circuit montre une légère baisse avec l'augmentation de N_{A2} . Cette tendance est principalement due à :

- Une recombinaison accrue des porteurs dans la couche pérovskite à forte densité de dopage, provoquant une perte d'efficacité dans la collecte des charges.
- Une réduction de la diffusion des porteurs minoritaires, ce qui diminue leur probabilité d'atteindre les interfaces collectrices.

La tension V_{co} augmente avec N_{A2} . En effet, un dopage plus élevé renforce le champ électrique interne, améliorant la séparation des porteurs et diminuant les recombinaisons interfaciales.

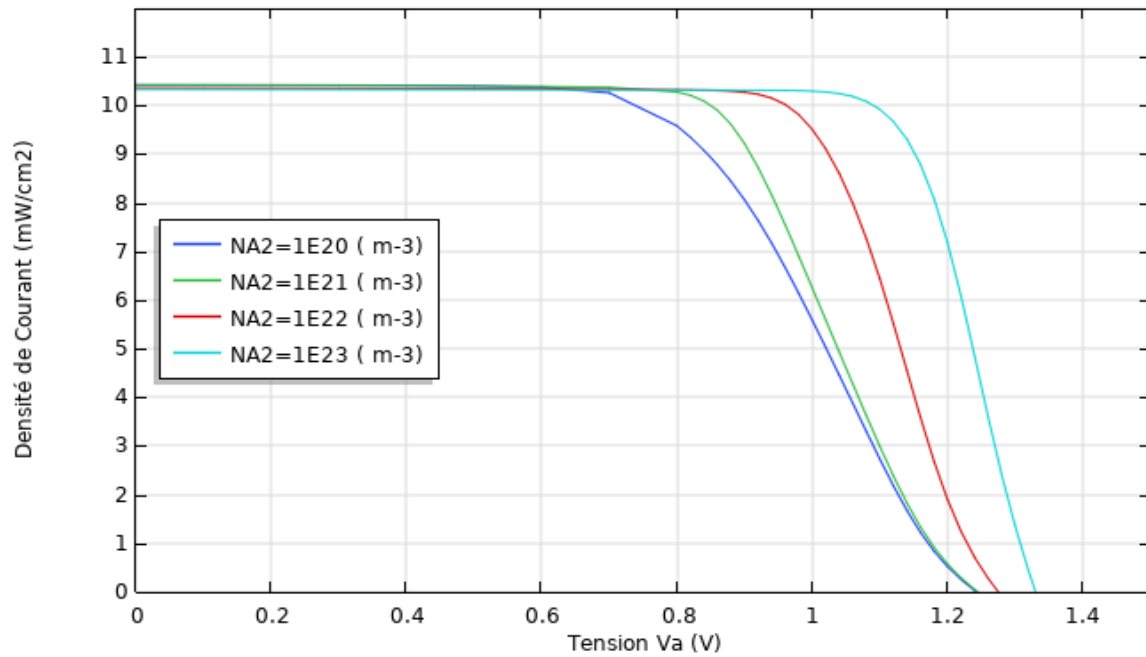


Figure 3.7 Caractéristiques courant -tension pour différents dopages de la couche pérovskite

3.7.2 Caractéristiques puissance-tension $P(V)$

La Figure (3.8) montre la variation de la densité de puissance en fonction de la tension V_a pour différents niveaux de dopage de la couche pérovskite.

On observe clairement que la densité de puissance maximale augmente avec l'augmentation du dopage. La puissance maximale atteint environ 11 mW/cm^2 pour $N_{A2} = 10^{23} \text{ m}^{-3}$. Cela suggère qu'un niveau de dopage optimal permet d'équilibrer séparation efficace des porteurs et pertes par recombinaison modérées.

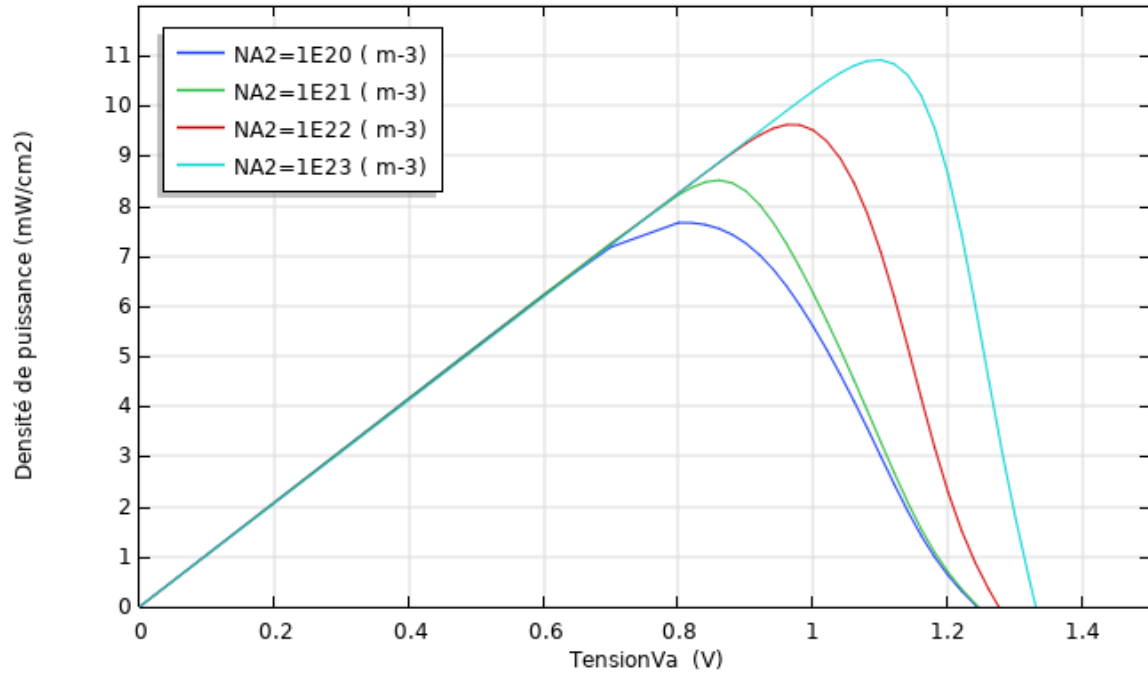


Figure 3.8 Caractéristiques puissance-tension pour différents dopages de la couche pérovskite

3.7.3 Puissance maximale P_{max} et rendement

La figure 3.9 montre l'évolution de la puissance maximale (P_{max}) et le rendement en fonction de la concentration de dopage accepteur N_{A2} dans la couche pérovskite.

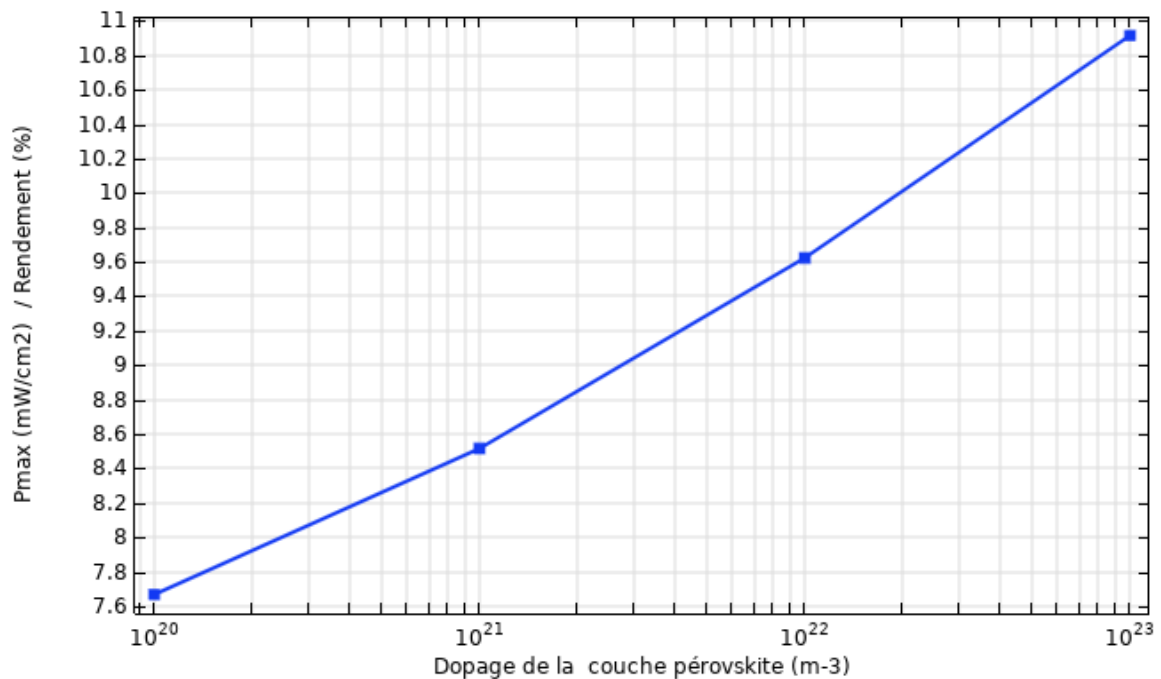


Figure 3.9 Variation de la puissance maximale et le rendement en fonction du dopage de la couche pérovskite

Le rendement de conversion (η) progresse de 7,6 % à 10,8 % entre les valeurs extrêmes de N_{A2} . Cette amélioration traduit une performance plus robuste en extraction et transport des charges.

3.8 Influence du dopage accepteur dans la couche NiO (N_{A3})

3.8.1 Caractéristiques courant-tension J(V)

La couche de NiO, utilisée comme matériau transporteur de trous (HTM), joue un rôle essentiel dans l'extraction et le transport des trous vers l'électrode arrière de la cellule photovoltaïque. Dans cette étude, la concentration du dopage accepteur, notée N_{A3} , est modulée entre 1×10^{22} et $1 \times 10^{25} \text{ m}^{-3}$ afin d'évaluer son impact sur les performances électriques et le comportement global de la cellule (figure 3.10)

La figure montre l'évolution des courbes J-V pour différentes valeurs du dopage accepteur N_{A3} dans la couche de NiO. On constate que lorsque N_{A3} augmente de 10^{22} à 10^{25} m^{-3} , la densité de courant de court-circuit reste pratiquement constante autour de $10,5 \text{ mA/cm}^2$, et la tension de circuit ouvert V_{co} reste constante, d'environ 1,3 V. par contre le facteur de forme s'améliore.

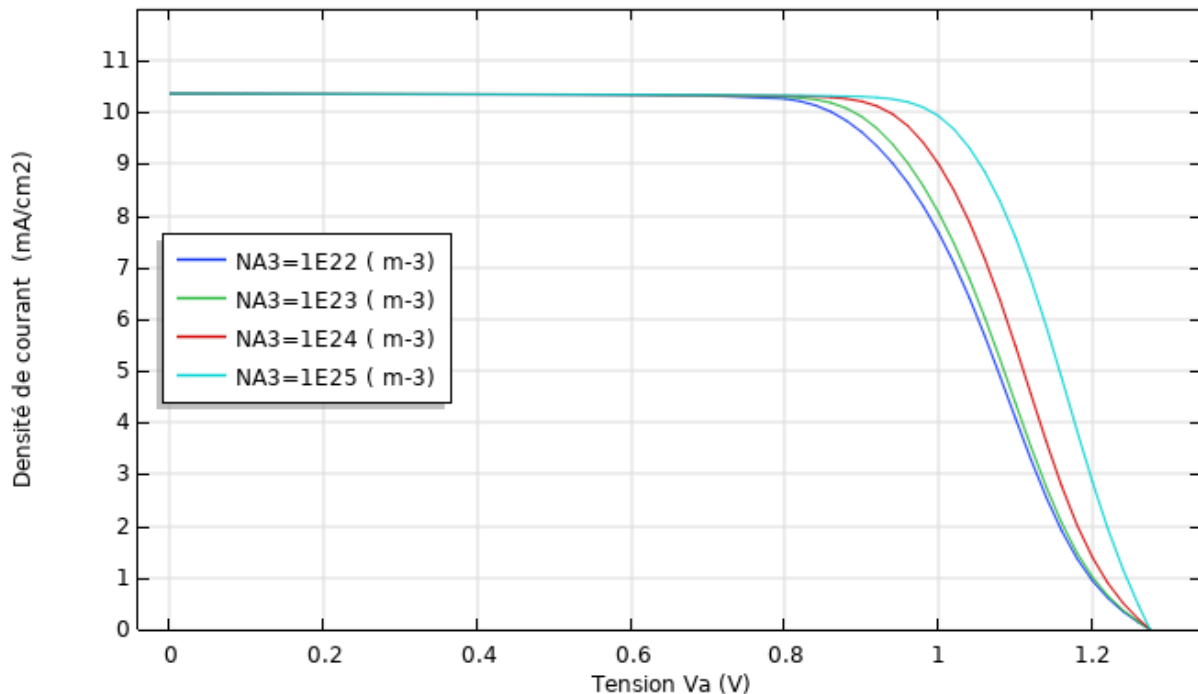


Figure 3.10 Caractéristiques courant-tension pour différents dopages la couche NiO

3.8.2 Caractéristiques puissance-tension P(V)

La figure 3.11 présente l'évolution de la densité de puissance en fonction de la tension appliquée V_a pour différentes concentrations de dopage accepteur N_{A3} dans la couche de NiO.

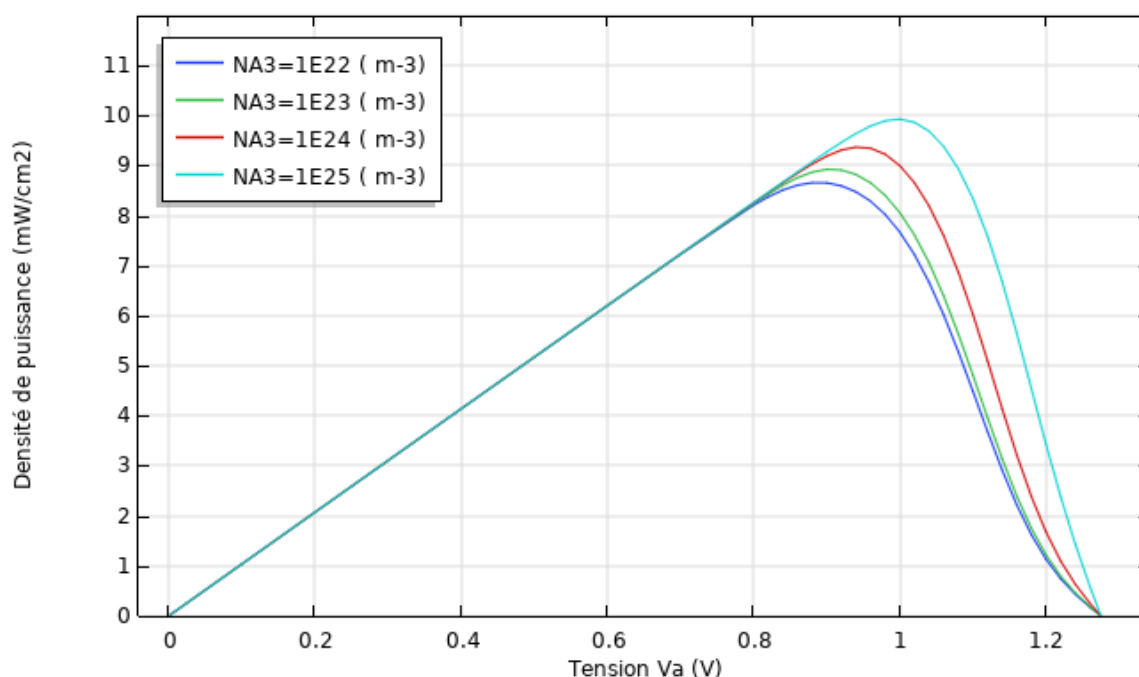


Figure 3.11 Caractéristiques puissance -tension pour différents dopages la couche NiO

On remarque que l'augmentation du dopage accepteur N_{A3} dans la couche de NiO entraîne une augmentation progressive de la puissance maximale (P_{max}). Cela traduit une amélioration du rendement de la cellule grâce à une meilleure extraction des charges et une réduction des recombinaisons. Plus N_{A3} augmente et plus la puissance maximale délivrée par la cellule s'améliore, atteignant environ 10 mW/cm² à une tension de 1,06 V pour $N_{A3} = 10^{25} \text{ m}^{-3}$.

3.8.3 Puissance maximale P_{max} et rendement

La Figure 3.12 représente l'évolution du rendement global de la cellule solaire en fonction du niveau de dopage de la couche NiO.

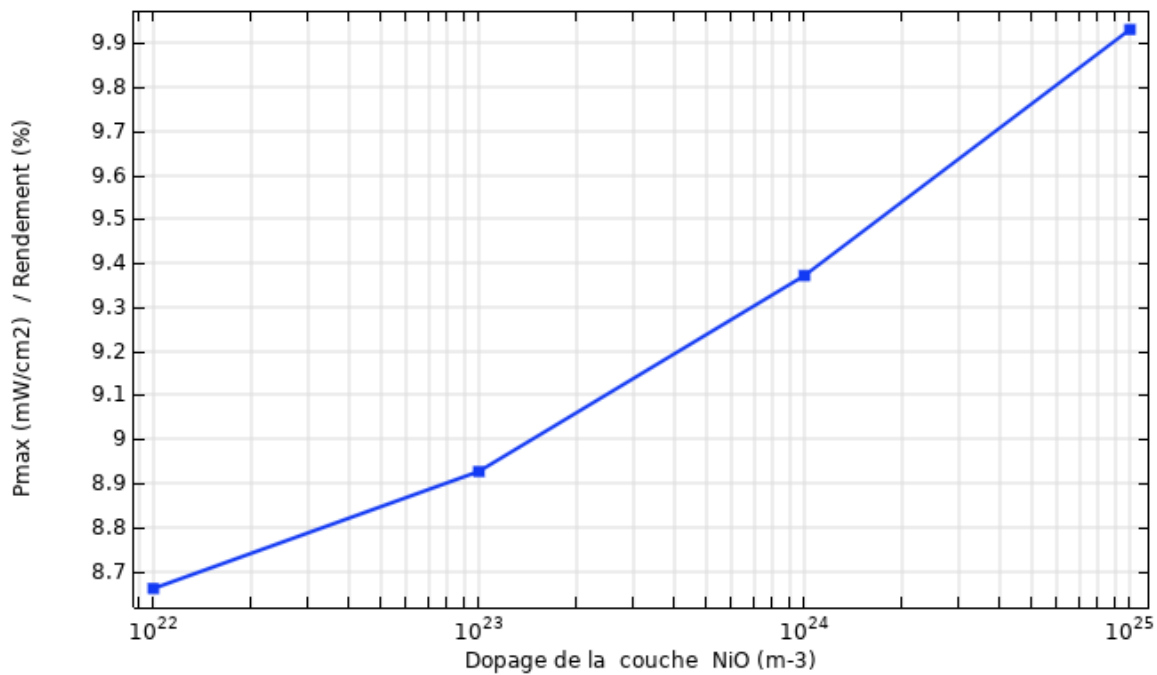


Figure 3.12 Variation de la puissance maximale et du rendement en fonction du dopage de la couche NiO

L'augmentation de la concentration de dopage accepteur N_{A3} dans la couche de NiO entraîne une amélioration nette de la puissance maximale P_{max} et du rendement de la cellule solaire. Comme le montre la figure, ces deux paramètres évoluent de manière quasi linéaire avec N_{A3} , passant d'environ 8,7 % à 9,9 % lorsque le dopage varie de 10^{22} à $10^{25} m^{-3}$. Cette progression s'explique par une meilleure conductivité de la couche HTM, qui facilite l'extraction des trous tout en réduisant les pertes ohmiques. En parallèle, l'interface NiO devient plus sélective, limitant les recombinaisons et améliorant la collecte des charges, ce qui se traduit directement par une hausse du rendement énergétique du dispositif

3.9 Influence de la durée de vie des porteurs (τ)

3.9.1 Caractéristiques courant-tension J(V)

La durée de vie des porteurs dans la couche pérovskite (τ) est un facteur critique qui détermine la probabilité qu'un porteur généré atteigne l'électrode avant de se recombiner, (figure 3.13)

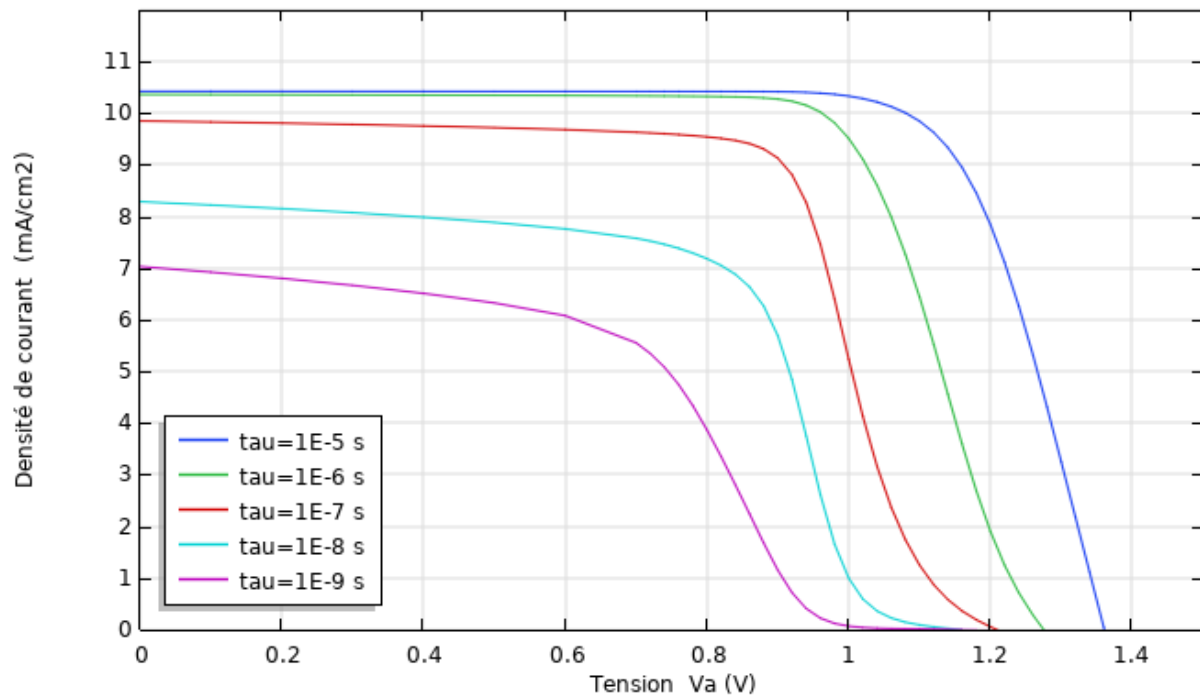


Figure 3.13 Caractéristiques courant-tension pour différentes valeurs de la durée de vie τ

En faisant varier τ de 10^{-5} s à 10^{-9} s, les courbes J-V révèlent que V_{co} et J_{cc} diminuent fortement pour les faibles valeurs de τ . Cela est dû à une augmentation significative des pertes par recombinaison.

3.9.2 Caractéristiques puissance-tension $P(V)$

La figure ci-dessous (3.14) illustre l'évolution de la densité de puissance (mW/cm^2) en fonction de la tension (V) pour différentes valeurs de la durée de vie des porteurs τ dans la couche absorbante de

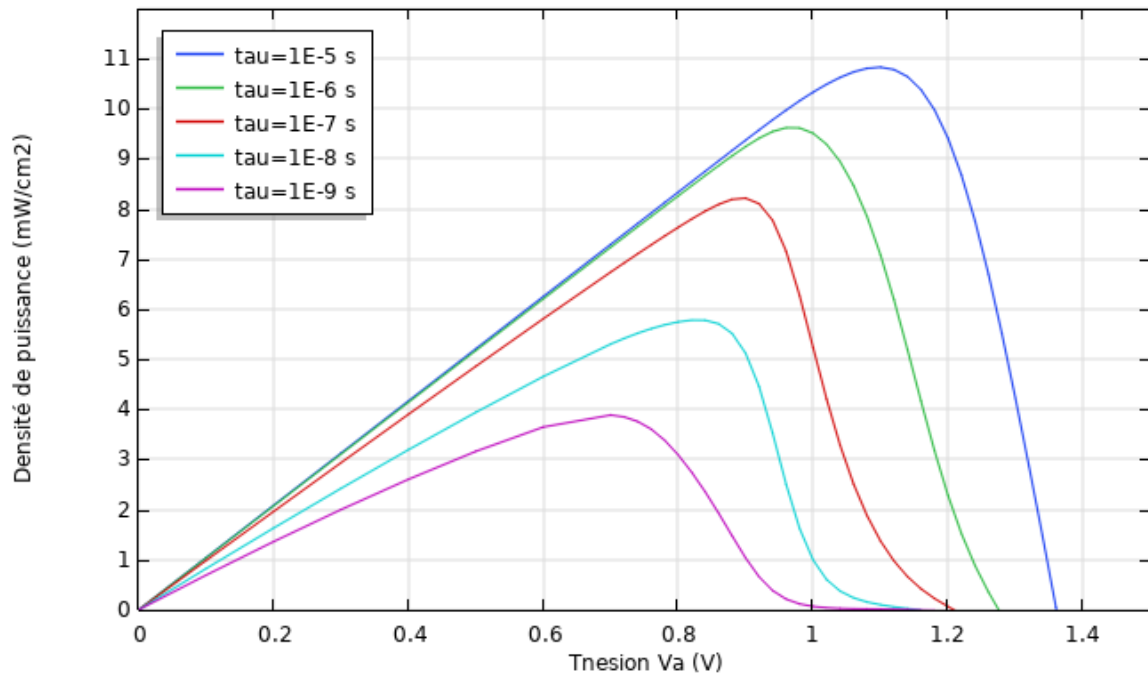


Figure 3.14 Caractéristiques puissance-tension pour différentes valeurs de la durée de vie tau

On observe clairement que la densité de puissance maximale augmente significativement avec l'augmentation de la durée de vie τ des porteurs. Cela s'explique par le fait qu'une durée de vie plus longue réduit les recombinaisons de porteurs avant leur collecte, ce qui favorise la génération efficace de courant et par conséquent, de puissance.

Ainsi, plus la durée de vie est faible, plus les recombinaisons augmentent, entraînant une réduction du courant généré, une baisse du rendement et donc une chute importante de la puissance maximale délivrée par la cellule

3.9.1 Puissance maximale $P_{\max}$ et rendement

Les courbes P-V (figure 3.15) montrent que la puissance maximale décroît à mesure que τ augmente, et le rendement passe de 4,2% à 10,8%.

Il est donc essentiel que le matériau pérovskite ait une durée de vie des porteurs suffisamment longue pour garantir une conversion efficace de l'énergie solaire.

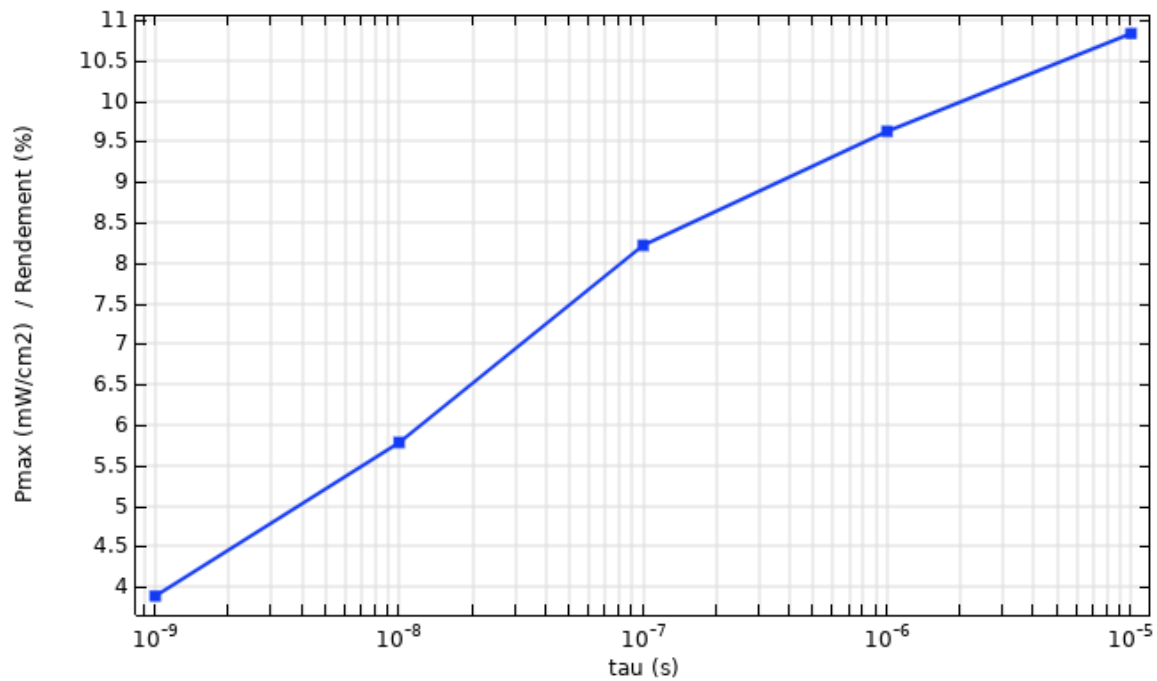


Figure 3.15 Variation de la densité de puissance maximale et du rendement en fonction de tau

3.10 Influence de la température de fonctionnement T

3.10.1 Caractéristiques courant-tension J(V)

La température influence la dynamique des porteurs et les recombinaisons. Lorsque T augmente de 300 K à 450 K, on observe une baisse continue de V_{co} dans les courbes J-V, (figure 3.16).

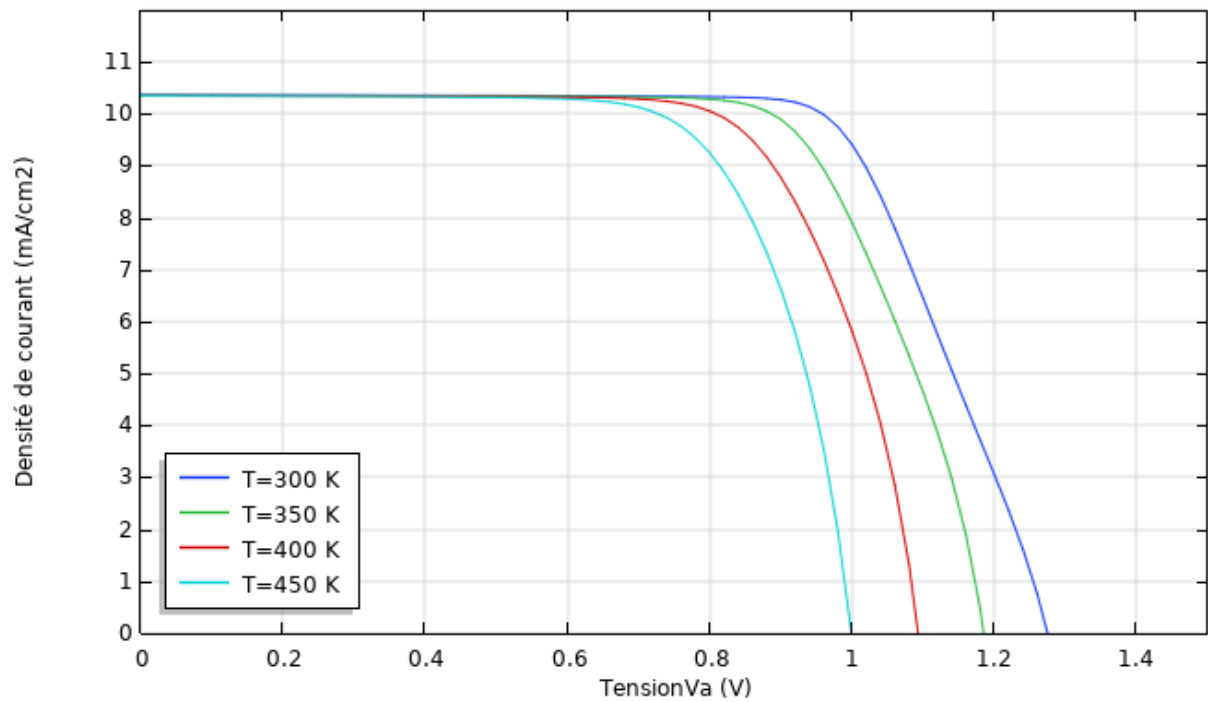


Figure 3.16 Caractéristiques courant-tension pour différentes valeurs de la température

3.10.2 Caractéristiques puissance-tension P(V)

Les courbes P-V (figure 3.17) confirment que la puissance maximale décroît avec la température

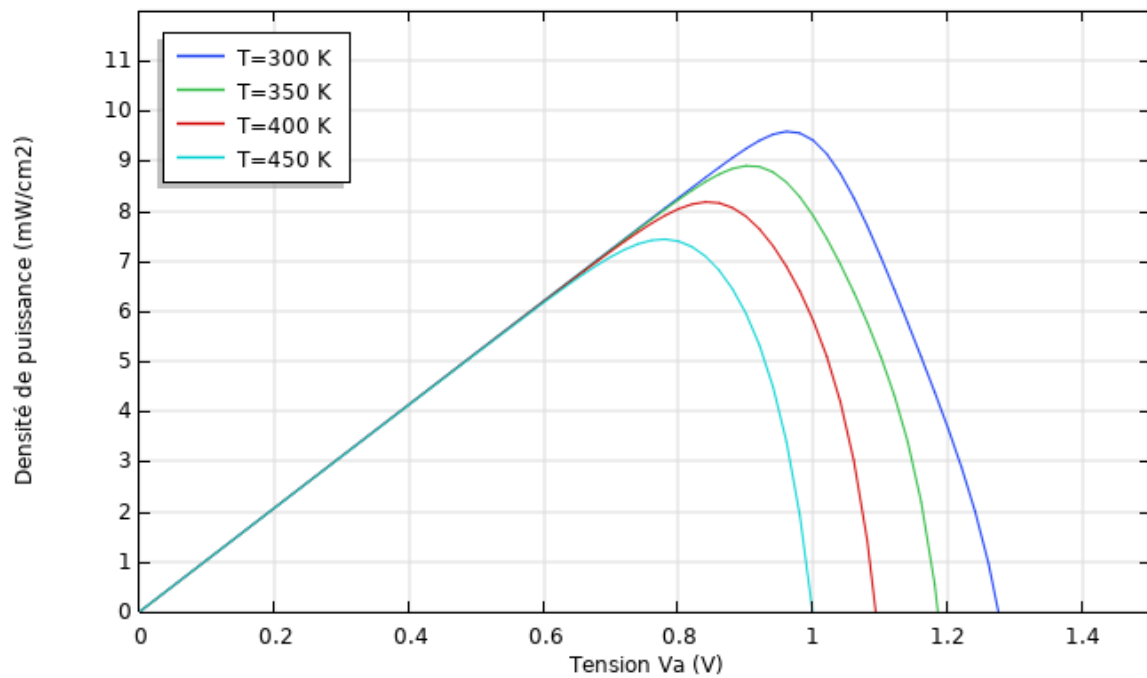


Figure 3.17 Caractéristiques puissance-tension pour différentes valeurs de la température

3.10.3 Puissance maximale $P_{\max}$ et Rendement

Le rendement passe de 9,6% à 7,4%, ce qui montre que la stabilité thermique est un facteur clé pour garantir une performance constante.

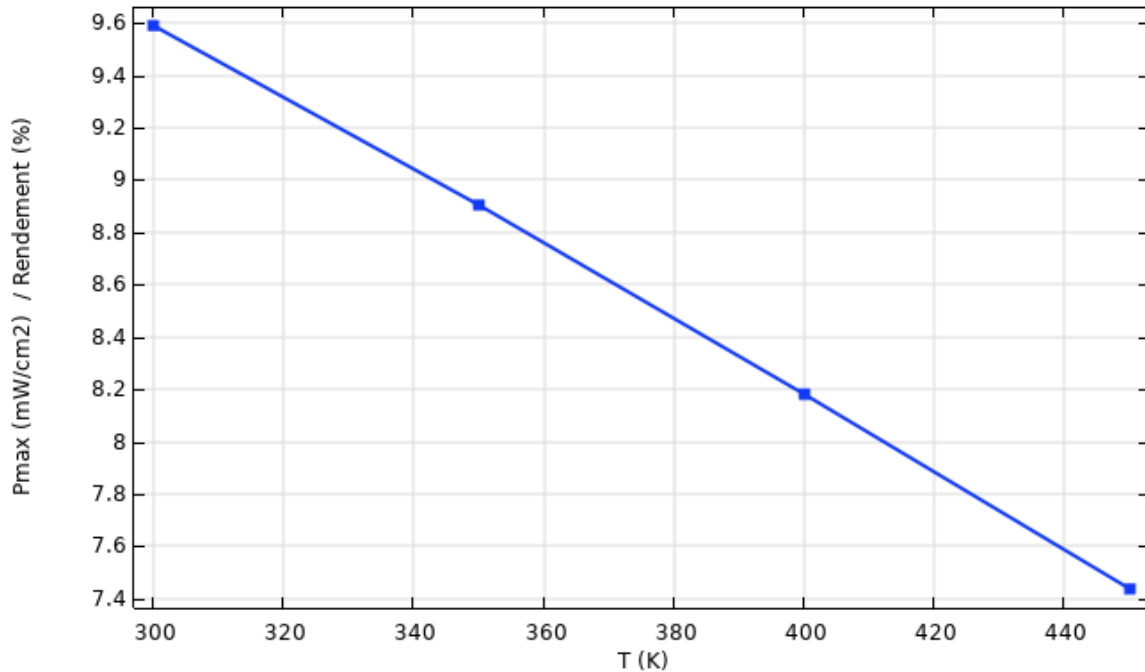


Figure 3.17 Variation de la densité de puissance maximale et du rendement en fonction de la température

Un bon encapsulage thermique ou un fonctionnement en environnement tempéré peut donc considérablement prolonger la durée de vie de la cellule.

3.11 Structure optimisée

Les paramètres de la structure optimisée sont regroupés dans le tableau 3.2

Et les caractéristiques courant-tension et puissance-tension sont représentées sur la figure 3.18

La structure optimisée présente un courant de court-circuit de $16\text{mA}/\text{cm}^2$, une tension de circuit ouvert de 1.3V et un rendement de 17%.

Tableau 3.2 : Paramètres de la structure optimisée

Paramètre	Cs ₂ AgBiBr ₆ (Pérovskite)	NiO (HTM)	ZnO (ETL)
W (μm)	4	0.05	0.05
τ (s)	10 ⁻⁶	10 ⁻⁷	10 ⁻⁷
N _D (cm ⁻³)	–	–	10 ¹⁸
N _A (cm ⁻³)	10 ¹⁷	10 ¹⁹	–

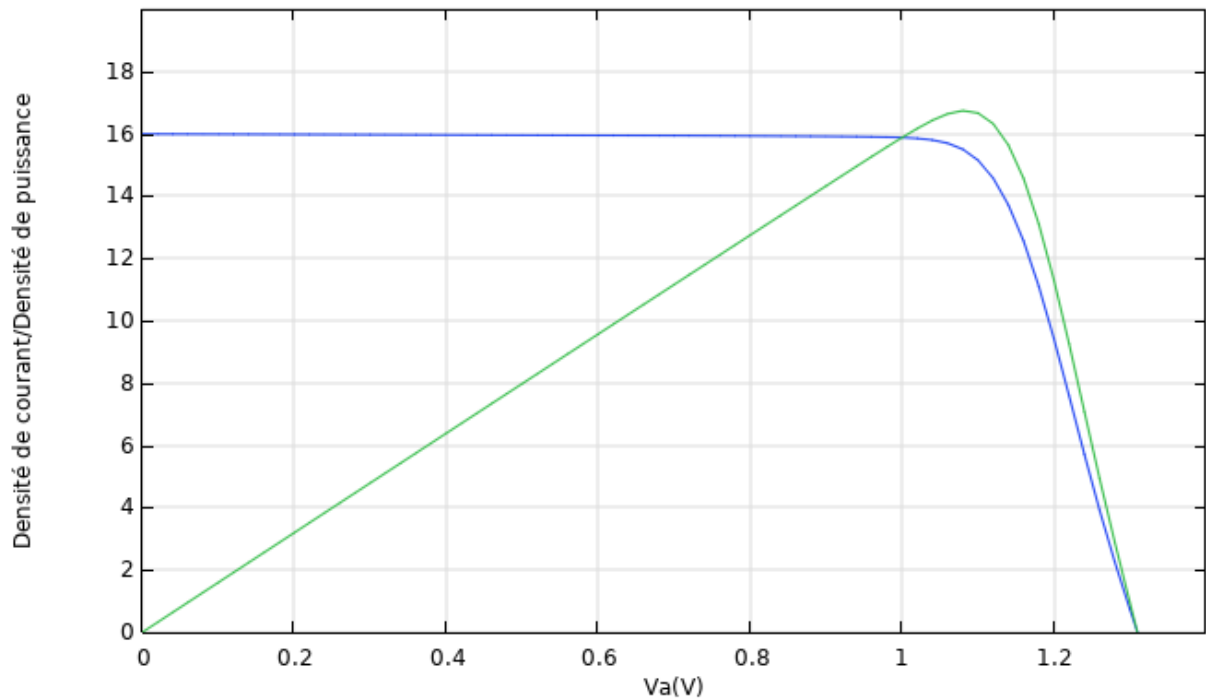


Figure 3.18 Caractéristiques courant-tension et puissance-tension de la structure optimisée

Conclusion

Dans ce travail, nous avons mené une analyse approfondie des performances d'une cellule solaire à base de pérovskite double sans plomb, Cs₂AgBiBr₆, à travers des simulations numériques réalisées avec le logiciel COMSOL Multiphysics. L'étude a porté sur l'influence de plusieurs paramètres clés, telles que l'épaisseur de la couche absorbante, les concentrations de dopage des différentes couches (ZnO, Cs₂AgBiBr₆, NiO), la durée de vie des porteurs et la température de fonctionnement.

Les résultats ont montré que l'optimisation de l'épaisseur de la couche pérovskite (autour de 3,5 à 4 μm) permet une amélioration notable du rendement, atteignant jusqu'à 14,7 %.

De même, le dopage adéquat des couches NiO et $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$ favorise une meilleure séparation des charges et réduit les pertes par recombinaison, contribuant à une hausse significative de la puissance maximale. En revanche, une durée de vie courte des porteurs et des températures élevées dégrade fortement les performances, soulignant l'importance des propriétés intrinsèques du matériau et de la gestion thermique du dispositif.

Ces simulations ont permis d'identifier des configurations optimales et des tendances critiques pour le développement de cellules photovoltaïques écologiques et performantes à base de pérovskites sans plomb. Ces résultats serviront de base pour les études expérimentales futures et ouvrent des perspectives prometteuses pour une transition vers des technologies solaires plus durables.

Conclusion Générale

Ce travail de fin d'études a permis d'explorer en profondeur le potentiel des cellules solaires à base de pérovskite sans plomb, plus précisément le composé $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, en tant qu'alternative prometteuse aux cellules photovoltaïques traditionnelles au silicium et aux pérovskites au plomb. À travers une étude théorique et une simulation numérique réalisée avec le logiciel COMSOL, nous avons pu analyser l'influence de différents paramètres structuraux et physiques tels que l'épaisseur des couches, le dopage, la durée de vie des porteurs de charge et la température sur les performances électriques de la cellule.

Les résultats obtenus montrent qu'il est possible d'atteindre un rendement de conversion optimal d'environ 17 %, avec une densité de courant de court-circuit de 16 mA/cm² et une tension de circuit ouvert de 1,3 V, ce qui confirme le potentiel de ce matériau pour des applications photovoltaïques durables et respectueuses de l'environnement. Ce rendement, bien qu'inférieur aux meilleures cellules à base de pérovskite au plomb, reste encourageant compte tenu de l'absence de toxicité et de la meilleure stabilité chimique et thermique du $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$.

Cette étude ouvre la voie à de futures optimisations, notamment par l'amélioration des procédés de fabrication et l'ingénierie fine des interfaces, afin de maximiser les performances et la viabilité commerciale des cellules solaires sans plomb. En contribuant à la recherche sur des matériaux photovoltaïques plus sûrs et écologiques, ce travail s'inscrit dans la dynamique actuelle de transition énergétique vers des solutions renouvelables, efficaces et durables.

Bibliographie

- [1] <https://www.windmyroof.com/2024/04/24/une-histoire-de-panneaux-solaires>
- [2] <https://www.solargie.com/actualites/l-histoire-du-photovoltaique>
- [3] https://fr.wikipedia.org/wiki/Histoire_de_l'energie_solaire
- [4] <https://www.eia.gov/energyexplained/solar/photovoltaics-and-electricity.php>
- [5] IEA – International Energy Agency, Solar Energy: Mapping the Road Ahead, IEA Report, 2021. <https://www.iea.org>
- [6] Quaschnig, V., Understanding Renewable Energy Systems, Routledge, 2016.
- [7] Green, M. A. (2003). Third generation photovoltaics: Advanced solar energy conversion. Springer.
- [8] Quaschnig, V. (2016). Understanding Renewable Energy Systems. Routledge
- [9] https://www.researchgate.net/figure/Figure-1-Spectre-solaire-AM0-spectre-solaire-hors-atmosphere-AM15-spectre-solaire_fig1_322100380
- [10] G, Adam. R, Modeling heterogeneous carbon nanotube networks for photovoltaic application using silvaco atlas software”, Thesis Naval postgraduate school Monterey
- [11] Boyle, G. (Ed.). (2012). Renewable Energy: Power for a Sustainable Future (3rd ed.). Oxford University Press.
- [12] ASTM G173-03 (2008). Reference Solar Spectral Irradiance: Air Mass 1.5. American Society for Testing and Materials.
- [13] Quaschnig, V. (2016). Understanding Renewable Energy Systems. Routledge.
- [14] <https://www.researchgate.net/figure/Composantes-du-rayonnement-solaire-Le-Rayonnement-solaire-arrive-au-sol-directement>.
- [15] Green, M. A. (2001). Solar Cells : Operating Principles, Technology and System Applications. Prentice Hall.
- [16] Luque, A., & Hegedus, S. (2011). Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. Wiley.
- [17] Fraunhofer ISE. (2023). Photovoltaics Report. [<https://www.ise.fraunhofer.de>]
- [18] NREL. (2023). Best Research-Cell Efficiency Chart. National Renewable Energy Laboratory. [<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>]
- [19] <https://www.mccours.net/cours/pdf/hassbg/hassbgli611.pdf>
- [20] Luque, A., & Hegedus, S. (2011). Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. Wiley.

- [21] Green, M. A. (2001). Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications. Prentice Hall.
- [22] <https://www.viessmann.ch/fr/connaissances/technique-et-systemes/photovoltaique/modules.html>
- [23] K. TAKI EDDINE, « Modélisation et commande d'un système photovoltaïque connecté au réseau électrique », mémoire de master. Université MOHAMED BOUDIAF M'SILA, 2016.
- [24] https://www.researchgate.net/figure/lallure-de-caracteristique-I-V-sous-eclairement-dune-cellule-photovoltaique_fig9_280234067
- [25] B. OUIZA, « Etude et Simulation des paramètres électriques d'une cellule solaire photovoltaïque à base de Silicium » Mémoire master. Université MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU ,2017.
- [26] Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). Physics of Semiconductor Devices (3rd ed.). Wiley-Interscience.
- [27] <http://danyamer.magix.net/public/Semiconducteurs/semicond01.htm>
- [28] https://www.researchgate.net/figure/Dopage-de-semi-conducteur-de-type-P_fig22_339130161
- [29] Pierret, R. F. (1996). Semiconductor Device Fundamentals. Addison-Wesley.
- [30] M. KAABACHE CHOKRI : „SIMULATION ET ETUDE DES CARACTERISTIQUES ELECTRIQUES D'UN CONTACT METAL SEMI - CONDUCTEUR A BASE DU GaAs“, Mémoire de master, Université A.MIRA-BEJAIA,2016
- [31] <https://www.techno-science.net/definition/2906.html>
- [32] Green, M. A. (2001). Solar Cells: Operating Principles, Technology and System Applications. Prentice Hall.
- [33] Nelson, J. (2003). The Physics of Solar Cells. Imperial College Press.
- [34] Sze, S. M., & Ng, K. K. (2006). Physics of Semiconductor Devices. Wiley-Interscience.
- [35] Luque, A., & Hegedus, S. (2011). Handbook of Photovoltaic Science and Engineering. Wiley.
- [37] <https://www.emse.fr/~dutertre/enseignement.html>
- [38] H. Mathieu, « Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques », Edition Masson, Paris, 1996.
- [39] <http://dSPACE.univ-tlemcen.dz/bitstream/112/16958/1/Ms.ELN.Hamed+Tounsi.pdf>
- [40] Green, M. A., et al. (2014). Solar cell efficiency tables (version 45). Progress in Photovoltaics.
- [41] Snaith, H. J. (2013). Perovskites: The Emergence of a New Era for Low-Cost, High-Efficiency Solar Cells. J. Phys. Chem. Lett.

- [42] https://www.researchgate.net/figure/Distribution-de-Part-denergie-renouvelable-dans-la-production-delectricite-par-source_fig1_339774391
- [43] <https://fr.wikipedia.org/wiki/P%C3%A9rovskite>
- [44] https://www.researchgate.net/figure/Structure-of-a-typical-perovskite-Reproduced-with-permission5-Copyright-2019-Nature_fig2_338906247
- [45] https://fr.wikipedia.org/wiki/Cellule_photovolt%C3%A9que_%C3%A0_p%C3%A9rovskite
- [46] Masood Mehrabian et al., Environmental Science and Pollution Research
- [47] <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC5615741/>
- [48] <https://actu.epfl.ch/news/les-points-quantiques-ameliorent-les-cellules-so-5/>
- [49] <https://innovation-eco.com/nouvelles-technologiques-solaire/cellules-photovoltaïques-en-perovskite/>.
- [50] <https://advanced.onlinelibrary.wiley.com>
- [51] Zhuang, L., et al. (2023). Enhanced optoelectronic performance of hydrogenated Cs $\square$ AgBiBr $\square$ perovskite for photovoltaic application.
- [52] Raza, A., Khan, M. A., Iqbal, W., Imran, M., Ali, A., & Ahmad, M. I. (2023). Design and device numerical analysis of lead-free Cs $\square$ AgBiBr $\square$ double perovskite solar cell. Crystals, 13(2), 267. <https://doi.org/10.3390/cryst13020267>
- [53] Awais, M., Naveed, M., Butt, H., Shahzad, M. I., & Umar, A. (2023). Design and defect study of Cs $\square$ AgBiBr $\square$ double perovskite solar cell using suitable charge transport layers. Semiconductor Science and Technology, 38(1), 015005. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aca42b>
- [54] Awais, M., Naveed, M., Butt, H., Shahzad, M. I., & Umar, A. (2023). Design and defect study of Cs $\square$ AgBiBr $\square$ double perovskite solar cell using suitable charge transport layers. Semiconductor Science and Technology, 38(1), 015005. <https://doi.org/10.1088/1361-6641/aca42b>
- [55] <https://opg.optica.org/josab/abstract.cfm?uri=josab-39-3-756&utm>
- [56] <https://www.nature.com/articles/s41598-024-62085-0?utm>
- [57] Albrecht, S., Saliba, M., Correa-Baena, J.-P., et al. (2016). Monolithic perovskite/silicon-heterojunction tandem solar cells processed at low temperature. Energy & Environmental Science, 9(1), 81–88. <https://doi.org/10.1039/C5EE02965A>
- [58] [COMSOL Inc. (2024). *COMSOL Multiphysics® Reference Manual, Version 6.2*. COMSOL AB, Stockholm, Sweden. Disponible sur : <https://www.comsol.com>]