



جامعة مولاي إسماعيل  
ⵜⴰⵎⴻⵔⴰⵏⵜ ⵏ ⵎⴰⵎⴻⵔⴰⵏ ⵏ ⵙⴻⵎⴰⵏⵉⵎⴰⵏ  
UNIVERSITÉ MOULAY ISMAÏL



كلية العلوم  
ⵜⴰⵎⴻⵔⴰⵏⵜ ⵏ ⵙⴻⵎⴰⵏⵉⵎⴰⵏ  
FACULTÉ DES SCIENCES

# TRAVAUX PRATIQUES DE PHYSIQUE



## Modélisation et optimisation d'une cellule solaire à pérovskite avec SCAPS-1D

SMP

Semestre 6

Responsable : El Mostafa ELKHECHOUBI

Année universitaire : 2025 – 2026

Ce TP permet aux étudiants de semestre 6 de comprendre le fonctionnement des cellules solaires et d'acquérir une compétence pratique en simulation numérique avec SCAPS-1D. Il offre également la possibilité d'analyser les performances photovoltaïques et d'étudier l'influence des paramètres physiques sur le rendement, renforçant ainsi le lien entre théorie et application.

## **Objectifs du TP**

À la fin de ce TP, l'étudiant sera capable de :

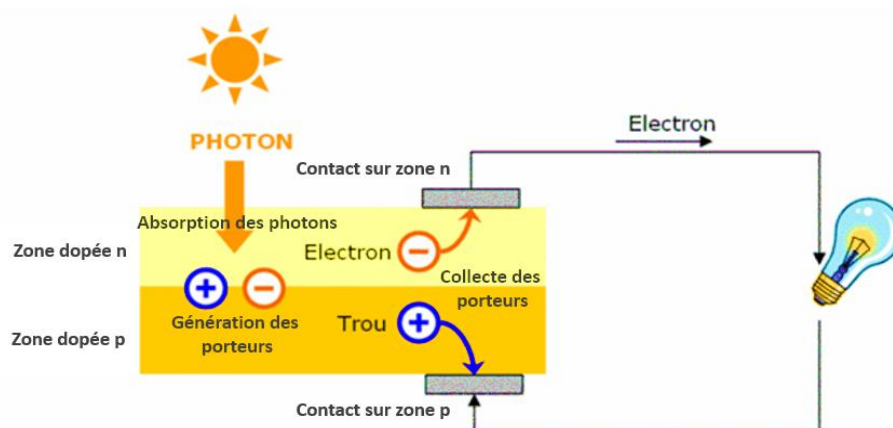
- Comprendre le fonctionnement d'une cellule solaire
- Prendre en main le logiciel SCAPS-1D
- Simuler une cellule photovoltaïque
- Analyser les paramètres électriques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF, PCE)
- Étudier l'influence de différents paramètres (épaisseur, dopage, défauts, Température,)

## Partie 1 : Rappels théoriques

### I- Principe de fonctionnement d'une cellule solaire

Une cellule solaire convertit la lumière en électricité grâce à l'effet photovoltaïque. Ce phénomène repose sur trois étapes fondamentales :

- Absorption de la lumière → création de paires électron-trou
- Séparation des charges par un champ électrique interne
- Collecte des charges aux électrodes → courant électrique



**Fig.1** : Schéma descriptif du principe de fonctionnement d'une cellule solaire photovoltaïque

### II- Présentation de la structure des cellules solaires à base pérovskite

Contrairement aux cellules classiques au silicium :

- Pas de jonction p-n classique
- Utilisation de couches sélectives :

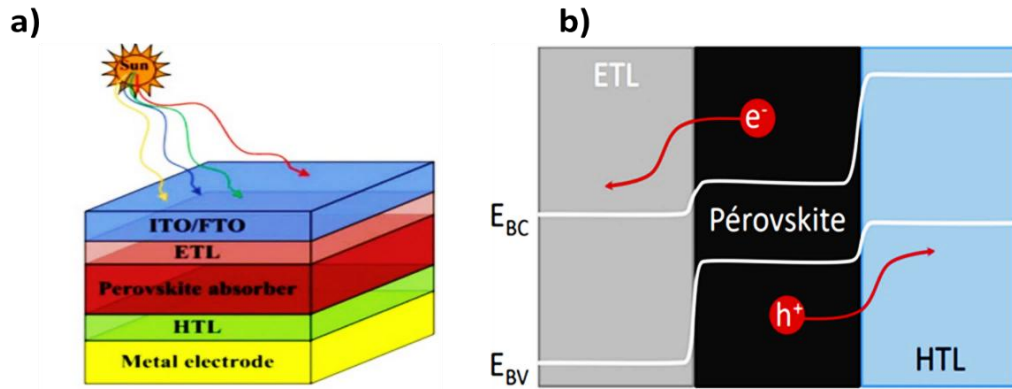
- **Couche de transport des électrons** (Electron Transport Layer : **ETL**) : Couche collecte les électrons, les transfère à l'électrode collectrice et bloque les trous.
- **Couche de transport des trous** (Hole Transport Layer : **HTL**) : Couche collecte les trous, les transfère à l'électrode anodique et bloque les électrons.

Ces couches sont insérées entre le matériau actif (pérovskite) et les électrodes pour faciliter la séparation des charges et minimiser la recombinaison.

#### Structure typique :

Une cellule solaire à pérovskite (Figure (a)) est constituée de plusieurs couches superposées assurant l'absorption de la lumière, la génération et le transport des charges. Elle comprend une

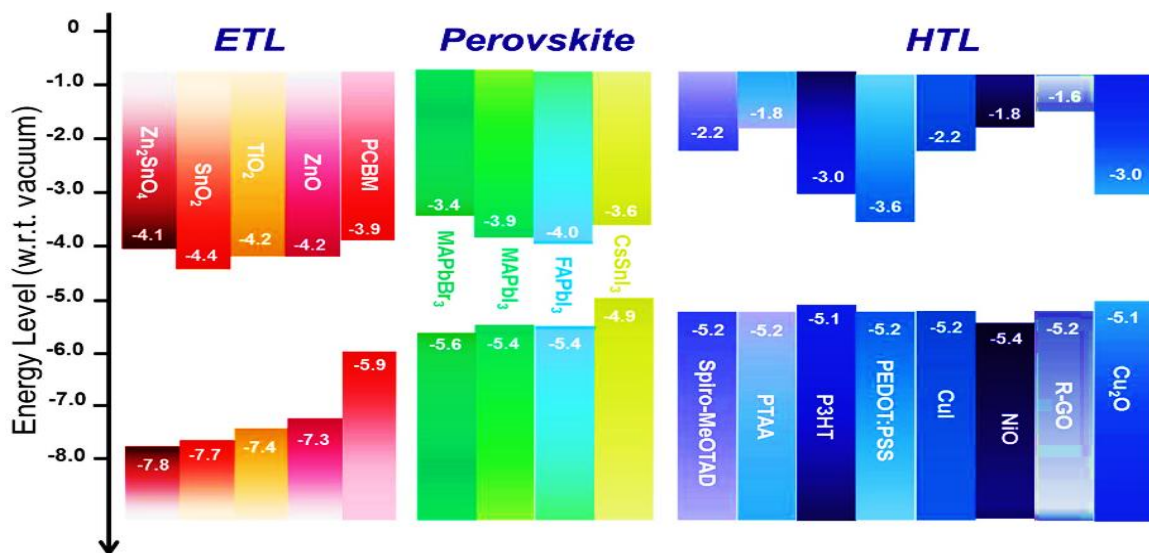
électrode transparente (ITO ou FTO), une couche de transport d'électrons (ETL), une couche active en pérovskite et une couche de transport de trous (HTL). Une électrode métallique (Au ou Ag) à l'arrière permet de fermer le circuit et de collecter les charges.



**Fig.2 :** a) Structure générale d'une cellule solaire pérovskite et b) Courbure de bande des niveaux d'énergie pendant la séparation des charges

La courbure des bandes d'énergie (Figure(b)) dans les couches ETL et HTL est essentielle pour la séparation et le transport des charges dans les cellules solaires. Un bon alignement des niveaux d'énergie entre la pérovskite et les couches de transport facilite le transfert des électrons (ETL) et des trous (HTL).

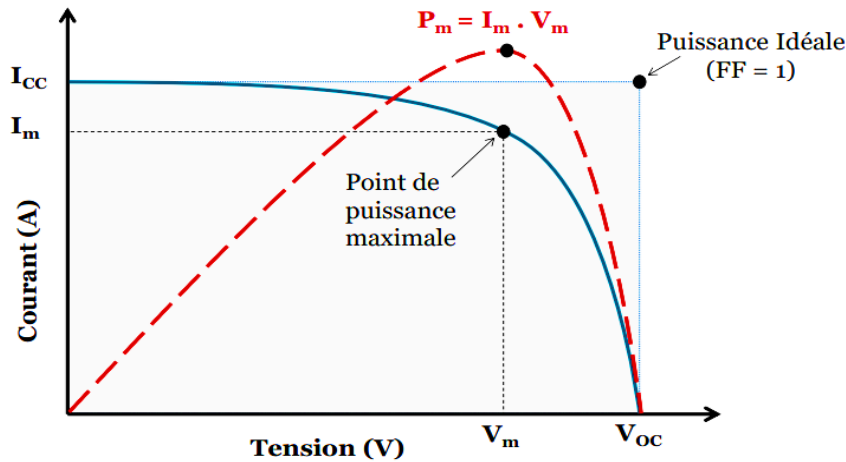
La Figure montre un récapitulatif des différentes couches ETL et HTL (oxydes métalliques et matériaux organiques) qui sont généralement adoptées dans l'architecture.



**Fig.3 :** Illustration des valeurs de niveaux d'énergie par rapport au niveau de vide de différents matériaux ETL (à gauche), pérovskites et matériaux HTL (à droite), tirées de la littérature, dans des cellules solaires à Pérovskite

### III- Les caractéristiques électriques d'une cellule photovoltaïque

Chaque cellule photovoltaïque possède ses propres caractéristiques de fonctionnement, représentées par les courbes non linéaires de  $I(V)$  et  $P(V)$  comme indique la *Figure 4*. Ces courbes indiquent un certain nombre de paramètres importants.



**Fig.4 :** Caractéristiques d'une cellule photovoltaïque

#### 1- Courant de court-circuit ( $I_{cc}$ )

Le courant de court-circuit  $I_{cc}$  ( $J_{cc}$ ) est le courant maximum généré par la cellule. Il est produit dans des conditions de court-circuit ( $V_{co} = 0$ ). Il varie en fonction de la surface de la cellule. Le courant  $I_{cc}$  est directement proportionnel à l'éclairement à température ambiante et dépend également de la mobilité des porteurs de charge. L'expression approchée du courant de court-circuit  $I_{cc}$ :

$$I_{cc} = \frac{I_{ph}}{1 + \frac{R_s}{R_{sh}}}$$

Les résistances parasites :  $R_s$  dites résistances série qui représentent les pertes résistives au sein de la photopile, et la résistance de shunt  $R_{sh}$  est associée à la recombinaison des charges (électrons et trous).

#### 2- Tension en circuit -ouvert ( $V_{co}$ )

La tension en circuit ouvert ( $V_{co}$ ), exprimée en volt, est la tension mesurée lorsqu'aucun courant ne circule dans la cellule ( $I_{cc} = 0$ ). La tension  $V_{co}$  d'une cellule photovoltaïque varie de façon

logarithmique avec l'éclairement et diminue avec l'augmentation de la température. Son expression est la suivante :

$$V_{co} = \frac{K_B T}{e} \text{Log} \left( \frac{I_{ph}}{I_s} + 1 \right)$$

### 3- Point de puissance maximale (PPM)

C'est la partie intéressante de la caractéristique  $I(V)$  pour l'utilisateur, car elle génère l'énergie de la cellule. Autrement dit est le point de fonctionnement optimal d'une cellule photovoltaïque, où le produit de la tension  $V$  et du courant  $I$  est maximal. Ce point est situé sur la courbe  $I(V)$  de la cellule, sous illumination, et permet d'extraire la puissance électrique la plus élevée possible. La puissance maximale d'une cellule solaire est définie par :

$$P_{max} = V_m \times I_m$$

### 4- Facteur de forme (FF)

Le facteur de forme ( $FF$ ), est un paramètre clé utilisé pour évaluer la qualité d'une cellule photovoltaïque. Il est défini comme le rapport entre le point de puissance maximale  $P_{max}$  et le produit du courant de court-circuit  $I_{cc}$  et de la tension en circuit-ouvert  $V_{co}$ . Plus le facteur de forme ( $FF$ ) est élevé, plus la puissance exploitable est importante. Son expression est le suivant :

$$FE = \frac{P_{max}}{V_{co} \times I_{cc}}$$

### 5- Rendement de conversion photovoltaïque (PCE)

Le rendement de conversion photovoltaïque (*Photovoltaic Conversion Efficiency* (PCE)), exprimé en (%), est défini comme le rapport entre la puissance maximale  $P_{max}$  délivrée par la cellule photovoltaïque et la puissance lumineuse incidente  $P_{inc}$  :

$$PCE = \frac{P_{max}}{P_{inc}} = FF \times \frac{V_{co} \times I_{cc}}{P_{inc}}$$

### 6- Rendement quantique (QE)

Le rendement quantique (Quantum Efficiency (%)) d'une cellule solaire est le rapport entre le nombre de paires électron-trou générées et collectées par la cellule et le nombre de photons incidents à une longueur d'onde donnée. Son expression est donnée par la relation suivante :

$$QE = \frac{\text{Nombre de paires "électron – trou" générées et collectées}}{\text{Nombre de photons incidents}}$$

Un QE élevé signifie que la cellule est capable de convertir efficacement la lumière en courant électrique à une longueur d'onde donnée.

☞ Plus ces paramètres sont élevés → meilleure cellule solaire

## **Partie 2 : Prise en main de SCAPS-1D**

### **I- Logiciel SCAPS-1D**

SCAPS-1D est un logiciel de simulation des cellules solaires unidimensionnelles développé par le département des systèmes électronique et informatique (ELIS) de l'Université de Gent, Belgique. Plusieurs chercheurs ont contribué à son développement : Marc Burgelman, Koen Decock, Johan Verschraegen, Alex Niemegeers, Stefaan Degrave.

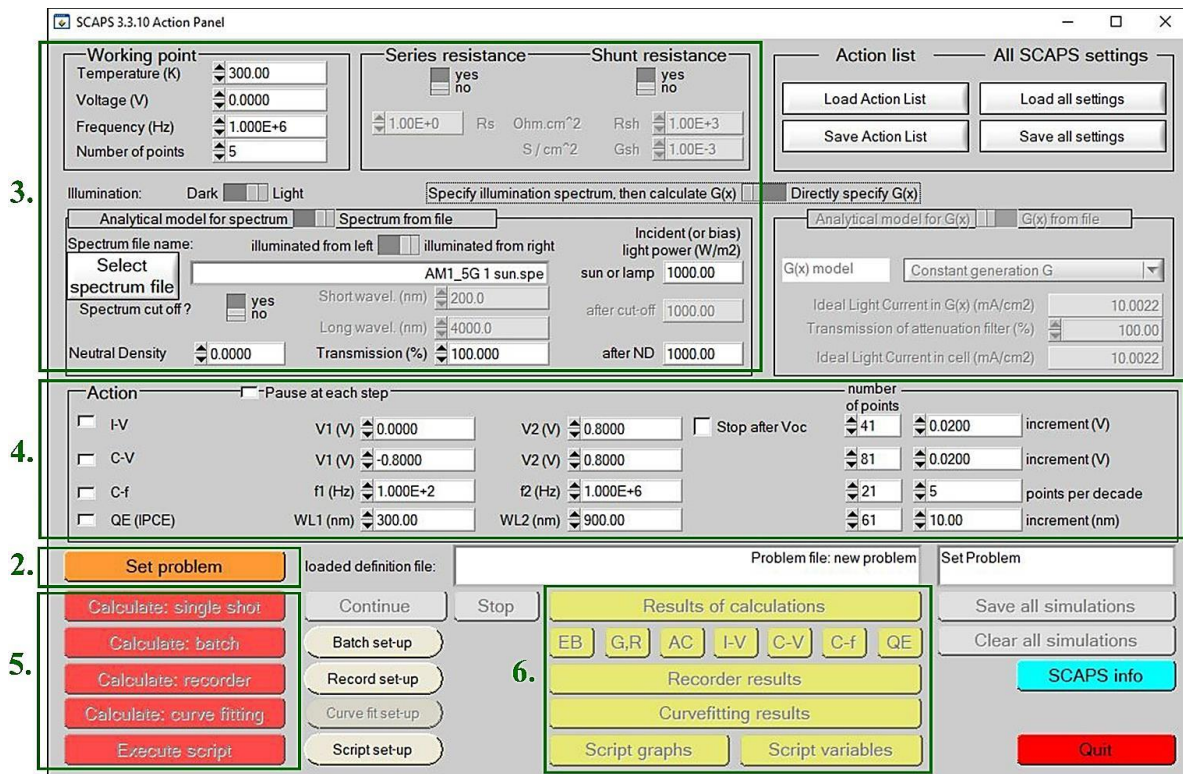
#### **1- Lancement du logiciel**

On clique sur l'icône ci-dessus sur le bureau, ou bien double-clique sur le fichier SCAPS3311.EXE dans le gestionnaire de fichiers (ou dans n'importe quelle autre version de SCAPS). SCAPS s'ouvre avec le panneau d'action.



#### **2- Panneau d'Action**

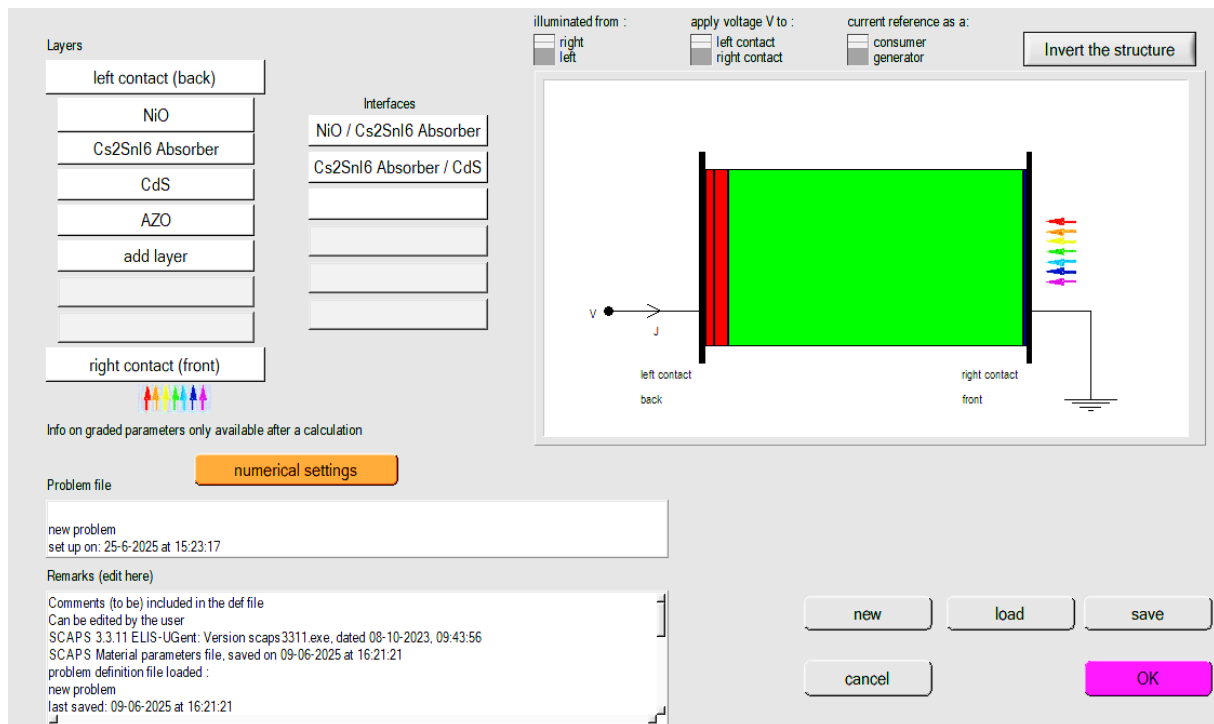
Le panneau d'action est la première fenêtre qui apparaît après l'exécution de scaps.exe sur l'ordinateur. Ce panneau offre différentes options numérotées à partir de (2), alors que (1) est déjà assigné au panneau d'action principal.



**Fig.5** : Panneau d'Action de SCAPS-1D : Fonctionnalités et Étapes pour la Simulation de Cellules Solaires

**Pour commencer :**

- *Définir le problème (2)* : Configuration de la structure de la cellule solaire à simuler, c'est-à-dire spécification du matériau, de l'épaisseur de la couche, du dopage et d'autres paramètres importants (Figure 6).
- *Points de travail initiaux (3)* : Choisir la température, la tension, la fréquence, le nombre de points de simulation et ajouter des résistances en série et en parallèle et choisir entre la lumière du soleil et l'obscurité.
- *Paramètres d'action (4)* : Sélectionnez les analyses à effectuer, comme J-V, C-V, C-f et EQE. Définissez les valeurs initiales et finales pour le balayage des paramètres, ainsi que le nombre de points de simulation.
- *La partie (5)* est réservée aux lancements des simulations et aux calculs
- *La partie (6)* permet d'afficher les résultats de simulations.



**Fig.6** : Interface de modification et d'intégration de couches

### 3- Configuration du dispositif et édition des couches

#### a- Interface de Configuration

L'option "Définir le problème" ouvre une interface dédiée à la configuration de la cellule solaire, comme illustré à la *Figure 5*. Cette interface permet :

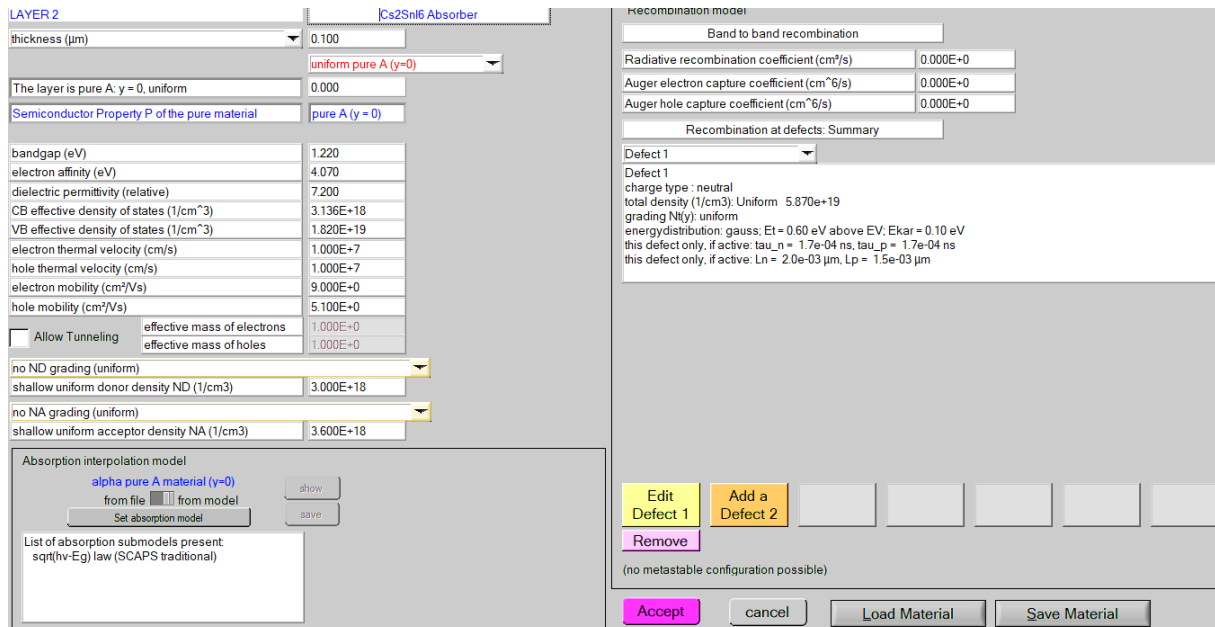
- Ajout de couches semi-conductrices : Un nombre maximal de 7 couches est supporté.
- Visualisation de la structure schématique : La structure du dispositif est représentée graphiquement en temps réel.
- Chargement et sauvegarde de structures : Des structures prédéfinies peuvent être chargées et la structure actuelle peut être sauvegardée pour une utilisation ultérieure.

#### b- Ajout et Modification des Couches

L'utilisateur clique sur "Ajouter une couche (Add layer) " pour commencer la création du dispositif. Lors de l'ajout de couches, les informations suivantes sont mises à jour :

- Propriétés des matériaux : Largeur de bande interdite, permittivité, mobilité des porteurs, etc.
- Dopage : Type et concentration de dopants.
- Épaisseur de la couche : Valeur numérique et unité.

Après avoir ajouté une couche, il est nécessaire de définir ses propriétés électriques et optiques afin de garantir une simulation précise des performances de la cellule solaire. Ces propriétés, souvent issues de la littérature scientifique, peuvent être spécifiées dans le panneau illustré à la *Figure 1.3*, auquel on accède en cliquant sur la couche souhaitée. Ce panneau peut être utilisé pour modifier les propriétés définies dans le *Tableau 1*.



**Fig.7 :** Interface pour l'incorporation des propriétés optiques et électriques des différentes couches

**Tableau 1:** Propriétés Électriques des Matériaux Semi-conducteurs

Symbole (Unité)	Définition
$E_g$ (eV)	Bande Interdite : Énergie nécessaire pour qu'un électron passe de la bande de valence à la bande de conduction.
$\chi$ (eV)	Affinité Électronique : Différence d'énergie entre le niveau de vide et le bas de la bande de conduction.
$\epsilon_r$	Permittivité Relative (ou constante diélectrique) : Capacité du matériau à stocker de l'énergie sous forme de champ électrique.
$N_c, N_v$ (cm <sup>-3</sup> )	Densité d'États dans les Bandes de Conduction et de Valence : Nombre d'états disponibles par unité de volume dans chaque bande
$V_{th}$ (m/s)	Vitesse Thermique : Vitesse moyenne des porteurs de charge à une température donnée.
$\mu_n, \mu_p$ (cm <sup>2</sup> /V s)	Mobilité des porteurs : Dérive des porteurs de charge sous l'influence d'un champ électrique (n : électrons, p : trous).

$N_D, N_A$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	Dopage : Concentration d'atomes dopants dans le matériau (D : donneurs, A : accepteurs).
$N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	Densité de Défauts de Volume : Concentration de défauts dans le matériau qui peuvent piéger les porteurs de charge.
$m_e^*, m_h^*$ (Kg)	Masse Effective de Tunnelisation : Masse utilisée pour décrire le tunnelling des porteurs de charge.
$\alpha$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	Coefficient d'Absorption : Fraction de la lumière incidente absorbée par le matériau.

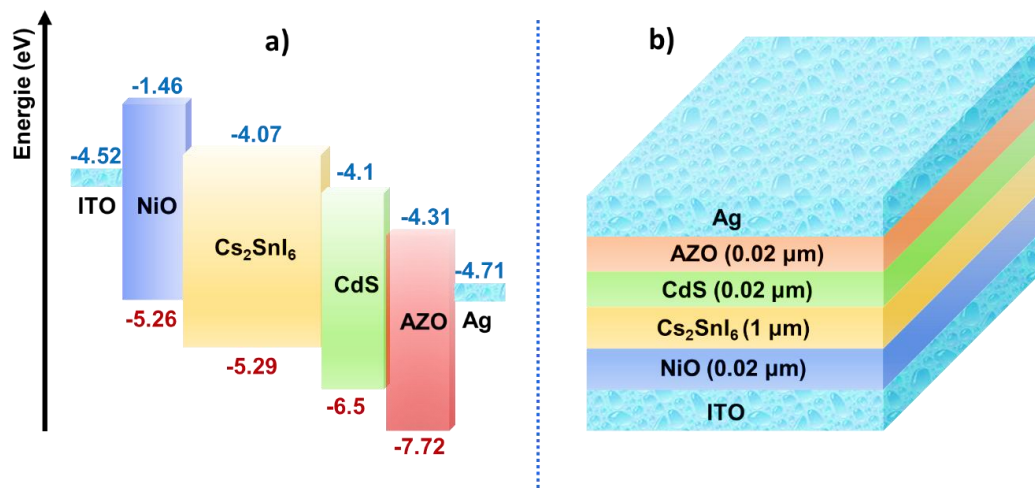
### Partie 3 : Optimisation d'une cellule solaire à base de $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$

#### Conditions de simulation :

- Température : 300 K
- Illumination : AM1.5G
- $R_s = 1 \Omega.\text{cm}^2$
- $R_{sh} = 700 \Omega.\text{cm}^2$

#### Structure étudiée

La figure illustre la configuration de la cellule simulée à l'aide du logiciel SCAPS-1D.



**Fig.8 :** Cellule solaire à pérovskite optimisée : a) Diagramme des niveaux d'énergie pour toutes les couches du dispositif et b) Architecture schématique.

Aller dans « **Set problem** »

Créer les couches suivantes :

Couche	Rôle
AZO	Contact transparent
CdS	ETL
Cs <sub>2</sub> SnI <sub>6</sub>	Absorbeur
NiO	HTL

### Entrer les paramètres :

Les paramètres d'entrée spécifiques pour les différentes couches.

	NiO	Cs <sub>2</sub> SnI <sub>6</sub>	CdS	AZO
d (µm)	0.03	1	0.06	0.02
E <sub>g</sub> (eV)	3.80	1.22	2.40	3.41
χ (eV)	1.46	4.07	4.18	4.31
ε <sub>r</sub>	10.70	7.2	10	9
N <sub>c</sub> (cm <sup>-3</sup> )	2.2×10 <sup>19</sup>	3.136×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>18</sup>	2.2×10 <sup>19</sup>
N <sub>v</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.0×10 <sup>19</sup>	1.82×10 <sup>19</sup>	1.9×10 <sup>19</sup>	1.8×10 <sup>19</sup>
μ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> /V s)	12	9	100	10
μ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> /V s)	2.8	5.11	25	5
N <sub>D</sub> (cm <sup>-3</sup> )	0	3.0×10 <sup>18</sup>	1.0×10 <sup>18</sup>	1.0×10 <sup>21</sup>
N <sub>A</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.0×10 <sup>18</sup>	3.6×10 <sup>18</sup>	0	0
N <sub>t</sub> (cm <sup>-3</sup> )	1.0×10 <sup>15</sup>	5.87×10 <sup>19</sup>	1.0×10 <sup>15</sup>	1.0×10 <sup>15</sup>
σ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.0×10 <sup>-15</sup>	1.0×10 <sup>-14</sup>	2.0×10 <sup>-14</sup>	1.0×10 <sup>-15</sup>
σ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.0×10 <sup>-15</sup>	1.0×10 <sup>-14</sup>	2.0×10 <sup>-14</sup>	1.0×10 <sup>-15</sup>

Les paramètres des défauts dans la couche Cs<sub>2</sub>SnI<sub>6</sub> et à ses interfaces sont détaillés dans le *Tableau 2*. Les fonctions de travail de l'ITO et de l'Ag sont respectivement de 4.52 eV et 4.71 eV.

**Tableau 2 :** Paramètres des défauts dans la couche Cs<sub>2</sub>SnI<sub>6</sub> et à ses interfaces

Paramètres	Absorber/HTL	ETL/Absorber	Cs <sub>2</sub> SnI <sub>6</sub>
Type de la Densité de défauts	Neutral	Neutral	Neutral
Distribution énergétique	Single	Single	Gaussian
L'énergie caractéristique (eV)	NA	NA	0.1
σ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.0×10 <sup>-18</sup>	1.0×10 <sup>-19</sup>	1.0×10 <sup>-14</sup>
σ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> )	1.0×10 <sup>-19</sup>	1.0×10 <sup>-18</sup>	1.0×10 <sup>-14</sup>

Niveau d'énergie relatif à EV	0.6	0.6	0.6
$N_t$ ( $\text{cm}^{-3}$ )	$4.85 \times 10^{22}$	$4.85 \times 10^{22}$	$5.87 \times 10^{19}$

## **Optimisation :**

### **I- Influence de l'épaisseur de NiO sur les performances**

Dans cette partie, nous étudions l'influence de l'épaisseur de la couche de NiO (HTL) sur les performances de la cellule solaire à pérovskite, en faisant varier son épaisseur entre 10 et 60 nm.

1. Comment évoluent les paramètres électriques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF, PCE) lorsque l'épaisseur de la couche de NiO varie de 10 à 60 nm ?
2. Quelle est l'épaisseur optimale de la couche de NiO et pourquoi cette valeur permet-elle d'obtenir de meilleures performances du dispositif ?

### **II- Influence de l'épaisseur de CdS sur les performances**

Analysez l'influence de l'épaisseur de la couche de CdS sur les performances de la cellule solaire en variant son épaisseur dans l'intervalle de 10 à 60 nm

1. Comment évoluent les paramètres électriques ( $J_{sc}$ ,  $V_{oc}$ , FF, PCE) lorsque l'épaisseur de la couche de CdS varie de 10 à 60 nm ?
2. Quelle est l'épaisseur optimale de la couche de CdS et pourquoi cette valeur permet-elle d'obtenir de meilleures performances du dispositif ?

### **III- Influence de l'épaisseur de $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$ sur les performances**

Étudiez l'influence de l'épaisseur de la couche de  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$  sur les performances de la cellule solaire en faisant varier son épaisseur entre 100 et 1000 nm.

1. Comment évolue  $J_{sc}$  avec l'épaisseur ?
2. Pourquoi une grande épaisseur n'est pas toujours optimale ?
3. Déterminer l'épaisseur optimal

### **IV- Effet de la concentration de dopants donneurs (Nd) dans la couche CdS sur les performances**

Dans cette partie, nous étudions l'influence de la concentration de dopants donneurs (Nd) dans la couche CdS sur les performances de la cellule solaire en faisant varier Nd entre  $10^{16}$  et  $10^{20} \text{cm}^{-3}$  afin d'optimiser le transport des charges et le rendement du dispositif.

1. Quelle valeur de la concentration de dopants donneurs (Nd) dans l'ETL permet d'optimiser les performances du dispositif, et quels sont les paramètres électriques ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF, PCE) obtenus pour une valeur supérieure à  $10^{19} \text{cm}^{-3}$  ?

## **V- Effet de la concentration de dopants accepteurs (NA) dans la couche NiO sur les performances**

Cette section examine l'influence de la concentration d'accepteurs (NA) dans la couche de NiO sur les performances des cellules solaires à pérovskite, en faisant varier NA entre  $10^{16}$  et  $10^{21}$   $\text{cm}^{-3}$ .

1. Quelle est la concentration de dopage optimale (NA) du HTL permettant d'obtenir les meilleures performances du dispositif, et quels sont les valeurs correspondantes de Voc, Jsc, FF et PCE ?

## **VI- Influence de la densité de défauts dans $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$ sur les performances**

La densité de défauts ( $N_t$ ) dans la pérovskite influence fortement les performances des cellules solaires, car elle correspond à des imperfections cristallines ou des impuretés.

Ces défauts peuvent apparaître lors de la synthèse ou du traitement du matériau et perturber le transport des charges.

Dans cette étude,  $N_t$  de  $\text{Cs}_2\text{SnI}_6$  est variée entre  $10^{11}$  et  $10^{17}$   $\text{cm}^{-3}$  en utilisant les paramètres optimisés.

1. Comment évoluent les paramètres de sortie (FF, Voc, Jsc et PCE) lorsque la densité de défauts dépasse  $10^{12}$   $\text{cm}^{-3}$ , et quelle est l'origine physique de la dégradation des performances observée ?

## **VII- Impact des résistances série et shunt sur les performances**

L'impact des résistances en série  $R_s$  et en shunt  $R_{sh}$  sur les performances des cellules solaires est fondamental, car ces deux paramètres influencent directement les quatre paramètres de performance des cellules solaires (PCE, Voc, Jsc et FF).

Étudiez l'influence des résistances série ( $R_s$ ) et shunt ( $R_{sh}$ ) sur les performances de la cellule solaire en faisant varier  $R_s$  de 1 à 6  $\Omega \cdot \text{cm}^2$  et  $R_{sh}$  de 1000 à 6000  $\Omega \cdot \text{cm}^2$  afin de déterminer leurs valeurs optimales.

1. Comment la résistance série ( $R_s$ ) et la résistance de shunt ( $R_{sh}$ ) influencent-elles les performances de la cellule solaire, notamment le PCE et le FF ?
2. Quelles sont les valeurs optimales permettant d'atteindre les meilleures performances photovoltaïques ?

## **VIII- Influence de la température sur les performances**

Analysez le comportement de la cellule solaire en fonction de la température en faisant varier celle-ci de 300 K à 400 K afin d'évaluer son influence sur les performances du dispositif.

1. Comment évoluent les paramètres  $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF et PCE de la cellule solaire lorsque la température augmente de 300 K à 400 K ?
2. Quel est l'effet global de cette variation thermique sur les performances du dispositif ?

### **IX- Interprétation des résultats d'optimisation**

1. À partir des résultats de simulation SCAPS-1D pour la cellule solaire optimisée, quelles sont les performances électriques obtenues ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF et PCE) du dispositif ?
2. Tracer la caractéristique courant-tension ( $V-J$ ) de la cellule solaire optimisée, quelles informations peut-on en déduire ?
3. Tracer et analyser la courbe d'efficacité quantique (QE) de la cellule solaire optimisée sous SCAPS-1D, et à quelle longueur d'onde observe-t-on le maximum de réponse ?
4. Quel est le lien entre la courbe QE et la réponse spectrale du dispositif dans le domaine visible,