

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA
FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE



Numéro de série.....

Numéro d'inscription.....

Thèse

**Présentée en vue de l'obtention du diplôme de
DOCTORAT LMD**

Filière : Electronique

Spécialité : Microélectronique

THÈME

**Piégeage de la lumière pour le contrôle de l'absorption dans les
cellules solaires photovoltaïques**

Présentée par :
CHAHMI Maroua

Soutenue publiquement le : 19/02/2025

Devant le jury composé de :

NOM et Prénom	Grade	Etablissement	Qualité
BENNACER Hamza	Professeur	Université M ^{ed} Boudiaf de M'sila	Président
BOURAS Mounir	Professeur	Université M ^{ed} Boudiaf de M'sila	Encadrant
HADJAB Moufdi	M.C.A.	Université M ^{ed} Boudiaf de M'sila	Co-Encadrant
KHELIFI Reski	M.R.A.	Unité de Recherche Appliquée en Énergies Renouvelables URAER (CDER) – Ghardaïa	Examineur
RABEHI Abdelaziz	M.C.A.	Université Ziane Achour de Djelfa	Examineur
KAHLOUCHE Ahmed	M.C.A.	Université M ^{ed} Boudiaf de M'sila	Examineur

Année Universitaire : 2024/2025

Dédicace

Celui qui dit que je suis à elle l'aura

Le voyage n'a pas été court

Le rêve n'était pas proche et la route n'était pas pleine de facilité

Mais je l'ai fait et je l'ai eu

الحمد لله حبا وشكرا وامتنانا

Grâce à Allah, me voici aujourd'hui face à un rêve tant attendu qui est devenu
une réalité dont je suis fier.

À mon ange pur et à ma force après Dieu, ma première et éternelle supportrice,
« Maman », Je vous dédie cette réalisation, qui sans vos sacrifices n'aurait pas
existé. Je suis reconnaissant que Dieu vous ait choisi parmi le peuple. Oh, le
meilleur soutien et la meilleure compensation.

A celui qui m'a soutenu sans limites et qui m'a donné sans compte, « Papa »
À l'âme pure de ma grand-mère, qui était très heureuse que j'aie atteint ce
niveau, tu me manques, « ma chère grand-mère,

الحنانة زوليخة

À qui on a dit d'eux

{سَنَشُدُّ عَضُدَكَ بِأَخِيكَ}

À celui qui a inlassablement tendu la main dans mes moments de faiblesse, «
Mon frère Mohammed Belkheir », que Dieu te garde comme un côté
inébranlable pour moi.

À celle qui a cru en mes capacités et se souvient de moi avec ma force, « Ma
sœur Dhikra ».

À celui qui m'a soutenu, a été mon meilleur compagnon et a été la source de ma
force « Mon mari ».

REMERCIEMENTS

Les recherches menées dans cette thèse ont été réalisées au sein du Département d'Électronique de la Faculté de Technologie de l'Université de M'sila.

Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur Bouras Mounir, professeur au département d'électronique, pour m'avoir confié cette tâche de recherche, ainsi que pour son aide et ses précieux conseils tout au long de ces années.

J'adresse également mes sincères remerciements à Monsieur Hadjab Moufdi, Maître de Conférences A au département d'électronique, pour m'avoir co-encadré durant toutes ces années.

Je suis reconnaissant envers Monsieur Bennacer Hamza, professeur au département d'électronique (Université de M'sila) de m'avoir honoré de sa présence en tant que président du jury. Je le remercie respectueusement d'avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je remercie également Monsieur Khelifi Reski, Maître de Recherche A à l'Unité de Recherche Appliquée en Énergies Renouvelables URAER (CDER) de Ghardaïa, de m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je lui suis reconnaissant d'avoir accepté de juger ce travail.

J'exprime ma gratitude à Monsieur Rabehi Abdelaziz, Maître de Conférences A à l'Université Ziane Achour de Djelfa, de m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je le remercie d'avoir accepté d'examiner cette thèse.

Je tiens également à exprimer ma gratitude à Monsieur Kahlouche Ahmed, Maître de Recherche A département d'électronique (Université de M'sila) pour m'avoir honoré de sa présence en tant que membre du jury. Je le remercie sincèrement d'avoir accepté d'évaluer ce travail.

Je remercie tous les enseignants de l'Université de M'sila avec qui j'ai eu le plaisir de travailler au cours de ces années, en particulier : Attallah Bilal, Brik Youcef et Khenouf Salah. Mes remerciements vont également à tous les membres du Département d'Électronique, Faculté de Technologie, Université Mohamed Boudiaf de M'sila, pour leur soutien et leurs encouragements.

CHAHMI Maroua

Dédicace	
Remerciements	
Table des matières	i
Liste des figures	iv
Liste des tableaux	ix
Liste des abréviations	x
Introduction générale	1
Chapitre I. Généralité sur les cellules solaires photovoltaïques	
I.1. Introduction	6
I.2. Historique du photovoltaïque	7
I.3. Définition d'une cellule solaire	8
I.4. Principe de fonctionnement des cellules solaires	9
I.5. Différents paramètres de sortie de la cellule photovoltaïque	10
I.5.1. La tension de circuit ouvert V_{CO} (pour $I_{CC} = 0$)	10
I.5.2. Le courant de court-circuit I_{CC} (pour $V_{CO} = 0$)	11
I.5.3. Facteur de forme FF	11
I.5.4. Le rendement	12
I.6. Les différents types de cellules solaires	12
I.6.1. Les cellules solaires au silicium cristallin	12
I.6.2. Les cellules solaires en couches minces	13
I.6.3. Les cellules solaires organiques	13
I.7. Le module photovoltaïque	13
I.8. Le string photovoltaïque	14
I.9. L'effet photovoltaïque	15
I.10. Système de stockage	15
I.10.1. Types d'accumulateurs	17
I.11. Les avantages et les inconvénients de l'énergie photovoltaïque	18
I.11.1. Les avantages de l'énergie photovoltaïque	18
I.11.2. Les inconvénients de l'énergie photovoltaïque	19
I.12. Conclusion	19
Chapitre II. La photonique pour le photovoltaïque	
II.1. Introduction	22
II.2. Définition des cristaux photoniques	22

II.3.	Propriétés optiques des principales structures utilisées pour le piégeage de la lumière	23
II.3.1.	Diffraction de la lumière par un réseau	24
II.3.2.	Couplage de la lumière avec les modes d'un cristal photonique	25
II.4.	Les cristaux photoniques naturels	26
II.4.1.	Les opales	26
II.4.2.	Les papillons	27
II.4.3.	Les oiseaux	27
II.5.	Caractéristiques des cristaux photoniques	28
II.5.1.	La dimensionnalité	28
II.5.2.	La symétrie	30
II.5.3.	La topologie	30
II.5.4.	Le paramètre du réseau	30
II.5.5.	L'indice de réfraction effectif	30
II.5.6.	Le contraste d'indice de réfraction	30
II.6.	Les types des cristaux photoniques	30
II.6.1.	Les cristaux photoniques unidimensionnels	30
II.6.2.	Les cristaux photoniques bidimensionnels	33
II.6.3.	Les cristaux photoniques tridimensionnels	34
II.7.	Les défauts dans les cristaux photoniques	35
II.8.	Domaine d'application des cristaux photoniques	36
II.8.1.	Capteurs	36
II.8.2.	Filtrage	37
II.9.	La photonique pour le photovoltaïque	37
II.9.1.	L'absorption de la lumière dans une cellule solaire	38
II.9.2.	Le piégeage de lumière dans les cellules solaires	38
II.9.3.	Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque	40
II.9.3.1.	L'effet de plasmon de surface	40
II.9.3.2.	Les réseaux de diffraction et les couches antireflet	42
II.9.3.3.	Les cristaux photoniques	43
II.10	Contexte de l'étude et objectif	45
II.11	Conclusion	46

Chapitre III. Outil de simulation		
III.1.	Introduction	49
III.2.	Outils numériques disponibles	49
	III.2.1. Présentation du logiciel Rsoft CAD	49
	III.2.1.1. Environnement de CAD	49
	III.2.1.2. Le simulateur << Solar Cell >>	50
III.3.	Modèles Optiques et Électriques	51
	III.3.1. Modèles Optiques	51
	III.3.1.1. DiffractMOD	51
	III.3.1.2. Full wave	51
	III.3.1.3. Méthodes de modélisation (RCWA, FDTD)	52
	III.3.2. Modèles Electriques	55
	III.3.2.1. Le modèle électrique LaserMOD	55
	III.3.2.2. Modèle Électrique de Diode Idéale	56
III.4.	Les fenêtres de simulateur << Solar Cell >>	58
III.5.	Conclusion	60
Chapitre IV. Résultats et discussions		
IV.1	Introduction	63
IV.2	Optimisation structurelle	65
	IV.2.1. Première structure étudiée	65
	IV.2.2. Deuxième structure étudiée	72
	IV.2.3. Structure proposée	76
IV.3	Conclusion	83
Conclusion générale		
	Liste des références bibliographiques	89
	Résumé – Abstract – ملخص	97

Figure I.1.	Principe de fonctionnement des cellules solaire.	9
Figure I.2.	Caractéristiques I(V) d'une cellule photovoltaïque soumise à différents éclairagements.	10
Figure I.3.	Module PV.	14
Figure I.4.	String PV	14
Figure I.5.	L'effet photovoltaïque.	15
Figure I.6.	Batterie au plomb acide.	17
Figure I.7.	Batterie au Nickel-Cadmium.	18
Figure II.1.	Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), Bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D).	22
Figure II.2.	Principales structures étudiées pour le piégeage de la lumière. Les deux premiers ordres de diffraction sont illustrés pour le réseau de diffraction. La période du réseau de diffraction et celle du cristal photonique (CP) sont notées « a ».	23
Figure II.3.	Un diagramme schématique de la dispersion dans un réseau de diffraction montre les ordres de diffraction $m = 0$, $m = 1$ et $m = 2$ pour $k_{//} > 0$. L'angle d'incidence de la lumière, noté θ_0 , est supposé non nul dans ce contexte.	24
Figure II.4.	Un diagramme schématique de la dispersion d'un cristal photonique est présenté dans la première zone de Brillouin, avec la période du cristal photonique notée 'a' et pour $k_{//} > 0$.	25
Figure II.5.	Schéma des cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D).	26
Figure II.6.	Image d'une opale.	27
Figure II.7.	(a) Aile de papillon, (b) Coupe d'une aile de papillon observée au MEB.	27
Figure II.8.	Vue microscopique d'une structure de cristal photonique naturel présente dans une plume de paon.	28
Figure II.9.	Représentations schématiques de cristaux photoniques (CP) avec une variation périodique de l'indice de réfraction dans une, deux ou trois dimensions. Les zones rouges et jaunes représentent des régions avec des indices de réfraction distincts.	29
Figure II.10.	Images MEB de cristaux photoniques (CP) : a) Structure 1D formée par un empilement de couches de poly électrolytes (les zones sombres, contenant des nanoparticules d'argent, ont un indice de réfraction plus élevé que les zones	29

claires, dépourvues de nanoparticules) ; b) Structure 2D constituée d'un arrangement de cylindres en InP ; c) Structure 3D formée par un réseau de tiges de polymère inclinées et imbriquées.

- Figure II.11. Diagramme d'un miroir de Bragg constitué d'un empilement de couches de différentes épaisseurs, a_1 et a_2 , avec des permittivités distinctes, n_1 et n_2 , où $n_1 > n_2$. 31
- Figure II.12. Relation de dispersion ω en fonction de k pour les ondes dans un cristal photonique (CPh) unidimensionnel le long de l'axe z . On y observe des modes autorisés et des modes interdits. Les modes interdits se trouvent dans une gamme de fréquences appelée bande interdite photonique. (b) Le cristal photonique 1D correspondant à (a), avec les points S_1 et S_2 , et leurs profils d'ondes stationnaires aux fréquences ω_1 et ω_2 . 32
- Figure II.13. (a) Cristal photonique 2D. (b) Matrice de trous d'air fabriquée sur un substrat de niobate de lithium, avec une période $a = 825$ nm et un rayon $r = 206$ nm. 33
- Figure II.14. Structures 2D (a) Structure carrée, (b) triangulaire et (c) hexagonale. 33
- Figure II.15. (a) Distribution de l'indice de la cellule unitaire FCC (b) le premier Cristal photonique 3D. 34
- Figure II.16. Défaut dans une structure périodique unidimensionnelle causé par une couche élargie. 35
- Figure II.17. Partition de l'espace des fréquences entre états propagatifs et évanescents. 36
- Figure II.18. (a) Image MEB d'une microcavité à photonic crystal intégrée entre deux guides, (b) un capteur reposant sur un cristal photonique 2D avec un réseau triangulaire de trous d'air. 37
- Figure II.19. (a) Schéma illustrant la loi de Snell-Descartes et le phénomène de réflexion totale interne lorsqu'un rayon lumineux traverse d'un matériau avec un indice n_1 vers un autre avec un indice n_2 . (b) Illustration schématique montrant qu'un rayon lumineux peut effectuer plusieurs passages dans un milieu absorbant grâce à la réflexion par un miroir et à la réflexion totale interne (le tracé ici est uniquement schématique). 39

Figure II.20.	Schémas montrant comment les structures plasmoniques peuvent améliorer l'absorption dans une cellule solaire. (a) Diffusion résonante de la lumière par les nanoparticules. (b) Confinement du champ électrique autour des nanoparticules. (c) Couplage à un plasmon de surface par l'intermédiaire d'une surface métallique structurée.	41
Figure II.21.	Diagrammes illustrant l'utilisation potentielle de réseaux pour améliorer l'absorption dans une cellule solaire. (a) Les réseaux dont la période est inférieure à la longueur d'onde ($d < \lambda$) peuvent servir de couches antireflets à l'entrée des cellules. (b) Les réseaux ayant une période égale ou supérieure à la longueur d'onde incidente ($d \geq \lambda$) peuvent diffracter la lumière. Les ordres diffractés peuvent ensuite subir une réflexion totale interne dans le matériau absorbant	43
Figure II.22.	Deux configurations proposées par Bermel et al. pour utiliser les cristaux photoniques comme réflecteurs dans une cellule solaire sont les suivantes : (a) l'utilisation d'un miroir de Bragg associé à un réseau de diffraction (DBR + réseau), et (b) l'utilisation d'un réseau 2D de trous d'air (PhC). (c) Les spectres d'absorption calculés montrent que les cristaux photoniques peuvent considérablement augmenter l'absorption dans ces différentes configurations.	44
Figure II.23.	Le schéma de la cellule proposée par Gomard et al., nanostructurée sous forme d'un réseau de trous d'air, indique que les spectres d'absorption mesurés expérimentalement montrent une absorption nettement supérieure lorsque la cellule est structurée	45
Figure II.24.	Des schémas peuvent être conçus pour montrer comment les cristaux photoniques 1D peuvent être utilisés pour améliorer l'absorption dans une cellule solaire : (a) comme couches antireflets à l'entrée des cellules, et (b) comme miroirs à l'arrière de la cellule. Lorsque la lumière incidente a une énergie correspondant à celle de la bande interdite, une partie de celle-ci est réfléchi.	46
Figure III.1.	Schéma de la structure 1D-PhC.	54
Figure III.2.	Cellule de Yee de dimensions Δx , Δy , Δz : Les composantes du champ H sont évaluées à des positions décalées d'un demi-pas spatial par rapport aux points de calcul des composantes du champ E.	55
Figure III.3.	La fenêtre de simulation de « Solar Cell » présente la sortie J-V par défaut.	59

Figure III.4.	La fenêtre de simulation de l'utilitaire affiche a) les résultats de l'efficacité quantique et b) les résultats des spectres, montrant les spectres incidents, échantillonné et absorbé.	60
Figure IV.1.	Cellule solaire à base de pérovskite.	65
Figure IV.2.	Constantes optiques du TiO ₂ (dioxyde de titane).	66
Figure IV.3.	Constantes optiques du ZnSe (sélénure de zinc).	67
Figure IV.4.	Constantes optiques du ZnO (monoxyde de zinc).	68
Figure IV.5.	Constantes optiques du ZnS (sulfure de zinc).	69
Figure IV.6.	Constantes optiques de P ₃ HT:PC ₆₁ BM.	69
Figure IV.7.	Constantes optiques de Al:ZnO (oxyde de zinc dopé à l'aluminium, AZO)	70
Figure IV.8.	Caractéristiques I=f(V) d'une cellule PV : (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).	70
Figure IV.9.	Absorption totale de la lumière (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).	71
Figure IV.10.	Efficacité quantique (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).	71
Figure IV.11.	Cellule solaire à base de pérovskite en remplaçons ensuite la couche réfléchissante en (Au) par d'autres métaux.	72
Figure IV.12.	Caractéristiques I=f(V) d'une cellule PV avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) en Be.	73
Figure IV.13.	Efficacité quantique avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) Be.	73
Figure IV.14.	Absorption totale de la lumière avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) Be.	74
Figure IV.15.	Structure proposée d'une cellule solaire à base de pérovskite avec PhC-1D(Ge/SiO ₂).	80
Figure IV.16.	(a) réflectance normalisée et (b) spectres d'absorption, pour les structures planaires et proposées.	82
Figure IV.17.	(a) Spectre d'absorption, (b) courbe J-V de la cellule solaire et (c) efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde.	75
Figure IV.18.	Cellule solaire à base de pérovskite avec un cristal photonique 1D (PhC-1D) en Ge/SiO ₂ et différentes configurations de couches PhC-1D : (Str.1) l'épaisseur de la couche PhC-1D est uniforme, (Str. 2) l'épaisseur de la couche	77

PhC-1D varie de la plus petite à la plus grande, (Str. 3) l'épaisseur de la couche PhC-1D décroît de la plus grande à la plus petit.

Figure IV.19. (a) spectre d'absorption, (b) courbe J-V de la cellule solaire, (c) efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde, pour les trois structures. 79

Tableau IV.1.	Tableau des rendements pour différents ETM et HTM.	72
Tableau IV.2.	Or et autres métaux dans la couche réfléchissante de cellule solaire et son efficacité.	75
Tableau IV.3.	Comparaison du rendement de conversion de puissance et du courant de court-circuit de la cellule solaire pérovskite à couche mince proposée avec et sans grille.	79
Tableau IV.4.	Comparaison entre le PCE et le J_{CC} pour les différentes structures proposées.	82
Tableau IV.5.	Comparaison de l'efficacité de conversion de puissance pour différentes structures de cellules solaires basées sur des matériaux pérovskites.	83

V_{CO}	:	La tension de circuit ouvert.
I_{CC}	:	Le courant de court-circuit.
I_{ph}	:	Le photo-courant.
I_S	:	Le courant de saturation.
PV	:	Photovoltaïque.
V_M	:	La tension correspond au point de puissance maximale.
I_M	:	Le courant correspond au point de puissance maximale.
FF	:	Facteur de forme.
1D	:	Unidimensionnelle.
2D	:	Bidimensionnelle.
3D	:	Tridimensionnelle.
BIP	:	Bandes Photoniques Interdites.
MEB	:	Microscopie Electronique à Balayage.
CP	:	Cristal Photonique.
hc	:	Hexagonale Compact.
cfc	:	Cubique à faces centrées.
EG	:	La bande de conduction.
PSL	:	Des modes de surface plasmon locale.
PPS	:	Des modes plasmoniques de surface propagatifs.
FDTD	:	Finite Difference Time Domain.
RCWA	:	Rigorous Coupled Wave Analysis.
MTL	:	Des lignes de transmission modale.
IQE	:	Efficacité Quantique Interne.
P_{inc}	:	Puissance incidente.
HTM	:	Hole Transport Materials.
ETM	:	Electron Transport Materials.
HTL	:	Hole Transport Layer.
ETL	:	Electron Transport Layer.

Introduction générale

Le niveau de consommation d'énergie ne cesse de croître en raison de l'évolution de l'industrie, des transports et des communications. Les énergies fossiles (pétrole, gaz naturel, charbon, uranium, etc.) représentent plus de 85 % de la consommation mondiale. Avec l'épuisement progressif de ces dernières d'une part, et la croissance de la demande énergétique d'autre part, les énergies renouvelables joueront un rôle de plus en plus important dans la société future.

Les énergies renouvelables semblent être un compromis idéal pour répondre aux besoins énergétiques mondiaux tout en préservant l'environnement, avec un coût le plus bas possible. Ce sont des sources d'énergie inépuisables fournies par le soleil, le vent, les cascades, la chaleur de la Terre, etc.

Parmi celles-ci, l'énergie solaire photovoltaïque connaît la croissance la plus rapide. Elle a la capacité de convertir directement le rayonnement solaire en énergie électrique [1], ce qui lui confère une importance cruciale dans le domaine de la recherche.

De plus, elle a connu un développement croissant depuis 1990. La recherche dans ce domaine repose sur deux points essentiels, qui peuvent sembler opposés : l'augmentation du rendement de la cellule tout en assurant une diminution du coût de production. La connaissance des matériaux utilisés dans la conception des composants est essentielle à ce développement.

Les cellules solaires conventionnelles à base de silicium affichent un rendement d'environ 17 % sur le marché, ce qui est relativement faible par rapport à la quantité importante d'énergie solaire incidente.

En conséquence, plusieurs technologies de cellules solaires ont été développées pour maximiser la quantité d'énergie solaire incidente. Elles ont été réparties en trois générations : Les cellules solaires de première génération, basées sur le silicium massif, ont des rendements de conversion de 27.6 % pour le silicium monocristallin avec concentrateur, de 26,1 % pour le silicium monocristallin sans concentrateur et de 21.2 % pour le silicium multi-cristallin [2].

Les cellules solaires de deuxième génération sont basées sur le silicium amorphe avec un rendement de 14 % [2], sur les technologies CIGS avec un rendement de 23.4 % [2] et CdTe avec un rendement de 22.1 % [2].

L'apparition récente de matériaux pérovskites, notamment les halogénures organiques-inorganiques ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, avec $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$), a ouvert de nouvelles perspectives pour le

développement de modules PV à faible coût [3, 4]. En quelques années seulement, l'efficacité des cellules solaires à base de pérovskite est passée de 3.8 % à environ 25 % [5-8].

Afin d'améliorer encore cette efficacité, différentes stratégies ont été développées, telles que l'ingénierie des matériaux d'interface [9, 10], l'optimisation des procédés de fabrication [8] et la conception d'échafaudages mésoporeux [11]. Ces stratégies visent toutes à renforcer les propriétés électriques des cellules solaires, notamment en réduisant les pertes de porteurs pour un rendement de conversion supérieur.

L'équilibre entre les propriétés électriques et optiques des cellules solaires à base de pérovskite, essentiel pour atteindre des performances optimales, peut être ajusté grâce à une gestion efficace de la lumière.

Dans une cellule solaire pérovskite standard, une couche active ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) est positionnée entre une couche de transport de trous (HTL) et une couche de transport d'électrons (ETL) [8, 10]. Un rendement de conversion élevé dépend à la fois de l'efficacité de collecte des porteurs et de la réduction des recombinaisons.

Cependant, la faible absorption de la lumière, en particulier pour les longueurs d'onde situées près du gap du matériau absorbant, a rapidement été identifiée comme la limitation principale de ces cellules. Une attention particulière s'est donc portée sur ces pertes optiques, qui sont encore plus critiques lorsqu'on considère des couches ultraminces dont les épaisseurs sont de l'ordre du micromètre, voire moins.

Pour traiter ce problème, les texturations relevant de l'optique géométrique pour les cellules à base de wafers de silicium s'avèrent inadaptées car de dimensions bien supérieures à l'épaisseur d'une couche mince. En piégeant davantage de photons dans les couches actives des cellules, il est possible de minimiser les pertes lumineuses.

L'objectif des méthodes de piégeage de la lumière est d'étendre cette capacité à l'ensemble du spectre utile. La notion de 'piégeage de la lumière' est apparue au début des années 1970 pour améliorer l'absorption lumineuse et le rendement des photo-détecteurs en silicium, notamment dans le proche infrarouge. Les recherches sur le couplage de la lumière dans les cellules solaires a évolué en un domaine à part entière.

Dans cette thèse, nous présenterons une vue d'ensemble des principaux concepts étudiés actuellement afin d'améliorer l'absorption dans les cellules solaires de dernière génération.

L'objectif de cette recherche est d'analyser et de créer une structure qui offre une absorption significativement améliorée dans la plage de longueurs d'onde de 400 à 1100 nm, améliorant ainsi considérablement l'efficacité globale.

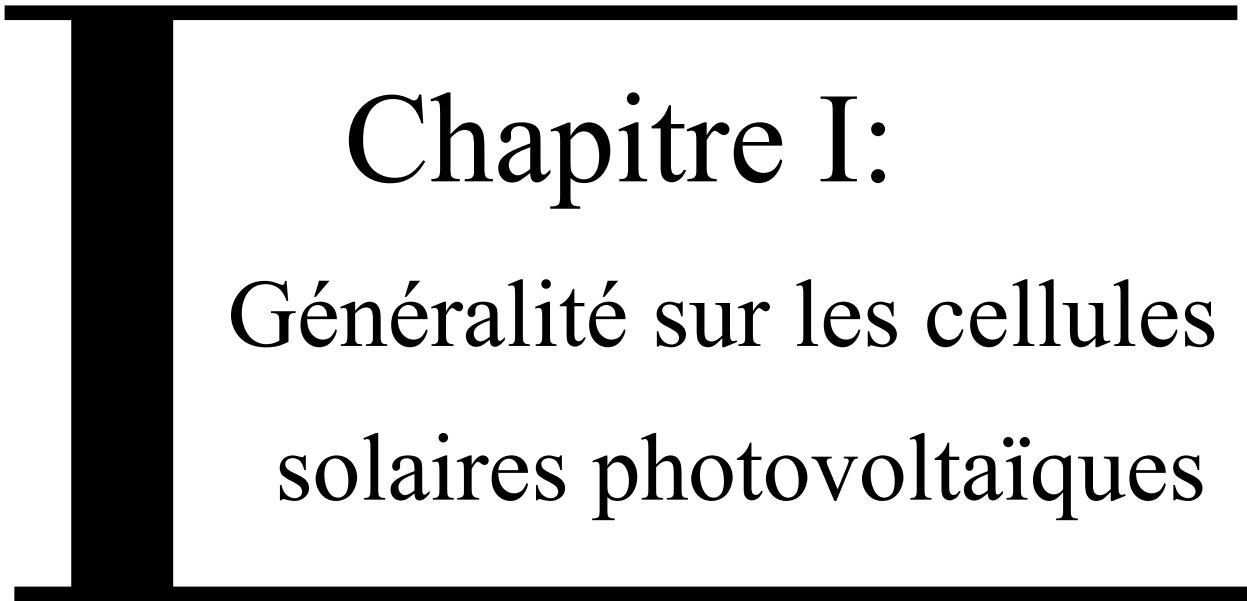
La conception de cellules solaires à partir de composés organiques est prometteuse en raison des avantages de cette technologie : facilité de conception, grande diversité des composants et coûts inférieurs par rapport aux dispositifs en silicium. Plusieurs études ont été menées pour améliorer les performances photovoltaïques de ces cellules.

Cette thèse est divisée en quatre chapitres, suivis d'une conclusion générale. Dans le premier chapitre, nous avons présenté les notions essentielles sur le développement de la cellule solaire, le principe de fonctionnement de la cellule en expliquant le phénomène photovoltaïque, les différents paramètres de sortie de la cellule photovoltaïque, les différents types de cellules solaires, ensuite le module, le string et l'effet photovoltaïque, ainsi que le système de stockage. Nous avons également présenté les avantages et les inconvénients de l'énergie photovoltaïque.

Le second chapitre, intitulé « La photonique pour le photovoltaïque », présente les notions essentielles sur les cristaux photoniques, les propriétés optiques des principales structures utilisées pour le piégeage de la lumière, les cristaux photoniques naturels, leurs caractéristiques, leurs types et leurs domaines d'application, ainsi que l'état de l'art de la photonique pour le photovoltaïque.

Ensuite, le troisième chapitre présente le logiciel de simulation utilisé dans ce travail : Rsoft CAD. Nous y détaillons les outils numériques disponibles, les modèles optiques et électriques, ainsi que les méthodes de modélisation RCWA et FDTD, LaserMOD et la diode Idéale. Le chapitre aborde également le concept des différentes fenêtres de l'interface du logiciel Rsoft CAD, permettant une meilleure compréhension et utilisation des outils de simulation.

Le quatrième chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats obtenus par le logiciel Rsoft CAD, on a une optimisation de trois structures différentes proposées dans le but d'augmenter l'efficacité et abaissé le cout de la cellule. Enfin, une conclusion générale clôt ce mémoire, résumant nos analyses, nos résultats et nos commentaires.



Chapitre I:

Généralité sur les cellules
solaires photovoltaïques

I.1. Introduction

L'énergie joue un rôle central dans le développement économique. Au cours des deux derniers siècles, les civilisations modernes se sont développées grâce à l'exploitation des combustibles fossiles, qui fournissent des sources d'énergie concentrées et abordables. Ces sources répondent à environ 80 % de la demande énergétique mondiale, mais leur disponibilité est limitée.

De plus, l'utilisation des combustibles fossiles émet du dioxyde de carbone (CO_2), contribuant à l'accentuation de l'effet de serre. Aujourd'hui, le défi énergétique majeur auquel l'humanité fait face est de réduire les émissions de CO_2 tout en remplaçant progressivement les combustibles fossiles par des sources d'énergie alternatives sans émission de carbone, appelées énergies décarbonées.

Pour relever ce défi, il est crucial de réduire la consommation d'énergie, d'adopter des technologies plus performantes, et de déployer massivement des sources d'énergie à faibles émissions de carbone, comme les énergies renouvelables et l'énergie nucléaire. La consommation d'énergie se répartit principalement entre la production d'énergie thermique, les transports, et la production d'électricité, dans cet ordre décroissant. À l'échelle mondiale, l'électricité est principalement produite à partir du charbon.

Toutefois, il est possible de générer cette forme d'énergie à partir de diverses sources, notamment des sources décarbonées. En revanche, les transports dépendent encore largement du pétrole. Pour la production de chaleur ou de froid, il est envisageable de réduire à terme l'utilisation des combustibles fossiles. Une part significative de l'énergie mondiale est consommée par les secteurs de l'habitat et des transports. Des économies d'énergie considérables sont possibles dans le secteur de l'habitat.

Cependant, la réduction de la consommation d'énergie dans les transports est une problématique plus complexe à résoudre. Les sources d'énergie peuvent être classées en deux grandes catégories : d'une part, les matières premières telles que le pétrole, le gaz et le charbon, et d'autre part, les phénomènes naturels comme le soleil, le vent et l'eau, utilisés pour produire de l'énergie. Ces sources sont divisées en deux types : les énergies non renouvelables et les énergies renouvelables.

Dans ce chapitre, nous avons détaillé les concepts liés à l'énergie solaire photovoltaïque, l'une des formes d'énergies renouvelables. Cette énergie, issue du rayonnement solaire capté

sur Terre, est une source naturelle inépuisable et entièrement écologique. Elle est exploitée de trois manières principales : en thermodynamique, en thermique et en photovoltaïque.

Ce dernier fait l'objet de développements récents visant à améliorer ses performances et à renforcer sa compétitivité économique. Depuis plusieurs années, la recherche dans ce domaine s'efforce d'étendre ses applications tout en réduisant les coûts.

I.2. Historique du photovoltaïque

L'effet photovoltaïque a été découvert par Antoine Becquerel en 1839. Il repose sur l'utilisation des semi-conducteurs pour convertir la lumière en électricité. Les photons, en libérant des électrons, créent une différence de potentiel aux bornes de la cellule, produisant ainsi un courant continu.

Dans les années 1930, l'hélioélectricité a été introduite à l'aide de cellules en oxyde de cuivre, puis en sélénium. Cependant, ce n'est qu'en 1954 que les laboratoires de la compagnie Bell Telephone ont fabriqué les premières cellules solaires en silicium, offrant ainsi une réelle possibilité de production d'énergie. Cette technologie a rapidement été utilisée dans les années 1960 pour alimenter des engins spatiaux, notamment les satellites.

Les premières applications terrestres, visant l'électrification de sites isolés, ont vu le jour à partir des années 1970.

Durant les années 1980, la technologie solaire terrestre a continué de se développer, notamment avec la construction de plusieurs centrales électriques de plusieurs mégawatts. Elle est devenue populaire auprès des consommateurs grâce à des produits à faible consommation d'énergie, tels que les montres, les calculatrices, les balises radio et météorologiques, ainsi que les pompes et réfrigérateurs solaires [12].

Depuis les années 1990, les prix des cellules solaires ont considérablement diminué grâce aux avancées dans les techniques de fabrication et à l'augmentation des volumes de production. La production de modules photovoltaïques est principalement réalisée en Chine (environ 60 % de la production mondiale), ainsi qu'au Japon, aux États-Unis, en Allemagne et dans d'autres pays européens, par des entreprises majeures telles que Yingli Green Energy, First Solar et Suntech Power.

La production mondiale de modules photovoltaïques est passée de 5 MWc en 1982 à plus de 18 GWc en 2013. En Algérie, le groupe « Condor Electronics » a lancé en juillet 2013 la

production de panneaux photovoltaïques, avec des puissances variant de 70W à 285W, à des prix compétitifs [12].

Dans le cadre de la mise en œuvre du programme national des énergies renouvelables en Algérie, un projet de 400 MW d'énergie solaire a été lancé pour répondre à la demande complémentaire en électricité prévue pour l'été 2014. Ce projet vise la construction de 23 centrales solaires dans les régions des Hauts Plateaux et du sud-ouest, ainsi que dans le Grand Sud. Il est également prévu de développer un parc d'énergies renouvelables d'une capacité de 5539 MW au cours des dix prochaines années.

L'objectif est d'atteindre 12000 MW d'énergies renouvelables destinées à la consommation intérieure d'ici 2030. À la fin de l'année 2013, la puissance photovoltaïque installée cumulée à l'échelle mondiale avait atteint 138.9 GW [12].

I.3. Définition d'une cellule solaire

Une cellule solaire photovoltaïque est généralement constituée d'un semi-conducteur de type n et d'un semi-conducteur de type p. Lorsque la lumière frappe la cellule, elle génère une différence de potentiel due à l'excitation des porteurs de charge à proximité de la jonction, où le flux lumineux est absorbé.

Autrement dit, une cellule solaire est un dispositif semi-conducteur capable de convertir directement l'énergie solaire en énergie électrique. Cette conversion d'énergie se produit lorsque des charges électriques positives et négatives sont générées et déplacées dans le matériau semi-conducteur sous l'effet de la lumière [13].

Cette conversion repose sur plusieurs principes essentiels :

- a. L'écart entre les bandes de valence et de conduction permet l'absorption des photons, une caractéristique fondamentale des semi-conducteurs.
- b. La transformation de l'énergie des photons en énergie électrique se traduit par la création d paires électron-trou.
- c. Une jonction p-n, ou une hétérojonction dans le cas de deux semi-conducteurs différents, permet de collecter les porteurs de charge générés dans le matériau.

Pour que ce phénomène se produise, le matériau ou les matériaux constituant la cellule doivent être soigneusement choisis. Les cellules solaires doivent présenter deux niveaux d'énergie distincts et être suffisamment conductrices pour permettre le passage de l'électricité.

C'est pourquoi les semi-conducteurs jouent un rôle clé dans l'industrie électronique de l'énergie solaire [13].

I.4. Principe de fonctionnement des cellules solaires

Les cellules photovoltaïques utilisent l'effet photoélectrique pour générer de l'électricité en courant continu en absorbant le rayonnement solaire. Cet effet permet aux cellules de convertir directement l'énergie lumineuse des photons en électricité via un matériau semi-conducteur chargé en porteurs de charge.

Une cellule photovoltaïque est constituée de deux types de semi-conducteurs : l'un ayant un excès d'électrons et l'autre un déficit d'électrons. Ces deux régions sont respectivement appelées "dopage de type n" et "dopage de type p".

Le dopage d'un cristal de silicium consiste à y ajouter des atomes étrangers pour augmenter la conductivité électrique du matériau. Un atome de silicium possède quatre électrons de valence. Une couche de la cellule est dopée avec des atomes de phosphore, qui en contiennent cinq (un de plus que le silicium).

Ce type de dopage est appelé "dopage de type n" ou dopage négatif, car il y a un excès d'électrons (chargés négativement). En revanche, une autre couche est dopée avec des atomes de bore, qui n'ont que trois électrons (un de moins que le silicium).

Ce type de dopage est qualifié de "dopage de type p" ou dopage positif, en raison du déficit d'électrons ainsi créé. Lorsque la couche de type n, entre en contact avec la couche de type p, les électrons en excès du matériau de type n diffusent vers le matériau de type p [14].

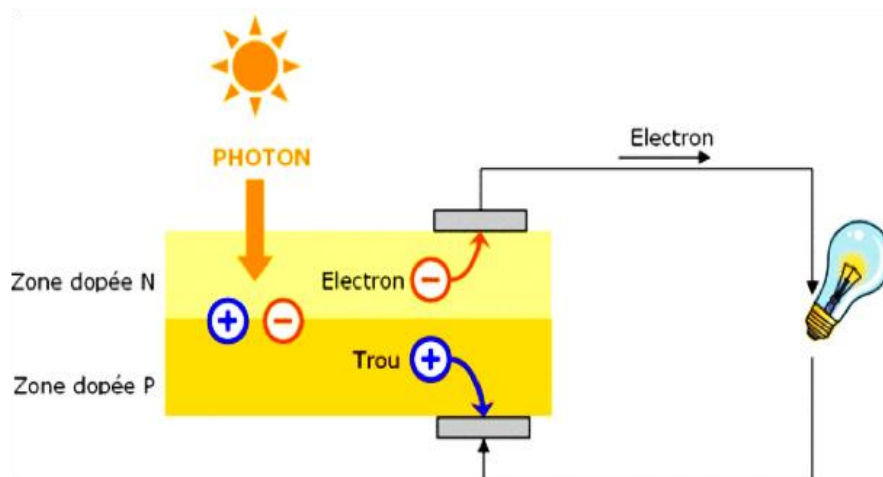


Figure I.1. Principe de fonctionnement des cellules solaires.

Lorsqu'ils traversent la cellule photovoltaïque, les photons arrachent des électrons aux atomes de silicium des couches n et p. Les électrons ainsi libérés se déplacent dans toutes les directions. Après avoir quitté la couche p, ces électrons retournent vers la couche n à travers le circuit. Ce mouvement d'électrons constitue ce que nous appelons l'électricité [14].

I.5. Différents paramètres de sortie de la cellule photovoltaïque

La technique la plus essentielle pour évaluer les caractéristiques d'une cellule solaire photovoltaïque est la courbe courant-tension sous illumination. Dans l'obscurité, la caractéristique courant-tension $I(V)$ d'une jonction PN passe par l'origine du graphique (Figure I.2), ce qui signifie que I et V ont le même signe selon la convention de signe ; en d'autres termes, le produit $V \times I$ est toujours positif. En revanche, lorsque la jonction est éclairée, la caractéristique $I(V)$ se déplace vers des courants négatifs d'une valeur équivalente au photocourant I_{ph} , créant ainsi une région où le produit $V \times I$ devient négatif. Dans ce cas, la photodiode fournit de l'énergie électrique [15].

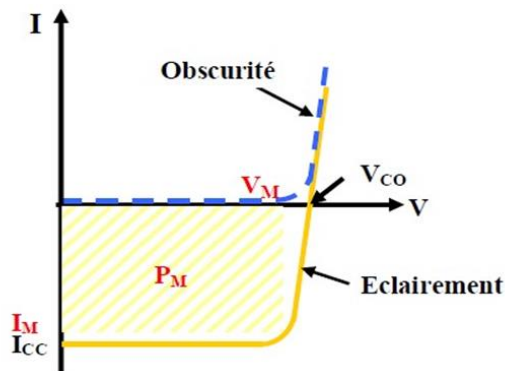


Figure I.2. Caractéristiques $I(V)$ d'une cellule photovoltaïque soumise à différents éclairages.

Cette dernière figure permet de calculer les quatre grandeurs photovoltaïques caractérisant la cellule solaire qui sont

I.5.1. La tension de circuit ouvert V_{CO} (pour $I_{CC} = 0$)

Elle dépend des caractéristiques de la jonction électronique et des matériaux utilisés. Pour une cellule donnée, elle reste presque constante avec l'intensité lumineuse, au moins pour des niveaux d'éclairage supérieurs à 100 W/m^2 , ce qui correspond au rayonnement solaire sur Terre lors d'une journée très nuageuse.

On peut la mesurer en connectant un voltmètre aux bornes de la cellule [15]. De plus, elle est liée au courant de court-circuit I_{CC} et au courant de saturation I_S par une relation logarithmique.

$$V_{CO} = \frac{n \cdot k \cdot t}{q} \cdot \ln\left(\frac{I_{CC}}{I_S} + 1\right) \quad (I.1)$$

I.5.2. Le courant de court-circuit I_{CC} (pour $V_{CO} = 0$)

Il est directement proportionnel à l'énergie de rayonnement reçue, c'est-à-dire à l'éclairement $G(W/m^2)$, à la température ambiante et à la vitesse de circulation de l'air ambiant. Il dépend également de la surface de la cellule. Sa valeur peut être mesurée en connectant un ampèremètre aux bornes de la cellule. Pour les cellules photovoltaïques (PV) au silicium, la tension V_{CO} est d'environ 0.4 à 0.6 V, et la densité de courant I_{CC} est d'environ 12 mA/cm² dans des conditions de test de laboratoire standard (STC).

Ces conditions correspondent à une distribution du rayonnement solaire de type AM1.5, avec un rayonnement incident normal sur la cellule PV de 1000 W/m², une température de la cellule de 25°C ± 2°C, et une vitesse de l'air circulant autour de la cellule d'environ 2 m/s, cette dernière étant prise en compte dans la température de la cellule [15].

Lorsque la cellule solaire est non polarisée ($V=0$), le courant qui circule dans la charge est le photo-courant d'éclairement.

$$I_{CC} = I_{ph} \quad (I.2)$$

I.5.3. Facteur de forme FF

Le facteur de forme FF est défini comme le rapport entre la puissance maximale fournie par une cellule photovoltaïque (P_M), mesurée sous des conditions spécifiques telles que l'éclairement, la température et la vitesse de circulation de l'air, et le produit du courant de court-circuit (I_{CC}) par la tension en circuit ouvert (V_{CO}), représentant ainsi la puissance maximale d'une cellule idéale.

$$FF = \frac{P_M}{V_{CO} \times I_{CC}} = \frac{V_M \times I_M}{V_{CO} \times I_{CC}} \quad (I.3)$$

Une cellule photovoltaïque produite industriellement présente un facteur de forme FF d'environ 70 %. En revanche, une cellule idéale ne devrait pas avoir un FF dépassant 0.89, en raison de la relation exponentielle qui existe entre le courant et la tension [15].

I.5.4. Le rendement

Le rendement de conversion est une caractéristique électrique essentielle de la cellule solaire, décrivant la relation entre la puissance électrique maximale que celle-ci peut produire et la puissance lumineuse qu'elle reçoit.

$$\eta = \frac{P_M}{P_{inc}} = \frac{V_M \cdot I_M}{P_{inc}} = \frac{FF \cdot V_{CO} \cdot I_{CC}}{P_{inc}} \quad (I.4)$$

Où P_{inc} : est la puissance incidente du rayonnement solaire sur la surface de la cellule. V_M et I_M sont respectivement la tension et le courant correspondant au point de puissance maximale de la caractéristique I(V).

Cette formule indique que les performances d'une photopile dépendent directement des valeurs de trois paramètres : I_{CC} , V_{CO} et FF . Ces paramètres sont influencés d'une part par les propriétés spécifiques du matériau, telles que la largeur de la bande interdite (gap), et d'autre part par des facteurs technologiques, comme la profondeur de la jonction, l'épaisseur de la zone de charge d'espace, ainsi que la présence de résistances parasites [15].

I.6. Les différents types de cellules solaires

Il existe trois grandes familles de cellules. Leurs rendements sont en perpétuel progrès.

I.6.1. Les cellules solaires au silicium cristallin

Le silicium est dérivé de la silice, dont l'une des formes, le quartz, est couramment trouvé dans le sable. Les cellules solaires en silicium représentent plus de 95 % du marché, avec des rendements moyens pour les produits commerciaux variant entre 16.5 % et 22 % selon la technologie utilisée.

Le silicium est généralement sous forme de plusieurs cristaux (polycristallins) après un traitement à froid. Sa fabrication est relativement simple et peut atteindre une efficacité supérieure à 22 % en laboratoire.

De plus, il est possible de recréer du silicium fondu en gros cristaux (monocristaux) en laboratoire, ce qui permet d'atteindre des rendements allant jusqu'à 26.6 %. Ces dernières années, les prix des cellules en silicium sont devenus très compétitifs par rapport aux autres solutions de production d'électricité [16].

I.6.2. Les cellules solaires en couches minces

Au lieu de découper le silicium en fines tranches d'environ 200 μm , il est possible de déposer des matériaux semi-conducteurs en couches de quelques microns d'épaisseur sur des substrats tels que le verre ou le plastique. Des matériaux comme le tellure de cadmium ou le CIGS (Cuivre/Indium/Gallium/Sélénium) peuvent être employés. Les rendements obtenus en laboratoire pour ces matériaux sont comparables à ceux du silicium, atteignant respectivement 22.1 % et 23.3 %.

De plus, le silicium peut être utilisé sous forme de couches minces lorsqu'il est à l'état "amorphe" (non cristallisé). Cette technologie, plus ancienne, a été employée dans des appareils tels que les petites calculatrices, bien qu'elle offre des performances inférieures [16].

I.6.3. Les cellules solaires organiques

Reposant sur des molécules ou des polymères issus de la chimie organique plutôt que sur des semi-conducteurs minéraux, ces cellules commencent à trouver des applications.

Bien que leurs rendements demeurent faibles et que leur stabilité à long terme soit insuffisante, les coûts de production de ces cellules sont très compétitifs. Les cellules pigmentaires photosensibles, également appelées mélanocytes, s'inspirent de la photosynthèse végétale [16].

I.7. Le module photovoltaïque

Dans les applications courantes, une seule cellule solaire photovoltaïque ne peut pas produire les niveaux de tension et de courant requis. Par conséquent, plusieurs dizaines de cellules photovoltaïques sont assemblées en série et en parallèle pour former un module photovoltaïque.

Le nombre de cellules varie selon les modules, les configurations classiques comprenant 36, 60 ou 72 cellules connectées en série. Cette méthode de connexion est choisie en raison de la faible tension de fonctionnement d'une cellule individuelle (qui ne dépasse généralement pas quelques dixièmes de volt) et du fait que le courant généré sous un fort rayonnement solaire ne dépasse que quelques ampères.

En général, la tension de fonctionnement des modules photovoltaïques se situe autour de quelques dizaines de volts, avec un courant de quelques ampères. Les cellules au sein du module sont organisées en groupes, et le cas le plus critique, où les cellules en bon état (ayant des

caractéristiques similaires et recevant le même éclairage) se déchargent à travers une seule cellule dans l'obscurité, détermine la taille de ces groupes. Les modules en silicium comportent généralement des groupes de 18 ou 20 cellules. Chaque groupe est équipé d'une diode de protection, souvent appelée diode de dérivation ou de bypass, montée en antiparallèle pour protéger la cellule lorsqu'elle fonctionne en mode récepteur. En conditions normales, il s'agit généralement d'une diode rapide de type Schottky, polarisée en inverse. La structure d'un module photovoltaïque est illustrée à la Figure I.3 [17].

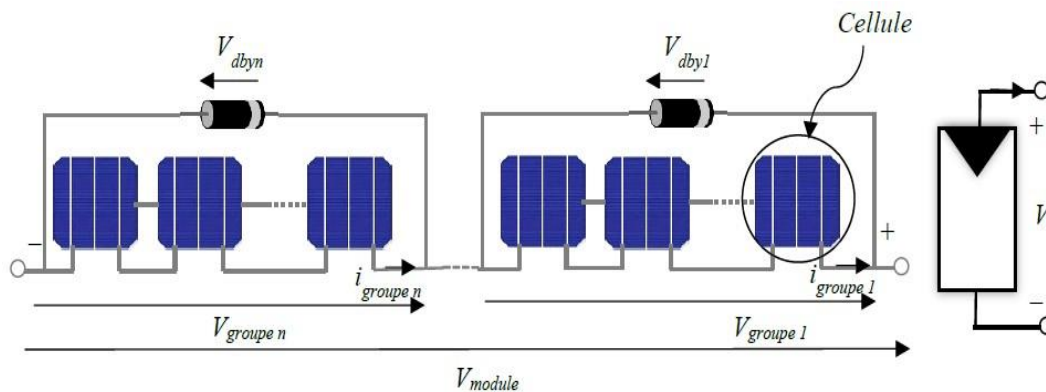


Figure I.3. Module PV.

I.8. Le string photovoltaïque

Pour obtenir le niveau de tension nécessaire à l'application, plusieurs modules photovoltaïques sont reliés en série pour constituer un string. Ce string est doté d'une diode de protection, communément appelée diode anti-retour (voir figure 1.4). Cette diode a pour fonction d'empêcher le courant inverse de circuler dans le string photovoltaïque [17].

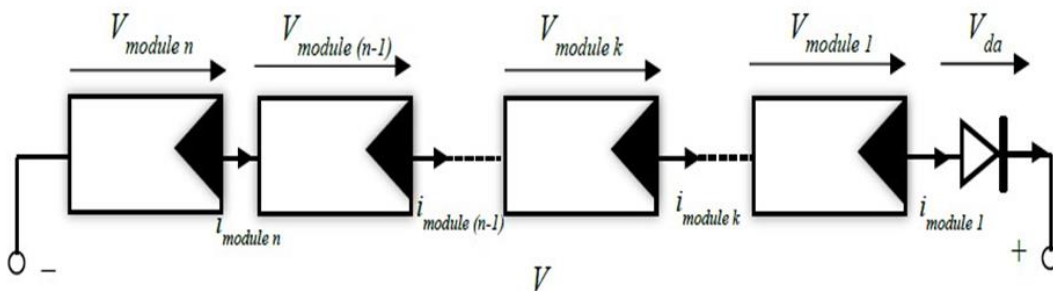


Figure I.4. String PV.

I.9. L'effet photovoltaïque

Lorsque la lumière frappe une cellule solaire, une partie de l'énergie incidente est directement transformée en électricité. Cette caractéristique remarquable, qui constitue le fondement de tout système photovoltaïque, est désignée sous le nom d'effet photovoltaïque (voir Figure I.5).

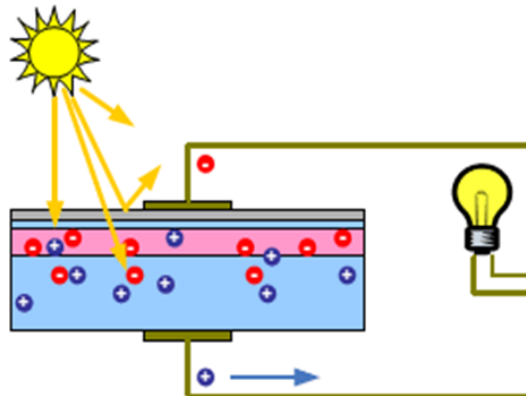


Figure I.5. L'effet photovoltaïque.

L'effet photovoltaïque est un phénomène physique caractéristique de certains matériaux, appelés « semi-conducteurs », qui produisent de l'électricité lorsqu'ils sont exposés à la lumière. Parmi ces matériaux, le silicium cristallin, qui représente actuellement 90 % des panneaux solaires fabriqués dans le monde, est le plus courant.

Ce phénomène a été observé pour la première fois en 1839 par Becquerel, lorsqu'il a immergé des électrodes dans un électrolyte éclairé. En 1876, un effet photoélectrique a également été constaté dans le sélénium, un solide utilisé pour mesurer la lumière avant l'avènement du silicium [18].

I.10. Système de stockage

Dans une installation photovoltaïque, le stockage fait référence à la conservation de l'énergie produite par le générateur PV, en attente d'une utilisation ultérieure. La gestion de l'énergie solaire implique de considérer le stockage en fonction des conditions météorologiques, répondant à deux fonctions principales [19] :

- Fournir de l'électricité à l'installation lorsque le générateur PV ne produit pas, comme pendant la nuit ou par mauvais temps.
- Apporter des puissances supérieures à celles fournies par le générateur PV.

Les principales caractéristiques d'une batterie sont [19] :

- a. Capacité en Ampère heure :** La capacité d'une batterie, exprimée en ampères-heures (Ah), représente le produit du courant en ampères qu'elle peut fournir et de la durée en heures pendant laquelle ce courant est disponible. Ainsi, théoriquement, une batterie de 200 Ah peut délivrer 200 A pendant une heure, 50 A pendant quatre heures, ou encore 4 A pendant 50 heures.
- b. Rapports de chargement et déchargement :** La capacité disponible d'une batterie peut fluctuer en fonction du rythme de charge ou de décharge par rapport à celui qui est recommandé. En général, la capacité d'une batterie a tendance à augmenter légèrement si elle est déchargée à un rythme plus lent. À l'inverse, si elle est déchargée à un rythme plus rapide, sa capacité sera diminuée.
- c. Température :** Un autre facteur qui impacte la capacité d'une batterie est la température ambiante, tant pour la batterie elle-même que pour son environnement. La performance d'une batterie est généralement évaluée à une température de 27 degrés Celsius. À des températures inférieures, sa capacité peut diminuer de manière significative. Bien que des températures plus élevées puissent légèrement augmenter la capacité, elles entraînent également une perte d'eau accrue et peuvent réduire la longévité de la batterie.
- d. La durée de vie :** Un accumulateur peut être complètement chargé et déchargé plusieurs fois avant que ses performances ne commencent à se dégrader. De plus, indépendamment de son mode d'utilisation, chaque accumulateur a une durée de vie globale, mesurée en années ou en nombre de cycles.
- e. Profondeur de décharge :** La profondeur de décharge désigne le pourcentage de la capacité totale d'une batterie qui a été utilisée durant un cycle de charge et de décharge. Les batteries à "cycle peu profond" sont conçues pour être déchargées de 10 à 25 % de leur capacité totale à chaque cycle. En revanche, la plupart des batteries "à cycle profond" utilisées dans les applications d'énergie solaire peuvent supporter une décharge allant jusqu'à 80 % de leur capacité sans subir de dommages. Les fabricants de batteries au nickel-cadmium affirment qu'elles peuvent être entièrement déchargées sans aucun risque de détérioration.
- f. La profondeur de décharge :** Cependant, cela impacte également les batteries à cycle profond. Plus la décharge est élevée, plus la durée de vie de la batterie diminue.

- g. La tension d'utilisation** : C'est la tension à laquelle l'énergie stockée est généralement délivrée à la charge.
- h. Le rendement** : Il s'agit du rapport entre l'énergie électrique restituée par l'accumulateur et celle qui lui a été fournie.
- i. Le taux d'autodécharge** : L'autodécharge désigne la réduction de capacité d'un accumulateur lorsqu'il reste inactif (sans charge) pendant une période donnée [20].

I.10.1. Types d'accumulateurs

Dans un système photovoltaïque, plusieurs méthodes de stockage sont disponibles, bien que les puissances rencontrées soient généralement inférieures au MW.

Le stockage électrochimique est actuellement la seule option viable pour l'énergie électrique. Deux types principaux d'accumulateurs sont couramment utilisés dans les systèmes photovoltaïques [20] :

a) Les Accumulateurs au plomb acide

La batterie au plomb-acide est la méthode de stockage d'énergie électrique la plus courante, en raison de son coût relativement bas et de sa large disponibilité. En revanche, les batteries au nickel-cadmium, bien qu'elles soient plus onéreuses, sont utilisées dans des applications où la fiabilité est essentielle [21].



Figure I.6. Batterie au plomb acide.

b) Les Accumulateurs au Nickel- Cadmium

Les batteries au Nickel-Cadmium présentent une structure physique similaire à celle des batteries au plomb-acide. Elles utilisent de l'hydroxyde de nickel pour les plaques positives et de l'Oxyde de Cadmium pour les plaques négatives.

L'électrolyte utilisé est de l'hydroxyde de potassium. La tension de ce type de batterie se situe entre 1.15 et 1.17 volt par cellule, en fonction de l'état de charge, avec un rendement énergétique d'environ 70 %.

Bien que leur coût soit encore élevé, ces accumulateurs offrent de nombreux avantages. Très bonne résistance mécanique [22].

- Capacité à supporter des décharges profondes.
- Absence d'émanations toxiques provenant de l'électrolyte.
- Résistance au gel.



Figure I.7. Batterie au Nickel-Cadmium

I.11. Les avantages et les inconvénients de l'énergie photovoltaïque [23]

L'énergie solaire présente de nombreux avantages

I.11.1. Les avantages de l'énergie photovoltaïque

- La production de cette électricité renouvelable est écologique et non toxique.
- Les systèmes photovoltaïques offrent une grande fiabilité.
- L'énergie photovoltaïque est particulièrement avantageuse en milieu urbain en raison de sa compacité et de son fonctionnement silencieux.
- Grâce à la disponibilité universelle de la lumière solaire, l'énergie photovoltaïque peut être utilisée aussi bien dans des villages isolés en montagne que dans le cœur des grandes villes.
- L'électricité photovoltaïque est générée à proximité de son point de consommation, de manière décentralisée, directement chez l'utilisateur.

- Les matériaux utilisés (verre, aluminium) sont conçus pour résister aux conditions climatiques les plus extrêmes, y compris la grêle.
- La durée de vie des panneaux photovoltaïques est très longue, avec certains fabricants offrant une garantie de 25 ans sur leurs produits.

I.11.2. Les inconvénients de l'énergie photovoltaïque

- La production d'énergie est tributaire de l'ensoleillement, qui varie constamment.
- Les coûts sont très élevés.
- Le rendement de conversion est relativement faible.
- Si l'énergie doit être stockée dans des batteries, le coût de l'installation augmente.
- La fabrication peut entraîner une pollution.

Malgré ces inconvénients, le marché du photovoltaïque continue d'évoluer et de croître. De plus, la technologie photovoltaïque est en phase de maturation, notamment grâce à la réduction des coûts de fabrication des équipements [23].

I.12. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté des généralités sur des cellules solaires en explorant plusieurs aspects fondamentaux et avancés du photovoltaïque.

Nous avons commencé par une introduction générale sur l'énergie solaire, suivie d'un historique du PV retraçant ses principales étapes de développement jusqu'à aujourd'hui. Ensuite, nous avons défini la cellule solaire et expliqué son principe de fonctionnement, basé sur l'effet photovoltaïque, un phénomène physique qui convertit directement la lumière en électricité.

Nous avons également analysé les paramètres clés des cellules photovoltaïques, notamment la V_{OC} , qui représente la tension maximale générée par une cellule lorsqu'elle n'est pas connectée à une charge, et l' I_{CC} , correspondant au courant maximal fourni par la cellule lorsqu'elle est en court-circuit.

Le FF, évaluant la qualité de la cellule en comparant sa puissance maximale réelle à sa puissance théorique, et le η , mesurant l'efficacité de conversion de l'énergie lumineuse en énergie électrique, ont également été étudiés en détail.

Ensuite, nous avons exploré les différents types de cellules solaires, en mettant l'accent sur les cellules en silicium cristallin, largement utilisées et disponibles sous forme monocristalline et polycristalline.

Les cellules à couches minces, caractérisées par leur faible coût et leur légèreté, mais avec des rendements généralement inférieurs, et les cellules organiques, qui offrent une flexibilité accrue mais souffrent encore de limitations en termes de durabilité et d'efficacité, ont également été abordées.

Nous avons poursuivi en expliquant les concepts de modules solaires, composés de plusieurs cellules connectées, et de strings, regroupant plusieurs modules pour former des ensembles fonctionnels.

Une explication approfondie de l'effet PV, à la base du fonctionnement des cellules solaires, a également été fournie.

Enfin, nous avons élargi la discussion en abordant les systèmes de stockage associés aux installations photovoltaïques, avec un focus sur les accumulateurs tels que les batteries lithium-ion et au plomb-acide, qui optimisent l'autonomie et garantissent la continuité de l'alimentation électrique.

Nous avons conclu le chapitre en examinant les avantages du PV, notamment son caractère renouvelable, sa faible empreinte écologique et son accessibilité croissante, tout en mentionnant ses principaux inconvénients, comme les coûts initiaux d'installation, les limites d'efficacité et la dépendance aux conditions météorologiques.

Chapitre II:

La photonique pour le
photovoltaïque

II.1. Introduction

La notion de « cristaux photoniques » a été proposée pour la première fois en 1987 [24], et le premier cristal photonique a été fabriqué en 1991 [25]. Ces cristaux sont des structures où l'indice de réfraction varie périodiquement sur une, deux, ou trois dimensions.

Cette périodicité crée, pour la lumière se propageant à travers le cristal photonique, un effet similaire à celui d'un potentiel périodique sur les électrons dans un cristal. Ainsi, tout comme les électrons possèdent des bandes d'énergie permises et interdites, il existe des bandes photoniques permises et interdites. Une bande photonique correspond aux modes de propagation possibles dans le cristal, tandis qu'une bande interdite photonique représente une gamme d'énergies dans laquelle la lumière ne peut se propager dans certaines directions. L'usage des cristaux photoniques permet de contrôler la propagation de la lumière à l'échelle de la longueur d'onde dans le matériau, une caractéristique qui les rend particulièrement intéressants pour de nombreuses applications.

II.2. Définition des cristaux photoniques

Le motif du réseau des cristaux photoniques, constitués des structures périodiques composés de matériaux diélectriques, métallos diélectriques ou de leurs combinaisons, se présentent en configurations unidimensionnelle (1D), bidimensionnelle (2D) et tridimensionnelle (3D) (voir Figure II.1). Grâce à leur capacité à confiner la lumière, ces cristaux permettent la réalisation de diverses fonctions optiques, ouvrant la voie à des avancées significatives dans la fabrication de circuits intégrés optoélectroniques. La majorité des applications des cristaux photoniques repose sur leur bande interdite photonique. Pour créer une fréquence permise au sein de cette bande interdite, il est nécessaire d'introduire des défauts dans la structure périodique [26].

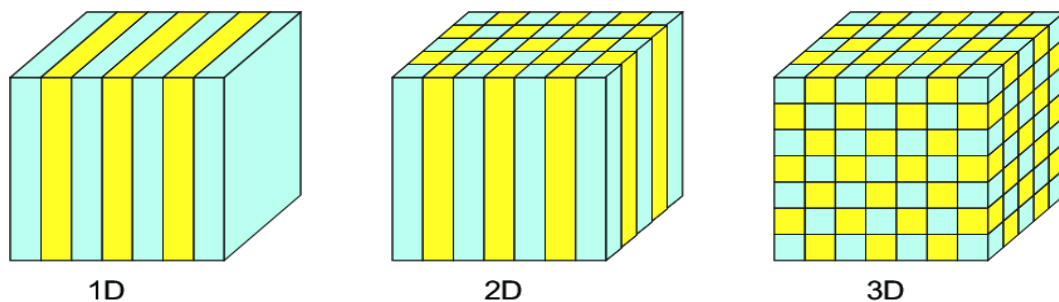


Figure II.1. Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), Bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D).

II.3. Propriétés optiques des principales structures utilisées pour le piégeage de la lumière

Les auteurs de [27] exposent les propriétés optiques des principales structures employées pour le piégeage de la lumière dans des couches minces. Ces structures se distinguent par leur capacité à accroître l'absorption dans certains intervalles de longueurs d'onde, en particulier près du gap des matériaux absorbants.

Les approches classiques de l'optique géométrique ne sont pas adaptées aux structures de piégeage de lumière de faible épaisseur, comme les structures pyramidales antireflet, nécessitant plutôt des méthodes d'optique ondulatoire.

Le concept de base est le réseau de diffraction, mais des concepts plus avancés incluent les cristaux photoniques et les plasmons de surface, illustrés schématiquement en figure II.2 [27].

Nous commencerons par décrire chacun de ces effets individuellement, en présentant leurs principales propriétés physiques à l'aide de diagrammes de dispersion typiques. Ces diagrammes illustrent la relation entre la pulsation (ω) et la composante parallèle du vecteur d'onde (k_{\parallel}).

Enfin, pour mieux comprendre les propriétés de couplage de ces différentes structures et optimiser l'absorption de la lumière incidente, nous explorerons leur application [27].

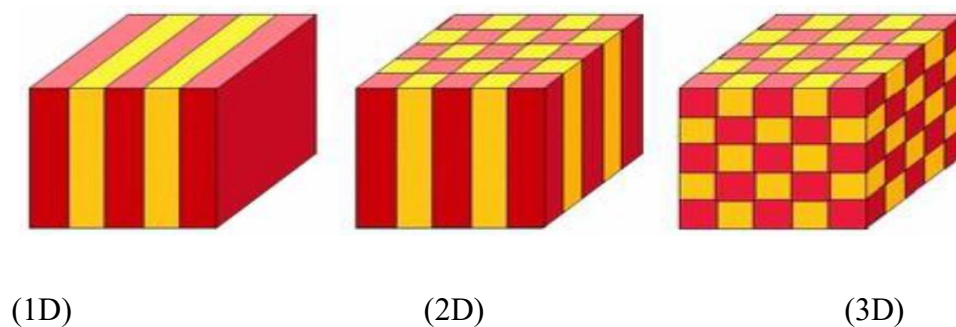


Figure II.2. Principales structures étudiées pour le piégeage de la lumière. Les deux premiers ordres de diffraction sont illustrés pour le réseau de diffraction. La période du réseau de diffraction et celle du cristal photonique (CP) sont notées « a » [27].

II.3.1. Diffraction de la lumière par un réseau

Le diagramme de dispersion d'un réseau de diffraction pour les deux premiers ordres de diffraction est illustré à la figure II.3.

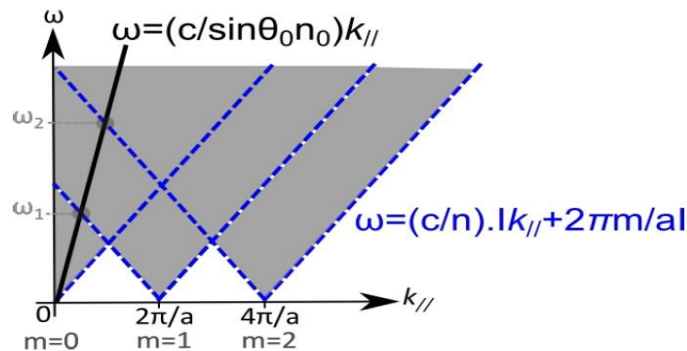


Figure II.3. Un diagramme schématisé de la dispersion dans un réseau de diffraction montre les ordres de diffraction $m = 0$, $m = 1$ et $m = 2$ pour $k_{//} > 0$. L'angle d'incidence de la lumière, noté θ_0 , est supposé non nul dans ce contexte.

Sur cette figure, on observe plusieurs « lignes lumineuses » représentées par des lignes pointillées, délimitant des « cônes de lumière » ou zones d'interférence lumineuse.

Ces cônes se reproduisent périodiquement tous les $2\pi/a$ (où a désigne la période du réseau), correspondant ainsi aux différents ordres de diffraction. Les ondes dont le vecteur $k_{//}$ se situe à l'intérieur d'un cône de lumière peuvent interagir avec les modes du réseau. Pour une incidence lumineuse d'angle θ , l'ordre θ se propage indépendamment de la fréquence, puisque $k_{//}$ demeure toujours dans le cône de lumière centré sur θ .

Les ordres supérieurs, s'ils existent, apparaissent aux fréquences croissantes ω_1 pour l'ordre 1 et ω_2 pour l'ordre 2 [27].

Dans le cadre d'une application de piégeage de la lumière, il est avantageux de coupler les ondes incidentes aux ordres de diffraction transmis ($m > 0$), ce qui allonge leur parcours optique à l'intérieur de la couche de matériau actif située sous le réseau de diffraction.

Les états optiques du matériau actif sont quantifiés en réduisant progressivement l'épaisseur de cette couche jusqu'à la ramener à la longueur d'onde, atteignant ainsi une configuration comparable à celle d'un cristal photonique sous forme de membrane.

Ce changement progressif de configuration modifie le diagramme de dispersion et génère des effets physiques exploitables pour le piégeage de la lumière [27]. La figure II.4 présente le diagramme de bandes d'un cristal photonique pour la première zone de Brillouin. Par rapport

au cas précédent, une discrétisation des états accessibles est observée, et des bandes photoniques interdites ou « BIP » apparaissent aux limites de cette zone de Brillouin. La modulation de la permittivité est d'autant plus marquée que ces bandes interdites sont larges.

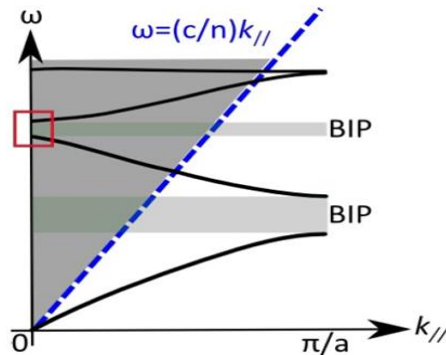


Figure II.4. Un diagramme schématisé de la dispersion d'un cristal photonique est présenté dans la première zone de Brillouin, avec la période du cristal photonique notée 'a' et pour $k_{//} > 0$.

Dans les bandes interdites de fréquences, aucun mode ne peut exister. Les autres modes, en fonction de leur valeur de $k_{//}$ et de leur symétrie, peuvent ou non interagir avec les ondes dans l'espace libre.

Comme mentionné précédemment, ces modes doivent se situer au-dessus de la ligne de lumière pour permettre le couplage entre la lumière incidente et les modes du cristal photonique. Prenons, par exemple, les modes représentés en rouge dans la Figure II.4, correspondant à une incidence quasi-normale ($k_{//} \approx 0$).

Ces modes sont répartis en bandes autour du BIP et présentent une courbure relativement faible. En couplant une onde incidente avec ces modes, la vitesse de groupe des photons dans le cristal photonique à membrane absorbante peut être réduite, augmentant ainsi leur durée de vie pour une meilleure absorption [27].

II.3.2. Couplage de la lumière avec les modes d'un cristal photonique

Les milieux diélectriques structurés, où la permittivité varie de façon périodique dans une, deux ou trois dimensions, constituent en général les cristaux photoniques. La plupart de ces structures sont réalisées sous forme de couches minces, avec un indice de réfraction élevé et une épaisseur de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde. Dans ce contexte, il est préférable d'opter pour un cristal photonique sous forme de membrane.

Ce type de cristal est intégré dans un guide d'onde plan, permettant de confiner la lumière par réfraction dans l'épaisseur de la couche. La diffraction, modulée selon une, deux ou trois directions spatiales, assure le contrôle latéral de la lumière, en fonction de la structuration choisie (voir figure II.5) [27].

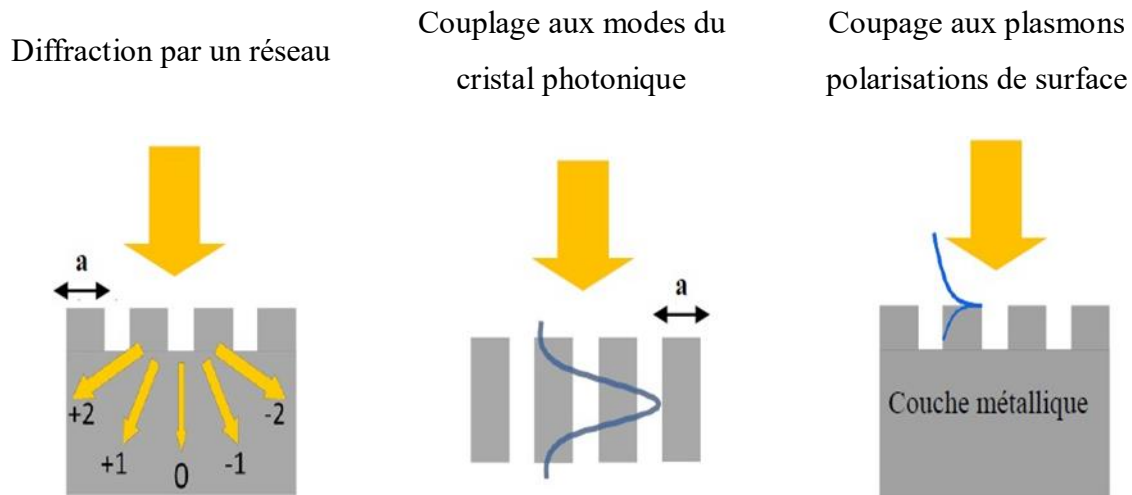


Figure II.5. Schéma des cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D).

II.4. Les cristaux photoniques naturels

En fait, les cristaux photoniques artificiels sont en réalité inspirés par la nature, où l'on trouve des structures naturelles présentant des propriétés similaires. En effet, les couleurs vives de certaines espèces sont parfois attribuées à la présence de structures périodiques très complexes [28].

II.4.1. Les opales

L'opale est un exemple de cristal photonique naturel. Sa structure en silice crée un effet visuel unique, permettant aux observateurs de voir une palette de couleurs variées. Comme illustré ci-dessous, la silice dans l'opale est principalement composée de petites sphères arrangées de façon régulière et dense, avec des espacements d'environ 150 à 300 nanomètres, correspondant approximativement aux longueurs d'onde de la lumière visible.

Cet espacement permet à la lumière de se diffracter et d'interférer en traversant la structure. Les couleurs perçues varient selon l'angle d'observation, de sorte qu'en tournant l'opale, une même zone peut changer de couleur en fonction de l'interaction de la lumière avec cette structure [29].



Figure II.6. Image d'une opale [29].

II.4.2. Les papillons

Les papillons comptent parmi les insectes les plus colorés de la nature. Leur interaction avec la lumière est essentielle, et ils ont développé une remarquable capacité à manipuler les ondes électromagnétiques à leur avantage.

Une observation microscopique des ailes révèle, par exemple, que les ailes du papillon *Cyanophrys remus* présentent une nanostructure complexe. Les teintes bleu métallique sur leur face dorsale et vert pois sur leur face ventrale résultent de la structure en cristaux photoniques. Ces structures sont constituées de chitine et d'air.

La figure II.7 montre un papillon ainsi que la coupe transversale de son aile, avec des détails visibles dans l'encadré en bas à droite. Cette portion, observée au microscope électronique, révèle une structure agissant comme un matériau à bande interdite photonique, à l'origine des couleurs iridescentes observées chez certains papillons.

Ce réseau réfléchit la lumière de manière à diffuser différentes longueurs d'onde dans des directions spécifiques, en fonction de leur fréquence [30].



Figure II.7. (a) Aile de papillon, (b) Coupe d'une aile de papillon observée au MEB [30].

II.4.3. Les oiseaux

Les couleurs des oiseaux figurent parmi leurs caractéristiques les plus fascinantes, leur permettant d'affirmer leur identité visuelle. Ces teintes sont produites par une combinaison de pigments et de structures microscopiques dans leurs plumes. Les pigments absorbent certaines longueurs d'onde de la lumière solaire et reflètent d'autres, créant ainsi les couleurs dites "pigmentaires".

En parallèle, les couleurs dites "structurelles" proviennent de la diffraction de la lumière par les microstructures des plumes. Les pigments assurent une certaine stabilité des couleurs, tandis que les couleurs structurelles varient souvent selon la lumière.

Par exemple, lorsqu'on observe une plume de paon au microscope, on remarque que les couleurs proviennent des barbules, des lames étroites constituées de cuvettes séparées par un seuil transversal. Au fond de ces cuvettes se trouvent des lamelles minces et parallèles qui agissent comme des miroirs réfléchissant la lumière incidente.

Ce phénomène peut être comparé à l'étude des cristaux photoniques unidimensionnels. Ainsi, l'intensité de la lumière réfléchie par la plume dépend de la longueur d'onde et de l'angle d'observation, créant cet effet de ruissellement coloré si caractéristique des plumes de paon [31].

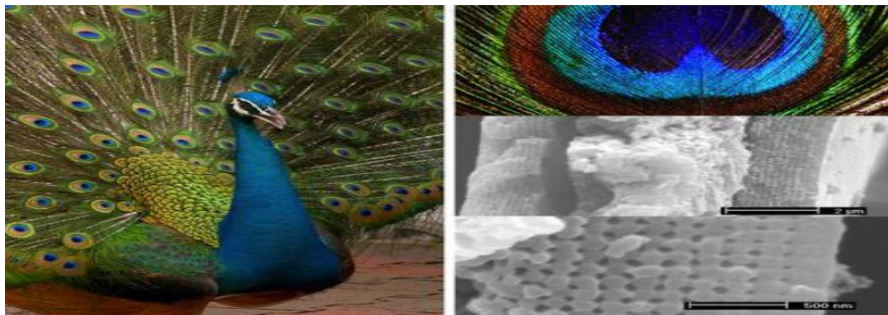


Figure II.8. Vue microscopique d'une structure de cristal photonique naturel présente dans une plume de paon [32].

II.5. Caractéristiques des cristaux photoniques

Plusieurs paramètres caractérisent un CP, on distingue :

II.5.1 La dimensionnalité

La périodicité de l'indice de réfraction est le facteur déterminant de ce phénomène. Un cristal photonique peut présenter une périodicité sur une, deux ou trois dimensions, comme illustré à la Figure II.9.

La Figure II.10 présente des images obtenues par microscopie électronique à balayage (MEB) de divers cristaux photoniques artificiels. Un exemple de cristal photonique unidimensionnel (CP 1D) est un empilement alterné de couches le long d'un axe, avec des indices de réfraction différents.

Un cristal photonique bidimensionnel (CP 2D) peut être formé par un réseau périodique de cylindres, tous ayant le même indice de réfraction, intégrés dans une matrice d'indice de réfraction différent.

Enfin, l'agencement de tiges inclinées et imbriquées permet de créer un cristal photonique dont l'indice de réfraction varie périodiquement dans les trois directions de l'espace [33].

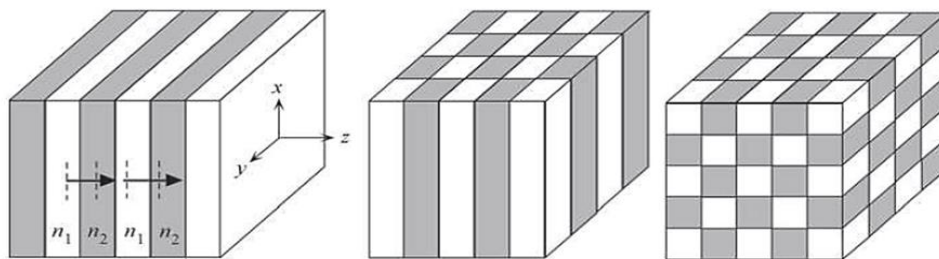


Figure II.9. Représentations schématiques de cristaux photoniques (CP) avec une variation périodique de l'indice de réfraction dans une, deux ou trois dimensions. Les zones rouges et jaunes représentent des régions avec des indices de réfraction distincts.

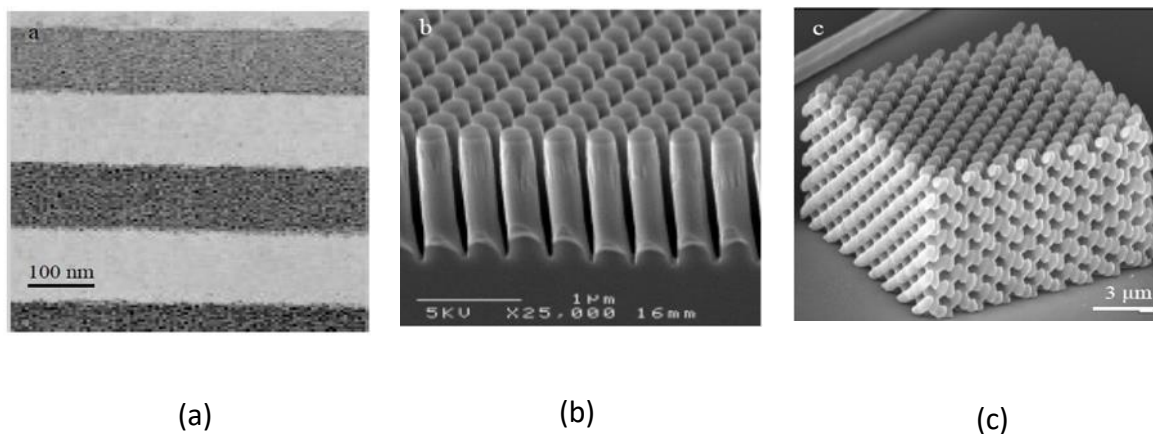


Figure II.10. Images MEB de cristaux photoniques (CP) : a) Structure 1D formée par un empilement de couches de polyélectrolytes (les zones sombres, contenant des nanoparticules d'argent, ont un indice de réfraction plus élevé que les zones claires, dépourvues de nanoparticules) ; b) Structure 2D constituée d'un arrangement de cylindres en InP ; c) Structure 3D formée par un réseau de tiges de polymère inclinées et imbriquées [32].

II.5.2. La symétrie

La disposition des briques d'un cristal photophonique (CP) détermine la symétrie du réseau. Par exemple, pour un CP tridimensionnel constitué de particules sphériques, il est possible d'obtenir une symétrie cubique, hexagonale compacte (hc) ou cubique à faces centrées (cfc) [33].

II.5.3. La topologie

La topologie illustre l'architecture et la compacité du matériau. Un réseau présentant une symétrie spécifique peut adopter diverses topologies, selon que les briques constitutives sont interpénétrées, en contact ou isolées [33].

II.5.4. Le paramètre du réseau

C'est la distance fondamentale entre deux briques constitutives. Elle détermine la zone spectrale où le CP interagit avec l'onde électromagnétique [33].

II.5.5. L'indice de réfraction effectif

Il est exprimé en fonction des indices de réfraction des deux matériaux constituant le cristal, ajustés selon les volumes respectifs qu'ils occupent. La fraction volumique des briques élémentaires est désignée par Φ [33].

II.5.6. Le contraste d'indice de réfraction

Le rapport entre les indices de réfraction des briques et de la matrice, désigné par n_1/n_2 , définit ce paramètre. Il fournit une indication générale de l'intensité de diffusion des deux matériaux qui composent le cristal photonique [33].

II.6. Les types des cristaux photoniques

Les cristaux photoniques se présentent sous diverses formes, mais on les classe principalement en trois catégories : unidimensionnelle, bidimensionnelle et tridimensionnelle. Ces dimensions déterminent le nombre de directions dans lesquelles la constante diélectrique manifeste une périodicité [34].

II.6.1. Les cristaux photoniques unidimensionnels

Retour en 1887, une période marquée par les premières recherches sur un matériau diélectrique présentant une périodicité dans une direction donnée. En effet, cette année-là, Lord

Rayleigh a analysé le comportement des ondes dans un film multicouches où l'indice de réfraction varie d'une couche à l'autre [35]. Ce type de structure, connu sous le nom de réseau de Bragg, est illustré dans la figure II.11.

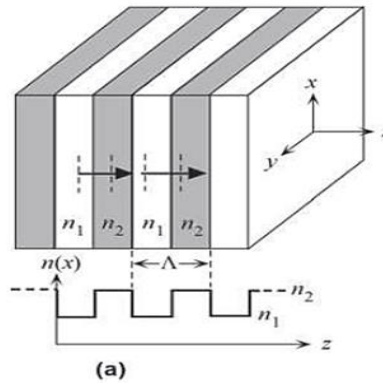


Figure II.11. Diagramme d'un miroir de Bragg constitué d'un empilement de couches de différentes épaisseurs, a_1 et a_2 , avec des permittivités distinctes, n_1 et n_2 , où $n_1 > n_1$ [35].

Un cristal photonique unidimensionnel se définit par l'alternance de deux milieux diélectriques, caractérisés par des constantes diélectriques différents (ϵ_1 et ϵ_2), dans une seule direction spatiale.

Lorsqu'une onde incidente se propage dans l'un de ces milieux et atteint l'interface entre eux, une partie de la lumière est réfléchi. Cette réflexion engendre un déphasage de π lorsque l'onde passe d'un milieu à faible indice de réfraction vers un milieu à indice élevé. L'autre portion de la lumière est transmise dans le second milieu où elle continue à se propager. Ce processus doit être répété pour chaque couche du miroir de Bragg, comme illustré dans la figure II.12.

C'est une explication simplifiée de ce phénomène, mais il est crucial de considérer les valeurs des déphasages, qui varient en fonction de la longueur d'onde. Selon ces valeurs, on peut obtenir des interférences constructives, menant à une réflexion totale, ou des interférences destructives. Pour obtenir une structure parfaitement réfléchissante sur une plage de longueurs d'onde donnée, il est essentiel de choisir avec soin l'épaisseur des couches. Lorsque la somme des épaisseurs optiques des alternances ($n_1 a_1 + n_2 a_2$) est égale à $\lambda/2$ (où λ représente la longueur d'onde), l'onde réfléchi à l'interface (1) est en phase avec celles réfléchies aux interfaces (3), (5), etc. Cela conduit à une réflexion totale après ces interférences constructives, ce qui empêche la propagation de l'onde et confirme l'existence d'une bande interdite photonique. Dans le cas particulier où les deux couches de chaque alternance ont la même épaisseur optique

(c'est-à-dire $n_1 a_1 = n_2 a_2 = \lambda/4$), les ondes réfléchies par toutes les interfaces (1), (2), (3), etc. sont en phase, ce qui représente la bande interdite la plus large.

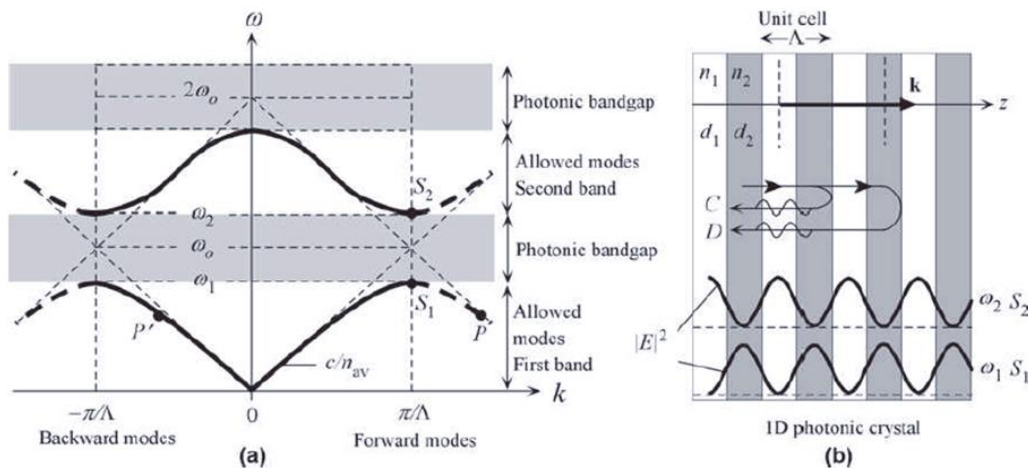


Figure II.12. Relation de dispersion ω en fonction de k pour les ondes dans un cristal photonique (CPh) unidimensionnel le long de l'axe z . On y observe des modes autorisés et des modes interdits. Les modes interdits se trouvent dans une gamme de fréquences appelée bande interdite photonique. (b) Le cristal photonique 1D correspondant à (a), avec les points S_1 et S_2 , et leurs profils d'ondes stationnaires aux fréquences ω_1 et ω_2 [35]

Cela permet de concevoir des miroirs diélectriques affichant des coefficients de réflexion très élevés, proches de 1. Sans entrer dans les détails des calculs, il a été démontré que lorsque les épaisseurs optiques des différentes couches sont identiques, la largeur de la bande interdite $\Delta\omega$ dépend uniquement du contraste de l'indice [35].

$$\Delta\omega = \frac{4}{\pi} \omega_0 \arcsin \left| \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2} \right| \quad (\text{II. 1})$$

Où $n_1 = \sqrt{\epsilon_1}$ et $n_2 = \sqrt{\epsilon_2}$, n_1 et n_2 représentent les indices de réfraction des deux matériaux diélectriques, et ω_0 correspond à la fréquence centrale. Les cristaux photoniques unidimensionnels constituent les premières structures à avoir été étudiées.

Ils sont principalement utilisés comme miroirs diélectriques, notamment dans les lasers, ainsi que dans les fibres optiques. En 1972, V.P. Bykov a mené une analyse théorique approfondie de ces structures optiques unidimensionnelles. Il a notamment été le premier à examiner l'impact des bandes interdites sur l'émission spontanée des atomes et des molécules intégrés dans ces structures. Pour conclure son étude, il a également suggéré d'explorer des structures bidimensionnelles et tridimensionnelles, que nous aborderons dans la section suivante [35].

II.6.2. Les cristaux photoniques bidimensionnels

Un cristal photonique bidimensionnel est une structure caractérisée par une modulation périodique de la permittivité diélectrique dans deux directions de l'espace, tandis qu'elle reste homogène dans la troisième direction [36].

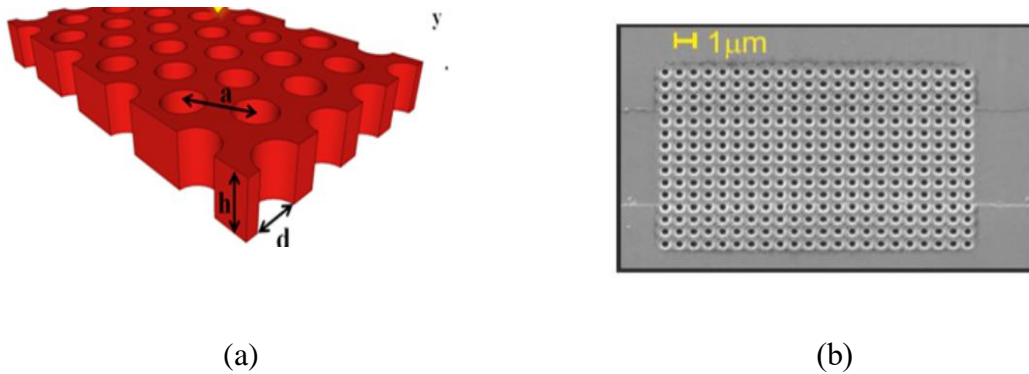


Figure II.13. (a) Cristal photonique 2D (b) Matrice de trous d'air fabriquée sur un substrat de niobate de lithium, avec une période $a = 825$ nm et un rayon $r = 206$ nm [37].

Les réseaux carrés, triangulaires et hexagonaux (honeycomb) sont les trois familles principales de cristaux photoniques 2D (voir figure II.14)

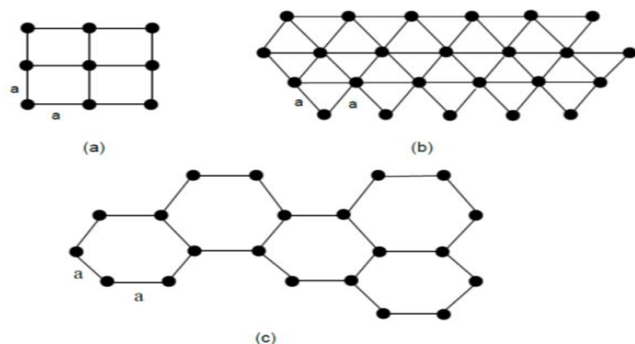


Figure II.14. Structures 2D (a) Structure carrée, (b) triangulaire et (c) hexagonale [38].

La polarisation des ondes électromagnétiques influence fortement les propriétés optiques des structures bidimensionnelles. Ces dernières peuvent être fabriquées de diverses manières. Par exemple, des tiges diélectriques peuvent être disposées dans l'air ou dans un autre matériau diélectrique.

Il est essentiel d'obtenir un contraste d'indice suffisamment élevé pour générer de larges bandes interdites. De plus, un cristal photonique bidimensionnel peut comporter un agencement de trous perforés dans le diélectrique. Ainsi, un cristal photonique 2D idéal se définit comme

un cristal périodique dans la direction (Oz) et s'étendant de manière infinie dans le plan (O, X, Y) [38].

II.6.3. Les cristaux photoniques tridimensionnels

Les cristaux photoniques 3D [39] sont des structures présentant une permittivité diélectrique périodiquement organisée dans les trois dimensions. La périodicité des indices de réfraction induit le phénomène de bande interdite, et l'analyse de ces bandes interdites (BIPs) révèle que le comportement des photons à l'intérieur du cristal peut être soit permis, soit interdit, en fonction des gammes de fréquences utilisées.

En d'autres termes, les photons ne peuvent pas traverser le cristal avec n'importe quelle énergie ni dans n'importe quelle direction. Le concept de bande interdite dans les trois dimensions, qui confère à une structure la capacité d'agir comme un réflecteur parfait pour toutes les directions d'incidence, a été introduit par Eli Yablonovitch. Il a étudié comment empêcher l'émission spontanée dans les semi-conducteurs afin d'améliorer l'efficacité des lasers. En 1987, il a proposé une structure ayant une périodicité spatiale égale à la moitié de la longueur d'onde dans les trois dimensions. De telles structures permettent d'inhiber complètement l'émission spontanée en intégrant le matériau actif dans un cristal photonique à bande interdite, sur une plage spectrale plus large que le spectre d'émission du matériau actif dans un milieu homogène.

Le premier cristal photonique tridimensionnel, conçu par KH. Ho et al., se compose de sphères de silicium disposées selon une structure en diamant.

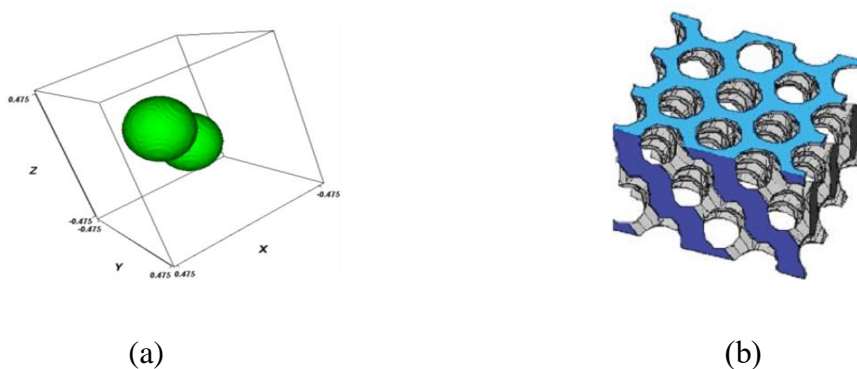


Figure II.15. (a) Distribution de l'indice de la cellule unitaire FCC (b) le premier Cristal photonique 3D.

Les cristaux photoniques tridimensionnels ont suscité et continuent de susciter de nombreux efforts de recherche en raison de leur capacité indéniable à permettre un contrôle

omnidirectionnel de la lumière. Toutefois, leur fabrication à l'échelle de la longueur d'onde pose des défis techniques considérables.

II.7. Les défauts dans les cristaux photoniques

L'introduction d'un défaut ou la rupture de la périodicité d'une structure permet à une onde de fréquence ω_0 , se trouvant dans la bande interdite photonique, de se propager. Cela ouvre la voie à la création de filtres d'une sélectivité exceptionnelle. Ce défaut peut résulter d'une couche unique, plus épaisse que les autres couches de la structure (voir figure II.16) [40].

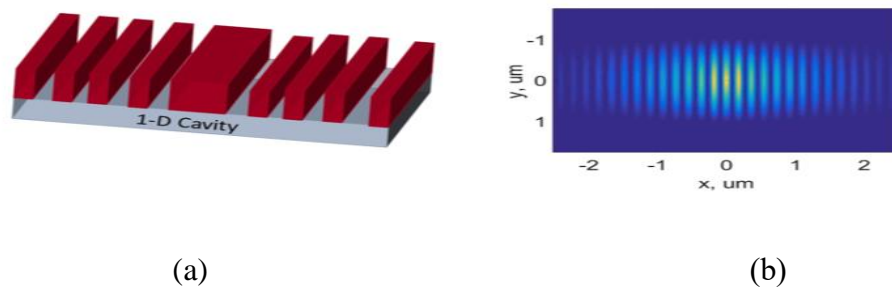


Figure II.16. Défaut dans une structure périodique unidimensionnelle causé par une couche élargie.

Dans cette figure, ce défaut peut être considéré comme une interface entre deux réseaux parfaitement unidimensionnels. Le champ est élargi en raison de la présence de ce défaut [40].

L'étude de l'impact d'un défaut se concentre sur l'axe de propagation et considère un mode dont la fréquence ω se situe dans la bande interdite photonique.

Même en présence d'un défaut dans la structure, le réseau périodique ne présente pas de modes propagatifs à cette fréquence ω .

Bien que la perte de périodicité empêche la description des modes du système par le vecteur d'onde k , il est possible d'évaluer si une fréquence spécifique peut permettre des états propagatifs dans le reste du cristal.

Dans ce contexte, les régions où les états sont propagatifs ou évanescents peuvent être classées en fonction des plages de fréquence, comme illustré dans la figure II.17. Les défauts favorisent également l'émergence de modes localisés, dont les fréquences se trouvent à l'intérieur de la bande interdite photonique [40].

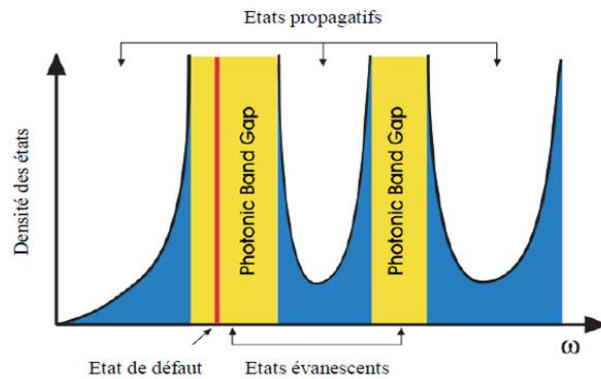


Figure II.17. Partition de l'espace des fréquences entre états propagatifs et évanescents.

Dans ce schéma (figure II.17) la densité d'états (nombre de modes autorisés par unité de fréquence) est nulle dans les bandes interdites du cristal (zone gris clair). Les modes ne peuvent exister dans ces régions que s'ils sont évanescents et si la périodicité est perturbée par un défaut (ligne en pointillé) [40].

II.8. Domaine d'application des cristaux photoniques

Les applications des cristaux photoniques (CPs) sont variées, incluant le contrôle de l'émission spontanée dans différents dispositifs, tels que les guides d'ondes rectilignes, les miroirs, les filtres et les microcavités. Les capteurs et les filtres illustrent l'utilisation des CPs bidimensionnels dans le domaine de l'optique intégrée [41].

II.8.1. Capteurs

De nombreux capteurs basés sur les cristaux photoniques (CPs) ont été étudiés et développés pour une vaste gamme d'applications de détection.

Les capteurs utilisant des fibres à CPs sont des structures novatrices de guides d'ondes optiques, qui intègrent un réseau de pores d'air le long de la fibre. Un léger défaut dans ces structures crée un chemin optique avec un spectre qui peut se propager à une fréquence spécifique, offrant ainsi une sensibilité élevée.

Un autre type couramment utilisé de capteurs à cristaux photoniques en 2D repose sur une cavité au centre de la structure, où le trou central est minimisé ou son rayon agrandi. Pour améliorer le facteur de qualité et la sensibilité, cette cavité peut également être couplée à d'autres guides d'ondes situés à l'extrémité de la structure [41].

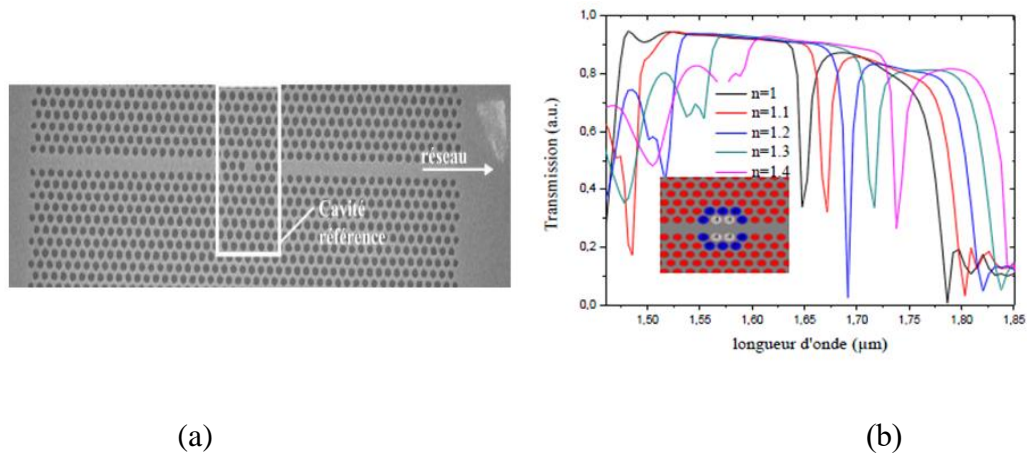


Figure II.18. (a) Image MEB d'une microcavité à « photonic crystal » intégrée entre deux guides, (b) un capteur reposant sur un cristal photonique 2D avec un réseau triangulaire de trous d'air [41].

II.8.2. Filtrage

Le filtrage constitue une autre application des cristaux photoniques bidimensionnels dans le domaine des communications optiques. Cette application repose sur l'utilisation de filtres, qui sont des éléments essentiels permettant de sélectionner un canal ayant une longueur d'onde spécifique.

Un tel dispositif peut être conçu grâce au couplage entre une cavité et un guide, comme c'est le cas pour le filtre Fabry-Pérot. Les longueurs d'onde guidées sont alors divisées en deux catégories : la plupart des longueurs d'onde sont réfléchies à l'extrémité du guide, tandis que certaines sont couplées à la cavité. Ce type de filtre a été mis en œuvre sur substrat SOI par Foresi et al. [41].

II.9. La photonique pour le photovoltaïque

Nous avons observé que divers processus physiques impactent l'efficacité d'une cellule photovoltaïque, le premier étant l'absorption des photons par le matériau semi-conducteur.

Nous examinerons donc dans un premier temps la question de l'absorption au sein d'une cellule solaire. Par la suite, nous analyserons les principes qui favorisent le piégeage de la lumière dans un matériau absorbant.

II.9.1. L'absorption de la lumière dans une cellule solaire

Lorsque qu'un faisceau lumineux ayant une intensité initiale I_0 traverse un matériau absorbant d'une épaisseur d , son intensité diminue selon la loi de Beer-Lambert, en négligeant les phénomènes de réflexion, qui peuvent jouer un rôle significatif lors de l'entrée dans une cellule.

$$I(\lambda, d) = I_0 e^{-\alpha(\lambda)d} \quad (\text{II.2})$$

Où le coefficient d'absorption du matériau est α , le coefficient d'extinction du matériau (partie imaginaire de l'indice de réfraction) est k et la longueur d'onde du rayonnement est λ :

$$\alpha(\lambda) = \frac{4\pi \cdot k(\lambda)}{\lambda} \quad (\text{II.3})$$

La valeur du coefficient d'absorption d'une cellule solaire est cruciale pour évaluer la capacité du matériau à produire des paires d'électrons et de trous.

Les matériaux semi-conducteurs se distinguent par leur bande interdite, ou gap, qui représente la différence d'énergie entre le sommet de la bande de valence et le creux de la bande de conduction (E_G). Seuls les photons ayant une énergie comparable à celle de ce gap ($h\nu \approx E_G$) peuvent engendrer des paires d'électrons-trous.

Ainsi, la valeur du gap des matériaux détermine la plage spectrale où le coefficient d'absorption atteint son niveau maximal. En général, les semi-conducteurs employés dans les cellules solaires présentent un gap optimal correspondant au pic d'émission du soleil, qui se situe autour de 500 nm.

II.9.2. Le piégeage de lumière dans les cellules solaires

Sur le plan de l'optique géométrique, maximiser l'absorption signifie allonger la trajectoire optique de la lumière. En d'autres termes, cela implique d'accroître la distance parcourue par un rayon lumineux au sein du milieu absorbant. Ainsi, il s'agit d'optimiser le temps de vie des photons dans ce milieu. Par conséquent, l'objectif est de 'piéger' la lumière pour augmenter sa probabilité d'absorption.

Pour comprendre les principes du piégeage de la lumière, il est utile de rappeler quelques lois de l'optique géométrique. Considérons un rayon lumineux passant d'un milieu à un autre, comme illustré dans la figure II.19 (a). Selon la loi de Snell-Descartes, ce rayon subit une réfraction dans le deuxième milieu :

$$n_1 \sin\theta_1 = n_2 \sin\theta_2 \quad (\text{II.4})$$

Où n_1 et n_2 sont les indices de réfraction des deux milieux, et θ_1 et θ_2 représentent respectivement les angles d'incidence et de réfraction, mesurés à l'interface entre les deux milieux par rapport à la normale. Ainsi, l'angle sous lequel le rayon pénètre dans le milieu 2 est donné par :

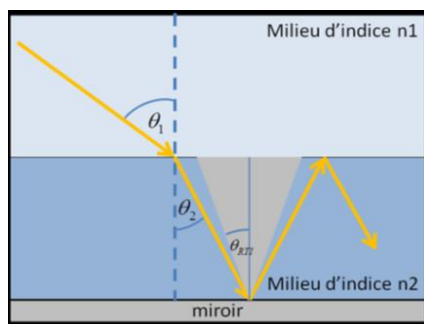
$$\theta_2 = \text{Arcsin}\left(\frac{n_1}{n_2} \sin\theta_1\right) \quad (\text{II.5})$$

Supposons qu'un miroir soit placé sous le milieu 2 pour réfléchir ce rayon. Si l'indice de réfraction du milieu 2 est supérieur à celui du milieu 1 ($n_2 > n_1$), il existe un angle critique au-delà duquel le rayon est entièrement réfléchi à l'intérieur du milieu 2. Cet angle critique correspond à la condition de réflexion totale interne (RTI) :

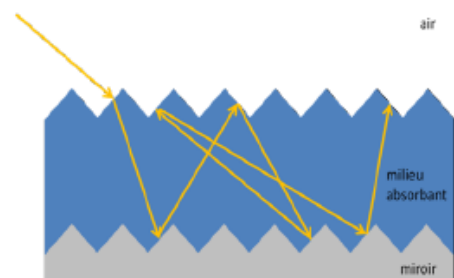
$$\theta_{RTI} = \text{Arcsin}\left(\frac{n_1}{n_2}\right) \quad (\text{II.6})$$

À l'intérieur d'un matériau avec un indice de réfraction n_2 (voir figure II.19 (a)), l'angle critique détermine un « cône » angulaire au-delà duquel les rayons lumineux ne peuvent plus s'échapper du milieu 2. Il est crucial de noter que θ_{RTI} diminue lorsque n_2 augmente. En comprenant ce principe, on réalise qu'il est possible de piéger la lumière en la faisant circuler dans le milieu absorbant d'une cellule solaire avant qu'elle ne puisse s'en échapper.

Dans une géométrie optimale, tout en maintenant une faible épaisseur physique du matériau, le parcours optique d'un rayon lumineux peut être considérablement allongé. La figure II.19 (b) illustre ce concept en montrant comment la structuration des faces avant et arrière de la cellule oblige le rayon lumineux à subir plusieurs réflexions par réflexion totale interne.



(a)



(b)

Figure II.19. (a) Schéma illustrant la loi de Snell-Descartes et le phénomène de réflexion totale interne lorsqu'un rayon lumineux traverse d'un matériau avec un indice n_1 vers un autre avec un indice n_2 . (b) Illustration schématique montrant qu'un rayon lumineux peut effectuer plusieurs passages dans un milieu absorbant grâce à la réflexion par un miroir et à la réflexion totale interne (le tracé ici est uniquement schématique).

II.9.3. Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque

À la fin des années 2000, le couplage de la lumière dans les cellules solaires a émergé en tant que domaine de recherche distinct. Dans cette section, nous fournirons un aperçu des concepts clés qui sont actuellement explorés pour optimiser l'absorption dans les cellules solaires de nouvelle génération.

II.9.3.1. L'effet de plasmon de surface

Pour décrire l'excitation cohérente des électrons à l'interface de deux matériaux aux permittivités distinctes, on emploie le terme "*plasmon de surface*". Ces excitations se manifestent principalement à l'interface entre un matériau diélectrique et un métal, et, sous certaines conditions, peuvent être déclenchées par des photons incidents.

Les plasmons de surface présentent un intérêt particulier en raison de leur confinement intense du champ électrique et de l'énergie électromagnétique à l'interface où ils se forment. En tirant parti de ces phénomènes, il est possible d'optimiser la distribution du champ électrique dans les zones photoactives des cellules photovoltaïques en choisissant des géométries appropriées.

L'intégration de structures plasmoniques offre ainsi au moins trois possibilités pour réduire l'épaisseur des couches actives des cellules tout en préservant leur épaisseur optique :

- Les nanoparticules métalliques peuvent être utilisées comme centres de diffusion à l'entrée des cellules pour prolonger le parcours optique de la lumière dans la couche active, jouant ainsi un rôle similaire aux structures nanophotoniques de Yablonovitch (voir figure II.20 (a)).
- En intégrant des nanoparticules dans ou autour de la couche active, il est possible de coupler des modes de surface plasmon locale (PSL), augmentant ainsi la section efficace d'absorption grâce à l'effet nano-antenne (voir figure II.20 (b)).

- En structurant, par exemple, l'électrode métallique à l'arrière de la cellule, la lumière peut se coupler à des modes plasmoniques de surface propagatifs (PPS) à l'interface avec la couche active, permettant ainsi un guidage qui prolonge son parcours moyen (voir Figure II.20 (c)).

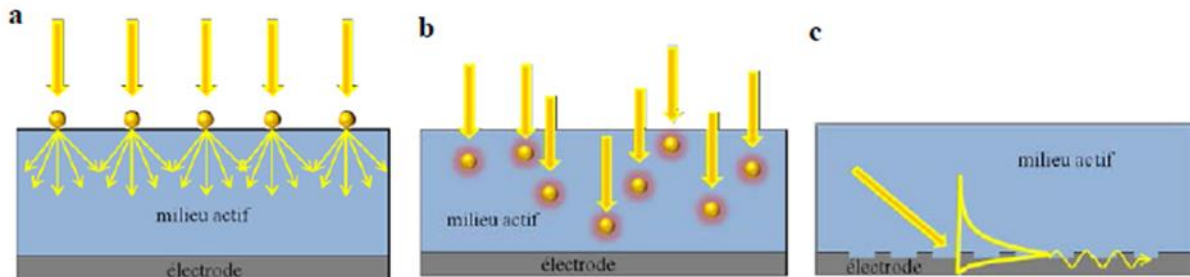


Figure II.20. Schémas montrant comment les structures plasmoniques peuvent améliorer l'absorption dans une cellule solaire. (a) Diffusion résonante de la lumière par les nanoparticules. (b) Confinement du champ électrique autour des nanoparticules. (c) Couplage à un plasmon de surface par l'intermédiaire d'une surface métallique structurée.

Stuart et Hall [33] furent les premiers à explorer l'utilisation de nanoparticules plasmoniques pour améliorer la diffusion de la lumière dans des photodétecteurs en silicium. Ils ont observé une augmentation significative du photocourant dans l'infrarouge dans leur dispositif.

Par la suite, des recherches ont porté sur le couplage plasmonique dans les cellules solaires, en particulier celles en silicium monocristallin [42]. Des études ont également été menées sur les cellules en silicium amorphe [40,41] et les cellules à base de GaAs [42], démontrant dans chaque cas une amélioration de la densité de courant.

Grâce à leur capacité à confiner efficacement l'énergie optique, les structures plasmoniques apparaissent comme des candidats prometteurs pour un piégeage de la lumière dans le domaine nanophotonique.

De plus, ces nanoparticules peuvent être facilement intégrées dans diverses architectures de cellules solaires, notamment celles produites par voie liquide (telles que les cellules solaires organiques de Grätzel et les cellules à pérovskite), tout en étant peu coûteuses à fabriquer.

II.9.3.2. Les réseaux de diffraction et les couches antireflet

Un autre concept largement utilisé est celui des réseaux de diffraction, qui permettent de coupler la lumière à la cellule et d'allonger le parcours optique des rayons lumineux dans le matériau absorbant.

Lorsque le pas du réseau est bien inférieur à la longueur d'onde étudiée, ces réseaux de diffraction peuvent également servir de couches antireflets à l'entrée des cellules (voir figure II.21 (a)).

Pour optimiser le couplage de la lumière dans le semi-conducteur, ces réseaux se comportent comme des matériaux homogènes avec un indice de réfraction effectif qui varie progressivement.

Parmi les exemples marquants [43,44], un réseau de nano-cônes a été utilisé dans des cellules en silicium de 2 μm d'épaisseur pour réduire la réflexion (voir figure II.21 (a)), ce qui a entraîné une augmentation de l'efficacité de 25 % [45].

De même, un réseau de "dômes" [46] a permis de réduire la réflexion sur tout le spectre utile d'une cellule en silicium à moins de 3 %. Une structure en forme d'œil de mite a également été employée pour améliorer sensiblement l'efficacité d'une cellule solaire organique [47].

Les réseaux de diffraction dont la période est supérieure à la longueur d'onde incidente sont utilisés pour orienter la lumière vers des ordres de diffraction dont l'angle de propagation excède l'angle de réfraction totale interne du matériau semi-conducteur (voir figure II.1 (b)).

Dès 1983, Sheng et al. [48] ont étudié ces réseaux. Une étude numérique a ensuite démontré qu'il est possible d'optimiser les performances d'une cellule en silicium de 500 μm en structurant l'électrode métallique en un réseau 1D, comme le montrent T.K. Chong et al. [49]. De plus, plusieurs types de structures ont été analysés numériquement pour identifier les géométries optimales des réseaux de diffraction à base de TiO.

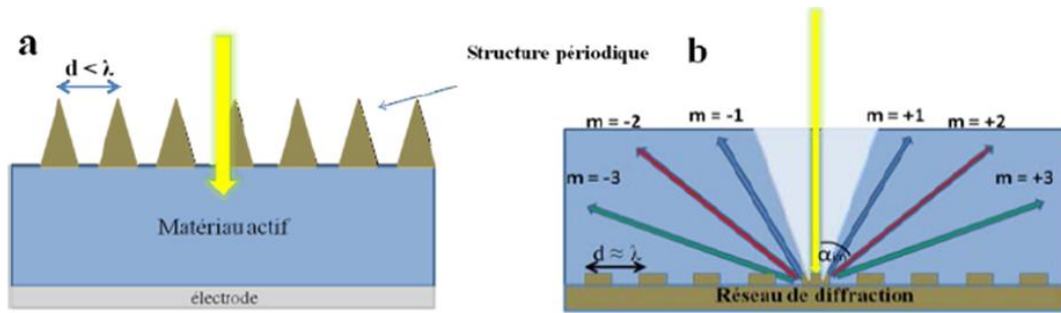


Figure II.21. Diagrammes illustrant l'utilisation potentielle de réseaux pour améliorer l'absorption dans une cellule solaire. (a) Les réseaux dont la période est inférieure à la longueur d'onde ($d < \lambda$) peuvent servir de couches antireflets à l'entrée des cellules. (b) Les réseaux ayant une période égale ou supérieure à la longueur d'onde incidente ($d \geq \lambda$) peuvent diffracter la lumière. Les ordres diffractés peuvent ensuite subir une réflexion totale interne dans le matériau absorbant.

Les couches antireflets et les réseaux de diffraction se sont révélés efficaces pour améliorer le couplage de la lumière dans les cellules solaires, en particulier celles à base de silicium. Comme ces matériaux structurés sont souvent des diélectriques, la modélisation numérique de la réponse optique des cellules intégrant des réseaux de diffraction est facilitée.

Cependant, la fabrication expérimentale de cellules nanostructurées reste un défi important, car les procédés de fabrication requièrent souvent des techniques de lithographie longues et coûteuses, inadaptées à tous les matériaux.

II.9.3.3. Les cristaux photoniques

Il est interdit de se propager dans certaines directions de l'espace. Les propriétés uniques des cristaux photoniques permettent deux stratégies principales pour augmenter l'absorption dans les cellules solaires :

C'est l'Effet miroir des bandes interdites : Les bandes interdites des cristaux photoniques peuvent agir comme des miroirs, empêchant ainsi la fuite de lumière des cellules. En 2007, P. Bermel et ses collaborateurs ont réalisé une étude numérique de différentes architectures incorporant des cristaux photoniques [50]. En remplaçant l'électrode métallique par un cristal photonique unidimensionnel, composé d'un miroir de Bragg constitué d'une alternance de couches aux indices optiques différents, ils ont démontré la possibilité d'une réflexion efficace de la lumière grâce à la bande interdite photonique.

Par ailleurs, l'utilisation d'un cristal photonique bidimensionnel permet de bénéficier d'effets de réflexion dus à la présence d'un gap photonique, qui agit à la fois pour les longueurs d'onde correspondant au gap et pour les autres longueurs d'onde via des effets de diffraction. Ainsi, il devient possible de concevoir un réflecteur performant sur un large spectre, augmentant considérablement l'absorption pour les grandes longueurs d'onde, comme illustré dans la figure II.22 ci-dessous.

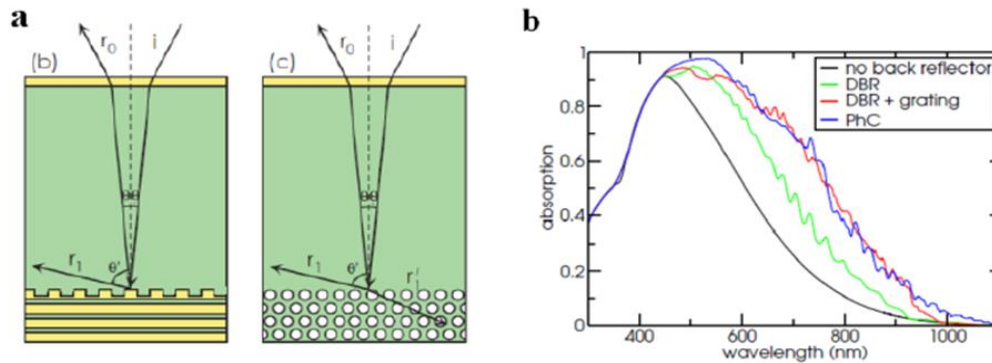


Figure II.22. Deux configurations proposées par Bermel et al. pour utiliser les cristaux photoniques comme réflecteurs dans une cellule solaire sont les suivantes : (a) l'utilisation d'un miroir de Bragg associé à un réseau de diffraction (DBR + réseau), et (b) l'utilisation d'un réseau 2D de trous d'air (PhC). (c) Les spectres d'absorption calculés montrent que les cristaux photoniques peuvent considérablement augmenter l'absorption dans ces différentes configurations [50].

La deuxième stratégie adoptée dans le cadre de cette thèse consiste à coupler la lumière à des modes de cristaux photoniques, prolongeant ainsi l'interaction des photons avec le milieu absorbant.

Duché et ses collègues ont proposé une approche similaire en structurant un réseau unidimensionnel constitué d'un mélange interpénétré de P3HT : PCBM et de PEDOT : PSS. Leurs simulations montrent que l'excitation d'un mode résonant du cristal photonique favorise un gain d'absorption aux grandes longueurs d'onde.

En structurant simultanément la couche active et l'électrode métallique, ils obtiennent un gain d'absorption de 5 %. Par ailleurs, Gomard et ses collaborateurs étudient la structuration d'une cellule en silicium amorphe, dans laquelle un réseau bidimensionnel de trous d'air est gravé (voir figure II.23 en bas). Ils estiment un gain d'absorption théorique de 28 % par rapport

à une cellule non structurée, grâce à l'excitation de plusieurs modes résonants et à l'effet antireflet des trous d'air [50].

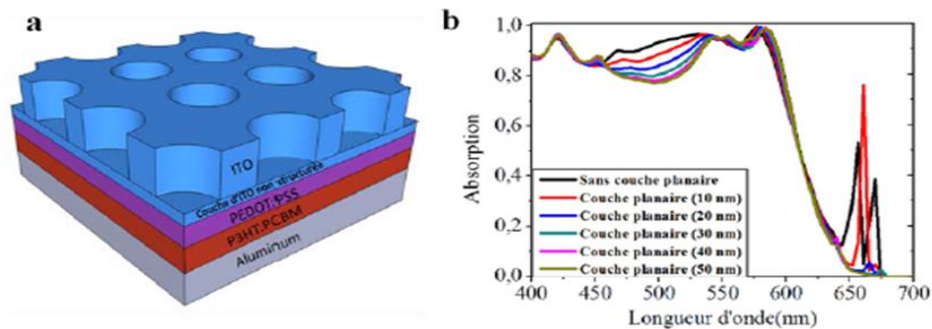


Figure II.23. Le schéma de la cellule proposée par Gomard et al., nanostructurée sous forme d'un réseau de trous d'air, indique que les spectres d'absorption mesurés expérimentalement montrent une absorption nettement supérieure lorsque la cellule est structurée [50].

II.10. Contexte de l'étude et objectif

Les cristaux photoniques présentent l'avantage de contrôler l'absorption de la lumière en fonction de son spectre, de son angle d'incidence et de sa polarisation dans les cellules solaires, grâce à l'ingénierie des bandes.

Ils sont également plus faciles à étudier numériquement que les structures plasmoniques, comme les réseaux de diffraction.

Cependant, des efforts spécifiques sont nécessaires pour garantir une fabrication peu coûteuse et une intégration électrique aisée et compatible avec les cellules photovoltaïques. Comme le montrent plusieurs exemples dans la littérature, les avantages potentiels de cette nanostructuration varient selon le type de cellule, qu'elle soit organique ou inorganique.

En effet, la réponse optique de la cellule nanostructurée dépend des caractéristiques des matériaux utilisés, tels que les indices de réfraction et les coefficients d'absorption. Cette thèse étudiera les propriétés des cristaux photoniques bidimensionnels dans le contexte de l'absorption de la lumière par les cellules solaires organiques, en se concentrant sur une architecture spécifique.

Ces résultats ouvrent de nouvelles perspectives et sont cruciaux pour comprendre le piégeage de la lumière. Cependant, il est important de noter que ces conclusions ne s'appliquent que dans des conditions particulières : un confinement de la lumière très intense, des matériaux

actifs extrêmement fins et des structures parfaitement diffusantes et transparentes. En combinant les deux stratégies précédemment décrites, notre structure tire parti des propriétés des cristaux photoniques, qui peuvent servir de miroirs à la face arrière de la cellule et de couches antireflets à son entrée. Lorsque l'énergie de la lumière incidente correspond à celle de la bande interdite, une partie de cette lumière est réfléchi (voir figure II.24 en bas).

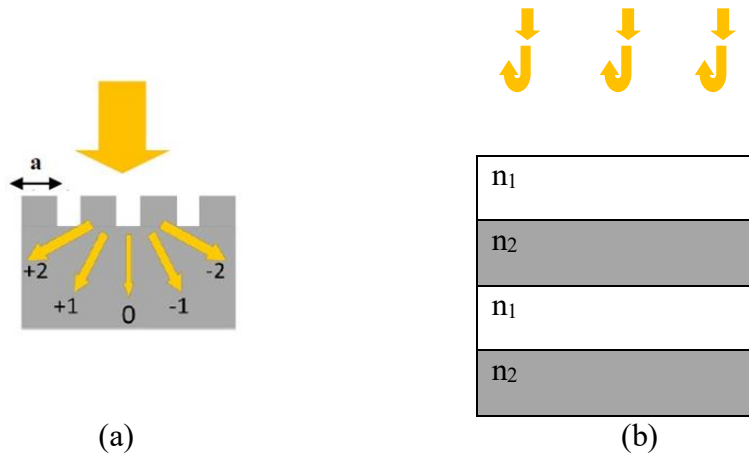


Figure II.24. Des schémas peuvent être conçus pour montrer comment les cristaux photoniques 1D peuvent être utilisés pour améliorer l'absorption dans une cellule solaire : (a) comme couches antireflets à l'entrée des cellules, et (b) comme miroirs à l'arrière de la cellule. Lorsque la lumière incidente a une énergie correspondant à celle de la bande interdite, une partie de celle-ci est réfléchi.

II.11. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons revisité les concepts de la photonique appliquée au photovoltaïque. Nous avons commencé par une introduction et une définition des cristaux photoniques, en décrivant les propriétés optiques des principales structures utilisées pour le piégeage de la lumière, telles que la diffraction de la lumière par un réseau et le couplage de la lumière avec les modes d'un cristal photonique.

Nous avons ensuite évoqué des exemples de cristaux photoniques naturels, tels que les opales, les papillons et les plumes d'oiseaux. Nous avons ensuite détaillé les caractéristiques des cristaux photoniques, notamment la dimensionnalité, la symétrie, la topologie, le paramètre de réseau, l'indice de réfraction effectif et le contraste d'indice de réfraction. Puis, nous avons abordé les différents types de cristaux photoniques : unidimensionnels, bidimensionnels et tridimensionnels.

Après cela, nous avons étudié les défauts présents dans ces cristaux. Enfin, nous avons exploré les applications des cristaux photoniques, notamment dans les domaines des capteurs et du filtrage, avant de conclure le chapitre par un état de l'art de la photonique dans le photovoltaïque. Ce dernier inclut les nanostructures pour la collecte de lumière dans les couches minces, l'effet de plasmon de surface, les réseaux de diffraction et les couches antireflets, ainsi que les cristaux photoniques absorbants, le tout dans le contexte de l'étude.

Chapitre III

Outil de simulation

III.1. Introduction

Les cristaux photoniques à structure périodique apparaissent comme une voie prometteuse grâce à leur capacité à améliorer les performances de divers systèmes existants, tels que les fibres optiques, les antennes et les dispositifs photovoltaïques.

La modélisation en micro- et nanophotonique, essentielle pour l'optimisation avancée de dispositifs optiques, exige de résoudre numériquement les Équations aux Dérivées Partielles (EDP) de Maxwell dans un espace tridimensionnel de manière précise et efficace.

Cette modélisation est hautement interdisciplinaire, intégrant des connaissances en physique, en mathématiques appliquées et en informatique, notamment pour la modélisation électromagnétique.

La compréhension approfondie des phénomènes nanophotoniques ou plasmoniques est cruciale pour le choix judicieux des hypothèses de modélisation, de la méthode de résolution et de la conception d'algorithmes optimisés.

Enfin, une analyse mathématique rigoureuse est indispensable pour garantir une modélisation numérique fiable.

III.2. Outils numériques disponibles

Dans ce chapitre, nous présenterons le logiciel RSoft CAD, en mettant l'accent sur les modules Solar Cell Utility, DiffractMOD et FullWave.

La création de méthodes de modélisation optique précises et rapides reste essentielle pour étudier ces structures. Dans ce cadre, nous avons étudié deux méthodes : l'analyse rigoureuse des ondes couplées (RCWA) et la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD).

Ces méthodes ont été appliquées pour concevoir des structures à base de cristaux photoniques gravés dans des empilements de couches minces [51].

III.2.1. Présentation du logiciel RSoft CAD

III.2.1.1. Environnement de CAD

Le logiciel de base RSoft Photonics, RSoft CAD, offre aux chercheurs et ingénieurs des outils pour concevoir divers dispositifs, tels que des cavités résonantes, des guides d'ondes, des circuits optiques et d'autres composants photoniques.

Ce logiciel permet de calculer la réflexion, l'absorption et l'efficacité de transmission pour tous les ordres de diffraction, affichés sous forme de spectres de réflexion et de transmission [51]. DiffractMOD, la toute dernière addition à la suite RSoft, s'ajoute à des outils comme BeamPROP, FuallWave, BandSOLVE, GratingMOD et Laser MOD. Il utilise la même interface RSoft Photonics CAD que les autres logiciels, permettant de définir des profils de manière précise sans se limiter à une approximation par morceaux, grâce à une interface conviviale.

La possibilité d'un processus de conception et de modélisation entièrement configurable, incluant les simulations par lots, permet d'obtenir rapidement des résultats optimisés.

Un avantage clé d'une interface CAD partagée réside dans le fait que, une fois la structure de diffraction conçue et analysée dans DiffractMOD, cette même configuration peut être utilisée dans FuallWave pour simuler d'autres aspects, comme la réponse temporelle avec la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) ou l'analyse de la structure de bande par extension d'onde plane.

III.2.1.2. Le simulateur << Solar Cell >>

Le simulateur <<Solar Cell >> est conçu pour évaluer l'efficacité d'une structure en tant que dispositif photovoltaïque. La structure est dessinée avec RSoft CAD Layout, les matériaux absorbants sont sélectionnés dans une bibliothèque dédiée, et des moniteurs peuvent être placés à divers emplacements dans le domaine de simulation, permettant ainsi l'évaluation des différentes couches.

Les caractéristiques électriques du dispositif sont modélisées à l'aide de l'équation de diode simple ou du logiciel LaserMOD de RSoft, tandis que les propriétés optiques sont simulées avec les modules FuallWave ou DiffractMOD.

Le logiciel permet de sélectionner un spectre incident, tel que le spectre solaire au niveau de la mer, de définir des efficacités de collecte spécifiques pour chaque région observée et de réaliser des simulations sur une gamme de longueurs d'onde. Les résultats sont automatiquement collectés et utilisés pour évaluer l'efficacité de la cellule ainsi que les propriétés du circuit [52].

III.3. Modèles Optiques et Électriques

Les cellules solaires sont fondamentalement des dispositifs optiques et électroniques. Pour modéliser précisément ce type de dispositifs, le simulateur Solar Cell Utility utilise l'un des modèles optiques ci-dessous afin de calculer soit le spectre d'absorption du dispositif, soit la densité d'énergie totale à l'intérieur de la structure. Ces informations optiques sont ensuite transmises à un modèle électrique pour analyse.

III.3.1. Modèles Optiques

Le simulateur Solar Cell prend en charge les modèles optiques suivants :

III.3.1.1. DiffractMOD

DiffractMOD est un outil de conception et de simulation dédié aux structures optiques diffractives, incluant les éléments de diffraction optique, les structures périodiques et les cristaux photoniques à bande interdite.

Il s'appuie sur la méthode d'analyse rigoureuse des ondes couplées (RCWA), mise en œuvre à l'aide d'algorithmes avancés, tels qu'une formulation généralisée de la ligne de transmission et une factorisation rapide de Fourier.

Cet outil est largement utilisé dans divers domaines, notamment la fabrication de semi-conducteurs et l'optique ondulatoire. La méthode RCWA utilise le concept de cellule unitaire pour analyser des structures périodiques en deux dimensions, et elle est particulièrement adaptée aux structures multicouches [51].

III.3.1.2. FuallWave

Les simulations numériques ont été réalisées à l'aide du logiciel FuallWave, qui utilise la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) pour la simulation électromagnétique.

Ce logiciel permet de simuler une variété de structures, qu'elles soient finies, infinies ou périodiques, et composées de matériaux métalliques ou diélectriques.

Pour utiliser FuallWave, il est nécessaire de définir les matériaux de la structure en précisant leur permittivité électrique, ainsi que l'environnement de la structure et les conditions aux limites. Des conditions absorbantes doivent être mises en place autour du domaine de calcul pour éviter les réflexions parasites aux bords de la fenêtre de calcul FDTD, permettant ainsi de simuler un milieu ouvert [51,52].

III.3.1.3. Méthodes de modélisation (RCWA, FDTD)

Plusieurs méthodes numériques permettent de résoudre les équations de Maxwell. Ces méthodes se classent selon différents critères, tels que leur domaine d'application (temporel ou fréquentiel) ou le nombre de dimensions spatiales qu'elles exploitent.

Les méthodes numériques utilisées dans cette étude appliquent une approche modale fréquentielle avec une discrétisation bidimensionnelle (2D), complétée par une intégration analytique dans la troisième dimension. Cette technique, appelée méthode modale de Fourier ou Rigorous Coupled Wave Analysis (RCWA), est largement reconnue et couramment utilisée pour calculer la diffraction et l'absorption dans des structures périodiques.

Une des méthodes numériques les plus répandues, la méthode FDTD (Finite Difference Time Domain), procède en discrétisant les trois directions spatiales dans le domaine temporel.

- **La méthode RCWA**

La méthode modale de Fourier permet de résoudre les problèmes de diffraction dans les structures périodiques. Elle repose sur le calcul des modes de la structure et sur leurs échanges d'énergie aux interfaces.

Pour cela, le champ électromagnétique, ainsi que la permittivité et la perméabilité de la structure, sont développés en séries de Fourier. Également connue sous le nom de RCWA (Rigorous Coupled Wave Analysis) dans la littérature, cette méthode a été initialement conçue à la fin des années 1970 pour analyser l'électromagnétisme des réseaux de diffraction.

Elle a aussi été utilisée dans le domaine des cristaux photoniques pour calculer les diagrammes de bande, sous le nom de méthode des ondes planes, et peut être généralisée au calcul de la diffraction. Cette extension repose sur une périodisation de l'objet et l'utilisation de couches absorbantes.

La cellule unitaire de la structure peut avoir une géométrie arbitraire et contenir des matériaux diélectriques standard, ainsi que des matériaux dispersifs ou absorbants, comme les métaux. L'onde plane incidente peut posséder une direction et une polarisation quelconques. Cette méthode représente les champs électromagnétiques comme une somme d'ondes couplées. Une fonction de permittivité périodique est exprimée à l'aide des harmoniques de Fourier, chaque onde couplée correspondant à une harmonique.

Cela permet de résoudre les équations vectorielles complètes de Maxwell dans le domaine de Fourier. L'approche de la théorie des lignes de transmission modale (MTL) est équivalente à la RCWA, mais utilise des sommes de modes individuels pour représenter les champs électromagnétiques.

Cette méthode permet de décrire les champs à l'aide d'un réseau de lignes de transmission équivalentes, apportant une compréhension physique des différents mécanismes selon les applications.

Un autre avantage de la méthode MTL réside dans son élimination des problèmes potentiels de stabilité, qui peuvent survenir avec d'autres schémas numériques comme la méthode de la matrice de transfert. Dans ce cadre, les équations de Maxwell peuvent être formulées ainsi :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (\text{III. 1})$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \frac{\partial E_z}{\partial x} \quad (\text{III. 2})$$

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right) \quad (\text{III. 3})$$

Où μ représente la perméabilité, ε est la permittivité et σ est la conductivité.

L'équation suivante lie les étapes spatiales et temporelles :

$$\Delta t \leq \frac{1}{C} \sqrt{\Delta x^{-2} - \Delta y^{-2}} \quad (\text{III. 4})$$

Où Δx et Δy représentent les pas spatiaux dans les directions x et y respectivement, et C : c'est la vitesse de la lumière dans le vide.

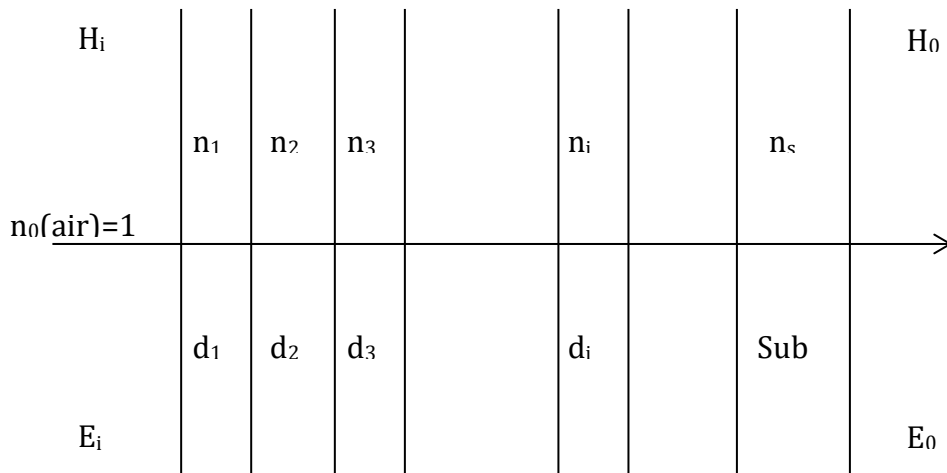


Figure III.1. Schéma de la structure 1D-PhC.

- **La méthode (FDTD)**

La méthode FDTD (Finite Difference Time Domain) fonctionne en résolvant les équations de Maxwell dans un domaine discrétisé tant spatialement que temporellement. Elle permet de suivre l'évolution du champ électromagnétique à chaque point de la structure au fil du temps. Ainsi, il est possible d'obtenir des cartographies du champ électromagnétique à tout moment et en tout lieu. Comprendre l'évolution du champ au fil du temps offre également des informations sur la réponse spectrale de la structure [52]. Les aspects fondamentaux de la formulation de base de la méthode seront présentés. Cette approche permet de résoudre les équations de Maxwell dans le temps et l'espace en approximant directement les opérations différentielles par des différences finies :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (\text{III. 5})$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] \quad (\text{III. 6})$$

Est quatre autres équations, qui sont des équivalents symétriques de celles mentionnées précédemment, sont obtenues en permutant cycliquement les indices et dérivées x, y et z. Les équations de Maxwell décrivent la relation entre la variation temporelle du champ électrique E et la variation spatiale du champ magnétique H, et vice versa.

La méthode FDTD résout ces équations en les échantillonnant à l'aide de différences centrales dans le temps et l'espace, puis en les calculant numériquement à l'aide d'un logiciel.

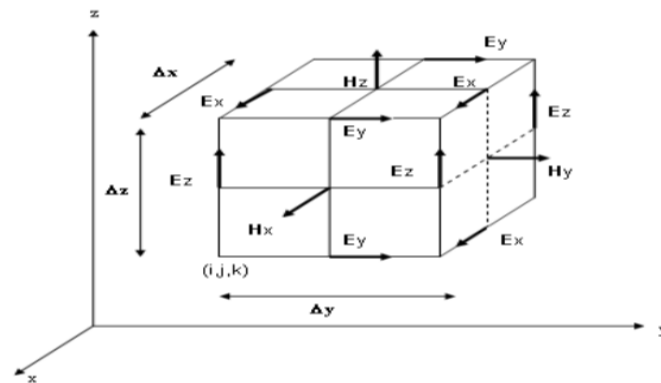


Figure. III.2. Cellule de Yee de dimensions Δx , Δy , Δz : Les composantes du champ H sont évaluées à des positions décalées d'un demi-pas spatial par rapport aux points de calcul des composantes du champ E [52].

III.3.2. Modèles Electriques

Le simulateur « Solar Cell » prend en charge les modèles électriques suivants :

III.3.2.1 le modèle électrique LaserMOD

Cette méthode évalue les caractéristiques électriques du dispositif en s'appuyant sur le modèle détaillé du dispositif actif de LaserMOD, à partir de la densité d'énergie totale au sein de la structure.

Dans ce cadre, les équations couplées de Poisson et de continuité sont résolues, intégrant différents modèles de recombinaison et d'absorption sombres.

Cela permet d'obtenir une estimation plus précise de l'efficacité de collecte, du facteur de remplissage et de la tension à circuit ouvert. Cependant, LaserMOD présente certaines limitations géométriques qui ne sont pas rencontrées avec les outils optiques, et il n'offre pas non plus de capacité complète en 3D.

Dans de nombreux cas, ces restrictions n'entravent pas la modélisation précise des dispositifs réels, mais il est important de veiller à ce que la structure soit définie de manière cohérente tant dans LaserMOD que dans l'outil optique.

III.3.2.2 Modèle Électrique de Diode Idéale

La méthode de la diode idéale s'appuie sur l'équation de la diode idéale pour évaluer les propriétés électriques du dispositif. Elle peut fournir des résultats précis si l'utilisateur possède une certaine compréhension des aspects électriques de ce dernier.

Cette méthode est intégrée à l'Utilitaire de Cellule Solaire et n'est pas disponible en tant que licence distincte. Cette méthode permet de calculer les caractéristiques électriques du dispositif à partir du spectre d'absorption.

Cette section présentera les quantités fondamentales que l'utilitaire de cellule solaire génère en utilisant cette méthode [53].

- **Quantités de Base**

L'énergie portée par un photon à une longueur d'onde λ est :

$$E(\lambda) = h\nu = \frac{hc}{\lambda} [\text{eV}] \quad (\text{III. 7})$$

Étant donné la constante de Planck : $h = 4.1357 \times 10^{-15}$ [eV. s], la vitesse de la lumière $C = 3 \times 10^8$ [m/s] et la longueur d'onde λ en mètres, l'énergie d'un photon à une longueur d'onde particulière λ peut être exprimée comme :

$$n_s(\lambda) = \frac{S(\lambda)}{E(\lambda)} = \frac{\lambda}{hc} S(\lambda) \quad (\text{III. 8})$$

L'utilitaire de cellule solaire se base par défaut sur le spectre solaire [54], mais il est possible d'utiliser tout spectre personnalisé par l'utilisateur. En combinant les spectres d'absorption de chaque couche, notés $A_i(\lambda)$, on obtient le spectre d'absorption total du dispositif, comme le montre l'illustration ci-dessous :

$$A(\lambda) = \sum_i A_i(\lambda) \quad (\text{III. 9})$$

Où : $A_i(\lambda)$: est le spectre d'absorption de la i -ème couche à la longueur d'onde λ .

Ces spectres d'absorption peuvent être déterminés à l'aide de plusieurs méthodes, notamment par les logiciels de simulation RSoft FuallWave et/ou DiffractMOD. En tenant

compte de ces spectres, le nombre de photons absorbés à une longueur d'onde λ dans chaque couche est donc :

$$n_i(\lambda) = \frac{S(\lambda)A_i(\lambda)}{E(\lambda)} = \frac{\lambda}{hc}S(\lambda)A_i(\lambda) \quad (\text{III. 10})$$

- **Les sorties électriques**

En prenant en compte les paramètres mentionnés précédemment, plusieurs résultats peuvent être calculés, c'est l'efficacité quantique externe (EQE) est définie comme :

$$EQE(\lambda) = \frac{n_{e-h}(\lambda)}{n_h(\lambda)} = \sum_i \eta_i A_i(\lambda) \quad (\text{III. 11})$$

$n_{e-h}(\lambda)$: est le nombre de paires électron-trou collectées par la cellule solaire à la longueur d'onde.

$n_s(\lambda)$: est le nombre de photons incidents sur la cellule solaire à la longueur d'onde.

L'efficacité quantique interne (IQE) est définie comme :

$$IQE(\lambda) = \frac{EQE(\lambda)}{A(\lambda)} = \frac{\sum_i \eta_i A_i(\lambda)}{\sum_i A_i(\lambda)} \quad (\text{III. 12})$$

Par contre : la densité de courant de court-circuit peut être calculée comme :

$$J_{CC} = e \cdot n_{e-h} [A/m^2] \quad (\text{III. 13})$$

Et la tension en circuit ouvert est :

$$V_{CO} = \frac{kT}{e} \ln \left(\frac{J_{CC}}{J_{CO}} + 1 \right) [V] \quad (\text{III. 14})$$

Où : $k = 8.6173 \times 10^{-5}$ [eV/K] est la constante de Boltzmann, T [K] est la température absolue en kelvins (K), J_{CC} est la densité de courant de court-circuit, et J_{SO} est le courant de saturation inverse, qui peut être calculé par une simulation de dispositif actif ou empirique.

Le rendement des cellules solaires est défini comme :

$$\eta = \frac{J_{CC} V_{CO} FF}{P_{inc}} \quad (III. 15)$$

Où FF est le facteur de remplissage, qui peut être obtenu à partir de la courbe J-V du dispositif ou défini par l'utilisateur, et P_{inc} est la puissance incidente totale.

III.4. Les fenêtres de simulateur « Solar Cell »

Une fois que tous les paramètres de la cellule solaire ont été configurés, saisissez un préfixe de sortie pour définir les noms de fichiers utilisés pour enregistrer les données, puis cliquez sur le bouton OK pour lancer le calcul.

Vous avez également la possibilité de cliquer sur le bouton "Enregistrer les paramètres" pour sauvegarder les valeurs des paramètres sans exécuter le calcul. Lorsque le calcul commence, la fenêtre de simulation de la cellule solaire affichera les fenêtres du moteur de simulation demandées.

Pendant le calcul, vous pouvez suspendre, reprendre ou abandonner la simulation en utilisant les options disponibles dans la barre d'outils de cette fenêtre.

Si un spectre d'absorption doit être généré par la simulation, mettre la simulation en pause ou l'abandonner dans la fenêtre Utilitaire n'interrompra pas le point de simulation actuel, mais empêchera le démarrage du suivant. Une fois la simulation achevée, l'état et les résultats seront rapportés comme illustré dans la figure III.3.

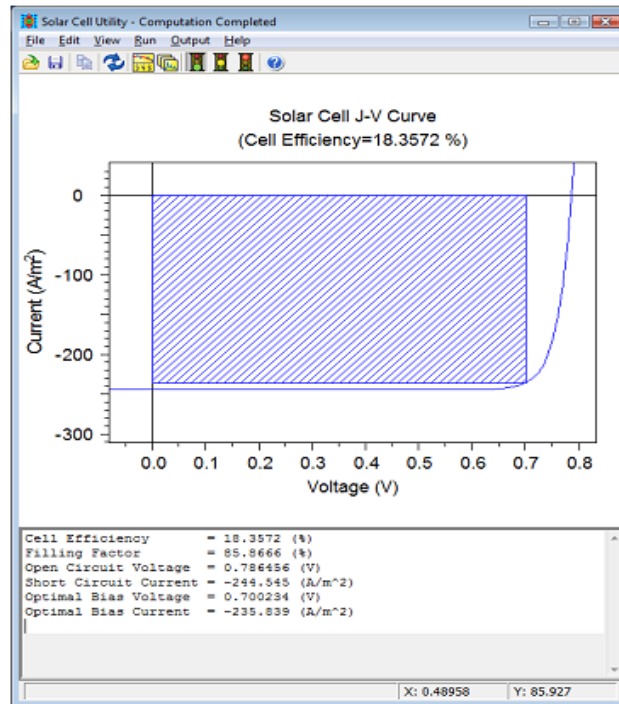
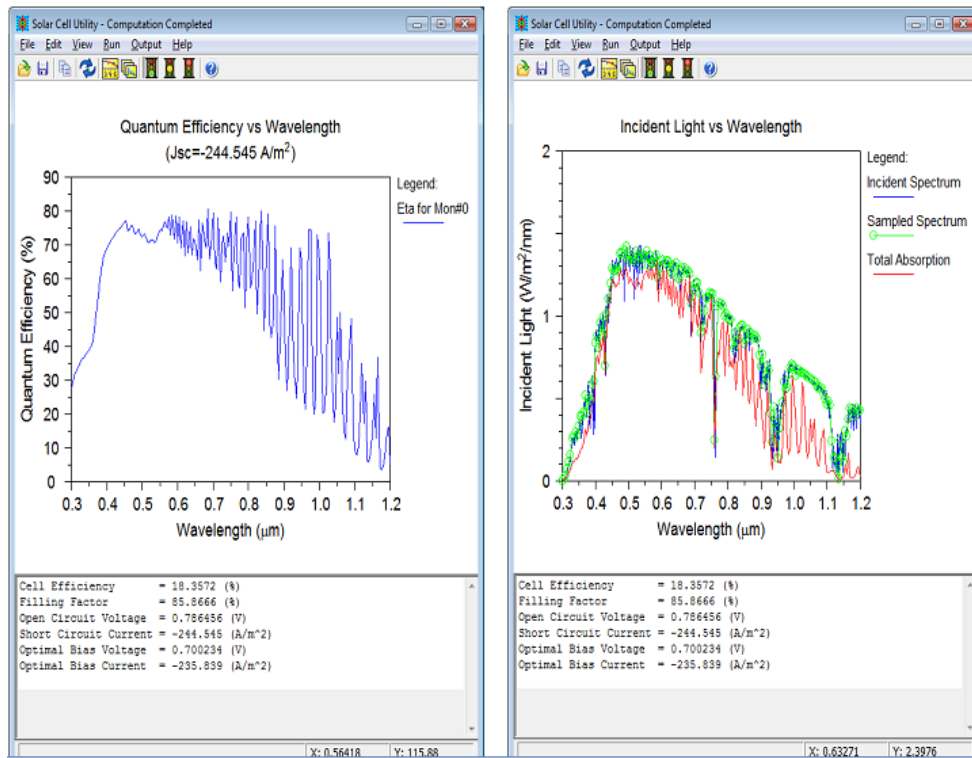


Figure III.3. La fenêtre de simulation de « Solar Cell » présente la sortie J-V par défaut.

Dans cette figure, le rectangle grisé représente le facteur de remplissage. Le point de la courbe où $V = 0$ correspond au courant de court-circuit J_{CC} , tandis que le point où le courant est nul représente la tension en circuit ouvert V_{CO} . Enfin, le point de la courbe qui définit le rectangle ombragé correspond au point de biais optimal.

Par défaut, la courbe J-V s'affiche dans la fenêtre de simulation. Il est également possible d'afficher les efficacités quantiques ainsi que divers spectres (absorption incidente, échantillonnée et totale).

Pour passer d'une vue à l'autre, utilisez l'élément de menu "Sortie" dans la fenêtre de simulation. Le spectre échantillonné représente le spectre incident interpolé et peut être utile pour vérifier si le taux d'échantillonnage est suffisamment élevé pour garantir des résultats précis. Toutes les sorties de simulation, y compris les fichiers de données, seront enregistrées dans un nouveau sous-répertoire portant le même nom que le préfixe de sortie.



(a)

(b)

Figure III.4. La fenêtre de simulation de l'utilitaire affiche a) les résultats de l'efficacité quantique et b) les résultats des spectres, montrant les spectres incidents, échantillonné et absorbé.

Lorsque plusieurs moniteurs d'absorption sont utilisés, l'efficacité quantique externe de chaque moniteur ainsi que l'efficacité totale seront affichées simultanément.

III.5. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté en détail le logiciel RSoft CAD et ses simulateurs intégrés, DiffractMOD et FullWAVE, qui jouent un rôle clé dans l'étude des structures photoniques.

Nous avons expliqué leurs fonctionnalités principales et leur capacité à modéliser des structures optiques complexes. DiffractMOD, basé sur la méthode des ondes planes rigoureusement couplées (RCWA), est particulièrement adapté pour analyser les structures périodiques, telles que les cristaux photoniques, en calculant des paramètres optiques comme la transmission, la réflexion et l'efficacité de diffraction.

En complément, FullWAVE, qui repose sur la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD), permet de modéliser des interactions dynamiques dans le domaine temporel, offrant une visualisation détaillée des champs électromagnétiques dans le temps et l'espace.

Ces deux approches, RCWA et FDTD, sont reconnues pour leur efficacité dans la modélisation des cristaux photoniques, car elles permettent de résoudre avec précision les équations de Maxwell pour des géométries complexes. Nous avons décrit les différentes étapes de simulation, allant de la définition des paramètres géométriques et des propriétés des matériaux à l'analyse des résultats.

Les simulations réalisées à l'aide de ces méthodes ont permis d'extraire des informations cruciales sur les propriétés dynamiques des structures étudiées, notamment la transmission et la réflexion, mais aussi des propriétés plus avancées comme la localisation spatiale des champs électromagnétiques et le facteur de qualité des résonateurs, qui est un indicateur clé des performances des dispositifs optiques.

Enfin, nous avons souligné la pertinence de ces outils et méthodes pour étudier et optimiser les cristaux photoniques, qui jouent un rôle important dans diverses applications optiques avancées.

La capacité de ces simulateurs à fournir une analyse précise et complète en fait des outils indispensables pour explorer les propriétés optiques, concevoir des dispositifs photoniques innovants et comprendre les mécanismes fondamentaux de l'interaction lumière-matière dans des structures périodiques.

Chapitre IV

Résultats et discussions

IV.1. Introduction

Le développement des technologies à couches minces constitue un moyen intéressant de réduire les coûts et la consommation de matériaux [55,56], facilitant potentiellement la commercialisation de tels dispositifs photovoltaïques.

Un avantage supplémentaire de ces technologies réside dans la plus courte longueur de diffusion des porteurs de charge, permettant l'utilisation de matériaux moins cristallins pour l'absorption. Par ailleurs, les propriétés électriques évoluent avec la dimensionnalité : en passant de la structure 2D à 3D, la bande interdite se réduit, ce qui est avantageux pour les applications solaires.

En 2009, Miyasaka et collaborateurs ont utilisé la pérovskite 3D- $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$ ($X = \text{Br}, \text{I}$) comme sensibilisant inorganique dans des cellules solaires sensibilisées par colorant [57]. La pérovskite, nommée d'après le minéralogiste russe L.A. Perovski, possède une structure cristalline particulière dont la formule est ABX_3 (X étant un oxygène ou un halogène).

Dans cette structure, le grand cation A occupé un site cubo-octaédrique entouré de douze anions X, tandis que le plus petit cation B est stabilisé dans un site octaédrique avec six anions X. Les pérovskites les plus étudiées sont des oxydes, réputés pour leurs propriétés de ferroélectricité ou de supraconductivité.

Les pérovskites d'halogénures, en revanche, ont longtemps été négligées jusqu'à ce qu'il soit démontré que certaines d'entre elles, sous forme de couches organométalliques, présentaient une transition de semi-conducteur à métal en augmentant leur dimensionnalité [58]. Miyasaka et al. [57] ont rapporté une efficacité de conversion de puissance (ECP) de 3.1 % pour $X=\text{Br}$ et de 3.8 % pour $X=\text{I}$, tandis que Park et al. [59] ont obtenu une ECP de 6.5 % en utilisant le composé $\text{CHNH}_3\text{PbI}_3$.

Toutefois, l'ECP diminue de manière significative en raison de la profondeur de pénétration des photons, qui dépasse souvent l'épaisseur du film, notamment près de la bande interdite. Ce défi nécessite une gestion optimisée de la lumière pour accroître l'absorption des photons dans la fine couche photoactive.

Divers concepts photoniques, comme les revêtements antireflets, les rétro-rélecteurs et les textures de surface aléatoires [55,56,60,61], ont été développés pour y remédier. Ces techniques, en raison de leur nature non résonante, permettent une amélioration sur une large gamme spectrale [62].

Dans les cellules solaires, des caractéristiques électriques améliorées, telles qu'une mobilité accrue des porteurs, une durée de vie prolongée et une densité de défauts réduite, ne peuvent être obtenues qu'en optimisant la qualité de la pérovskite utilisée comme couche mince active [63]. Cependant, une couche absorbante fine n'assure pas toujours un transport efficace des photons.

Le piégeage de la lumière dans une fine couche active pourrait être une solution clé pour maximiser l'absorption de la lumière incidente. Ainsi, après avoir sélectionné les couches ETM et HTM appropriées qui augmenteraient l'efficacité des cellules, l'ajout d'une couche active nanostructurée permettrait d'améliorer simultanément les propriétés optiques et électriques des cellules solaires à base de pérovskite.

La technique, appelée « réutilisation des photons » [64], consiste à utiliser une couche métallique standard, comme de l'aluminium (Al) ou de l'argent (Ag), en tant que rétroprojecteur, offrant une réflectance supérieure à 90 % et donc une plus grande efficacité à moindre coût.

Cependant, la présence d'une interface métal-semiconducteur introduit des effets indésirables en raison des plasmons de surface.

De plus, les surfaces métalliques présentent des limites naturelles liées à leurs capacités restreintes de diffraction et leurs taux de dégradation élevés [65, 66]. Les matériaux pérovskites organo-inorganiques à base d'halogénures, semblables aux cristaux photoniques, peuvent néanmoins améliorer l'efficacité des cellules solaires en capturant la lumière.

En effet, les cristaux photoniques sont largement utilisés dans les cellules solaires pour optimiser le piégeage de la lumière, grâce à leurs structures de matériaux diélectriques agencés de manière à contrôler la lumière efficacement.

Dans cette étude, nous présentons la préparation d'une cellule solaire hybride en pérovskite, avec un cristal photonique en fond servant de réflecteur sélectif de lumière. Celui-ci favorise la réutilisation des photons au sein de la cellule, augmentant ainsi l'efficacité d'absorption de la cellule solaire nanostructurée en pérovskite.

Pour permettre une production à grande échelle, un cristal photonique 1D a été intégré afin de maintenir le dispositif fin. Dans la structure proposée, les couches alternées ont été optimisées. Cette configuration permet une rétention accrue des photons, avec une longueur d'onde centrale de 600 nm.

Les pérovskites hybrides organiques-inorganiques sont des matériaux absorbants prometteurs pour les cellules solaires photovoltaïques ou les dispositifs optoélectroniques à faible coût. Parmi ces pérovskites, le triiodure de plombate de méthylammonium ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, MAPbI_3 ou MAPI) présente actuellement le rendement le plus élevé. Nous avons analysé la transition structurale du MAPI par diffraction des rayons X en phase β et l'avons corrélée à ses propriétés électroniques.

$\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ devient un bon collecteur de lumière grâce à ses caractéristiques remarquables telles que bande interdite idéale, absorption large spectre, bon mécanisme de transporteur, facilité de fabrication sur le substrat souple et la bande accordable espace et longue longueur de diffusion.

IV.2. Optimisation structurelle

IV.2.1. Première structure étudiée

Dans cette première structure étudiée (Figure IV.1), une structure optimisée de cellule solaire a été modélisée, avec la pérovskite comme couche active, le PDMS comme couche de fenêtre, le ZnSe en tant que couche de transport d'électrons (ETL) et l'P3HT comme couche de transport de trous (HTL).

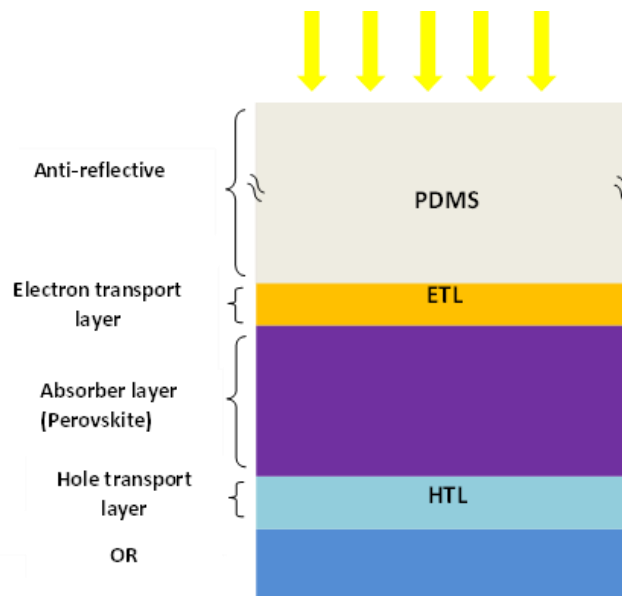


Figure IV.1. Cellule solaire à base de pérovskite.

Afin d'atteindre des performances optimales, nous avons évalué plusieurs matériaux alternatifs pour les couches intermédiaires, notamment le remplacement de la couche ETL

(Electron Transport Layers) ZnSe par TiO_2 , ZnO et ZnS. La couche HTL (Hole Transport Layer) P3HT a remplacé par AZO.

a. Les propriétés optiques des matériaux ETM et HTM :

➤ Matériaux ETM :

TiO_2 : Le dioxyde de titane (TiO_2) est un oxyde de titane naturel. Son indice de réfraction élevé en fait un matériau important pour les revêtements et composants optiques, notamment comme pigment blanc dans les peintures, les cosmétiques et les crèmes solaires grâce à ses propriétés d'absorption des UV.

Les deux principales formes cristallines utilisées dans l'industrie sont le rutile et l'anatase. De plus, ses propriétés photovoltaïques et photocatalytiques ont donné lieu à des recherches et à des applications dans les cellules solaires et la purification de l'air, respectivement.

Le TiO_2 présente également une excellente stabilité chimique dans diverses conditions, ce qui en fait un matériau de choix pour une utilisation en environnements difficiles. Minéraux : rutile, anatase, brookite.

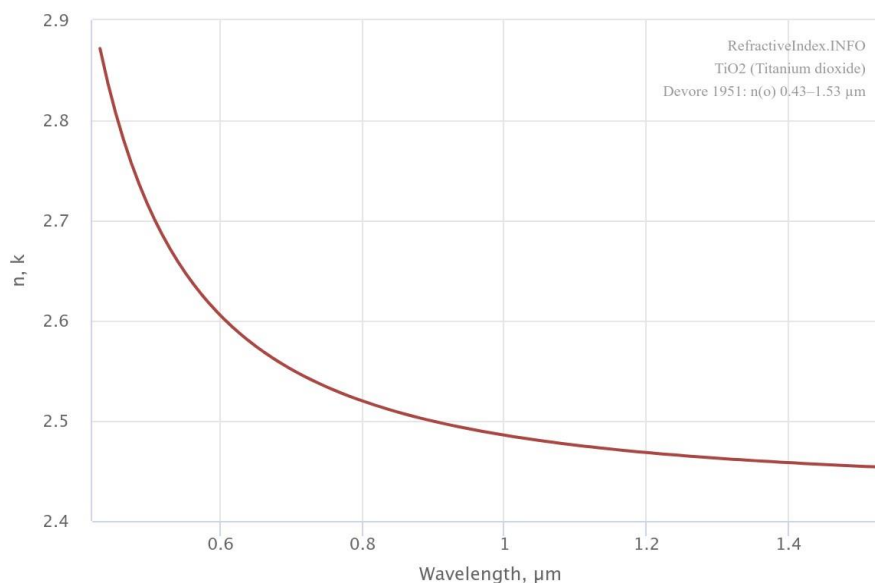


Figure IV.2. Constantes optiques du TiO_2 (dioxyde de titane)

ZnSe : Le sélénure de zinc (ZnSe) est un semi-conducteur binaire à structure cubique en blende de zinc. Ce matériau est transparent dans le visible et le proche infrarouge du spectre électromagnétique, avec une large bande interdite directe d'environ 2,7 eV. Grâce à sa transparence et à son indice de réfraction élevé, le ZnSe est devenu un choix populaire pour les systèmes laser infrarouges de forte puissance, notamment les lasers à CO₂, où les optiques en ZnSe servent de coupleurs de sortie et d'expandeurs de faisceau.

Le ZnSe peut également être dopé avec divers éléments, notamment le chrome (Cr:ZnSe), pour produire des lasers à solide dans l'infrarouge moyen. De plus, le ZnSe est utilisé dans la fabrication de diodes électroluminescentes, de photodétecteurs et de cellules solaires.

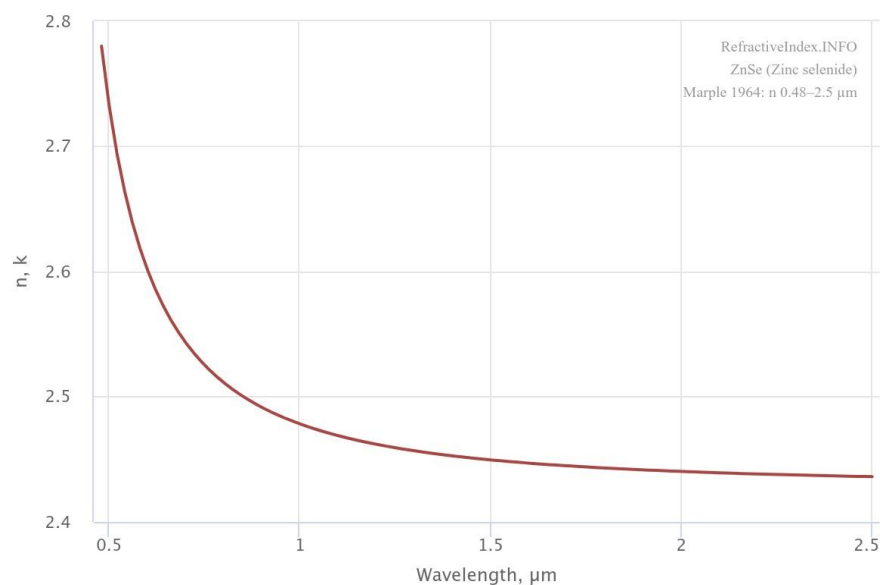


Figure IV.3. Constantes optiques du ZnSe (sélénure de zinc)

ZnO : L'oxyde de zinc (ZnO) est un semi-conducteur à large bande interdite directe d'environ 3,37 eV. Cette propriété unique en fait un matériau d'un intérêt majeur pour diverses applications optoélectroniques, notamment les cellules solaires, les capteurs et les LED.

Le ZnO présente également des propriétés piézoélectriques, exploitées dans la conception de capteurs et d'actionneurs. Il se forme naturellement dans une structure cristalline wurtzite hexagonale, affichant une forte luminescence même à température ambiante.

De plus, le ZnO est un oxyde conducteur transparent, ce qui signifie qu'il conduit l'électricité tout en restant transparent à la lumière visible, ce qui le rend utile dans l'électronique transparente et les écrans tactiles. Grâce à ses propriétés antibactériennes et anti-UV, le ZnO est également couramment utilisé comme ingrédient dans les cosmétiques et les crèmes solaires.

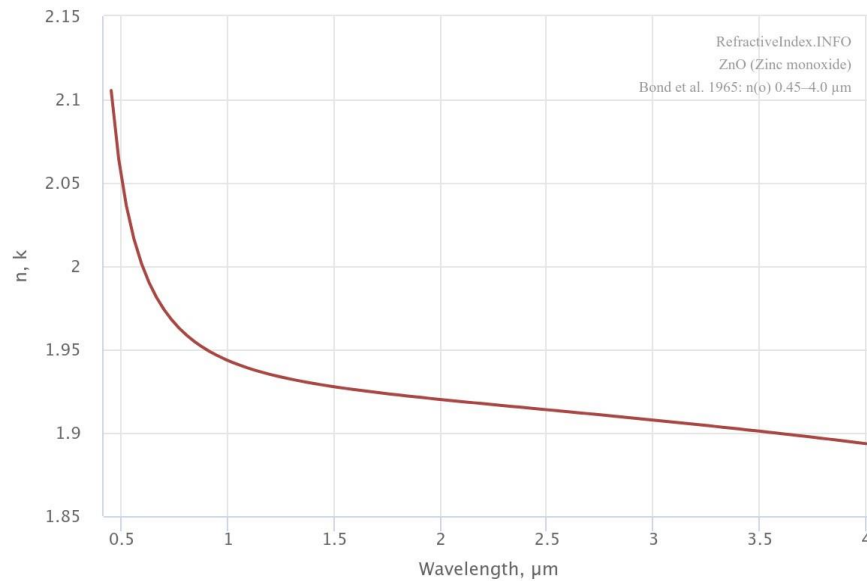


Figure IV.4. Constantes optiques du ZnO (monoxyde de zinc)

ZnS : Le sulfure de zinc (ZnS) est un matériau semi-conducteur présentant une structure cristalline sphalérite (cubique) ou wurtzite (hexagonale). Sa bande interdite directe est d'environ 3,68 eV pour la forme cubique et 3,91 eV pour la forme hexagonale. Grâce à ses propriétés luminescentes, le ZnS a été largement utilisé dans des applications telles que les panneaux électroluminescents, les écrans à rayons X et les matériaux phosphorescents.

Le ZnS dopé, notamment au cuivre ou à l'argent, permet de produire des matériaux phosphorescents largement utilisés dans divers écrans. Le ZnS est également utilisé comme matrice hôte dans de nombreuses applications de boîtes quantiques.

De plus, sa capacité de transmission infrarouge le rend précieux pour l'optique infrarouge et il est fréquemment utilisé dans les fenêtres et lentilles infrarouges. Minéraux : Sphalérite (minéral de ZnS cubique), Wurtzite (minéral de ZnS hexagonal).

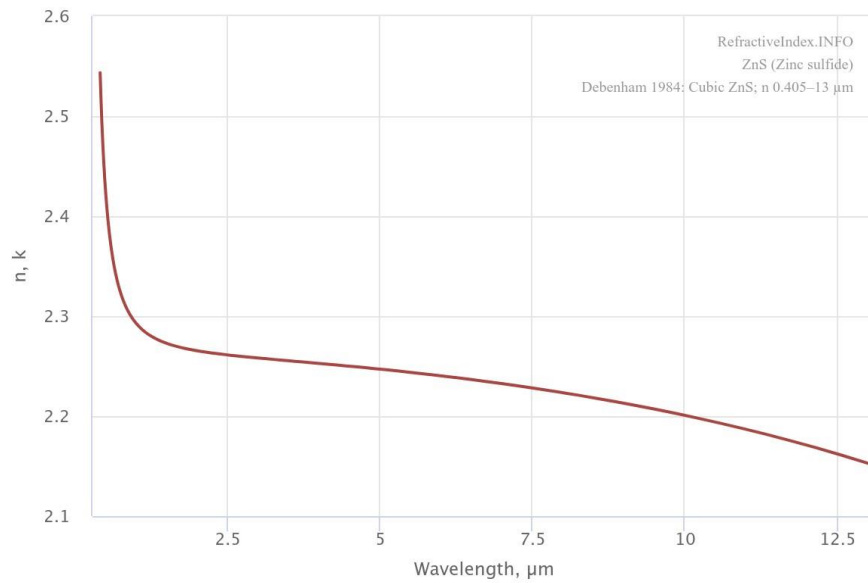


Figure IV.5. Constantes optiques du ZnS (sulfure de zinc)

a.2. Matériaux HTM :

P3HT : Applications : Cellules solaires Composition chimique du P3HT : $(C_{41}H_{53}FO_4S_4)_n$
 Composition chimique du PC61BM : $C_{72}H_{14}O_2$.

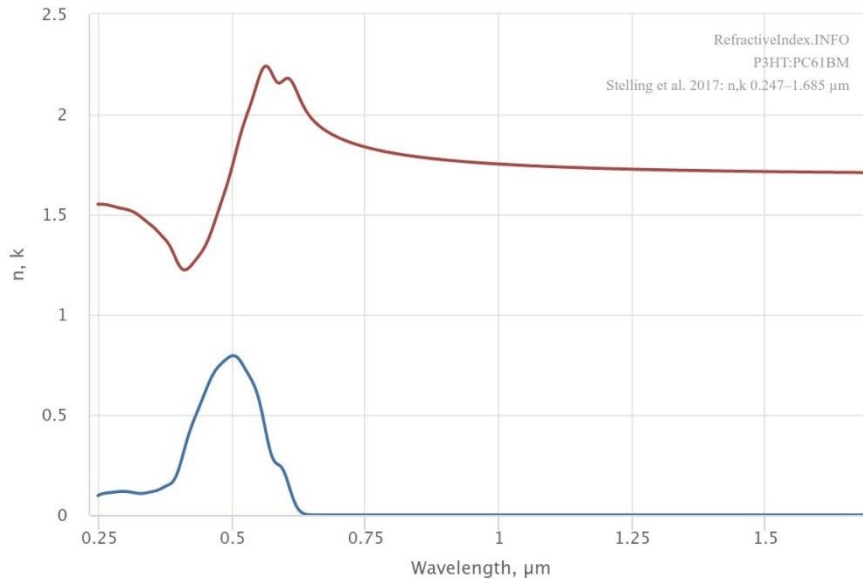


Figure IV.6. Constantes optiques de P3HT:PC61BM

AZO : L'oxyde de zinc dopé à l'aluminium (AZO) est un oxyde conducteur transparent utilisé dans les dispositifs optoélectroniques. Stanford Advanced Materials (SAM) peut se prévaloir d'une grande expérience dans la fourniture d'oxyde de zinc dopé à l'aluminium, d'une grande pureté et à des prix compétitifs.

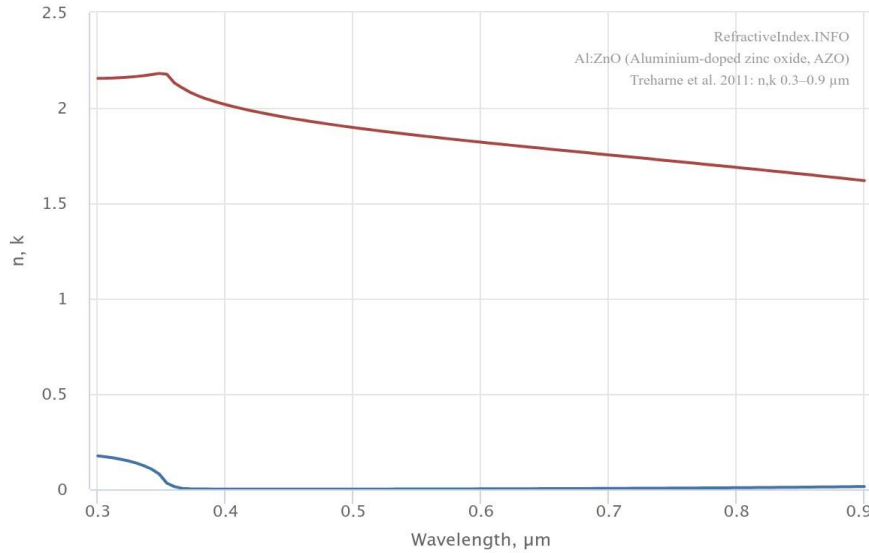


Figure IV.7. Constantes optiques de Al:ZnO (oxyde de zinc dopé à l'aluminium, AZO)

L'objectif principal de cette analyse est d'améliorer l'efficacité énergétique globale de la cellule solaire tout en réduisant les coûts de fabrication, grâce à une sélection judicieuse des matériaux pour les couches fonctionnelles.

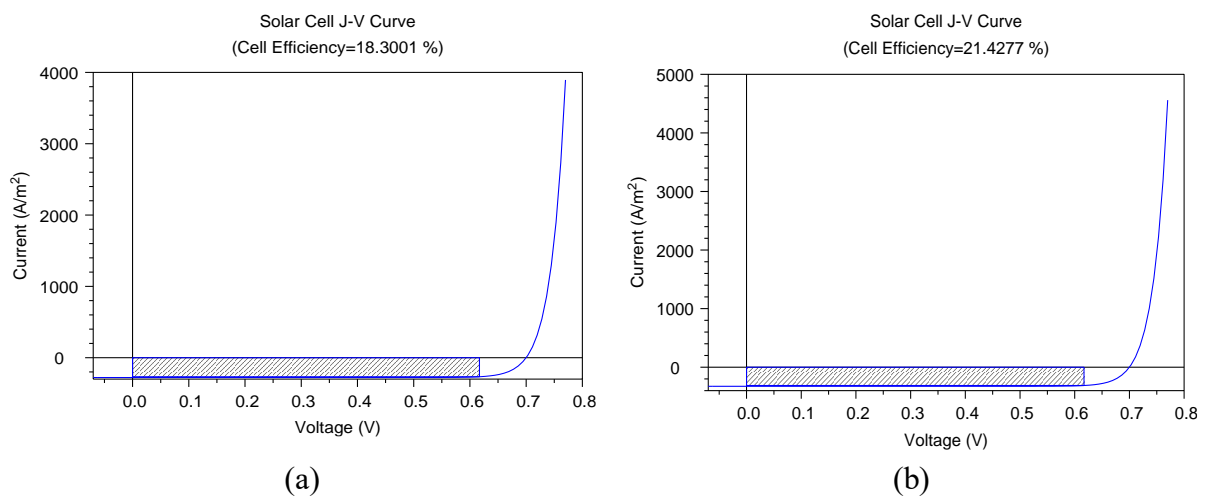


Figure IV.8. Caractéristiques $I=f(V)$ d'une cellule PV: (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).

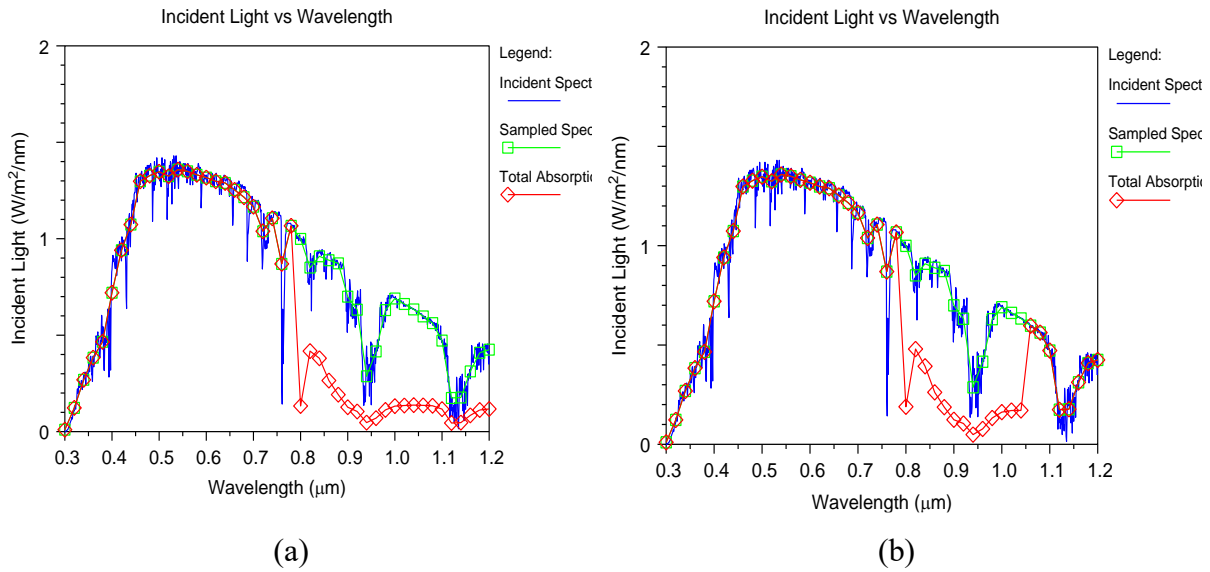


Figure IV.9. Absorption totale de la lumière (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).

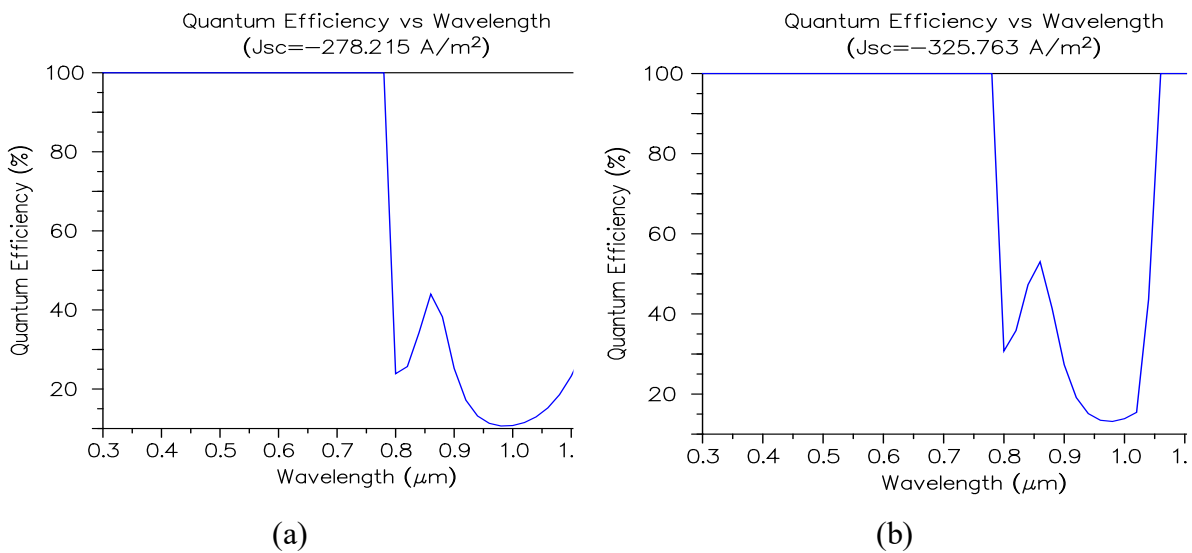


Figure IV.10. Efficacité quantique (a) ETM (ZnSe) et HTM (P3HT), (b) ETM (ZnS) et HTM (AZO).

Les résultats obtenus mettent en évidence l'influence critique des propriétés optiques et électroniques des matériaux sur les performances globales de la cellule, notamment en termes d'absorption de la lumière, de gestion des charges et de minimisation des pertes résistives.

Tableau IV.1. Tableau des rendements pour différents ETM et HTM.

HTM	ETM	TiO ₂	ZnSe	ZnO	ZnS
P3HT		18.54	18.30	18.74	21.19
AZO		18.87	18.61	19.08	21.43

Selon cette étude, le matériau ETM optimal est le ZnS, tandis que le matériau HTM le plus approprié est l'AZO, comme le montre l'optimisation de nos cellules solaires à base de pérovskite l'efficacité a été augmentée comme le montre le tableau IV.1. Les matériaux ont été sélectionnés en raison de leurs propriétés optoélectroniques favorables et de leur compatibilité économique.

IV.2.2. Deuxième structure étudiée

Dans cette deuxième structure étudiée (figure IV.5) comprend plusieurs matériaux : une couche absorbante d'environ 500 nm de pérovskite à base d'halogénure organique-inorganique ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbX}_3$, X = Cl, Br, I), une couche de transport d'électrons (ETL) en ZnS, et une couche de transport de trous (HTL) en AZO, chacune de ~50 nm d'épaisseur. Une couche de PDMS de 10 nm sert de fenêtre, tandis qu'une couche réfléchissante d'or de 20 nm complète la structure.

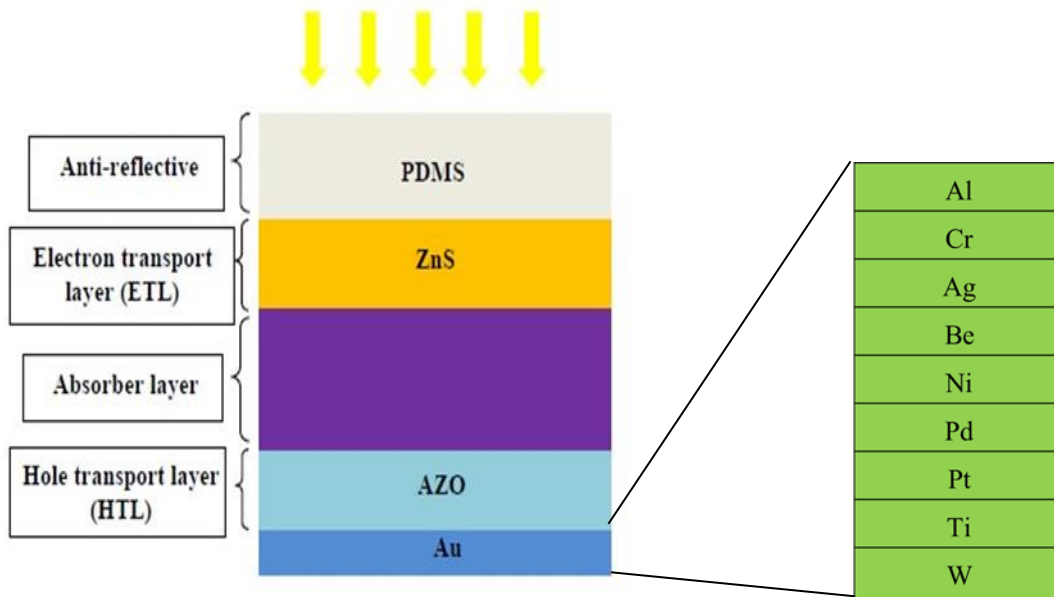


Figure IV.11. Cellule solaire à base de pérovskite en remplaçons ensuite la couche réfléchissante en (Au) par d'autres métaux.

Nous remplaçons ensuite la couche réfléchissante en (Au) par d'autres métaux, tels que l'aluminium, le chrome, l'argent, le béryllium, le titane, etc., dans le but d'augmenter l'efficacité de la cellule solaire, d'optimiser l'absorption des photons et de réduire les coûts.

À l'aide de RSoft CAD, nous avons analysé l'effet de différents matériaux dans les différentes couches d'une cellule solaire à base de pérovskite sur l'efficacité de conversion de puissance (ECP) et d'autres paramètres, tels que la densité de courant (J-V) obtenue lors des mesures.

Nous avons ainsi retenu la pérovskite comme couche active, le PDMS comme couche de fenêtre et l'or comme couche réfléchissante de référence, laquelle sera remplacée successivement par divers métaux comme l'aluminium, le chrome, l'argent, le béryllium et le titane.

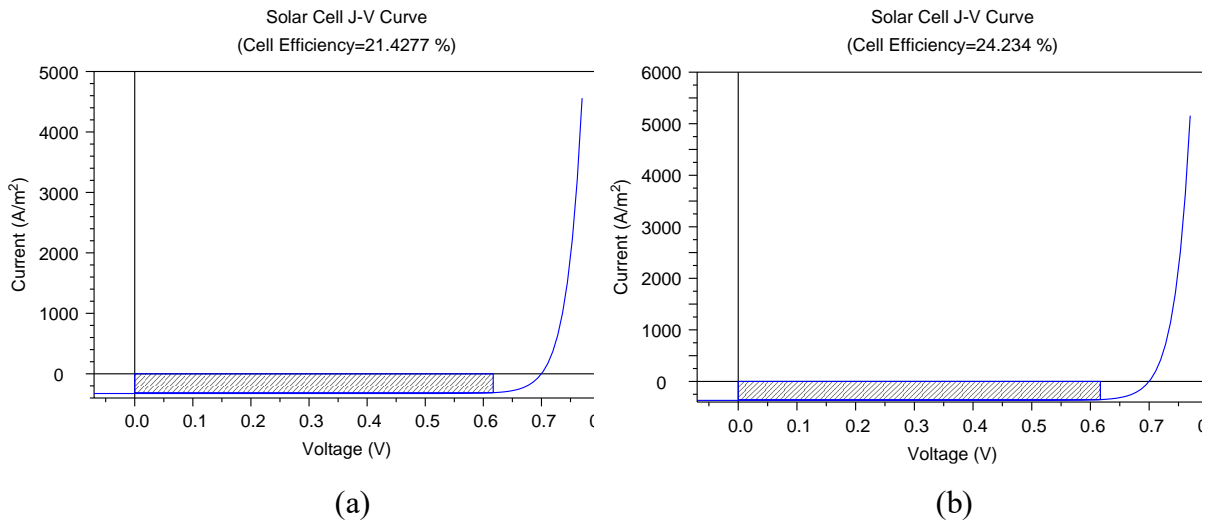


Figure IV.12. Caractéristiques $I=f(V)$ d'une cellule PV avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) en Be

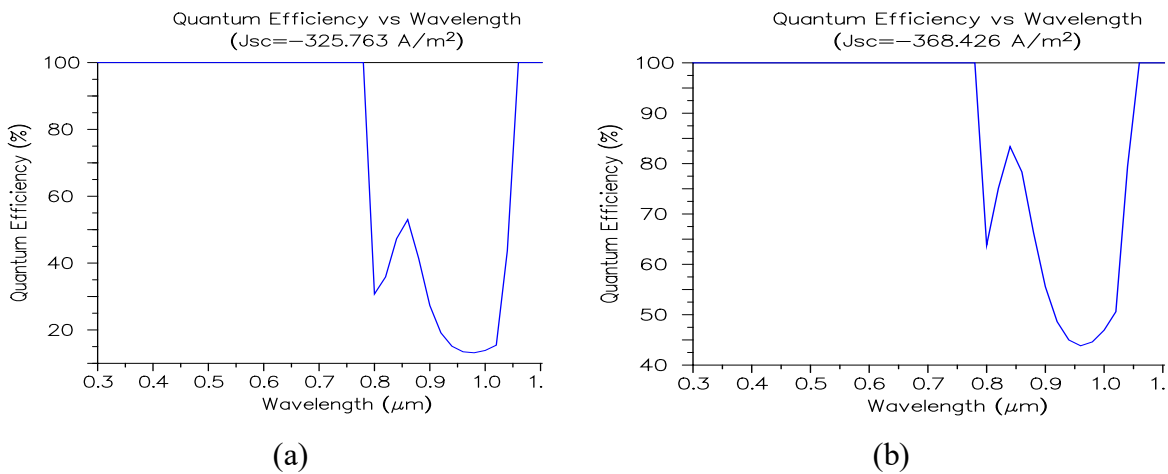


Figure IV.13. Efficacité quantique avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) Be.

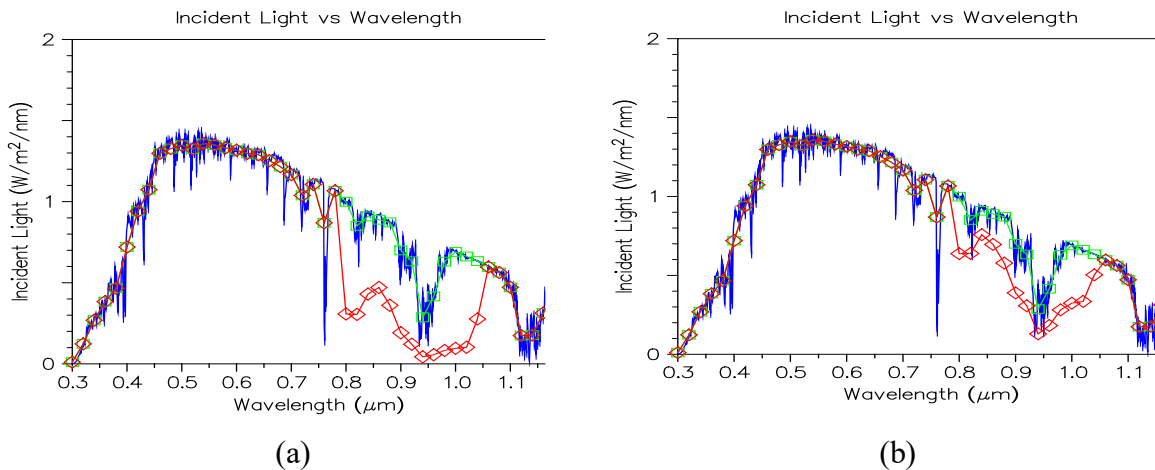


Figure IV.14. Absorption totale de la lumière avec une couche réfléchissante (a) en Au, (b) Be.

Les figures IV.12, IV.13, IV.14, présentent une comparaison de les caractéristiques $I=f(V)$, l'efficacité quantique et de l'absorption totale de la lumière respectivement entre deux configurations : une première cellule avec de l'or (Au) comme couche réfléchissante et une seconde avec de l'aluminium (Be) dans cette même couche. On observe que l'efficacité de la cellule passe de 21.43 % (Figure IV.12.a) dans la configuration avec Au à 22.49 % (Figure IV.12.b) dans celle avec Be. La densité de courant de court-circuit (J_{CC}) atteint -34.19 mA/cm^2 dans la cellule avec Be (Figure IV.13.b), ce qui est supérieur à celle contenant Au, dont la valeur J_{CC} est de -32.58 mA/cm^2 (Figure IV.13.a). De plus, l'absorption de la lumière est plus élevée dans la cellule utilisant Be comme couche réfléchissante (Figure IV.14.b) que dans celle avec Au (Figure IV.14.a). Ces résultats montrent que le béryllium est plus performant que l'or en tant que couche réfléchissante, avec en outre un avantage économique, l'aluminium étant moins coûteux que l'or.

Une autre simulation avec de l'or (Au) comme couche réfléchissante et une autre avec du titane (Ti). Nous avons eu On obtient que l'efficacité de la cellule passe de 21.43 % avec Au comme couche réfléchissante à 24.10 % avec Ti. La densité de courant de court-circuit (J_{CC}) atteint -36.63 mA/cm^2 dans la cellule avec Ti comme couche réfléchissante, ce qui est supérieur à celle avec Au, dont la valeur J_{CC} est de -32.58 mA/cm^2 . En outre, l'absorption de la lumière est plus élevée dans la cellule utilisant Ti comme couche réfléchissante que dans celle avec Au. Ces résultats indiquent que le titane est plus performant que l'or en tant que couche réfléchissante, offrant également un avantage économique, car il est moins coûteux.

Tableau IV.2. Or et autres métaux dans la couche réfléchissante de cellule solaire et son efficacité

Metals	Efficacité (%)	J _{CC} (mA/cm ²)
Au	21.43	-32.58
Al	22.49	-34.19
Cr	24.20	-36.79
Ag	21.37	-32.49
Be	24.23	-36.84
Ni	23.90	-36.33
Pd	23.56	-35.82
Pt	23.87	-36.28
Ti	24.10	-36.63
W	24.19	-36.78

Le tableau IV.2 présente une comparaison de l'efficacité, de l'efficacité quantique et de l'absorption totale de la lumière d'une cellule solaire à base de pérovskite, en remplaçant la couche réfléchissante d'or (Au) par d'autres métaux, notamment Al, Cr, Ag, Be, Ni, Pd, Pt, Ti et W. Cette comparaison permet d'analyser l'impact du changement de métal dans la couche réfléchissante.

Lorsque l'on compare la cellule avec une couche réfléchissante en Au à celles avec d'autres métaux, on observe que les cellules contenant Al, Cr, Be, Ni, Pd, Pt, Ti ou W dans leur couche réfléchissante montrent des rendements et des valeurs de J_{CC} plus élevés que la cellule avec Au. De plus, ces métaux sont plus économiques que l'or, sauf pour l'argent (Ag), où l'efficacité et le J_{CC} diminuent légèrement par rapport à Au. Cependant, la différence est faible et le coût inférieur de l'Ag en fait une option intéressante par rapport à l'or. Cette étude montre donc que la couche réfléchissante en Au d'une cellule solaire à base de pérovskite peut être avantageusement remplacée par une couche de même épaisseur en Al, Cr, Ag, Be, Ni, Pd, Pt, Ti ou W. L'efficacité de la cellule passe ainsi de 21.43 % avec Au à 24.23 % avec Be et à 24.10 % avec Ti, tandis que l'efficacité quantique augmente de -32.58 pour Au à -36.84 pour Be et à -36.63 pour Ti. Les autres cellules, avec l'un des métaux mentionnés dans leur couche réfléchissante, montrent des performances similaires, avec des coûts de production réduits par rapport à Au. Bien que l'efficacité et l'efficacité quantique soient légèrement plus faibles avec

Ag, la baisse reste minimale, et le coût inférieur de l'Ag en fait une alternative économiquement avantageuse.

IV.2.3. Structure proposée

La structure de la cellule solaire proposée (Figure IV.15) se compose de matériaux pérovskites à base d'halogénures organiques-inorganiques ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$) avec une couche de soutien d'environ 700 nm. Elle inclut également une couche de transport de trous (HTL) en P3HT (poly(3-hexylthiophène)) et une couche de transport d'électrons (ETL) efficace en ZnS (sulfure de zinc). Les épaisseurs des couches HTL et ETL sont fixées à environ 20 nm, tandis que la couche de ZnS possède un réseau d'environ 510 nm. Le ZnS peut également jouer le rôle de couche tampon entre l'ETL et le cristal photonico. L'oxyde conducteur utilisé dans cette structure est l'oxyde d'étain dopé au fluor (FTO), qui fait partie intégrante de la conception du réflecteur. Le piégeage des photons est réalisé grâce à des réseaux de diffraction, qui dirigent la lumière incidente vers des zones spécifiques de la cellule solaire avec un ordre de diffraction particulier.

Dans les simulations, les paramètres associés au réseau sont définis comme suit : la période de la structure arrière est $\Lambda = 0.72 \lambda_g$ et la profondeur du réseau est $t = 0.18 \lambda_g$, où λ_g correspond à la longueur d'onde de la bande interdite du silicium, estimée à $1.107 \mu\text{m}$.

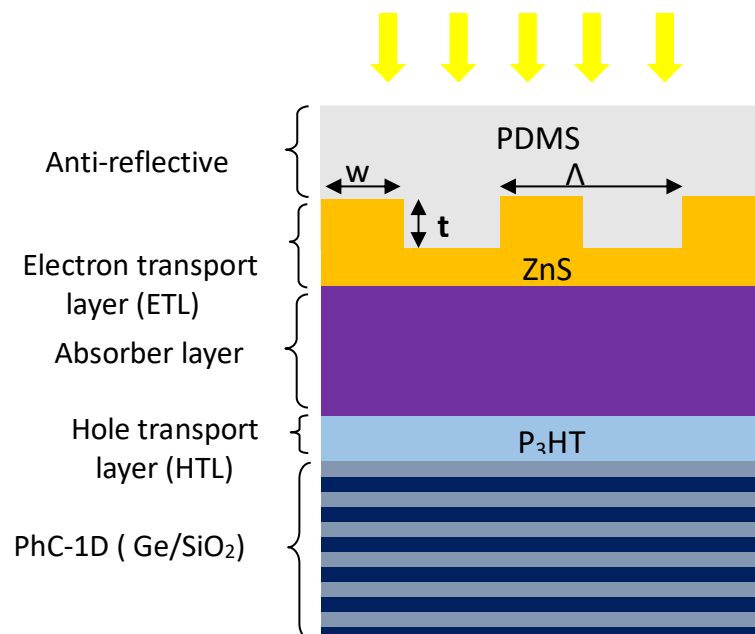


Figure IV.15. Structure proposée d'une cellule solaire à base de pérovskite avec PhC-1D(Ge/SiO₂).

Le cristal photonique 1D, intégré dans le réflecteur arrière, peut doubler le chemin optique, agissant ainsi comme un élément clé dans la structure de piégeage de la lumière grâce à la réutilisation des photons réfléchis. L'épaisseur de ce cristal photonique 1D est fixée à un quart de l'épaisseur totale de la cellule. En pratique, il s'agit d'un empilement de 7 paires de Ge/SiO₂, avec un rapport d'indices de réfraction de $n_h/n_l = 3.5/1.46$. Ce rapport est déterminé par la longueur d'onde centrale, λ_d . L'effet de la longueur d'onde centrale est montré une influence sur le cristal photonique 1D. Il a été constaté que le choix de la longueur d'onde centrale est plus crucial pour les cellules plus fines que pour les plus épaisses. En effet, pour les cellules solaires plus épaisses, un plus grand nombre de photons incidents peut être absorbé, ce qui diminue finalement la rétention des photons. Par ailleurs, il a été noté que la sélection de la longueur d'onde centrale est moins essentielle pour une cellule solaire plus épaisse, comme l'indique la figure IV.16. Les observations montrent que la longueur d'onde centrale λ_d de 0.60 μm peut offrir des performances optimales pour les cellules solaires dont l'épaisseur totale varie de 5 μm à 20 μm .

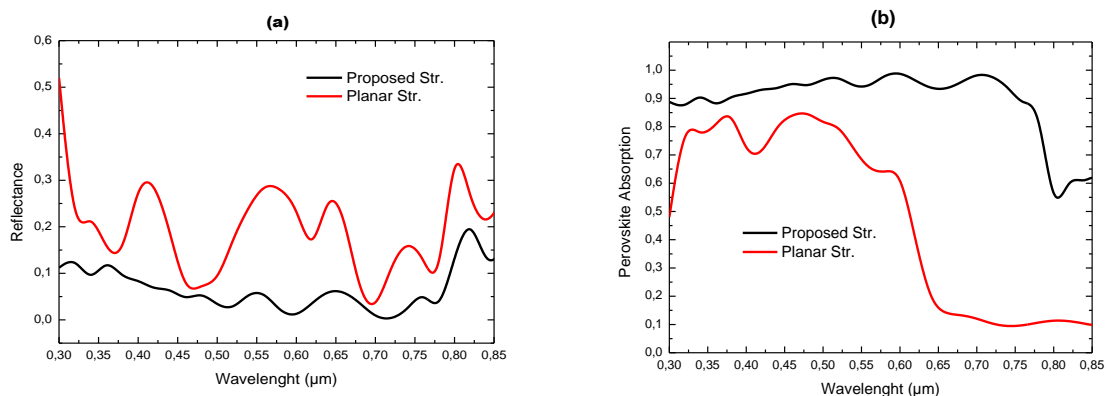


Figure IV.16. (a) réflectance normalisée et (b) spectres d'absorption, pour les structures planaires et proposées.

L'analyse du comportement de la cellule solaire proposée et le calcul de son efficacité de conversion de puissance (ECP) ont été réalisés à l'aide de DiffractMOD et de Solar Cell Utility de RSoft, sur la base des calculs par méthode de décomposition en ondes résonantes (RCWA).

Lorsque les photons sont piégés à l'intérieur de la structure proposée, la réflexion de la lumière incidente diminue considérablement, comme l'illustre la figure IV.16.a. Ce piégeage des photons conduit à une amélioration notable du profil du champ électrique au sein de la cellule solaire, comme le montre la figure IV.16.b. Il a été observé que jusqu'à 90 % des photons incidents peuvent être retenus dans une cellule dont l'épaisseur varie de 300 nm à 800 nm, en

raison d'une réduction significative des pertes optiques parasites et de la réflexion. Cette amélioration se traduit par une augmentation évidente du spectre intégré de la structure proposée.

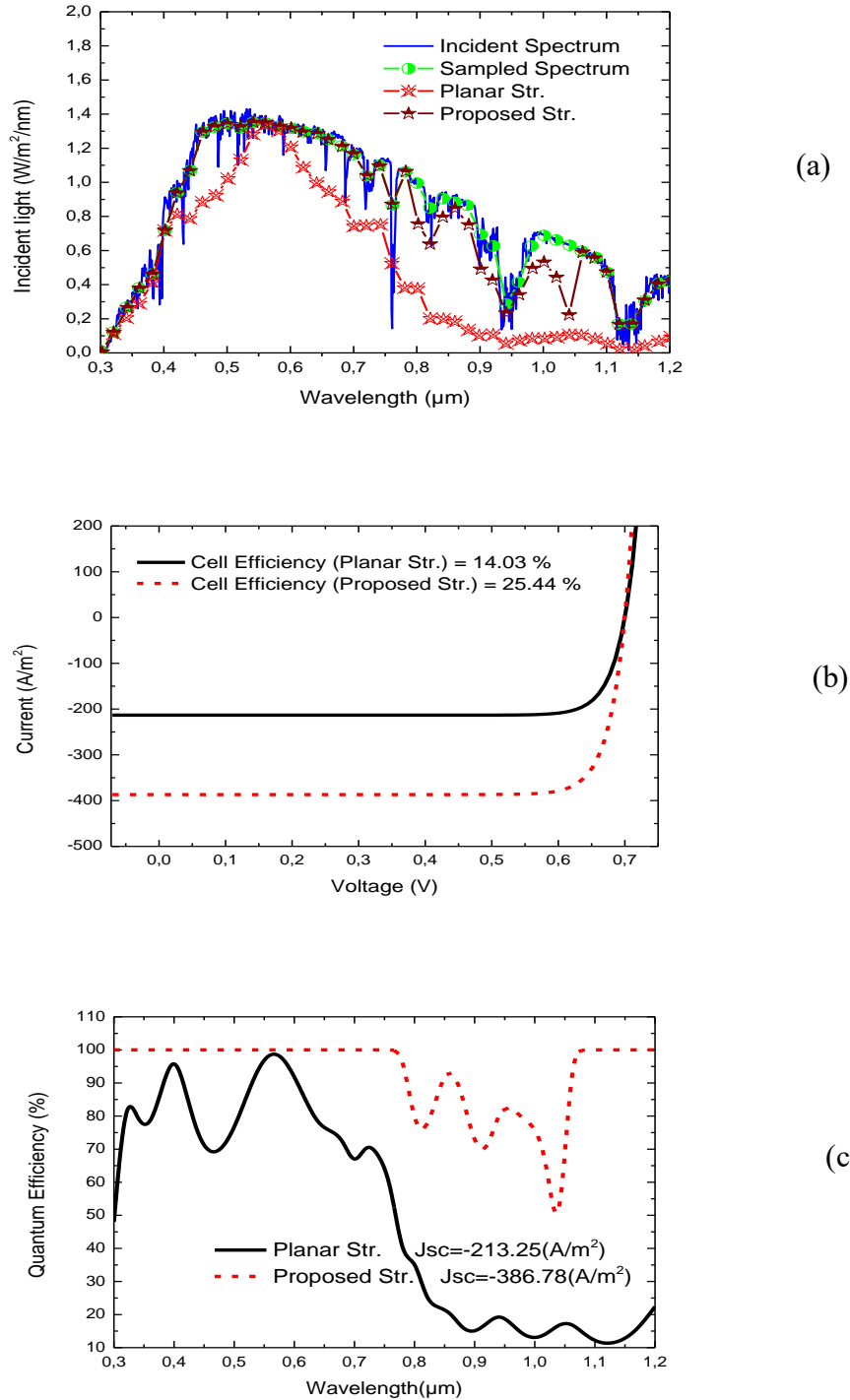


Figure IV.17. (a) Spectre d'absorption, (b) courbe J-V de la cellule solaire et (c) efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde.

Tableau IV.3. Comparaison du rendement de conversion de puissance et du courant de court-circuit de la cellule solaire pérovskite à couche mince proposée avec et sans grille.

Structure du dispositif	PCE (%)	J _{CC} (mA/cm ²)
Structure planaire.	14.0268	21.3248
Structure proposée.	25.4411	38.6778

La simulation a été réalisée pour une cellule solaire à pérovskite à couche mince, avec et sans réseau (figure IV.15). Les résultats des simulations montrent que les performances des cellules sont comparées dans la gamme de longueurs d'onde d'environ 300 nm à 1200 nm. Les calculs de l'efficacité de conversion et de la densité de courant de court-circuit pour les structures planaires et proposées révèlent que l'ajout de réseaux améliore les paramètres spécifiques de la cellule en augmentant l'absorption de la lumière grâce au piégeage des photons au fond de la cellule (tableau IV.3 et figure IV.17).

Dans une étude antérieure, nous avons observé que l'intégration de cristaux photoniques au fond de la cellule augmentait significativement la rétention des photons incidents dans la cellule solaire.

Un des principaux atouts de l'emploi d'un cristal photonique diélectrique 1D, par rapport à un réflecteur métallique ou à une interface semi-conductrice métallique, est qu'il permet de réduire au minimum les pertes dues à la diffraction ainsi que la réverbération des plasmons de surface [67,68].

Ce segment présente une stratégie d'optimisation de la structure. Dans le contexte des cellules solaires, il est essentiel qu'une cellule affiche une haute efficacité de conversion et un fort courant de court-circuit. Les résultats observés indiquent que l'efficacité de conversion photovoltaïque (PCE) augmente avec l'épaisseur de la couche considérée. Pour explorer cette question, une structure avec une épaisseur de $\frac{d_{SiO_2}}{d_{Ge_j}} = 0.2 \mu m$ a été choisie. Le nombre de couches discontinues au sein des cristaux photoniques a été maintenu à sept. Dans la méthode proposée, seule l'épaisseur des couches des cristaux photoniques 1D est ajustée. L'épaisseur de chaque couche dans le cristal photonique est modifiée de manière linéaire en fonction d'une valeur constante. La figure IV.18 illustre un cristal photonique 1D dont l'épaisseur des couches varie linéairement, avec une augmentation de l'épaisseur de chaque couche dans le cristal comme suit,

$$\frac{d_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{Ge } j}} = \frac{d_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{Ge } 1}} + (j - 1) \cdot \Delta B \text{ avec } j = 1, 2, \dots, n \quad (\text{IV. 1})$$

Où $\frac{d_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{Ge } 1}} = 0.1 \mu\text{m}$; est l'épaisseur de la première couche d'air ; $(\Delta B) = 0.03 \mu\text{m}$ est la quantité ajoutée à l'épaisseur de la couche d'air à chaque étape ; et $n = 7$ est le nombre de couches périodiques dans le cristal photonique.

L'épaisseur de la couche de paires dans le cristal photonique est diminuée comme suit ;

$$\frac{d_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{Ge } j}} = \frac{d_{\text{SiO}_2}}{d_{\text{Ge } 1}} + (n - j) \cdot \Delta B \text{ avec } j = 1, 2, \dots \quad (\text{IV. 2})$$

Les valeurs des paramètres variables demeurent identiques à celles mentionnées précédemment. Par conséquent, l'épaisseur de la couche de paires dans le cristal photonique augmente de manière linéaire de 50 nm à 220 nm, puis diminue également de 220 nm à 50 nm, dans le but d'atteindre une efficacité de conversion photovoltaïque (PCE) plus élevée pour la cellule.

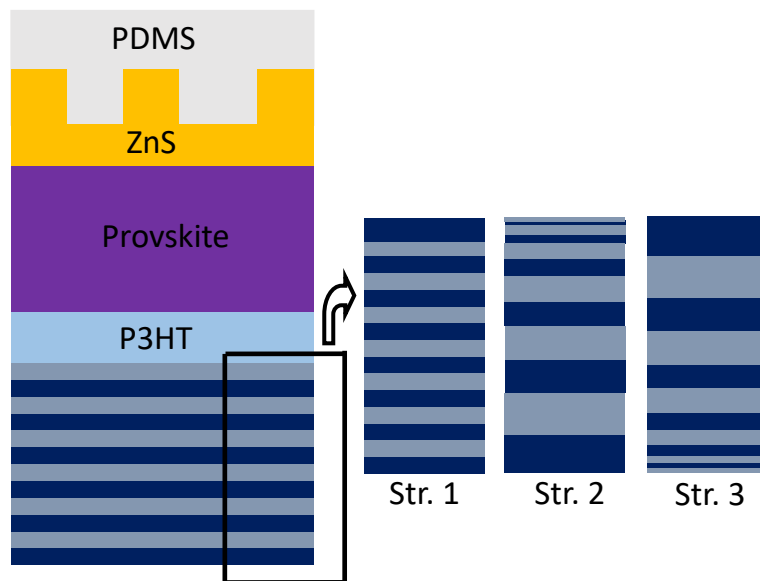
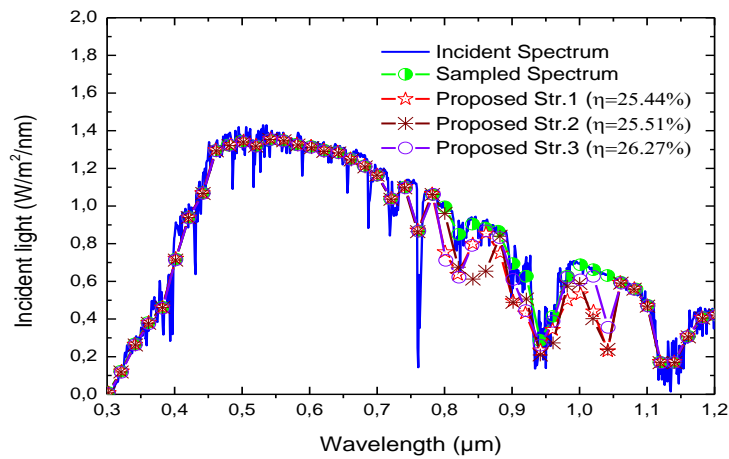
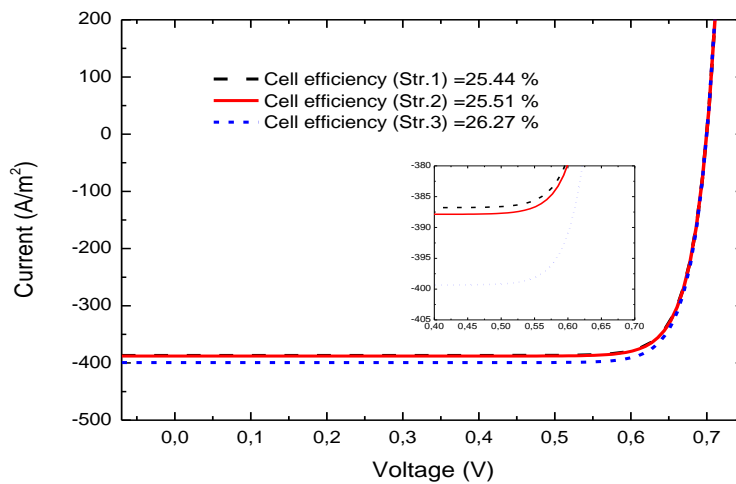


Figure IV.18. Cellule solaire à base de pérovskite avec un cristal photonique 1D (PhC-1D) en Ge/SiO_2 et différentes configurations de couches PhC-1D : (Str.1) l'épaisseur de la couche PhC-1D est uniforme, (Str. 2) l'épaisseur de la couche PhC-1D varie de la plus petite à la plus grande, (Str. 3) l'épaisseur de la couche PhC-1D décroît de la plus grande à la plus petit.

Dans ce cas, après l'utilisation d'une couche aussi épaisse, la figure IV.18 illustre que trois hypothèses distinctes permettent de modéliser approximativement la cellule. Telle que la structure du cristal photonique est uniforme (Str 1), l'épaisseur de la couche PhC-1D varie de la plus petite à la plus grande (Str 2), et l'épaisseur de la couche PhC-1D décroît de la plus grande à la plus petit (Str3). Pour chacune de ces hypothèses, la structure de base du cristal photonique a été optimisée afin d'étudier l'impact de ces trois configurations sur les performances de la cellule.



(a)



(b)

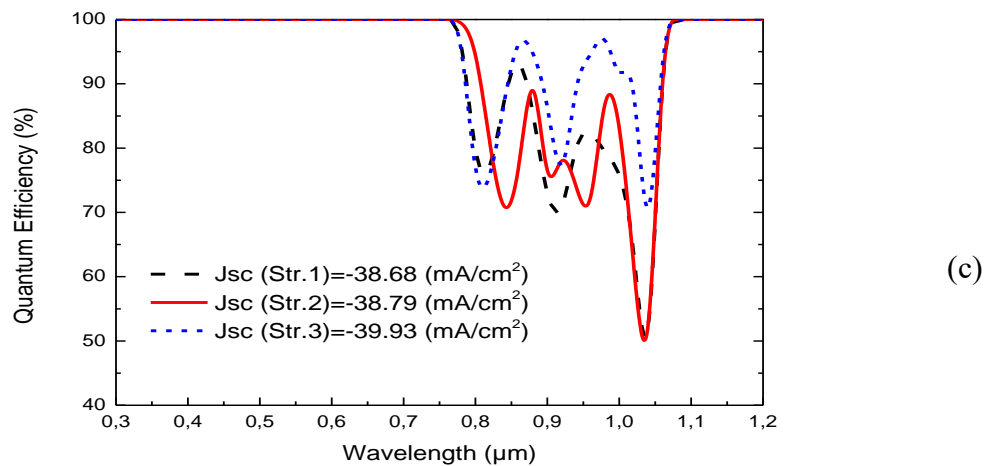


Figure IV.19. (a) spectre d'absorption, (b) courbe J-V de la cellule solaire, (c) efficacité quantique en fonction de la longueur d'onde, pour les trois structures.

La figure IV.19 présente les spectres d'absorption des rayonnements solaires incidents, ainsi que les courbes J-V et les efficacités quantiques en fonction de la longueur d'onde. Les spectres d'absorption montrent peu de variations dans la plage de 750 nm à 1000 nm (Figure IV.19.a). Les photons à haute énergie sont absorbés par la partie supérieure du cristal photonique, sans interactions significatives avec les couches inférieures de la pérovskite.

La figure IV.19.b illustre les caractéristiques du profil de courant en fonction de la tension pour les trois structures proposées. Comme anticipé, la réduction de la réflexion et des pertes parasites, ainsi que l'augmentation de l'absorption lumineuse dans la couche de pérovskite grâce au piégeage, ont conduit à une amélioration de la densité de courant de court-circuit (J_{CC}) pour la structure proposée par rapport à celle d'une cellule à pérovskite plane.

Tableau IV.4. Comparaison entre le PCE et le J_{CC} pour les différentes structures proposées.

Structure du dispositif	PCE (%)	J_{CC} (mA/cm ²)
Str. 1	25.4411	-38.6778
Str. 2	25.5126	-38.7865
Str. 3	26.2676	-39.9343

Selon le tableau IV.4, la densité de courant J_{CC} pour la structure 3 atteint -39.93 mA/cm^2 , ce qui représente une augmentation de 2.96 % par rapport à la structure 2 et de 3.23 % par rapport à la structure 1. Le potentiel à vide (V_{CO}) a également été amélioré, atteignant désormais 0.78 volt. De plus, l'efficacité de conversion a augmenté de 3.26 %, passant de 25.44 % pour la structure 1 à 26.27 % pour la structure 3.

Tableau IV.5. Comparaison de l'efficacité de conversion de puissance pour différentes structures de cellules solaires basées sur des matériaux pérovskites.

Références	Réflecteur arrière	PCE (%)
[72] (2020)	Semi-transparent	14.96
[69] (2016)	Nanoparticules d'Argent	16.04
[70] (2018)	Nanoparticules d'Or	15.94
[71] (2020)	Couche métallique d'Or	24.93
[73] (2018)	Cristal photonique 1D	25.44
Travail de présent	Structure proposée	26.27

Le tableau IV.5 fournit des informations sur l'efficacité de conversion de l'énergie pour différentes cellules solaires à base de pérovskite.

Les structures [69-73]. Nous pouvons conclure que les structures de cellules solaires proposées présentent de bonnes performances par rapport à d'autres dispositifs.

IV.5. Conclusion

Ce travail se concentre sur l'optimisation des performances des cellules solaires à pérovskite en exploitant des nanostructures avancées, dans le but d'améliorer leur efficacité de conversion.

Dans une première phase, une cellule solaire classique à couches planes a été étudiée, intégrant un cristal photonique unidimensionnel (1D-PhC) à sa base. Cette configuration visait à améliorer la gestion des photons grâce à leur rotation dans le matériau, augmentant ainsi les interactions lumière-matière.

Cependant, les résultats ont révélé que l'ajout d'un réseau nanostructuré offrait une amélioration significative de l'absorption lumineuse en introduisant un piégeage efficace des photons. Par la suite, l'étude a comparé l'absorption lumineuse de trois configurations

différentes : la cellule planaire, la cellule avec un cristal photonique 1D, et la cellule intégrant un réseau nanostructuré optimisé.

Les résultats expérimentaux ont montré que la densité de courant de court-circuit (J_{CC}) pour la cellule nanostructurée atteignait 39.93 mA/cm^2 , marquant une augmentation impressionnante de 87.29% par rapport à la cellule planaire, dont la densité de courant était de 21.32 mA/cm^2 . De plus, cette avancée a directement impacté l'efficacité de conversion de puissance (PCE), qui est passée de 14.03% pour la cellule planaire à 26.27% pour la cellule nanostructurée, soit une amélioration remarquable de 87.24% .

Ces résultats soulignent le potentiel des nanostructures dans les cellules solaires à pérovskite, démontrant que l'intégration de cristaux photoniques et de réseaux nanostructurés peut non seulement améliorer l'absorption lumineuse mais aussi maximiser l'extraction des porteurs photogénérés, conduisant ainsi à des performances globales nettement supérieures. Ce travail constitue une étape importante dans le développement de cellules solaires à pérovskite à haut rendement pour des applications photovoltaïques avancées.

Conclusion générale

Au début de ce travail, nous avons offert une vue d'ensemble des cellules solaires, en commençant par une introduction générale au domaine du photovoltaïque, accompagnée d'un historique retraçant son développement. Nous avons défini les cellules solaires, expliqué leur principe de fonctionnement et analysé les principaux paramètres de performance, notamment la tension à circuit ouvert, le courant de court-circuit, le facteur de forme et le rendement.

Nous avons également présenté les différents types de cellules solaires, telles que celles en silicium cristallin, à couches minces et organiques, en décrivant leurs avantages, leurs limitations et leurs domaines d'application. Par ailleurs, nous avons abordé des notions essentielles, comme les concepts de module, de string et l'effet photovoltaïque, avant de discuter des systèmes de stockage et des types d'accumulateurs. Enfin, nous avons terminé cette exploration générale par une analyse critique des avantages et inconvénients de l'énergie photovoltaïque, soulignant son rôle central dans la transition énergétique.

Ensuite, nous avons revisité les concepts fondamentaux de la photonique appliquée au photovoltaïque, en mettant en avant l'importance des cristaux photoniques pour optimiser l'efficacité des dispositifs solaires. Nous avons débuté par une introduction aux cristaux photoniques et à leurs propriétés optiques, en expliquant leur capacité à manipuler la lumière grâce au piégeage et au contrôle des photons.

Nous avons décrit les principales structures employées, telles que la diffraction par réseau et le couplage avec les modes propres d'un cristal photonique, tout en illustrant ces concepts avec des exemples naturels, comme les opales, les ailes de papillons et les plumes d'oiseaux. Par ailleurs, nous avons exploré en détail les caractéristiques spécifiques des cristaux photoniques, incluant leur dimensionnalité, leur symétrie, leur paramètre de réseau, leur indice de réfraction effectif et le contraste d'indice.

Les types de cristaux photoniques (1D, 2D et 3D) ont été examinés, ainsi que les défauts structuraux pouvant influencer sur leurs performances.

Nous avons ensuite concentré notre étude sur les cellules solaires à base de pérovskite, en explorant différentes configurations géométriques, allant des structures non structurées aux structures unidimensionnelles (1D), dans le but d'identifier les meilleures combinaisons pour optimiser l'absorption lumineuse.

À cette fin, nous avons utilisé la méthode des différences finies dans le domaine temporel (RCWA) pour simuler le comportement optique des structures et optimiser leurs paramètres géométriques. Les simulations, réalisées à l'aide du logiciel RSoft, ont permis de prédire théoriquement l'absorption lumineuse en fonction des modifications apportées à la géométrie des structures. Les résultats ont démontré que l'utilisation de PDMS à la place du verre dans la structure étudiée réduit significativement les pertes de réflexion globales, améliorant ainsi l'absorption.

Des simulations optiques et électriques couplées ont également été effectuées pour analyser les propriétés des cellules solaires à pérovskite. Ces travaux ont permis de développer des cellules nanostructurées à haute performance, en identifiant des matériaux optimaux pour les couches de transport d'électrons (ETM) et de trous (HTM). Par ailleurs, nous avons démontré que la couche réfléchissante en or (Au) pouvait être remplacée par des métaux alternatifs tout en maintenant la même épaisseur, ce qui a permis de réduire les coûts sans compromettre l'efficacité.

Dans la première configuration étudiée, nous avons ajouté un cristal photonique unidimensionnel (1D PhC) à la base d'une cellule solaire à couches planes pour faciliter la rotation des photons et maximiser les interactions lumière-matière. Par la suite, nous avons introduit un réseau nanostructuré qui a permis d'améliorer davantage l'absorption lumineuse grâce au piégeage des photons.

Une comparaison de l'absorption lumineuse entre trois structures différentes a révélé une augmentation significative de la densité de courant de court-circuit passant de 21.32 mA/cm² dans la structure planaire à 39.93 mA/cm² dans la structure optimisée, soit une amélioration de 87.29 %. De manière similaire, l'efficacité de conversion de puissance (PCE) a été portée de 14.03 % pour la structure planaire à 26.27 % pour la structure nanostructurée, représentant une augmentation impressionnante de 87.24 %.

En fin, ce travail a démontré l'impact significatif de l'intégration des nanostructures et des cristaux photoniques dans l'amélioration des performances des cellules solaires à pérovskite. Ces avancées ouvrent la voie au développement de dispositifs photovoltaïques innovants et à haut rendement, offrant des solutions prometteuses pour améliorer la conversion énergétique tout en maintenant une rentabilité économique.

De plus, cette étude met en évidence le rôle crucial des approches théoriques et des simulations numériques dans l'optimisation des architectures des dispositifs et la résolution de défis tels que la stabilité et la faisabilité de la production à grande échelle. Ces résultats soulignent le potentiel de la combinaison des matériaux avancés et des méthodes computationnelles pour propulser la prochaine génération de technologies photovoltaïques.

Liste des références bibliographiques

- [1] S. Xiong, M. Zhu, Basic Knowledge and Application of Solar Cell, 1^{ère} éd., Beijing: Science Press 2009, 4–42.
- [2] <https://www.nrel.gov> (dernier accès, le 10.06.2024)
- [3] R. F. Service, Perovskite solar cells keep on surging, *Science* 344 (6183) 2014, 458.
- [4] M. D. McGehee, Materials science: Fast-track solar cells, *Nature* 501, 2013, 323–325.
- [5] F. Wang, T. Wang, Y. Sun, X. Liang, G. Yang, Q. Li, Y. Li, X. Zhou, Q. Zhu, A. Ng, H. Lin, M. Yuan, Two-Step Perovskite Solar Cells with > 25% Efficiency: Unveiling the Hidden Bottom Surface of Perovskite Layer, *Advanced Materials* 36(31) 2024, 2401476.
- [6] W. Nie, H. Tsai, R. Asadpour, J.C. Blancon, A. J. Neukirch, G. Gupta, J. J. Crochet, M. Chhowalla, S. Tretiak, M. A. Alam, H. L. Wang, A. D. Mohite, High-efficiency solution-processed perovskite solar cells with millimeter-scale grains, *Science* 347(6221) 2015, 522–525.
- [7] S. Rühle, Tabulated values of the Shockley-Queisser limit for single junction solar cells, *Solar Energy* 130, 2016, 139–147.
- [8] H. Zhou, Q. Chen, G. Li , S. Luo , T.B. Song , H. S. Duan , Z. Hong , J. You , Y. Liu , Y. Yang, Photovoltaics. Interface engineering of highly efficient perovskite solar cells, 345(6196) 2014, 542–546.
- [9] M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop, Solar cell efficiency tables (version 45), *Progress In Photovoltaics: Research And Applications*, 23, 1–9, 2015.
- [10] O. Malinkiewicz, Y. Aswani, L.Y. Hui, E. G. Mínguez, G. Michael, N. K. Mohammad, B. J. Henk, Perovskite solar cells employing organic charge-transport layers, *Nature* 8(2) 2014, 128–132.
- [11] Docampo, P., J. M. Ball, M. Darwich, G. E. Eperon, H. J. Snaith, Efficient organometal trihalide perovskite planar-heterojunction solar cells on flexible polymer substrates, *Nature Communications* 4, 2013, 2761.

- [12] S. Belaid Lalouni, Cours énergie solaire photovoltaïque, Université de Bejaia, 2014, Récupéré de : <https://elearning.univ-bejaia.dz> (dernier accès, le 16.05.2024)
- [13] M. Mimoune, Etude des capteurs PV basés sur les nanotechnologies, Thèse de Doctorat, Université du Québec, 2016.
- [14] Connaissance des Énergies, Solaire photovoltaïque, Fiche pédagogique, 2024, Récupéré de: <https://www.connaissancedesenergies.org> (dernier accès, le 10.06.2024)
- [15] A. Bensmain, Investigation de l'ingénierie de bandes des cellules solaires à hétérojonction a-Si:H/cSi Modélisation et simulation numérique, Thèse de Doctorat, Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbes, 2018.
- [16] Planète Energies, Cellule photovoltaïque : comment ça marche, 2024, Récupéré de <https://www.planete-energies.com/fr/media/article/cellule-photovoltaique-comment-ca-marche> (dernier accès, le 12.06.2024)
- [17] S. Fadhel, Efficacité énergétique et Surveillance d'un microgrid à courant continu alimenté par des panneaux photovoltaïques, Thèse de Doctorat, Université Paris-Saclay, 2020.
- [18] K. Ayache, Modélisation et Simulation d'un Générateur Photovoltaïque Couplé à un Réseau Électrique, Mémoire de Magister, Université Mohamed Chérif Messaâdia de Souk-Ahras, 2014.
- [19] N. Achaibou, A. Malek, N. Bacha, Modèle de Vieillissement des Batteries Plomb-Acide dans les Systèmes PV, Revue des Energies Renouvelables Chemss, 2000, 61–66.
- [20] M. Belhadj, Modélisation d'un système de captage photovoltaïque autonome, Mémoire de Magister, Centre Universitaire de Bechar, 2008.
- [21] M. Leeflink, Optimiser la vie des batteries plomb, Documents Victron Energy, (Sans date) récupéré de: <https://www.victronenergy.fr> (dernier accès, le 18.06.2024)
- [22] The Astrologypage, Qu'est-ce qu'une batterie nickel-cadmium?, 2024, récupéré de : <https://fr.theastrologypage.com> (dernier accès, le 18.06.2024)

- [23] K. Helali, Modélisation d'une cellule photovoltaïque - étude comparative", Mémoire de Magister, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2012.
- [24] E. Yablonovitch, Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics, *Physical Review Letters* 58(20), 1987, 20592062.
- [25] E. Yablonovitch, T.J. Gmitter, and K.M. Leung, Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms, *Physical Review Letters* 67(17) 1991, 2295–2298.
- [26] M. Bouchemat, Cours des cristaux photonique (M1-Microélectronique), Université Frères Mentouri de Constantine, 2020.
- [27] H. Rigneault, J. M. Lourtioz, C. Delalande, A. Levenson, *Nanophotonics*, GET et Lavoisier, Paris, 2005.
- [28] Y. Benachour, Optimisation de cristaux photoniques pour l'optique non linéaire, Thèse de Doctorat, Université de Paris Sud 11, 2008.
- [29] Opals And Photonic Crystals, Cours, The University of Vermont, récupéré de: <https://www.uvm.edu> (Dernier accès : le 21.06.2024)
- [30] A. Dahmani, Optimisation des filtres selectifs à base des cristaux photoniques unidimensionnelles par une approche hybride, Mémoire de master, Université de Tlemcen, 2017.
- [31] F. Benaïssa, Etude et simulation de la propagation des ondes electromagnetiques dans les guides a cristaux photoniques-application aux fibres optiques, Mémoire de Magister, Université Abou-Bakr Belkaïd de Tlemcen, 2013.
- [32] <https://ricochets.info/2016/11/14/la-vie-est-bleue-comme> (Dernier accès : le 22.06.2024)
- [33] P. Massé, Cristaux photoniques colloïdaux d'architecture contrôlée, Thèse de Doctorat, L'université Bordeaux I, 2008.
- [34] H. Charik, Étude théorique des matériaux à cristaux photoniques unidimensionnels : applications dans le domaine de détection, Thèse de Doctorat, Université Mohamed Boudiaf de M'sila, 2022.

- [35] F. Gauffillet, Cristaux photoniques à gradient dispositifs et applications, Thèse de Doctorat, Université Paris Sud 11, 2014.
- [36] Z. Oulmane, A. Belhouel, Réalisation d'une interface graphique pour le calcul des bandes interdites dans les cristaux photoniques 2D, Mémoire de Master, Université Mohamed Seddik Benyahia de Jijel, 2019.
- [37] J. Dahdah, Etude théorique et expérimentale de cavités photoniques en Niobate de Lithium-Application à la détection de gaz, Optique/photonique, Thèse de Doctorat, Université de Franche-Comté, 2010.
- [38] A. Amirouche, Contribution à l'étude des microcavités à base des cristaux photoniques, Thèse de Doctorat, Université Mohamed Seddik Ben Yahya de Jijel, 2017.
- [39] L. Dehbi, Étude des cristaux photoniques 3D sur guides ridges de faible largeur en niobate de lithium, Mémoire de Master, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, 2015.
- [40] S. Massy, Contribution à la réalisation de fonctions optiques à base de cristaux photoniques sur LiNbO₃, Thèse de Doctorat, Université de Limoges, 2004.
- [41] F. Larioui, Etude et application des cristaux photoniques démultiplexeur, Thèse de Doctorat, Université Frères Mentouri de Constantine 1, 2022.
- [42] G. Gomard, Cristaux photoniques pour le contrôle de l'absorption dans les cellules solaires photovoltaïques silicium ultraminesces, Thèse de Doctorat, École Centrale de Lyon, 2012.
- [43] M. D. Kelzenberg, S. W. Boettcher, J. A. Petykiewicz, D. B. Turner-Evans, M. C. Putnam, E. L. Warren, J. M. Spurgeon, Enhanced absorption and carrier collection in Si wire arrays for photovoltaic applications, *Nature Materials* 9, 2010, 368–368.
- [44] O. L. Muskens, J. G. Rivas, R. E. Algra, E.P.A.M. Bakkers, A. Lagendijk, Design of Light Scattering in Nanowire Materials for Photovoltaic Applications. *Nano letters* 8(9) 2008, 2638–42.
- [45] J. Zhu, Z. Yu, G. F. Burkhard, Optical absorption enhancement in amorphous silicon nanowire and nanocone arrays. *Nano letters* 9(1) 2009, 279–82

- [46] Y. M. Song, J. S., Yu, Y. T. Lee, Antireflective submicrometer gratings on thin-film silicon solar cells for light-absorption enhancement, *Optics Letters* 35, 2010, 276–278.
- [47] K. Forberich, G. Dennler, C. Scharber, C. J. Brabec, Performance improvement of organic solar cells with moth eye anti-reflection coating, *Thin Solid Films* 516, 2008, 7167–7170.
- [48] P. Sheng, Wavelength-selective absorption enhancement in thin-film solar cells, *Applied Physics Letters* 43, 1983, 579.
- [49] T. K. Chong, J. Wilson, S. Mokkaapati, K. R. Catchpole, Optimal wavelength scale diffraction gratings for light trapping in solar cells, *Journal of Optics* 14, 2012, 024012.
- [50] P. Lodahl, A. F. V. Driel, I. S. Nikolaev, A. Irman, K. Overgaag, D. Vanmaekelbergh, W. L. Vos, Controlling the dynamics of spontaneous emission from quantum dots by photonic crystals, *Nature* 430, 2004, 654–7.
- [51] <https://www.synopsys.com/photonic-solutions/rsoft-photonic-device-tools/cad-environment.html> (Dernier accès : le 25.06.2024)
- [52] RSoft-CAD 5.1.9, User guide, RSoft Design Group, 200 Executive Blvd. Ossining, NY 10562.
- [53] S. M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices*, 2ième éd., chapitre 14, Wiley, Hoboken, 1981.
- [54] Reference Solar Spectral Irradiance : Air Mass 1.5. Oct. 2007, National Renewable Energy Laboratory (NREL), récupéré de : <http://redc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5> (Dernier accès : le 25.06.2024)
- [55] S. Basu Mallick, N. P. Sergeant, M. Agrawal, J.-Y. Lee, P. Peumans, Coherent light trapping in thin-film photovoltaics, *Materials Research Society Bulletin* 36, 2011, 453–460.
- [56] M. L. Brongersma, Y. Cui, S. Fan, Light management for photovoltaics using high-index nanostructures, *Nature Materials* 13(5) 2014, 451–460.

- [57] A. Kojima, K. Teshima, Y. Shirai, T. Miyasaka, Organometal Halide perovskites as visible-light sensitizers for photovoltaic cells, *Journal of the American Chemical Society*, 131(17) 2009, 6050–6051.
- [58] D. B. Mitzi, C. A. Feild, W. T. A. Harrison, A. M. Guloy, Conducting tin halides with a layered organic-based perovskite structure, *Nature*, 369, 1994, 467–469.
- [59] J. H. Im, C. R. Lee, J. W. Lee, S. W. Park, N. G. Park, 6.5% efficient perovskite quantum-dot-sensitized solar cell, *Nanoscale* 3, 2011, 4088–4093.
- [60] F. Priolo, T. Gregorkiewicz, M. Galli, T. F. Krauss, Silicon nanostructures for photonics and photovoltaics, *Nature Nanotechnology* 9(1) 2014, 19–32.
- [61] X. Meng, V. Depauw, G. Gomard, O. E. Daif, E. Drouard, C. Jamois, A. Fave, F. Dross, I. Gordon, C. Seassal, Design, fabrication and optical characterization of photonic crystal assisted thin film monocrystalline-silicon solar cells, *Optics Express* 20(S4) 2012, A465–A475.
- [62] J. D. Joannopoulos, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*, Princeton University Press, 2ième éd., 2011.
- [63] A. V. Shah, H. Schade, M. Vanecek, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, J. Bailat, Thin-film silicon solar cell technology, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 12, 2004, 113–142.
- [64] Z. Yu, A. Raman, and S. Fan, Fundamental limit of nanophotonic light trapping in solar cells, *PNAS* 107(41) 2010, 17491–17496.
- [65] Z. Tang, W. Tress, O. Inganäs, Light trapping in thin film organic solar cells, *Materials Today* 17(8) 2014.
- [66] J. Nelson, *The Physics of Solar Cell*, Imperial College Press, United Kingdom, London, 2008.
- [67] P. Sathya, R. Natarajan, *International Journal of Energy Research*, Numerical simulation and performance measure of highly efficient GaP/InP/Si multi-junction solar cell, *International Journal of Energy Research* 41, 2017, 1211–1222.
- [68] M. V. Shuba, M. Faryad, M. E. Solano, P. B. Monk, A. Lakhtakia, Adequacy of the rigorous coupled-wave approach for thin-film silicon solar cells with periodically

- corrugated metallic backreflectors: spectral analysis, *Journal of the Optical Society of America A* 32(7) 2015, 1222–1230.
- [70] O. A. M. Abdelraouf, A. Shaker, N. K. Allam, Front dielectric and back plasmonic wire grating for efficient light trapping in perovskite solar cells, *Optical Materials* 86, 2018, 311–317
- [71] T. Bendib, H. Bencherif, M. A. Abdi, F. Meddour, L. Dehimi, M. Chahdi, Combined optical-electrical modeling of perovskite solar cell with an optimized design, *Optical Materials* 109, 2020, 110259.
- [72] A. Hajjiah, H. Badran, I. Kandas, N. Shehata, Perovskite solar cell with added gold/silver nanoparticles: enhanced optical and electrical characteristics, *Energies* 13(15) 2020, 3854.

Résumé – En résumé de notre travail, des simulations optoélectroniques couplées ont été réalisées pour étudier les propriétés optiques et électriques des cellules solaires à base de pérovskite PSC. Tout d'abord, l'effet des matériaux utilisés des couches HTL et ETL sur les caractéristiques optiques de la cellule a été étudié. Les pertes de lumière dans une architecture planaire ont été également étudiées, et une cellule solaire à base de nanostructures sur un substrat d'Or et on a changé avec d'autres métaux a été proposée pour atténuer ces pertes. Les observations ont révélé que l'utilisation de PDMS au lieu de verre dans la structure proposée diminue les pertes de réflexion globales et l'effet du grating pour piéger la lumière. En outre, le phénomène de piégeage de la lumière dans la couche active entraînerait une amélioration de l'absorption et de la diffusion SPR en champ lointain. L'absorption de la pérovskite dans les structures proposées lorsqu'on utilise un cristal photonique 1D (Ge/SiO₂) représentées par trois structures différentes avec variation des épaisseurs de ce cristal, et les PSC présentent une efficacité considérable. Les caractéristiques courant-tension ont révélé des améliorations de JCC et VCO. Le rendement de conversion de puissance du PSC est passé de 14,03 % à 26,27 %. Les données de simulation décrivent que le PCE été augmenté jusqu'à 90 % par rapport à la structure planaire est la preuve d'une augmentation significative de l'efficacité.

Abstract – In summary of our work, coupled optoelectronic simulations were performed to study the optical and electrical properties of PSC perovskite solar cells. First, the effect of the materials used in the HTL and ETL layers on the optical characteristics of the cell was investigated. Light losses in a planar architecture were also studied, and a solar cell based on nanostructures on a gold substrate and interchanged with other metals was proposed to mitigate these losses. Observations revealed that the use of PDMS instead of glass in the proposed structure decreases the overall reflection losses and the effect of grating to trap light. In addition, the light trapping phenomenon in the active layer would lead to enhanced far-field SPR absorption and scattering. The perovskite absorption in the proposed structures when using a 1D photonic crystal (Ge/SiO₂) represented by three different structures with varying thicknesses of this crystal, and the PSCs exhibited considerable efficiency. The current-voltage characteristics revealed improvements in JCC and VCO. The power conversion efficiency of the PSC increased from 14.03% to 26.27%. The simulation data described that the PCE was increased up to 90% compared to the planar structure is evidence of a significant increase in efficiency.

ملخص – في ملخص عملنا، تم إجراء عمليات محاكاة كهروضوئية مقترنة لدراسة الخصائص البصرية والكهربائية للخلايا الشمسية المعتمدة على البيروفسكايت PSC. أولاً، تمت دراسة تأثير المواد المستخدمة من طبقتي HTL و ETL على الخصائص البصرية للخلية. تمت أيضاً دراسة خسائر الضوء في البنية المستوية، وتم اقتراح خلية شمسية تعتمد على هياكل نانوية على ركيزة ذهبية ويتم تغييرها بمعادن أخرى للتخفيف من هذه الخسائر. كشفت الملاحظات أن استخدام PDMS بدلاً من الزجاج في الهيكل المقترح يقلل من خسائر الانعكاس الإجمالية وتأثير الشبكة في احتجاز الضوء. علاوة على ذلك، فإن ظاهرة محاصرة الضوء في الطبقة النشطة ستؤدي إلى تعزيز امتصاص وتشتت SPR في المجال البعيد. إن امتصاص البيروفسكايت في الهياكل المقترحة عند استخدام بلورة فوتونية أحادية الأبعاد (Ge/SiO₂) ممثلة بثلاثة هياكل مختلفة مع اختلاف في سماكة هذه البلورة، وتوفر الخلايا الجذعية الصلبة (PSCs) كفاءة كبيرة. كشفت خصائص الجهد الحالي عن تحسينات في JCC و VCO. زادت كفاءة تحويل الطاقة لـ PSC من 14.03% إلى 26.27%. تصف بيانات المحاكاة أن معدل الكفاءة قد زاد بنسبة تصل إلى 90% مقارنة بالهيكل المستوي وهو دليل على زيادة كبيرة في الكفاءة.