

# Modélisation, caractérisation et analyse de la dégradation de cellule pérovskite par méthode Bayésienne

Antoine Burgaud<sup>2,3</sup>, Joseph Chakar<sup>1</sup>, Karim Medjoubi<sup>2</sup>, Jorge Posada<sup>2</sup>, Jean-Baptiste Puel<sup>2,3</sup>, Yvan Bonnassieux<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Physique des Interfaces et des Couches Minces (LPICM), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Ecole Polytechnique, Institut Polytechnique de Paris (IP Paris), Palaiseau, 91120, France

<sup>2</sup> Institut Photovoltaïque d'Île-de-France (IPVF), 18 Boulevard Thomas Gobert, 91120, Palaiseau, France

<sup>3</sup> EDF, R&D, 18 Boulevard Thomas Gobert, 91120, Palaiseau, France

Les cellules solaires à base de pérovskite sont des candidates prometteuses pour l'avenir de l'énergie photovoltaïque, atteignant des rendements records. Cependant, leur instabilité sous divers stress environnementaux entrave leur commercialisation à grande échelle. Notre travail propose une approche innovante pour comprendre et modéliser les mécanismes de dégradation de ces cellules. Notre méthode couple des simulations dérive-diffusion à une analyse bayésienne pour caractériser des propriétés physiques difficilement mesurables des matériaux et des interfaces responsables de la dégradation des performances.

Nous avons appliqué cette approche à des courbes caractéristiques courant-tension (JV) de cellules solaires en pérovskite mesurée en conditions réelles. En particulier pour la cellule placée en extérieur (Fig.1) et grâce à la modélisation dérive-diffusion des courbes JV et à l'inférence bayésienne, nous avons pu extraire l'évolution temporelle (Fig.2) des paramètres physiques de la dérive-diffusion. Nous avons notamment identifié la densité de défauts, la mobilité des porteurs de charges et l'accumulation d'ions à l'interface avec l'ETL comme étant des propriétés clés responsables de la dégradation/rétablissement des performances de cette cellule. Notre approche flexible peut être adaptée à d'autres technologies de cellules solaires et à divers jeux de mesures expérimentales, ouvrant ainsi la voie à une meilleure compréhension des mécanismes de dégradation et à la mise en place de tests accélérés appropriés. Enfin, il est possible de coupler ces mesures JV à d'autres caractérisations complémentaires (PL, EQE, etc.) permettant de réduire l'incertitude sur les résultats.

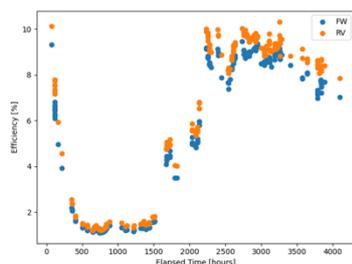


Figure 1 Évolution temporelle de l'efficacité d'une cellule en pérovskite placée en extérieur. On remarque une très forte dégradation au bout de 500h puis une récupération des performances à partir de 1500 h d'expérience.

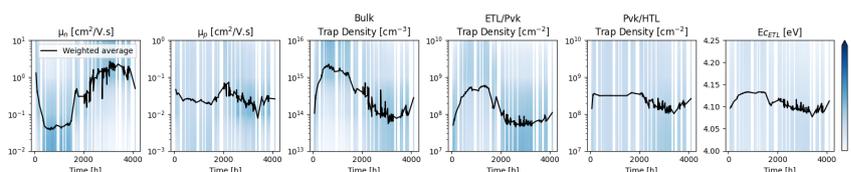


Figure 2 Évolution au cours du temps de la distribution de probabilité de chaque paramètre de la modélisation dérive-diffusion susceptible d'évoluer. La moyenne pondérée a elle aussi été tracée pour aider à la lecture des figures. L'évolution de ces paramètres physique est corrélée à l'évolution des performances électriques Fig. 1.

[1]. Majeed, N., Saladina, M., Krompiec, M., Greedy, S., Deibel, C., and MacKenzie, R.C.I. (2020). Using Deep Machine Learning to Understand the Physical Performance BoLlenecks in Novel Thin-Film Solar Cells. *Advanced Functional Materials* 30, 1907259. <https://doi.org/10.1002/adfm.201907259>.

[2]. Brandt, R.E., Kurchin, R.C., Steinmann, V., Kitchaev, D., Roat, C., Levenco, S., Ceder, G., Unold, T., and Buonassisi, T. (2017). Rapid Photovoltaic Device Characterization through Bayesian Parameter Estimation. *Joule* 1, 843–856. <https://doi.org/10.1016/j.joule.2017.10.001>