

Modélisation multiphysique de cellules photovoltaïques tandem en conditions réelles de fonctionnement – Approche optique

Marion Gonçalves⁽¹⁾, Emmanuel Drouard⁽²⁾, Wilfried Favre⁽³⁾, Mohamed Amara⁽¹⁾, Anthony Valla⁽³⁾

1) CNRS, INSA Lyon, École Centrale de Lyon, Université Claude Bernard Lyon 1, CPE Lyon, INL, UMR5270, 69621 Villeurbanne. France.

2) Ecole Centrale de Lyon, INSA Lyon, CNRS, Université Claude Bernard Lyon 1, CPE Lyon, INL, UMR5270, 69130 Ecully, France.

3) Univ Grenoble Alpes, CEA, LITEN, DTS, LPH, INES, 73370, Le-Bourget-du-Lac, France.

RESUME – Les cellules photovoltaïques tandem sont une technologie innovante. Les meilleurs rendements sont déjà supérieurs à la limite théorique des cellules à une seule jonction. Cependant, ces rendements sont calculés pour des conditions de test dites standard (STC). Afin d'évaluer la production d'énergie de ces cellules en conditions réelles de fonctionnement, nous avons développé un modèle multiphysique (optique, électrique et thermique) complet permettant de simuler l'électricité générée par cette technologie à un endroit donné sur un an. Dans un premier temps, il est nécessaire de valider l'outil de simulation optique. Les tests sont réalisés sur la sous-cellule du bas en c-Si, en comparant RayFlare, avec CROWM, un logiciel validé et avec un EQE expérimental. Les résultats sont prometteurs : les résultats de RayFlare sont en accord avec ceux de CROWM, et ont la même tendance que les résultats expérimentaux.

Mots-clés—Cellules photovoltaïques tandem, modélisation multiphysique, optique, photonique

1. INTRODUCTION

La technologie photovoltaïque (PV) connaît un grand essor ces dernières années, dans un contexte de décarbonation de la production d'énergie. Même si de nombreuses améliorations ont permis une absorption plus efficace de la lumière du soleil, les cellules solaires à une seule jonction (le cas de plus de 98% des modules PV) convertissent seulement une partie des photons absorbés en électricité. Le reste est perdu sous forme de chaleur (phénomène de thermalisation), et entraîne une augmentation de la température des cellules, ce qui impacte leur rendement et leur durée de vie.

D'après le modèle de Shockley-Queisser, le rendement théorique maximal pour une cellule à une seule jonction est d'environ 33% [1]. Les cellules en silicium cristallin (c-Si), qui dominent le marché, s'approchent de plus en plus de cette limite (plus de 27 % pour une cellule solaire hétérojonction à contacts arrière [2]). Pour dépasser cette limite d'efficacité, des cellules à deux jonctions dites « tandem » ont été conçues. La sous-cellule du dessus a une bande interdite supérieure à celle du dessous, ce qui entraîne une baisse des pertes par thermalisation et une meilleure conversion du spectre solaire. Une des architectures répandues consiste à recouvrir le c-Si, par des pérovskites hybrides halogénées (HaP)s, qui sont des matériaux semi-conducteurs prometteurs pour cette application.

A gap direct, donc utilisables en couche mince, ils peuvent être conçus de manière à choisir la valeur de bande interdite sur une plage de 1,3 à 2 eV [3]. Le choix optimal de l'énergie de bande interdite du matériau HaP dépend de l'architecture de la cellule tandem envisagée. Les architectures tandem les plus répandues sont celles dites « à deux terminaux », dans lesquelles les deux sous cellules sont connectées en série. Dans cette configuration, la stratégie consiste, en conditions de test standard (STC), à équilibrer les photocourants des deux sous cellules, grâce à un matériau HaP de grande bande interdite (WBG). Le rendement record sous STC pour une cellule tandem HaP/c-Si est actuellement de 34,9 % [4].

Les STC sont utiles pour établir des comparaisons simples entre cellules photovoltaïques. Les cellules sont éclairées avec, une irradiance de 1000 W/m² selon le spectre AM1.5 et délivrée en incidence normale. La cellule est également maintenue à une température de 25°C. Cependant, ces conditions ne sont pas représentatives des conditions d'éclairement (tant d'irradiance spectrale que d'angles d'incidence et azimutal), et de température au cours du temps, à l'échelle d'une année, en un lieu donné. Particulièrement, dans une cellule tandem à deux terminaux, si l'équilibre des courants n'est pas respecté, le courant total est limité par le plus faible délivré par l'une des deux sous-cellules. Au cours d'une journée, les conditions d'illumination peuvent modifier l'absorption respective des deux sous cellules par rapport aux STC, et perturber l'équilibre des photocourants. Il est donc utile d'étudier la production en conditions réelles de fonctionnement, sur une année, pour tenter de prédire précisément le gain en production des cellules tandem.

L'objectif de notre travail est de développer un modèle multiphysique complet (optique, électrique, et thermique) pour calculer le productible d'une cellule tandem HaP/c-Si heure par heure en conditions réelles de fonctionnement, c'est-à-dire en simulant le spectre solaire réel sur une année, selon la localisation, et en calculant la température de la cellule dans ces conditions. Cet article porte sur le choix des modèles physiques et numériques de la partie optique du problème.

Pour améliorer le rendement des cellules tandem HaP/c-Si, les sous cellules c-Si sont, comme les versions mono-jonction, dotées d'une texturation pyramidale face avant et arrière [1],

[5], [6]. La sous sous-cellule HaP est déposée sur la sous-cellule c-Si, sa faible épaisseur lui permettant de suivre le relief de la texturation. Ces pyramides servent à diminuer la réflexion et à augmenter le piégeage de la lumière en augmentant son chemin parcouru dans les couches actives.

Une des approches utilisées pour modéliser les propriétés optiques de cellules tandem HaP /c-Si, texturée sur les deux faces est la combinaison du « lancer de rayon », communément appelé ray-tracing, avec des modèles d'optique ondulatoire [7], [8], [9] comme la méthode de transfert de matrices (TMM) [10], [11]. Le ray-tracing, lui, est basé sur l'optique géométrique. Il est utilisé dans la couche de c-Si, épaisse, et aussi pour prendre en compte les texturations (si leur taille est grande devant les longueurs d'onde du spectre incident). La méthode de transfert de matrices sert pour les couches fines, : les interférences entre les ondes sont prises en compte. Elle est aussi valable seulement si l'épaisseur de chaque couche est plus faible que la dimension latérale de la texturation.

Afin de déterminer l'outil de simulation optique le plus adapté au modèle multiphysique, nous avons comparé deux logiciels : RayFlare [12] et CROWM [10]. La comparaison s'effectue sur la sous-cellule en c-Si.

CROWM a été conçu pour des systèmes opto-électroniques multi-couches (tels que les cellules solaires ou les diodes luminescentes), avec des couches ayant des épaisseurs d'échelle différente. Il combine le ray-tracing dans les couches pouvant être traitées comme incohérentes, avec le TMM dans les couches minces.

RayFlare est un package Python open-source, qui a été imaginé spécialement pour modéliser des cellules solaires. Différentes méthodes de simulation optique sont implémentées : de l'optique géométrique (ray-tracing), et de l'optique électromagnétique (méthode de transfert de matrices TMM ou, solveur d'équation de Maxwell comme le RCWA).

2. STRUCTURE DE LA SOUS-CELLULE EN C-Si

La sous-cellule en c-Si est une cellule à hétérojonction (SHJ) type du CEA à l'Institut National de l'Energie Solaire (INES). La structure est représentée Figure 1.

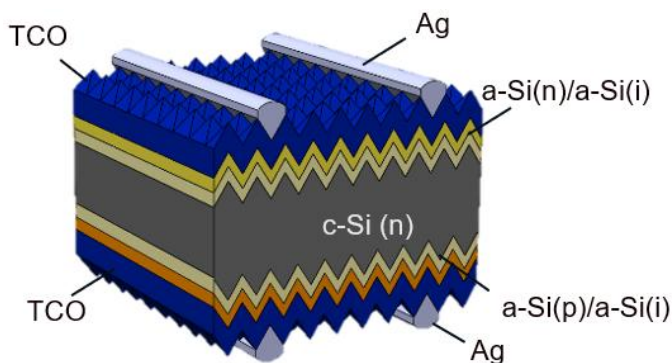


Figure 1 : Architecture de la cellule à hétérojonction simulée

Le wafer de c-Si utilisé pour cette cellule en simple jonction est d'épaisseur de l'ordre de 100 à 150 μm et peut atteindre 300 μm lorsqu'elle est intégrée en tant que sous-cellule inférieure en tandem à l'échelle de laboratoire. Il est

typiquement texturé avec des pyramides de tailles aléatoires, de l'ordre du μm , et ayant un angle de base d'environ 55° . La texturation sur la Figure 1 est arbitraire.

Sur le c-Si, on vient déposer des couches fines de Silicium amorphe hydrogéné non dopées et dopées (entre 5 et 15 nm) pour passiver les liaisons pendantes et former l'hétérojonction de silicium, puis des couches d'oxyde transparent conducteur (TCO), de l'ordre de 75 nm, pour assurer le rôle d'antireflet et améliorer le transport latéral des charges photogénérées jusqu'aux contacts métalliques.

3. DESCRIPTION DU MODELE OPTIQUE

Compte tenu de son architecture combinant un wafer texturé et des couches minces, la sous-cellule SHJ est modélisée par une combinaison de ray-tracing et de TMM [10], [13].

Le ray-tracing considère la lumière comme un ensemble de rayons, et néglige tous les phénomènes d'interférences et de diffraction. Les propriétés de dispersion chromatique des matériaux sont prises en compte. Pour une longueur d'onde donnée, un nombre défini de rayons sont lancés, et à chaque interface, les chemins des rayons réfléchis et réfractés, s'ils existent, sont déterminés par les lois de l'optique géométrique. Les probabilités de réflexion et transmission sont calculées via les équations de Fresnel [10], [12], [14], éventuellement en tenant compte de la polarisation de la lumière au point d'incidence. La lumière solaire, non polarisée, est alors modélisée par une moyenne des polarisations.

Les pyramides aléatoires en face avant et arrière du c-Si ont des dimensions supérieures à la longueur d'onde ($> 1 \mu\text{m}$), et peuvent donc être traitées par ray-tracing. Des conditions périodiques latérales sont appliquées : si la lumière rencontre une bordure latérale, elle est réinjectée de l'autre côté. L'absorption à l'intérieur de la couche est calculée par la loi de Beer Lambert.

La TMM est à privilégier pour un empilement de couches fines devant la longueur d'onde de la lumière, éventuellement absorbantes. Ces couches recouvrent une texturation : l'utilisation de la TMM est valable seulement si les dimensions des pyramides sont grandes devant l'épaisseur des couches fines [12].

Pour chaque longueur d'onde, la TMM considère la lumière incidente comme une onde polarisée. Dans l'empilement des couches minces, les ondes arrivant du milieu incident et celles allant dans le sens opposé interfèrent. L'amplitude des ondes transmises et réfléchies à chaque interface est calculée par les équations de Fresnel, issues des équations de Maxwell. Une matrice de transfert propre à chaque couche est déduite, et le produit de l'ensemble de ces matrices permet de relier les champs sur le premier interface (transmis et réfléchi) et ceux sur le dernier interface de l'empilement. A partir des amplitudes des champs, il est possible de remonter à la fraction de lumière transmise, réfléchie et absorbée au niveau de chaque couche. Les angles réfléchis et transmis sont issus des lois de Snell. [10], [13].

RayFlare [12] est un outil récent et peu comparé dans la littérature. Nous avons choisi de confronter ses résultats à CROWM, un logiciel de simulation optique validé et qui représente bien la réalité expérimentale [7], [15]. Il est utilisé

dans les travaux de Holman et al. pour analyser en détails les performances optiques des cellules et diminuer les pertes [1].

4. RESULTATS

Pour modéliser la cellule SHJ sur CROWM, les données d'entrée sont 40 000 rayons lancés, distribués sur 200 points selon l'axe x et 200 selon l'axe y. Le fichier pour représenter la texturation aléatoire est issu du travail de Gageot et al. [16], qui a été validé par comparaison avec une courbe de réflexion expérimentale d'un wafer de c-Si d'épaisseur de l'ordre de 110 μm (mesurée par spectrophotométrie).

Sur RayFlare, la méthode de ray-tracing combinée avec la TMM est utilisée. Les paramètres de ray-tracing sont fixés à 30 000 rayons lancés, 50 points d'intersection avec la pyramide initiale scannée selon l'axe x et 50 selon l'axe y. Deux approches sont choisies pour représenter des pyramides aléatoires en face avant et arrière de la couche de c-Si :

- Une option interne à RayFlare imitant le comportement d'une texturation non régulière est activée : la position de chaque rayon est considérée comme aléatoire avant toute intersection avec une face des pyramides.
- L'autre option est d'utiliser le même fichier de texturation que celui importé dans CROWM. Il a fallu diminuer le pas de précision des coordonnées z de la surface (point tous les 100 nm selon x et y, contre 10 nm initialement), pour diminuer le temps de simulation et la mémoire utilisée sur RayFlare.

Sur les deux logiciels, les rayons arrivent en incidence normale, et les milieux incident et de transmission sont de l'air.

4.1. Comparaison RayFlare/CROWM

Pour évaluer les performances et les différences entre CROWM et RayFlare, les courbes d'absorption d'un wafer c-Si en fonction de la longueur d'onde sont tracées Figure 2. La courbe de c-Si nommée RayFlare 1 correspond à l'option a. du paragraphe 4, et celle de c-Si appelée RayFlare 2 fait référence à l'option b du paragraphe 4.

Le calcul des courants de génération J_{gen} (Tableau 1) est réalisé à partir du spectre AM1.5 du NREL [17].

Un bon accord est obtenu entre les deux outils, avec des écarts entre les J_{gen} de CROWM et RayFlare compris entre 0,7 et 0,8 %.

	J_{gen} (mA/cm ²)
c-Si CROWM	38,91
c-Si RayFlare_1	38,64
c-Si RayFlare_2	38,62

Tableau 1 : Courants de génération obtenus pour chaque simulation

Il semble important de noter que l'option 1 sur RayFlare a un temps de simulation bien plus rapide que l'option 2 : moins d'une heure contre 9h à 10h. Cela concerne les longueurs d'onde dans l'IR.

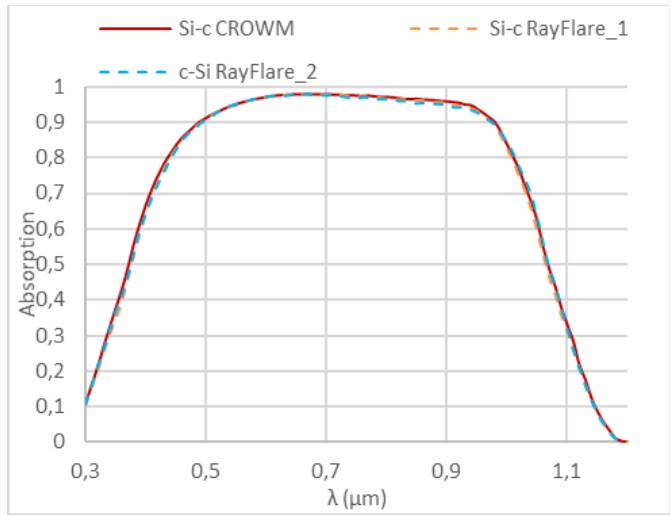


Figure 2 : Courbe d'absorption de la couche de c-Si

4.2. Comparaison RayFlare/EQE expérimental

Le spectre d'absorption de RayFlare est aussi comparé à l'efficacité quantique externe (EQE) d'une cellule SHJ mesurée expérimentalement en fonction de la longueur d'onde, en faisant l'hypothèse dans la simulation que tout photon absorbé génère un électron qui est collecté. Il est important de noter que lors de la mesure d'EQE, la cellule est positionnée sur un socle plein métallique qui réfléchit la majorité des photons non absorbés par la cellule. Cela a pour effet de permettre un second passage des photons de l'infrarouge et une absorption potentielle par la cellule. L'ombrage optique induit par la présence de la métallisation en face avant de la cellule est estimé à 5 %.

La cellule SHJ expérimentale a des propriétés optiques très proches de celles de la cellule modélisée. La simulation sur RayFlare est réalisée avec la méthode a. section 4. L'ombrage optique induit par la présence de la métallisation en face avant de la cellule est prise en compte en considérant 5 % de réflexion sur l'ensemble du spectre ; et la contribution des réflexions de photons sur le socle de mesure en face arrière en choisissant de l'Argent comme milieu de transmission sur RayFlare (à la place de l'air). L'Argent recouvre donc l'entièreté de la face arrière dans la modélisation. Il est important de noter qu'il est possible d'avoir de légères variations d'épaisseurs et d'indices optiques de chacun des matériaux entre la cellule expérimentale et la structure simulée.

La courbe d'absorption obtenue sur RayFlare et celle de l'EQE mesurée sont tracées Figure 3, et sont relativement similaires. Les raisons expliquant les différences peuvent être liées aux pertes par recombinaison des électrons générés, et aux propriétés optiques légèrement différentes. Par exemple, celles de l'ITO ont été obtenues expérimentalement par mesures sur un substrat de c-Si poli, alors que, dans cette architecture, l'ITO est déposé sur du Silicium amorphe (a-Si) hydrogéné, sur un wafer de c-Si texturé.

Dans l'IR, un écart de 5 à 10 % persiste, que nous ne savons pour l'instant pas expliquer. Nous allons continuer à étudier les potentielles causes.

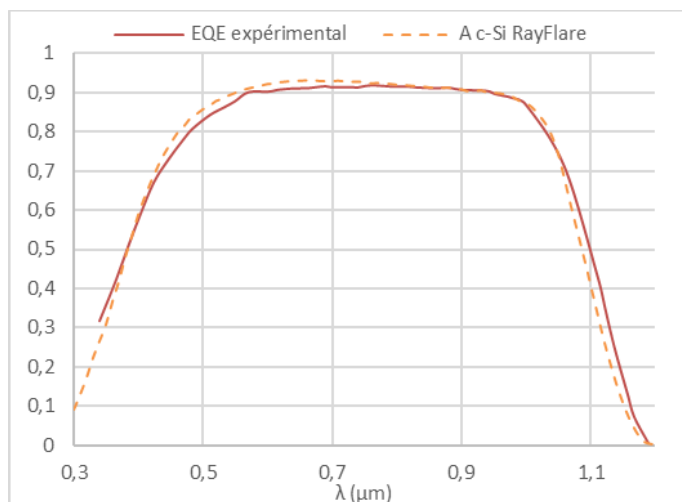


Figure 3 : Comparaison de la courbe d'absorption de la couche de c-Si de RayFlare et de l'EQE mesurée pour la cellule SHJ

Les J_{gen} calculés à partir du spectre AM1.5 du NREL [17] sont présentés dans le Tableau 2. La plage d'intégration débute à 0,34 μm , qui correspond à la première mesure expérimentale. Celui obtenu par modélisation sur RayFlare est supérieur de 0,83 % par rapport au résultat expérimental. En moyenne sur tout le spectre, l'écart reste faible.

	$J_{\text{gen}} \text{ (mA/cm}^2\text{)}$
SHJ expérimentale	37,25
SHJ RayFlare	37,56

Tableau 2 : Courants de génération de la cellule SHJ issus des résultats expérimentaux et de RayFlare (à partir de 0,34 μm)

5. CONCLUSIONS

Dans cet article, l'approche optique qui sera intégrée à notre modèle opto-électro-thermique couplé a été présentée, ainsi que les méthodes associées. L'objectif est de modéliser optiquement une cellule photovoltaïque tandem, pour adapter le modèle en conditions réelles de fonctionnement sur un an. Pour simplifier l'étude, la comparaison a été faite sur une cellule silicium à hétérojonction classique qui se rapproche beaucoup de la sous-cellule inférieure de la cellule tandem.

L'outil de simulation optique RayFlare [12], que nous souhaiterions utiliser dans le modèle multiphysique, est comparé à CROWM, un logiciel de modélisation validé et représentatif de la réalité. Un bon accord entre les deux outils est trouvé pour une cellule SHJ. Les résultats de RayFlare sont également évalués par rapport à un EQE expérimental d'une cellule SHJ. La modélisation permet de retrouver la tendance des résultats expérimentaux, avec un J_{sc} ayant moins de 1 % de différence. Des écarts subsistent, notamment dans l'IR et leurs causes restent à déterminer.

En perspectives, nous allons chercher des explications concernant les différents entre les courbes issues de modélisation et d'expérience. Une fois le modèle optique

validé pour une cellule SHJ, nous l'appliquerons aux cellules tandem.

6. REFERENCES

- [1] T. Kirchartz, G. Yan, Y. Yuan, B. K. Patel, D. Cahen, et P. K. Nayak, « The state of the art in photovoltaic materials and device research », *Nat Rev Mater*, vol. 10, n° 5, p. 335- 354, mai 2025, doi: 10.1038/s41578-025-00784-4.
- [2] H. Wu *et al.*, « Silicon heterojunction back-contact solar cells by laser patterning », *Nature*, vol. 635, n° 8039, p. 604- 609, nov. 2024, doi: 10.1038/s41586-024-08110-8.
- [3] Y. Cheng et L. Ding, « Perovskite/Si tandem solar cells: Fundamentals, advances, challenges, and novel applications », *SusMat*, vol. 1, n° 3, p. 324- 344, 2021, doi: 10.1002/sus2.25.
- [4] « Best Research-Cell Efficiency Chart », NREL. Consulté le: 7 février 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>
- [5] F. Sahli *et al.*, « Fully textured monolithic perovskite/silicon tandem solar cells with 25.2% power conversion efficiency », *Nature Mater*, vol. 17, n° 9, p. 820- 826, sept. 2018, doi: 10.1038/s41563-018-0115-4.
- [6] X. Luo *et al.*, « Efficient Perovskite/Silicon Tandem Solar Cells on Industrially Compatible Textured Silicon », *Advanced Materials*, vol. 35, n° 9, p. 2207883, 2023, doi: 10.1002/adma.202207883.
- [7] M. Jošt *et al.*, « Textured interfaces in monolithic perovskite/silicon tandem solar cells: advanced light management for improved efficiency and energy yield », *Energy Environ. Sci.*, vol. 11, n° 12, p. 3511- 3523, 2018, doi: 10.1039/C8EE02469C.
- [8] D. A. Jacobs *et al.*, « Light Management: A Key Concept in High-Efficiency Perovskite/Silicon Tandem Photovoltaics », *J. Phys. Chem. Lett.*, vol. 10, n° 11, p. 3159- 3170, juin 2019, doi: 10.1021/acs.jpclett.8b03721.
- [9] B. W. Schneider, N. N. Lal, S. Baker-Finch, et T. P. White, « Pyramidal surface textures for light trapping and antireflection in perovskite-on-silicon tandem solar cells », *Opt. Express*, vol. 22, n° S6, p. A1422, oct. 2014, doi: 10.1364/OE.22.0A1422.
- [10] B. Lipovšek, J. Krč, et M. Topič, « Optical Model for Thin-Film Photovoltaic Devices With Large Surface Textures at the Front Side », *Informacije MIDEM - Journal of Microelectronics, Electronic Components and Materials*, vol. 41, p. 264- 271, 2011.
- [11] S. J. Byrnes, « Multilayer optical calculations », 30 décembre 2020, *arXiv*: arXiv:1603.02720. doi: 10.48550/arXiv.1603.02720.
- [12] P. M. Pearce, « RayFlare: flexible optical modelling of solar cells », *JOSS*, vol. 6, n° 65, p. 3460, sept. 2021, doi: <https://doi.org/10.21105/joss.03460>.
- [13] J. M. Greulich, « Simulation and Characterization of Novel Large-Area Silicon Solar Cells for Industrial Production », Fraunhofer ISE, 2014.
- [14] S. C. Baker-Finch et K. R. McIntosh, « Reflection of normally incident light from silicon solar cells with pyramidal texture », *Progress in Photovoltaics: Research*

- and Applications*, vol. 19, n° 4, p. 406- 416, 2011, doi: 10.1002/pip.1050.
- [15] A. Čampa, A. Valla, K. Brecl, F. Smole, D. Muñoz, et M. Topič, « Multiscale Modeling and Back Contact Design of Bifacial Silicon Heterojunction Solar Cells », *IEEE Journal of Photovoltaics*, vol. 8, n° 1, p. 89- 95, janv. 2018, doi: 10.1109/JPHOTOV.2017.2775155.
- [16] T. Gageot, « Diminution de la quantité d'Indium dans les cellules SHJ en vue d'améliorer la performance, la durabilité et la dépendance aux éléments rares », These de doctorat, Université Grenoble Alpes, 2024. Consulté le: 27 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://theses.fr/2024GRALI032>
- [17] NREL, « Reference Air Mass 1.5 Spectra ». Consulté le: 28 mai 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.nrel.gov/grid/solar-resource/spectra-am1.5>