

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR  
ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
Université Mohamed Boudiaf - M'sila  
Faculté de Technologie  
Département d'Electronique



**THÈSE**

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

**Doctorat de troisième cycle en Electronique**

**Option Systèmes Electro-Energétique et Energies Renouvelables**

Présentée par :

*OUANOUGHI Asma*

**THÈME**

---

**Amélioration d'absorption des cellules solaires par  
l'utilisation des cristaux photoniques en couches minces**

---

Soutenue publiquement le .../.../....

Devant le jury:

SAIGAA Djamel	Président	Professeur	Univ. M'sila
HOCINI Abdesselam	Rapporteur	Professeur	Univ. M'sila
BOUMAZA Touraya	Examineur	Professeur	Univ. Constantine1
BOUCHEMAT Mohamed	Examineur	Professeur	Univ. Constantine1
BOUCHAMA Idris	Examineur	Maître de conférences	Univ. M'sila

# *Dédicaces*

*je remercie mes parents et je remercie spécialement mon marrie Diab*

*Khoudja, pour son soutient et son encouragement et je remercieles*

*membres de ma famille ( mes frères , mes sœurs et ma fille kamar )*

*pour leur énorme support, Mes remerciements vont aussi à tous mes*

*amies (amira, samia et asma) pour aide précieuse.*

# Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au Département d'Electronique, à la Faculté de Technologie de l'Université de M'sila.

Je tiens dans un premier temps à remercier Monsieur **HOCINI Abdesselam** Professeur au département d'électronique, pour avoir proposé et dirigé ce travail efficacement et pour son aide et ses remarques précieuses.

J'exprime ma vive gratitude à Monsieur **SAIGAA Djamel**, Professeur à l'Université de M'sila, responsable de la formation doctorale S3ER, pour l'intérêt qu'il a porté à mon travail en faisant l'honneur de présider le jury de ma soutenance.

Je remercie très sincèrement Madamele Professeur **BOUMAZA Touraya**, du département d'électronique de Université de Constantine1, pour l'intérêt qu'elle a manifesté pour ce travail et d'avoir accepté d'être membre dans le jury de cette thèse.

Je tiens à remercier également Monsieur **BOUCHEMAT Mohamed**, Professeur à l'Université de Constantine1, pour l'intérêt qu'il a manifesté pour ce travail et d'avoir accepté d'être membre dans le jury de cette thèse.

Je remercie également, Monsieur **BOUCHAMA Idris**, Maître de Conférences à l'Université de M'sila, pour avoir accepté de participer à mon jury de thèse.

Je suis reconnaissante à Monsieur **KHEDROUCHE Djamel**, Maître de Conférences à l'Université de M'sila, non seulement pour les nombreuses et fructueuses discussions, que nous avons pu avoir, mais aussi pour son aide et encouragements durant ces années.

Je remercie tous les membres de l'équipe que j'ai pu côtoyer durant toutes ces années passées avec eux, en particulier: **Samia Abdelkebir, Ahmed Kahlouche, Mounir Bouras, et Ahlem Harhouz.**

Mes remerciements vont aussi à tous les membres du département d'électronique, notamment mes collègues pour leurs aides et encouragements.

# Sommaire

<b>INTRODUCTION GENERALE</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre 1</b>	<b>5</b>
<b>GENERALITES SUR LES CELLULES PHOTOVOLTAÏQUES</b>	<b>5</b>
1. Introduction .....	5
2. Les cellules photovoltaïques.....	6
3. Historique de l'effet photovoltaïque.....	7
4. Générations des cellules photovoltaïques.....	8
4.1. Cellules de la première génération.....	9
4.2. Cellules de la deuxième génération.....	9
4.3. Cellules de la troisième génération .....	10
5. Fonctionnement d'une cellule solaire photovoltaïque.....	11
5.1. Propriétés de l'éclairement solaire à la surface terrestre.....	11
5.2. Principe de la conversion photovoltaïque .....	12
5.3. Absorption optique.....	14
5.4. Collecte des porteurs.....	16
5.5. Schéma électrique équivalent d'une photopile réelle.....	19
6. Les différents types de cellules solaires.....	19
6.1. Les cellules solaires au silicium.....	19
6.2. Les cellules solaires à couche mince.....	20
6.3. Les Cellules photovoltaïques organiques.....	24
7. Cellule solaire photovoltaïque à base de cristaux photonique 1D et 2D .....	27
8. Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque.....	28
9. Conclusion.....	29
<b>Chapitre 2</b>	<b>30</b>
<b>ÉTAT DE L'ART SUR LES CELLULES SOLAIRES</b>	<b>30</b>
1. Introduction .....	30
2. Préparation des films métalliques.....	31
3. Propriétés des matériaux et cellules solaires en silicium.....	32
3.1. Propriétés structurales de l'a-Si : H .....	32
3.2. Propriétés structurales du $\mu$ c-Si:H.....	33
3.3. Propriétés optiques de silicium amorphe hydrogéné.....	35
3.4. Propriétés optiques du c-Si .....	35
3.5. Propriétés optiques du $\mu$ c-Si : H .....	35
4. Dopage du silicium amorphe hydrogéné.....	36
5. Dépôt du silicium amorphe hydrogéné par PECVD.....	36
6. Fonctionnement des cellules solaires en a-Si : H .....	38
7. Fonctionnement des cellules solaires en c-Si .....	38
8. Circuit équivalent pour une diode pin .....	39
9. Cellules solaires en configuration p-i-n et n-i-p .....	40

10. Les cellules solaires simples et multi-jonction .....	41
10.1. Cellules solaires à jonction simple à base du a-Si .....	41
10.2. Cellules solaires Multi-jonctions à base de silicium amorphe hydrogéné .....	44
11. Intérêt des nanostructures de silicium .....	45
11.1. Propriétés fondamentales du silicium cristallin .....	45
11.2. Les nanostructures de silicium pour la conversion photovoltaïque .....	45
12. Pertes physiques dans une cellule solaire standard .....	46
13. L'amélioration du rendement .....	46
13.1. Les multijonctions .....	47
13.2. Les "transformateurs" optiques .....	47
14. Contact avant de TCO .....	48
15. Conclusion .....	48
<b>Chapitre 3</b> .....	<b>50</b>
<b>LES CRISTAUX PHOTONIQUES</b> .....	<b>50</b>
1. Introduction .....	50
2. Bref historique sur les cristaux photoniques .....	50
3. Propriétés optiques des principales structures utilisées pour le piégeage de la lumière .....	51
3.1. Diffraction de la lumière par un réseau .....	52
3.2. Couplage de la lumière avec les modes d'un cristal photonique .....	54
4. Différent type des cristaux photoniques .....	55
4.1. Les Cristaux photoniques unidimensionnel (réseau de Bragg) .....	55
4.2. Les cristaux photoniques bidimensionnels .....	56
4.3. Les cristaux photoniques tridimensionnels .....	59
5. Les cristaux photoniques 1D .....	60
6. Courbes de dispersion d'un milieu périodique 1D .....	61
6.1. Structure et description des courbes de dispersion .....	61
6.2. Approche qualitative .....	62
7. Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque .....	63
7.1. Substrats texturation aléatoire .....	64
7.2. Réseaux de diffraction .....	64
7.3. Cristaux photoniques absorbants .....	66
8. Conclusion .....	69
<b>Chapitre 4</b> .....	<b>70</b>
<b>RESULTATS DE SIMULATIONS</b> .....	<b>70</b>
1. Introduction .....	70
2. La méthode FDTD .....	71
3. L'implémentation de la FDTD dans FullWave .....	72
4. Propriétés optiques et conception d'un cristal photonique absorbant .....	73
4.1. Propriétés optiques .....	73
4.2. Conception d'un cristal photonique absorbant .....	73
5. Résultats et discussions .....	75
5.1. Structure de couche sans motifs faite par (Si et a-Si: H) .....	76

5.2. Structure à cristal photonique 1D.....	78
5.3. Les cellules solaires à cristaux photoniques bidimensionnelles .....	84
6. Discussions des résultats obtenus .....	94
7. Analyse des résultats .....	97
8. Conclusion.....	98
<b>CONCLUSION GENERALE</b>	<b>99</b>

# Liste des figures

Fig. 1.1. Évolution de la capacité photovoltaïque installée cumulative dans les pays de l'Organisation de coopération et de développement économiques de 2001 à 2012 [7].	8
Fig. 1.2. Répartition spectrale de l'éclairement solaire dans les conditions AM1.5G.	11
Fig. 1.3. Principe de la conversion photovoltaïque [2].	13
Fig. 1.4. L'effet photovoltaïque.	14
Fig. 1.5. Une lumière monochromatique traversant une solution absorbante de concentration C contenue dans une cuve d'épaisseur l.	15
Fig. 1.6. Spectre solaire hors atmosphère et au niveau de la mer.	17
Fig. 1.7. Caractéristique rectangulaire d'une photopile à l'obscurité et sous illumination.	18
Fig. 1.8. Schéma électrique équivalent d'une diode réelle.	19
Fig. 1.9. Structure de la cellule classique à base d'absorbeur Cu (In, Ga) Se <sub>2</sub> [3].	21
Fig. 1.10. Structure superstrat de la cellule solaire Verre/ZnO : Al/i-ZnO/Cu (In, Ga) Se <sub>2</sub> /Ag en couchesminces [3].	23
Fig. 1.11. Cellule tandem à base de CuInSe <sub>2</sub> et CuGaSe <sub>2</sub> [3].	24
Fig. 1.12. Structure d'une cellule de type Schottky (a), d'une cellule à hétérojonction PN (b) et d'une cellule à hétérojonction en volume (c) [3].	25
Fig. 1.13. Cellule solaire bifaciale à base de CIGS en couches minces [3].	26
Fig. 1.14. Structure typique d'une cellule solaire à base de couche active CdT [3].	27
Fig. 1.15. Couches de 100nm d'épaisseur en a-Si : H pour une configuration non structurée, un CP1D sur substrat verre et un CP2D (ici à réseau carré), le milieu environnant est l'air.	28
Fig. 2.1. Représentation schématique de la structure atomique du silicium cristallin (à gauche) et du silicium amorphe (à droite) [7].	33
Fig. 2.2. Diagramme schématique montrant la microstructure particulière du $\mu\text{c-Si:H}$ obtenu à haute fréquence par PECVD.	34
Fig. 2.3. Coefficient d'absorption $\alpha$ du silicium cristallin (c-Si), du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et du silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{c-Si:H}$ ), mesuré par spectroscopie de déviation photothermique(PDS).	36
Fig. 2.4. Représentation schématique de la technique de PECVD, présentant le plasma créé par un champ électrique appliqué entre deux électrodes en parallèle et la décomposition de $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$ au sein du plasma [7].	37
Fig. 2.5. Circuit équivalent pour une diode pin [7].	39
Fig. 2.6. Représentation schématique de cellules solaires en configuration p-i-n (à gauche) et n-i-p (à droite). La grille d'argent de la cellule n-i-p, normalement déposée sur le contact avant de TCO, n'est pas représentée [7].	40
Fig. 2.7. Cellules solaires de type superstrat et les cellules solaires de type substrat.	43
Fig. 2.8. Structure de bande du silicium massif cristallin [37].	45
Fig. 3.1. Principales structures étudiées pour le piégeage de la lumière. Les deux premiers ordres sont représentés pour le réseau de diffraction. La période du réseau de diffraction et du CP est notée « a » [42].	52
Fig. 3.2. Diagramme de dispersion schématique d'un réseau de diffraction représenté pour les ordres de diffraction $m=0,1$ et $2$ et $k//>0$ . L'angle d'incidence de la lumière noté $\theta_0$ est considéré ici non nul [2].	52

Fig. 3.3. Diagramme de dispersion schématique d'un cristal photonique représenté dans la première zone de Brillouin (période du CP notée a) et pour $k//>0$ .	53
Fig. 3.4. Représentation schématique de cristaux photoniques : unidimensionnels (1D), bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D) [39].	54
Fig. 3.5. Schéma d'un miroir de Bragg constitué d'un milieu diélectrique périodique [39].	55
Fig. 3.6. Défaut dans une structure périodique unidimensionnelle, formé par l'élargissement d'une couche [39].	55
Fig. 3.7. Division de l'espace des fréquences dans les états propagatifs et évanescents.	56
Fig. 3.8. Structure 2D : (a) Structure carrée, (b) triangulaire et (c) hexagonale [39].	57
Fig. 3.9. Réseau direct d'une structure à deux dimensions	57
Fig. 3.10. Maille élémentaire Wigner - Seitz du réseau direct [39].	58
Fig. 3.11. Construction de la zone de Brillouin irréductible défini dans un réseau réciproque.	58
Fig. 3.12. Réseau réel, réciproque, première zone de Brillouin et zone de Brillouin irréductible pour les réseaux 2D (a) carré et (b) triangulaire [39].	59
Fig. 3.13. Un exemple de structure photonique 3D : les ailes de papillon [41].	60
Fig. 3.14 . (a) Représentation schématique de structures 3D de« la Yablonovitch », (b) Image d'unCP3D « tas de bois » [39].	60
Fig. 3.15. Cristal photonique 1D : la propagation est normale au plan des couches [41].	60
Fig. 3.16. Les courbes de dispersion des modes optiques dans un milieu périodique sont dominées par les processus de diffraction et de couplage entre modes [39].	62
Fig. 3.17. Représentation schématique d'un miroir de Bragg constitue de 2 types de couches de permittivité $\epsilon_1$ et $\epsilon_2$ . La maille du cristal est $a=a_1+a_2$ . Nous considérons une onde plane électromagnétique polarisée suivant l'axe (Oy). A droite, schémas des réflexions sur des mailles successives pour $\lambda=\lambda_B$ (longueur d'onde de Bragg) [43].	63
Fig. 3.18. Schéma représentatif du phénomène de diffusion de la lumière par des microstructures en face avant d'une cellule solaire. Une réflexion totale interne est réalisée pour $\theta > \theta_c$ [42].	64
Fig. 3.19. Design 1D PCs avec différent profil : (a) rectangulaire ; (b) triangulaire ; and (c) circulaire [46].	65
Fig. 4.1. Cellule cubique de Yee [66].	71
Fig. 4.2. (a) Structure de cellule solaire en couche non structurée sur un substrat de verre, (b) cristal photonique à une dimension, (c) cristal photonique à deux dimensions, avec un réseau de trous circulaires.	74
Fig. 4.3. Mesure et simulation des spectres d'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) avec une épaisseur de 100 nm.	76
Fig. 4.4. Couche absorbante non structurée à base de Si ou de Si-a :H.	76
Fig. 4.5. Spectres d'absorption de la couche non structurée de Silicium et de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) d'une épaisseur H = 100 nm. [73 -74].	77
Fig. 4.6. Spectres d'absorption de la couche non structurée avec des valeurs différentes de l'épaisseur.	78
Fig. 4.7. Le spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde sur la surface frontale d'une couche structurée 1D.	79
Fig. 4.8. Efficacité intégrée d'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) sur verre d'épaisseur 100 nm, en fonction de la période L et du facteur de remplissage ff (en%).	79
Fig. 4.9. Spectre d'absorption de la structure 1D PPC, avec un facteur de remplissage de 59% et pour différentes valeurs de période L = 0.320 $\mu$ m, L = 0.335 $\mu$ m, L = 0.350 $\mu$ m et une couche non structurée d'épaisseur H = 100 nm.	80

Fig. 4.10. Le rapport d'absorption entre les couches à motifs et sans motifs d'épaisseur 100 nm. ....	81
Fig. 4.11. Spectres d'absorption du cristal photonique 1D de Silicium et du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) avec la même épaisseur $H = 100$ nm.[74-75]. ....	82
Fig. 4.12. Spectre d'absorption d'une structure à CP-1D avec un facteur de remplissage $ff=65\%$ , $L = 310$ nm et différentes valeurs d'épaisseur $H = 0.100\mu\text{m}$ , $0.200\mu\text{m}$ , $300$ nm et $0.400\mu\text{m}$ pour la polarisation TE. ....	83
Fig. 4.13. Le spectre d'absorption de la structure à CP1D, (a) $N=3$ . (b) $N=5$ . (c) $N=9$ , $L=350$ nm et $ff=55\%$ . ....	84
Fig. 4.14. (a) Réseau triangulaire avec sa première zone de Brillouin, (b) Réseau carré avec sa première zone de Brillouin. ....	85
Fig. 4.15. Diagramme de bandes d'un cristal photonique (réseau triangulaire) gravé dans une matrice de silicium ( $\epsilon_{\text{substrat}} = 12.25$ ) : (a) réseau carré, (b) réseau triangulaire. ....	86
Fig. 4.16. Carte des bandes interdites d'un réseau triangulaire pour les deux polarisations dans le cas d'une matrice de permittivité $\epsilon_1=12.25$ [75]. ....	87
Fig. 4.17. (a) Schéma d'un CP2D carré composé de trous d'air dans le Silicium (b) Distribution de la constante de permittivité. ....	87
Fig. 4.18. Diagramme de bande d'un CP2D pour $a= 0.3\mu\text{m}$ et $d= 0.225\mu\text{m}$ . ....	88
Fig. 4.19. Cristal photonique à deux dimensions (2D) à réseau carré de trous circulaire. ....	89
Fig. 4.20. Les spectres d'absorption d'un CP 2D de réseau carré de Silicium avec différentes périodes ( $L$ ) pour l'épaisseur $H = 100$ nm. ....	89
Fig. 4.21. (a) Schéma d'un CP2D triangulaire composé de silicium, (b) Distribution de la constante de permittivité. ....	90
Fig. 4.22. Diagramme de dispersion d'une structure triangulaire composée de trous d'air plongés dans le Silicium. ....	91
Fig. 4.23. Cristal photonique à deux dimensions (2D SSP), avec un réseau triangulaire de trous circulaire. ....	91
Fig. 4.24. Les spectres d'absorption d'un CP2D de réseau triangulaire de Silicium pour différentes périodes ( $L$ ) pour l'épaisseur $H = 100$ nm [73 -74]. ....	92
Fig. 4.25. Effet de la matrice carrée 2D PC de trous circulaires en mode TE, avec un facteur de remplissage fixe et des différentes périodes ( $L$ ), sur le spectre d'absorption de la couche a-Si: H[78]. ....	93
Fig. 4.26. Spectre d'absorption de la couche a-Si: H d'un CP 2D de réseau triangulaire et de trous circulaires, avec facteur de remplissage constant pour différentes périodes ( $L$ ) [74]. ....	94
Fig. 4.27. Spectres simulés en incidence normale de la lumière pour la polarisation TE correspondant à une couche non structurée et aux CP 1D et 2D membranaires optimisés [73]. ....	95
Fig. 4.28. Spectres simulés en incidence normale de la lumière correspondant à une couche de CP-2D membranaire optimisé. ....	96

# Liste des tableaux

Tab. 4.1. Les absorptions intégrées résultantes. ....	95
---	----



# Introduction générale

L'augmentation de la consommation énergétique mondiale, associée à l'appauvrissement des ressources fossiles et à la prise de conscience des enjeux environnementaux, poussent les acteurs de la recherche à proposer et développer de nouvelles solutions pour produire une énergie propre et renouvelable. A l'heure actuelle, environ 85 % de l'énergie consommée dans le monde est issue de combustibles fossiles tels que le pétrole, le gaz naturel ou encore le charbon, avec l'impact environnemental que l'on connaît. Dans ce contexte, la technologie photovoltaïque se présente comme une solution non polluante à la problématique de production d'énergie électrique [1]. Portée par un contexte économique et social favorable, la recherche dans le domaine des cellules solaires photovoltaïques (PV) s'est intensifiée depuis plus de deux décennies, avec pour fil conducteur la volonté de créer une technologie mature et compétitive.

Dans ce contexte, l'optimisation des matériaux et des procédés technologiques employés a longtemps été mise au premier plan. Avec le développement des cellules solaires en couches minces, une étape importante a été franchie dans la réduction des coûts grâce à la diminution de l'épaisseur de la couche active. 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. De ce fait, des concepts d'ingénierie photonique plus avancés ont été développés en introduisant des nanostructures afin d'améliorer la collection de la lumière, mais aussi assurer un piégeage efficace des photons dans la couche active pour les longueurs d'onde où l'absorption est normalement faible [2].

De nos jours, la conversion photovoltaïque contribue très peu à la production énergétique mondiale à cause du coût du KWh d'environ 10 à 20 fois supérieur à celui des énergies fossiles. Ainsi que, la technologie de photovoltaïque est au carrefour de profondes mutations.

L'essentiel de son industrie repose actuellement sur des cellules dites de première génération dont le matériau de base est une plaquette de silicium, monocristallin ou multicristallin. Cela pose un double problème : la disponibilité du matériau et la prépondérance du coût de ce dernier dans le prix des cellules. L'enjeu est donc de recourir à des cellules de deuxième génération qui font, ces dernières années, l'objet de recherches intensives à travers le

monde : la technologie des cellules en couches minces poly- cristallines. Cette dernière, est appelée à jouer un rôle considérable dans la réduction du coût de fabrication des cellules [3].

L'idée originale développée par Yablonovitch [4], il a d'utilisée la bande interdite photonique (BIP), pour inhiber l'émission spontanée en annihilant la densité d'états des photons.

Ce n'est qu'en 1954 que les laboratoires de la Bell Telephone mettent au point une cellule au silicium, avec un rendement de 4%. Ce fut le début d'un véritable projet de cellules photovoltaïques au sein de la société Bell qui a permis à trois chercheurs américains, Chapin, Pearson et Prince de mettre au point une cellule photovoltaïque à haut rendement affichant 6% [5].

La démarche consistant à les concevoir à partir de composés organiques est prometteuse, en raison des avantages liés à cette technologie tels que : facilité de conception, diversité des composants, et coût moindre comparé aux dispositifs à base de silicium. Afin d'améliorer les performances photovoltaïques des cellules solaires, plusieurs travaux ont été entrepris. Ainsi, une grande variété de matériaux organiques (petites molécules, polymères conjugués, colorants) ou de mélanges organiques/inorganiques favorisant la création des charges, le transport et la collecte, ont été testés comme composants de telles cellules. D'autres investigations ont été faites consistant en le développement de nouvelles architectures de cellules [6].

L'optimisation des performances des cellules solaires à couches minces de silicium liée à une réduction des coûts reste un problème clé pour la production industrielle. Afin de parvenir à des rendements élevés, les cellules solaires à couches minces de silicium doivent présenter une forte absorption de la lumière. Ceci se traduit par un accroissement du courant photovoltaïque. Trouver de nouvelles structures ou dispositifs optiques pour piéger la lumière dans les cellules solaires est un véritable défi pour les chercheurs. Les auteurs de [7] ont proposé d'utiliser des nanoparticules de métal pour accroître l'absorption de la lumière dans les cellules solaires à couches minces de silicium.

Ce dernier point constitue l'objectif des méthodes de piégeage de la lumière qui visent à étendre cette condition à l'ensemble du spectre utile. La notion de « piégeage de la lumière » est apparue dès le début des années 1970 pour améliorer l'absorption de la lumière et le rendement de photodétecteurs en silicium, en particulier dans le proche infra-rouge [8].

Afin d'adresser ce problème, il a été proposé de graver totalement cette couche pour former un CP et d'optimiser ses paramètres (période  $L$  et facteur de remplissage en air  $ff$ ) afin d'augmenter la densité locale d'états photoniques aux grandes longueurs d'onde [9]

Dans le cas de [10], ils ont cherché à tirer profit des propriétés optiques particulières et ajustables des cristaux photoniques (CP), qui sont des structures caractérisées par un indice de réfraction périodique selon une, deux ou trois directions de l'espace. Plus précisément, ils ont

proposé de graver la couche active pour former un CP afin d'y contrôler le bande de gab les plus large, et ainsi d'augmenter l'absorption sur une large gamme spectrale avec une grande acceptance angulaire. La démonstration de ce concept a été effectuée à partir de couches absorbantes ultraminces (100nm d'épaisseur) à base de silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H). Ces dernières, ainsi que l'ensemble des couches sont nécessaires à la formation d'une cellule solaire completent. Egalement, ils ont choisi comme point de départ pour leur étude, une cellule solaire à base d'a-Si :H dont l'épaisseur de la couche active est de seulement 100nm. En l'absence de structures photoniques spécifiques, cette couche ultramince souffre d'une faible absorption (en particulier près du gap du matériau) limitant ainsi le rendement de la cellule.

De ce fait, des concepts d'ingénierie photonique plus avancés ont été développés en introduisant des nanostructures afin d'améliorer la collection de la lumière, mais aussi assurer un piégeage efficace des photons dans la couche active pour les longueurs d'onde où l'absorption est normalement faible.

L'objectif de ce travail réside dans l'études des cellules solaires à couche mince de Si et a-Si :H à base de cristaux photoniques unidimensionnelset bidimensionnels, et cela pour un contrôle optimal de variation d'absorption des cellules solaires photovoltaïques. Pour atteindre ce but, notre thèse a été structurée en quatre chapitres complémentaires :

- **Chapitre I :** au sein de ce chapitre, nous allons introduire le fonctionnement général d'une cellule solaire en couches minces, l'historique de l'énergie photovoltaïque, les filières technologiques associées et le principe de fonctionnement d'une photopile.
- **Chapitre II :** dans ce chapitre, nous allons décrire les conditions de dépôt et de préparation des nanostructure. Pour mentionner le piègea adéquat de la lumière dans les cellules solaires à couches minces de silicium, nous allons présenter aussi, un rappel des propriétés structurales, optiques et électroniques du silicium amorphe, et expliquer le fonctionnement des cellules solaires à couches minces de silicium.
- **Chapitre III :** dans ce chapitre, nous allons faire une mise en point de la notion de variabilité de limite d'absorption dans une cellule solaire à base des réseaux 2D (carré, triangulaire) et 1D. Ces réseaux permettent de réaliser une fine ingénierie des modes optiques au niveau des cellules solaires
- **Chapitre IV :** ce chapitre est consacré à la méthodologie utilisée pour réaliser la simulation optique qu'est en relation directe avec les fondements physiques des matériaux mentionnés précédemment. Egalement, nous allons simuler l'absorption de la seule couche d'a-Si : H et Si en fonction des paramètres physiques et géométriques à base des cristaux photoniques 1D et 2D structurée et non structurée à couche d'a-Si : H. Une

comparaison entre les deux matériaux et les différentes structures sera aussi présentée. Dans chaque étape de simulation, nous allons extraire les résultats en termes d'absorption optique.

- Nous terminons cette thèse par une conclusion générale qui résume le contexte de notre travail ainsi que des perspectives de recherches futures.

# *Chapitre 1*

## **Généralités sur les cellules photovoltaïques**

### **1. Introduction**

La technologie photovoltaïque permet de produire de l'électricité de manière respectueuse pour l'environnement, en utilisant une source d'énergie quasiment infinie : le soleil. Aujourd'hui, la plupart des cellules solaires commercialisées sont produites en utilisant du silicium monocristallin ou polycristallin. Ces cellules solaires peuvent atteindre des rendements photovoltaïques de l'ordre de 24.7% avec une lumière non concentrée. Toutefois, les inconvénients majeurs sont le coût élevé du matériau et la forte consommation d'énergie au cours de la production.

Les cellules solaires à couches minces de silicium intégrant du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) ou du silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{c-Si:H}$ ) suscitent un intérêt croissant de la part des industriels. Les couches très minces qui constituent les cellules ( $\sim 1\mu\text{m}$  d'épaisseur de silicium contre des centaines de microns pour les cellules solaires basées sur le silicium monocristallin ou polycristallin) permettent une faible consommation de matière.

La technologie des couches minces de silicium offre de nombreuses possibilités de production à la chaîne (modules de 1 m<sup>2</sup> ou plus). En outre, les températures modérées (150 - 300°C) nécessaires à la production des couches minces de silicium induisent une faible consommation d'énergie au cours des processus industriels et offrent la possibilité d'utiliser une grande variété de substrats peu coûteux, comme le verre, l'acier inoxydable ou encore les matières plastiques. Etant donné que les cellules solaires sont très minces, elles peuvent être déposées sur des substrats flexibles, comme des films métalliques ou des feuilles de matière plastique.

Enfin, le fait que les connexions fassent partie inhérente de la conception des modules solaires à couche mince, par opposition à des connexions extérieures dans le cas de cellules mono- ou poly-cristallines, simplifie considérablement le processus industriel. Un désavantage lié à la technologie de silicium amorphe hydrogéné est le rendement photovoltaïque relativement faible et le phénomène de dégradation induit par la lumière qui conduit à une diminution du rendement initial.

Des rendements stabilisés de l'ordre de 4 - 6% sont généralement obtenus pour des modules à jonction simple de silicium amorphe hydrogéné. Le concept des cellules multicouches

(également appelé concept des cellules multi-jonctions) est un concept intéressant qui permet de renforcer la stabilité des cellules à couches minces. Il permet en outre d'améliorer le rendement photovoltaïque. Les cellules multi-jonctions se composent de plusieurs cellules simples déposées les unes sur les autres élaborées sur la base d'alliages de silicium amorphe hydrogéné et/ou de  $\mu\text{-Si:H}$ .

La réussite du dopage du silicium amorphe en 1975 a mené à un intérêt énorme pour ce matériau, et des activités de recherches dans ce domaine autour du monde se sont développées exponentiellement. Dans ces dernières années, un progrès significatif a été réalisé dans l'amélioration du rendement des cellules solaires à base du silicium amorphes et ses alliages hydrogénés tel qu' $\text{a-Si:H}$ ,  $\text{a-SiC:H}$  et  $\text{a-SiGe:H}$ .

Les travaux de recherches associés aux modélisations ainsi qu'aux développements expérimentaux dans ce domaine, ont mené à une augmentation régulière de la production de ces cellules solaires en modules et panneaux basés sur  $\text{a-Si:H}$ . Des centrales capables de produire jusqu'à 10 MW/an ont été installées.

La technologie de silicium amorphe a déjà prouvé sa valeur, aujourd'hui les panneaux d'un pied carré (environ  $929 \text{ cm}^2$ ), composés de tels matériaux, peuvent avoir un rendement " stabilisé " de  $\sim 10\%$ . Le terme rendement " stabilisée " surgit en raison du phénomène désavantageux de la dégradation du matériau  $\text{a-Si}$  induit par la lumière. Cette cause est l'une des limitations les plus graves des cellules solaires de silicium amorphe hydrogéné. La manière de réduire au minimum la dégradation de la cellule solaire de silicium amorphe hydrogéné est de réduire l'épaisseur de la couche intrinsèque du matériau [7].

## 2. Les cellules photovoltaïques

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique une fois exposé à la lumière (photons), produit de l'électricité grâce à l'effet photovoltaïque ; ce dernier étant à l'origine du phénomène de conversion. La tension délivrée par la cellule photovoltaïque est une tension continue et varie en fonction de la lumière incidente. Les cellules photovoltaïques les plus répandues sont constituées de semi-conducteurs, principalement à base de silicium (Si) et plus rarement d'autres semi-conducteurs : sélénure de cuivre et d'indium ( $\text{CuIn}(\text{Se})_2$  ou  $\text{CuInGa}(\text{Se})_2$ ), tellure de cadmium ( $\text{CdTe}$ ), etc. Elles se présentent généralement sous la forme de fines plaques d'une dizaine de centimètres de côté. Les cellules sont souvent réunies dans des modules solaires photovoltaïques ou panneaux solaires, en fonction de la puissance recherchée.

Le fonctionnement de la cellule solaire peut s'expliquer aussi par trois phénomènes importants quasi-simultanés : l'absorption des photons, la production et la collecte des charges électriques photo générées [3].

### 3. Historique de l'effet photovoltaïque

L'effet photovoltaïque réalise la transformation directe d'une énergie électromagnétique (rayonnement solaire) en énergie électrique continue directement utilisable. Il a été découvert par Antoine Becquerel en 1839 qui a mis en évidence l'apparition d'une tension aux bornes de deux électrodes immergées dans une solution électrolytique, lorsque celle-ci était exposée à la lumière naturelle [5,6].

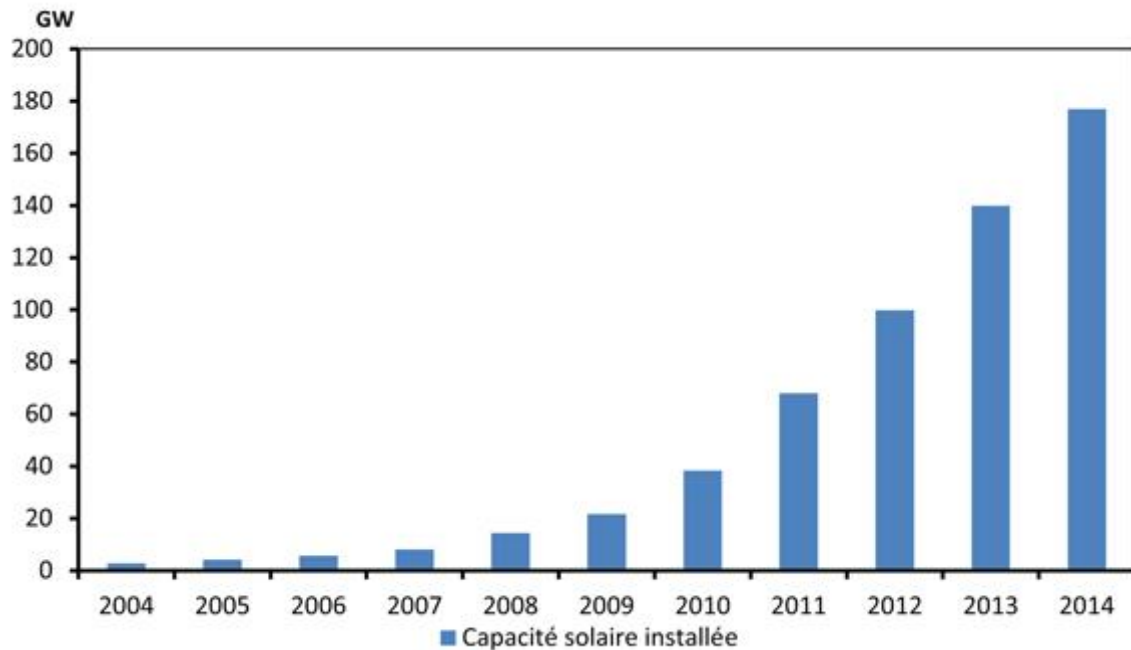
En 1873 Willoughby Smith découvre la photoconductivité du sélénium et par la suite, Werner Von Siemens expose en 1875 devant l'Académie des Sciences de Berlin un article sur l'effet photovoltaïque dans les semi-conducteurs. Sur le même thème, en 1877 W. G. Adams et R. E. Day développent une jonction solide à base de sélénium dont le rendement de conversion était de l'ordre de 1%. Cependant, la première véritable vision de l'énergie photovoltaïque revient à Charles Fritts. Ce dernier en reprenant les travaux d'Adams et Day, il a établi un développement industriel des cellules au sélénium. Fritts pensait pouvoir faire concurrence aux technologies de production électrique naissantes de l'époque.

En 1886, il a écrit que les cellules photovoltaïques utilisent une source d'énergie qui est sans limites, sans coûts et qui continuera à inonder la terre après que nous ayons fini de consommer nos réserves de combustibles fossiles. Le monde scientifique et technique de l'époque, n'ayant pas les connaissances physiques nécessaires pour comprendre l'effet photovoltaïque, a conclu que les travaux de Fritts violaient le principe de conservation d'énergie et les a donc considérés frauduleux. Il a fallu attendre l'explication physique de l'effet photoélectrique par Einstein en 1904 et la mécanique quantique pour que l'effet photovoltaïque devienne un phénomène reconnu par la communauté scientifique.

En 1958, une cellule avec un rendement de 9% est mise au point et, par la suite les premiers satellites alimentés par des cellules solaires fûts envoyés dans l'espace. Le rendement du silicium monocristallin atteint 10% à la fin des années 60, puis 14% en 1973. Cette même année la première maison alimentée par des cellules photovoltaïques est construite à l'Université de Delaware. Dix ans plus tard, la première voiture alimentée par énergie photovoltaïque parcourt une distance de 4000 kilomètres en Australie.

Depuis les années 1990, et pour les raisons évoquées auparavant, l'énergie photovoltaïque a suscité un intérêt grandissant et de nombreuses avancées technologiques ont été

réalisées jusqu'à présent à travers plusieurs filières technologiques. La production d'électricité d'origine photovoltaïque s'est même accrue de manière exponentielle depuis 2001 et les projections sont assez optimistes pour les années à venir comme le montre la figure 1.1 [3].



**Fig. 1.1. Évolution de la capacité photovoltaïque installée cumulative dans les pays de l'Organisation de coopération et de développement économiques de 2004 à 2014 [7].**

Le développement de l'énergie photovoltaïque passe obligatoirement par une recherche accentuée pour résoudre cette énigme. Trois axes essentiels doivent être optimisés séparément par un choix déterminant : (i) le matériau, (ii) la technique de croissance et (iii) la structure. En considérant le coût de fabrication, la cellule doit être conçue au moyen de couches minces assurant un gain énorme de matière, ce qui revient à choisir la filière des matériaux photovoltaïques à grand pouvoir d'absorption. Par la suite, il est nécessaire de s'intéresser aux développements des techniques de croissance de couches minces à faible coût qui offrent de grandes potentialités. Enfin, il faut réaliser des structures photovoltaïques simples, en grandes surfaces et sans matériau polluant.

#### 4. Générations des cellules photovoltaïques

L'objectif actuel pour les cellules solaires photovoltaïques est d'accéder à la « parité réseau », c'est-à-dire au point à partir duquel l'électricité délivrée par un module photovoltaïque a un prix au kilowattheure (kWh) comparable à celui fourni par le réseau.

C'est une condition nécessaire pour que leur installation ne soit plus tributaire des subventions des gouvernements et qu'elles puissent s'imposer de manière définitive sur le

marché des énergies. Si l'on considère ici le module photovoltaïque, deux leviers permettent d'abaisser le rapport prix/Watt-crête les condition standard dans et ainsi de converger vers la parité réseau : d'une part la diminution du coût de fabrication des cellules et d'autre part l'augmentation de leur rendement de conversion. Pour répondre simultanément à ces deux points, les cellules solaires ont évolué en plusieurs générations que l'on peut définir comme suit :

#### **4.1. Cellules de la première génération**

Les cellules de cette génération sont basées sur l'utilisation de wafers en Silicium cristallin (mono ou multi-cristallin, c'est-à-dire avec des tailles de grains supérieures au millimètre [11]) ayant des épaisseurs allant de 180 à 200  $\mu\text{m}$  [12]. Elles jouissent de rendements de conversion relativement élevés grâce à l'absorption quasi totale de la lumière pénétrant dans la cellule et à la bonne qualité électronique des matériaux actifs. Le coût en matériau constitue leur limitation principale car celui-ci compte pour environ 30% du prix final du module photovoltaïque [13].

#### **4.2. Cellules de la deuxième génération**

Cette génération se distingue de la précédente par l'utilisation d'absorbeurs en couches minces dont les épaisseurs sont de l'ordre de quelques centaines de nanomètres, voire moins. Cette diminution des épaisseurs combine plusieurs avantages. Tout d'abord, elle permet une réduction importante du coût de la cellule en diminuant la quantité de matériau nécessaire et en déposant les couches sur de plus larges surfaces (augmentation de la surface d'un facteur 100 en passant du wafer de silicium à une surface ayant la taille d'un module [14]) à partir de substrats bas-coûts en verre, en aciers inoxydables ou encore en plastique.

Le fait que certains matériaux puissent être déposés à basse température (par exemple à environ 200°C pour le silicium amorphe hydrogéné) permet en effet d'utiliser des substrats souples ce qui facilite l'intégration de ces cellules dans les bâtiments, par exemple. Du point de vue des performances électriques, l'amincissement de la couche active provoque une augmentation de  $V_{co}$  (tension circuit ouvert) en diminuant le courant de saturation  $I_0$  de la diode qui est la base de la structure d'une cellule solaire et une réduction de la recombinaison des porteurs de charges (augmentation de la probabilité de collection) [12]. Cela autorise également l'utilisation de Semiconducteurs pour lesquels la longueur de diffusion des porteurs de charges minoritaires est faible, typiquement les Semiconducteurs organiques ou le silicium poly-cristallin (taille des grains entre 1  $\mu\text{m}$  et 1mm).

Les autres matériaux utilisés pour la fabrication de cellules solaires en couches minces sont le silicium amorphe hydrogéné, qui a longtemps occupé le premier plan, le CIGS (pour « Cuivre Indium Gallium Sélénium »), qui possède le record de rendement des cellules en couches minces avec rendement d'environ 20,3% et enfin le CdTe (tellure de cadmium). Ce dernier, dont la part de marché a fortement augmentée depuis quelques années, doit néanmoins faire face à la réticence du public vis-à-vis de la toxicité du cadmium et à la disponibilité en tellure qui pourrait être critique [11].

Enfin, les limitations associées à cette technologie couches minces sont la vitesse de dépôt modérée des couches et surtout l'absorption de la lumière qui est particulièrement faible dans certains cas [15]. Par exemple, une couche mince à base de CdTe(tellure de cadmium)peut absorber toute la lumière sur l'ensemble de son spectre utile avec une épaisseur d'environ  $2\mu\text{m}$  [11]. Cette épaisseur s'élèverait à plus de  $10\mu\text{m}$  pour le silicium amorphe hydrogénéà cause de son coefficient d'absorption plus faible. De ce fait, si on restreint l'épaisseur des couches (ultra)minces à quelques centaines de nanomètres afin d'améliorer le rendement de collection des porteurs photo générés, les matériaux actifs peuvent être quasiment transparents sur une large région spectrale.

### 4.3. Cellules de la troisième génération

Ce terme désigne l'ensemble des cellules qui utilisent des concepts permettant d'amener le rendement de conversion au-delà de la limite de Shockley-Queisser afin de l'approcher de la limite thermodynamique qui est d'environ 85%. Les concepts mis en jeu incluent par exemple les cellules tandem, ou encore les cellules à porteurs chauds (pour une explication détaillée de ces concepts, voir [14]).

Un enjeu important consiste alors à intégrer ces différentes stratégies dans des cellules en couches minces pour combiner fort rendement de conversion et coût modéré. Si plusieurs études ont démontré le potentiel de ces concepts, leur transfert dans l'industrie PV ne semble pas encore à l'ordre du jour. Comme vu précédemment, le passage de la 1ère à la 2ème génération a permis une réduction du coût de la cellule ramené à sa surface. Néanmoins, les cellules en couches minces souffrent de rendements de conversion limités, ce qui est essentiellement imputable à leur faible absorption. Cela justifie pleinement les études actuelles qui visent à augmenter l'absorption dans les cellules en couches ultraminesces en introduisant des concepts issus de la nano-photonique. C'est sur ce plan que se situe le travail présenté dans ce manuscrit. L'objectif consiste à la fois de réduire l'écart des rendements entre la première et la deuxième génération

mais aussi à développer des stratégies qui pourront améliorer la gestion de la lumière dans les cellules de troisième génération.

## 5. Fonctionnement d'une cellule solaire photovoltaïque

### 5.1. Propriétés de l'éclairement solaire à la surface terrestre

La source lumineuse exploitée ici est le soleil dont le spectre d'irradiance est comparable à celui d'un corps noir à 5776K avec un pic d'émission principal autour de  $\lambda=500\text{nm}$ . La traversée de l'atmosphère terrestre conduit à la fois à une baisse globale de l'irradiance du fait de la présence de poussières et autres aérosols mais modifie également ce spectre en créant des bandes plus ou moins larges caractérisées par une faible irradiance. Ces dernières sont dues à l'absorption de l'énergie incidente par diverses molécules telles que l'ozone ( $\text{O}_3$ , responsable de la faible irradiance en-dessous de 300nm), l'oxygène ou encore la vapeur d'eau et le dioxyde de carbone dans le spectre infra-rouge (voir figure 1.2).

On comprend donc que le spectre d'irradiance obtenu à la surface de la terre est fonction de la composition de l'atmosphère, de la saison et du lieu d'observation. De ce fait, on utilise généralement des spectres « standards » obtenus sous des conditions précises et qui permettent une comparaison directe des performances des différentes cellules.

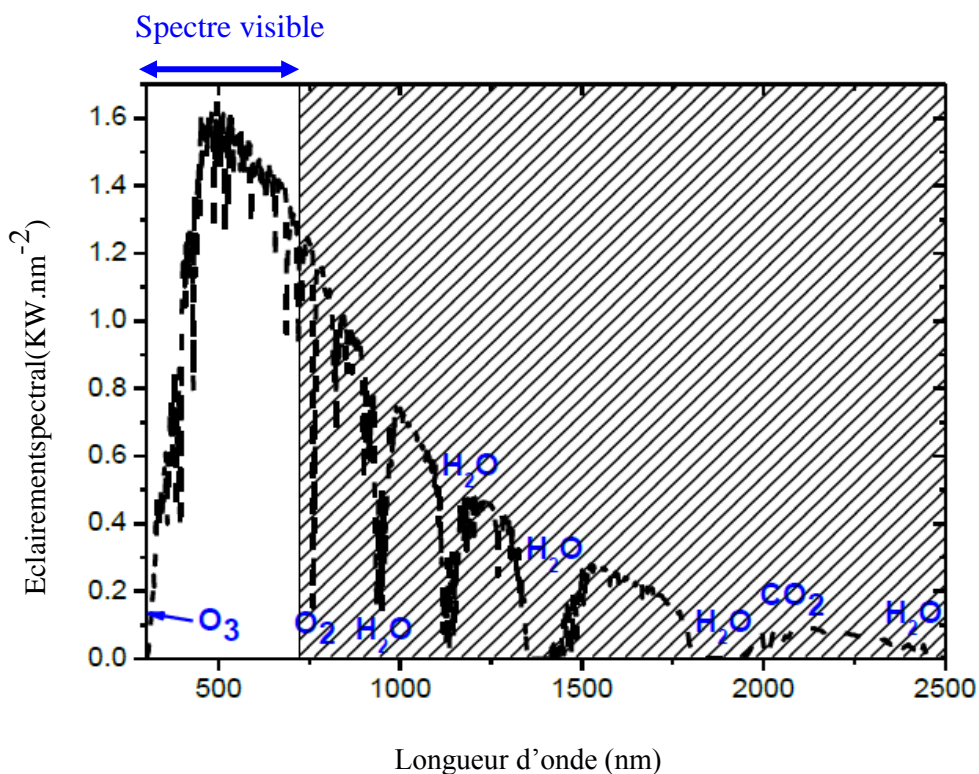


Fig. 1.2. Répartition spectrale de l'éclairement solaire dans les conditions AM1.5G.

Dans notre étude, nous utiliserons le spectre **AM1.5G** ayant un éclairage intégré cumulé d'environ  $1\text{kW/m}^2$  et dont la signification est la suivante : **AM**, pour « Air Mass », est un coefficient qui prend en compte le chemin optique de la lumière à travers l'atmosphère normalisé par le chemin optique le plus court (c'est-à-dire lorsque la lumière traverse verticalement l'atmosphère). Il est défini par  $1/\cos\theta$ , où  $\theta$  est l'angle formé entre la position du soleil et sa position au zénith. Ainsi, « **AM1.5** » correspond à un angle  $\theta = 48,2^\circ$ . Cet angle est approprié pour décrire la position moyenne du soleil sur une année et sous nos latitudes. Finalement, **G**, pour « Global », signifie que l'on considère simultanément les rayonnements directs et diffus [2].

La zone non hachurée de la Figure 1.2, correspond à la gamme spectrale utile pour une cellule solaire à base de silicium amorphe hydrogéné. Elle s'étend jusqu'à environ  $\lambda = 720\text{nm}$  (gap du silicium amorphe hydrogéné). Les molécules rapportées sur cette figure sont à l'origine des bandes d'absorption observées [2].

## 5.2. Principe de la conversion photovoltaïque

L'effet photovoltaïque utilisé par les cellules solaires permet de convertir directement l'énergie lumineuse issue des rayons solaires en électricité par le biais de la production et du transport de charges électriques positives et négatives dans un matériau semi-conducteur.

Ce matériau comporte deux parties, une présentant un excès d'électrons et l'autre un déficit en électrons, dites respectivement dopée de type N et dopée de type P. Lorsque la première est mise en contact avec la seconde, les électrons en excès dans le matériau N diffusent dans le matériau P. La zone initialement dopée N devient chargée positivement, et la zone initialement dopée P chargée négativement. La lumière qui parvient à la surface d'une cellule solaire et pénètre dans le matériau semi-conducteur est susceptible d'y être absorbée si son énergie  $h\nu$  est supérieure à l'énergie de bande interdite (ou « gap ») notée  $E_g$  sur la Figure 1.3. Dans le cas du silicium amorphe hydrogéné, cela correspond à la zone non hachurée sur la Figure 1.2.

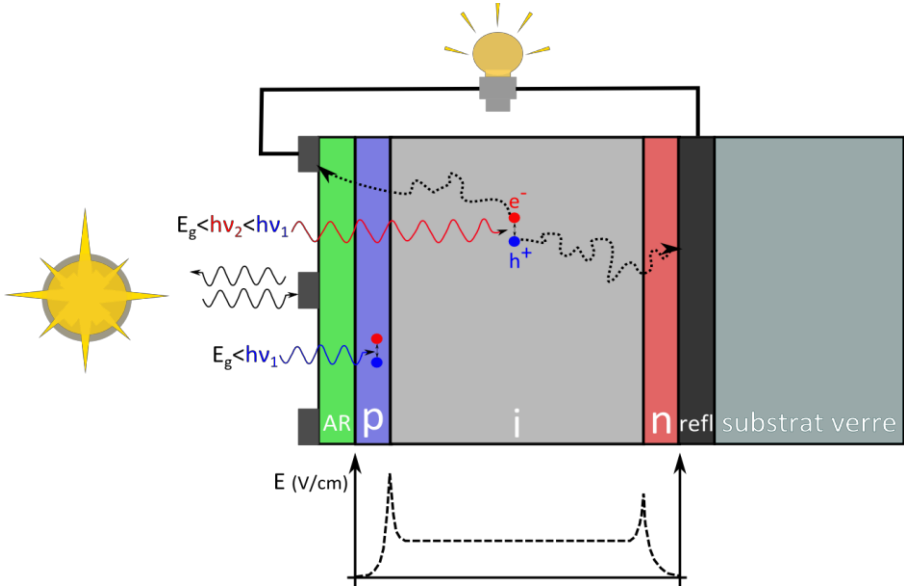


Fig. 1.3. Principe de la conversion photovoltaïque [2].

### 5.3. Absorption optique

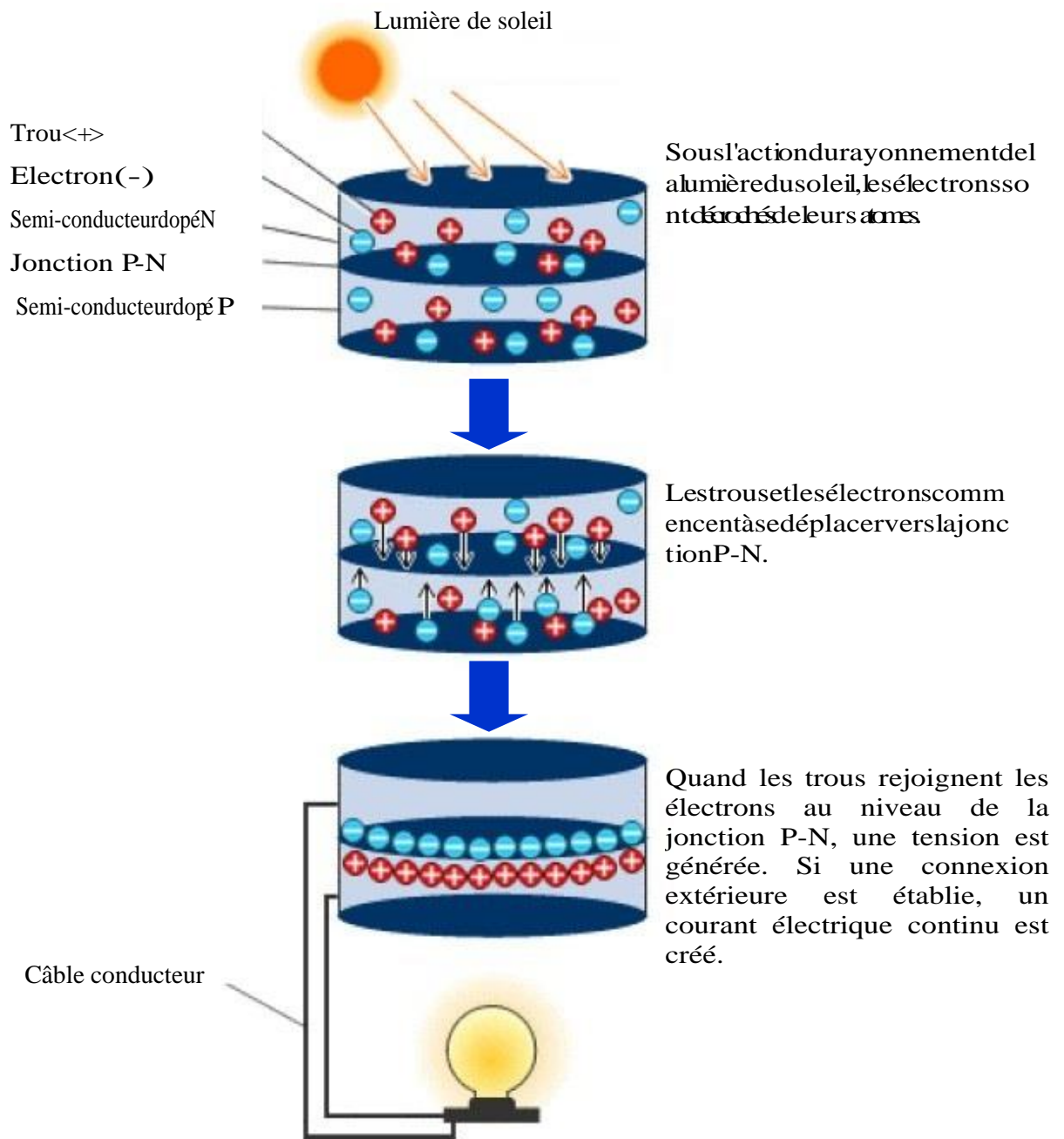
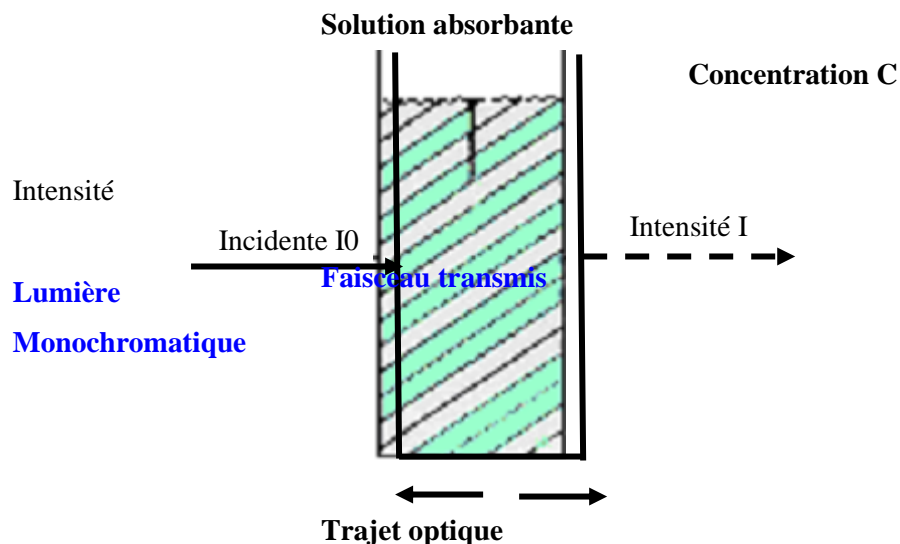


Fig. 1.4. L'effet photovoltaïque.

L'absorption des photons est la première étape nécessaire au processus de conversion photovoltaïque. Dans le cas général, lorsqu'un matériau est exposé à la lumière du soleil, les atomes exposés au rayonnement sont "bombardés" par les photons constituant la lumière ; sous l'action de ce bombardement, les électrons des couches électroniques supérieures (appelés électrons des couches de valence) ont tendance à être arrachés de leurs orbites. En revenant à leurs états initiaux, leurs agitations se traduisent par un échauffement du matériau. L'énergie

cinétique des photons est transformée en énergie thermique. Par contre, dans les cellules photovoltaïques, une partie des électrons ne reviennent pas à leurs états initiaux mais créent une tension électrique continue faible. Une partie de l'énergie cinétique des photons est ainsi directement transformée en énergie électrique : c'est l'effet photovoltaïque (figure 1.4 au-dessus).

D'un autre côté et afin de comprendre les enjeux de la gestion de la lumière au sein des cellules solaires, prenons l'exemple d'une couche absorbante isolée d'épaisseur finie. Lorsqu'un faisceau lumineux est dirigé vers une telle couche, trois mécanismes peuvent intervenir : la lumière peut être réfléchie, transmise ou absorbée. Pour une source lumineuse donnée, l'importance relative de ces trois phénomènes dépend à la fois des propriétés optiques de la couche absorbante, de la position de la source, de l'état de polarisation de la lumière incidente et de la longueur d'onde considérée si le matériau est dispersif (Figure 1.5).



**Fig. 1.5. Une lumière monochromatique traversant une solution absorbante de concentration  $C$  contenue dans une cuve d'épaisseur  $l$ .**

Dans tous les cas, le principe de conservation de l'énergie doit être respecté. Ainsi, l'absorption  $A$  (ou la fraction de photons absorbés) est limitée à 1 et sa valeur dépend à la fois des pertes optiques par réflexion et par transmission :

$$A(\lambda) = 1 - R(\lambda) - T(\lambda) \quad (1.1)$$

Où  $R(\lambda)$  et  $T(\lambda)$  représentent la fraction de photons réfléchis et transmis à la longueur d'onde  $\lambda$ .

Soit une lumière monochromatique traversant une solution absorbante de concentration  $C$  contenue dans une cuve d'épaisseur  $l$  (Figure 1.5). Une partie de ce rayonnement sera

absorbée par l'échantillon et une partie sera transmise. Bouguer, Lambert et Beer ont étudié les relations qui existent entre  $I_0$  (l'intensité incidente) et  $I$  (l'intensité transmise).

L'intensité d'une lumière monochromatique traversant un milieu où elle est absorbée décroît de façon exponentielle, et cette intensité a la forme :

$$I = I_0 e^{-kIC} \quad (1.2)$$

- $I_0$  : est l'intensité de la lumière incidente
- $I$  : est l'intensité après passage à travers la cuve contenant la solution (intensité transmise)
- $l$  : est la distance traversée par la lumière (épaisseur de la cuve) (en cm)
- $C$  : est la concentration des espèces absorbantes
- $K$  : est une constante caractéristique de l'échantillon.

En posant :  $I/I_0 = T$ .

L'équation précédente peut se réécrire :

$$\log(I_0/I) = kIC / 2.3 = \varepsilon lC \quad (1.3)$$

- $\log(I_0/I)$  : est appelé absorbance ( $A$ )
- $I/I_0 = T$  : est la transmission
- $T$  : est la transmittance

$\varepsilon$  est le coefficient d'extinction molaire (en  $L \cdot mol^{-1} \cdot cm^{-1}$ ); c'est une caractéristique de la substance étudiée à une longueur d'onde donnée. On obtient alors la relation connue sous le nom de loi de Beer-Lambert [16].

$$A = -\log(T) = \varepsilon lC \quad (1.4)$$

#### 5.4. Collecte des porteurs

Les porteurs créés par les photons doivent être collectés et envoyés dans le circuit extérieur. Mais tous ces porteurs n'arrivent pas dans le circuit extérieur, certains sont piégés avant d'y arriver. Les principales causes de disparition des porteurs libres sont les impuretés, les recombinaisons dues aux états d'interface et les courbures de bandes non appropriées.

Les états d'interfaces sont constitués par l'ensemble des défauts de la structure du matériau. Ces états d'interface jouent un rôle très important, ils introduisent des niveaux d'énergie permis dans le gap, donc ils piègent les porteurs libres et par conséquent apportent une

modification des populations dans les bandes permises.

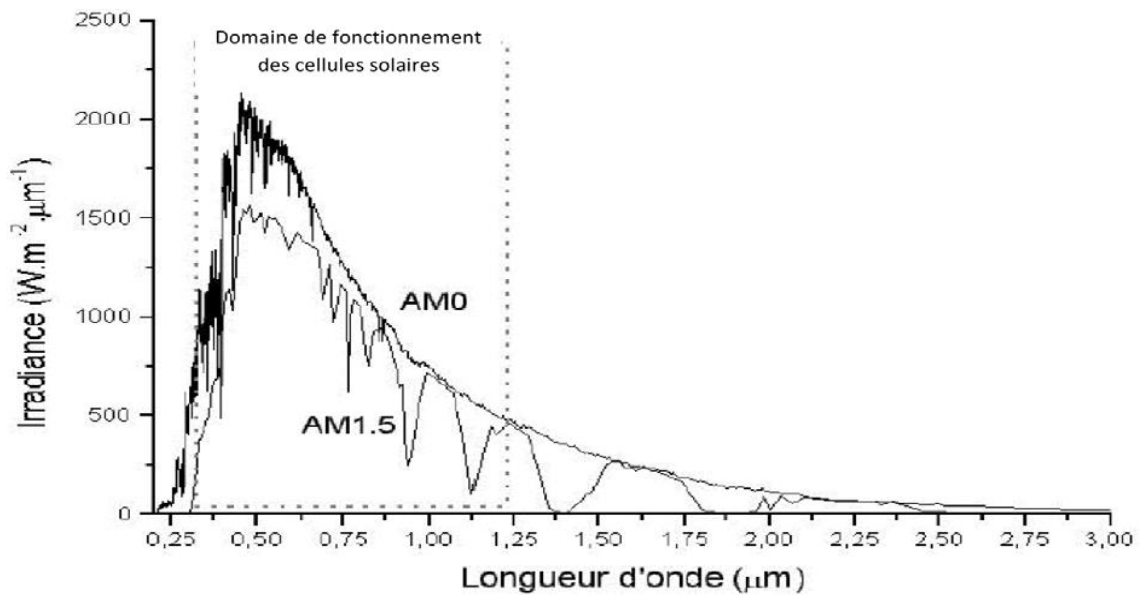


Fig. 1.6. Spectre solaire hors atmosphère et au niveau de la mer.

Une cellule photovoltaïque est caractérisée par une résistance série  $R_s$  et une résistance shunt  $R_p$ . La résistance série est formée par la résistance électrique du semi-conducteur dans la zone extérieure à la zone de charge d'espace et par la résistance de contact entre le semi-conducteur et le métal qui assure le contact électrique avec le circuit extérieur. La résistance shunt  $R_p$  est due à des impuretés ou défauts qui court-circuitent le courant entre les deux électrodes. On annule l'effet de la résistance shunt en formant une couche tampon, c'est-à-dire une couche isolante très mince ( $<500 \text{ \AA}$ ) entre les régions P et N de la jonction, ce qui empêche les courts-circuits et, de plus, augmente la largeur de la zone de charge d'espace, d'où une augmentation du nombre de porteurs libres créés et du photocourant de la zone de charge d'espace. Le piégeage des porteurs libre au niveau des interfaces se traduit par l'augmentation de la résistance série  $R_s$  et la diminution de la résistance shunt  $R_p$ .

Dans le cas idéal, on suppose que la résistance série  $R_s$  est nulle et que la résistance shunt  $R_p$  est infinie. Dans le cas réel, le rendement est diminué par l'augmentation de  $R_s$  et la diminution de  $R_p$ . Le rendement se calcule à partir de la relation :

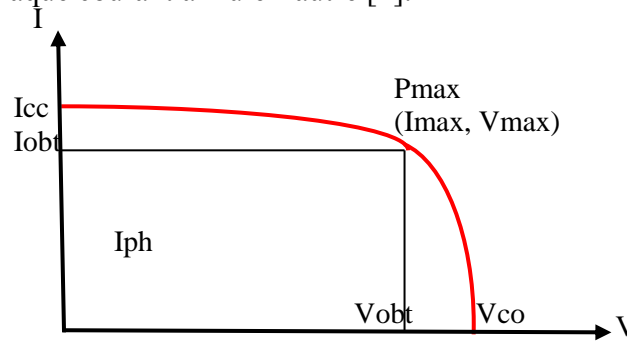
$$\eta = \frac{P_{\max}}{P_{\text{incd}}} = \frac{V_{co} I_{cc} FF}{P_{\text{incd}}} \quad (1.5)$$

Où  $V_{co}$  est la tension en circuit-ouvert,  $I_{cc}$  est le courant de court-circuit, où les valeurs de

tension  $V_{obt}$  et du courant  $I_{obt}$  appelées également tension et courant maximums respectivement,  $P_{max}$  est la puissance maximale,  $P_{incid}$  est la puissance incidente des photons et FF est le facteur de forme. Ce dernier est donné par :

$$FF = I_{obt} V_{obt} / I_{cc} V_{co} \quad (1.6)$$

La caractéristique  $I(V)$  de la cellule à l'obscurité et sous illumination est présentée sur la Figure 1.7. On peut déduire les ordres de grandeur de la résistance série et de la résistance shunt.  $R_s$  est l'inverse de la pente de la partie linéaire passant par  $V_{co}$  et  $R_p$  est l'inverse de la pente de la partie linéaire passant par  $I_{cc}$ . Le phénomène de transport des porteurs à travers une jonction PN est assuré par deux courants : Un courant de dérive qui doit son origine au champ électrique qui règne dans la zone de charge d'espace et le courant de diffusion, de sens contraire, qui provient du gradient de concentration des porteurs tout le long de la jonction. Sans aucune perturbation ou excitation extérieure, chaque courant annule l'autre [2].



**Fig. 1.7. Caractéristique rectangulaire d'une cellule à l'obscurité et sous illumination.**

Sous une polarisation extérieure, la caractéristique  $I(V)$  de la jonction est décrite par une solution analytique donnée par Shockley en 1949, connue comme étant l'équation de photogénérique de la diode idéale :

$$J(V) = J_{ph} - J_{sat} \left[ \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (1.7)$$

$J_{sat}$  désigne la densité du courant de saturation qui dépend directement des propriétés des matériaux en questions, c'est-à-dire, des concentrations de porteurs minoritaires  $n_p$  et  $p_n$  et des coefficients de diffusion des électrons ( $D_n$ ) et des trous ( $D_p$ ).

$$J_{sat} = \left[ (q D_p / L_p) p_n + (q D_n / L_n) n_p \right] \quad (1.8)$$

Dans le cas d'une jonction idéale, la résistance série  $R_s$  et la résistance shunt  $R_p$  ne sont pas

prises en considération. Dans le cas réel, l'expression de densité de courant s'écrit :

$$J(V) = J_{ph} - J_{sat}[q(V + R_s I) - 1] - (V + R_s I)R_p \quad (1.9)$$

### 5.5. Schéma électrique équivalent d'une cellule réelle

La Figure 1.8, présente le circuit électrique équivalent d'une cellule réelle. L'analogie entre le fonctionnement de la cellule photovoltaïque sous éclairage et celui d'un générateur de courant, produisant un courant  $I_{ph}$ , auquel se soustrait le courant de la diode en polarisation directe, n'est qu'une représentation simplifiée du fonctionnement réel de la cellule.

En plus de la diode réelle, on retrouve bien la résistance série  $R_s$ , qui prend en compte la conduction à travers toute la cellule, et la résistance  $R_p$ , qui reflète les divers chemins conducteurs à travers la cellule tels que les chemins de court-circuit qu'on appelle shunts [3].

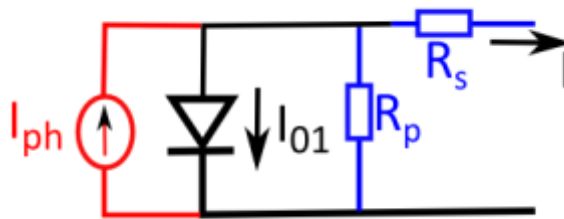


Fig. 1.8. Schéma électrique équivalent d'une cellule réelle.

## 6. Les différents types de cellules solaires

Sur le plan technologique ; plusieurs types de cellules solaires sont distingués :

### 6.1. Les cellules solaires au silicium

Le silicium est le matériau de base des photopiles. C'est le deuxième élément en termes d'abondance sur notre planète (après l'oxygène), mais il n'existe pas à l'état pur dans la nature (le sable et le quartz en contiennent). Il existe trois catégories principales de photopiles au silicium :

- Les cellules monocristallines

Elles sont considérées comme la première génération de photopile, elles ont un taux de rendement excellent [1C] (12 – 16% et jusqu'à 24 % en laboratoire) mais leur méthode de production est laborieuse et délicate, et donc, très chère ; il faut une grande quantité d'énergie

pour obtenir du cristal pur.

- Les cellules poly-cristallines

Elles ont un coût de production moins élevé et un rendement qui varie entre 11 – 13% (autour de 18% en laboratoire) [17].

- Les cellules amorphes

Leur coût de production bien plus bas, mais malheureusement aussi, ont un rendement plus bas qui varie entre 8 –10% (autour de 13% en laboratoire pour une cellule non dégradée). Cette technologie permet d'utiliser des couches très minces de silicium de 0.3 à 1.0 nanomètre seulement (500 nanomètres pour les deux autres types). On peut donc appliquer de très fines couches de silicium amorphe sur des vitres, du métal, voir du plastique souple par un procédé de vaporisation sous vide. C'est le silicium amorphe que l'on trouve le plus souvent dans les petits produits de consommation comme les calculatrices, les montres,... Les panneaux amorphes ont besoin d'environ deux fois plus de surface (comparé aux panneaux cristallin) pour produire la même quantité d'électricité, et semblent se dégrader plus rapidement, mais ils ont l'avantage de mieux réagir à la lumière diffuse et à la lumière fluorescente et d'être plus performants à des températures élevées [17].

## 6.2. Les cellules solaires à couche mince

On distingue plusieurs technologies parmi lesquelles :

- Cuivre-indium-di sélénium (CIS) ou cuivre-indium-gallium-sélénium (CIGS): leur rendement est égal à 11% (17 .1% au laboratoire). 99% d'absorption, dégradation minime, mais fabrication très délicate [17].
- Cadmium-tellure (CdTe) : rendement 10.5% (15.8% en laboratoire). Haute absorption, mais n'oublions pas que le cadmium est très toxique [17].
- Gallium Arsenic (GaAs) : leur rendement dépasse les 25% en laboratoire. Ces cellules, dont le prix est très élevé, sont très appréciées dans l'aérospatiale.

Les trois principaux avantages des cellules solaires à couche mince sont :

- Une absorption très élevée. Ces cellules ne sont pas épaisses, ce qui traduit un gain en volume et en masse pour les sondes sur lesquelles le moindre gramme superflu est traqué.
- leur puissance est, par rapport aux cellules simples au silicium, peu affectée par les augmentations de température que les sondes peuvent rencontrer.

### 6.2.1. La structure substrat classique

La structure de la cellule solaire classique à base d'absorbeur  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  s'appelle aussi « la structure standard ». Comme le montre la Figure 1.9, la structure substrat est composée de :

- Une électrode métallique arrière en Molybdène déposée sur substrat de verre.
- Une couche absorbante  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  dont l'épaisseur peut varier de 1 à 3  $\mu\text{m}$ .
- Une couche tampon ( $\text{CdS}$ ,  $\text{ZnO}$ ) d'épaisseur de 10 à 100 nm chacune, assurant respectivement la jonction et l'absence de courts circuit.
- Une fenêtre optique de  $\text{ZnO}$  dopé aluminium ( $\text{ZnO:Al}$ ) qui doit combiner deux propriétés essentielles, à savoir la conductivité électrique et la transparence optique.
- Une grille métallique avant 'aluminium-nickel' nécessaire pour la collecte de courant.

Outre que les électrodes métalliques (contact ohmique inférieur (Molybdène) et contact ohmique supérieur (Ni/Al)), la cellule photovoltaïque est constituée principalement de trois éléments : une couche absorbante ( $\text{p-Cu(In,Ga)Se}_2$ ), une couche tampon ( $\text{n-CdS}$ ,  $\text{i-ZnO}$ ) et une fenêtre optique  $\text{ZnO}$  dopé aluminium ( $\text{ZnO:Al}$ ).

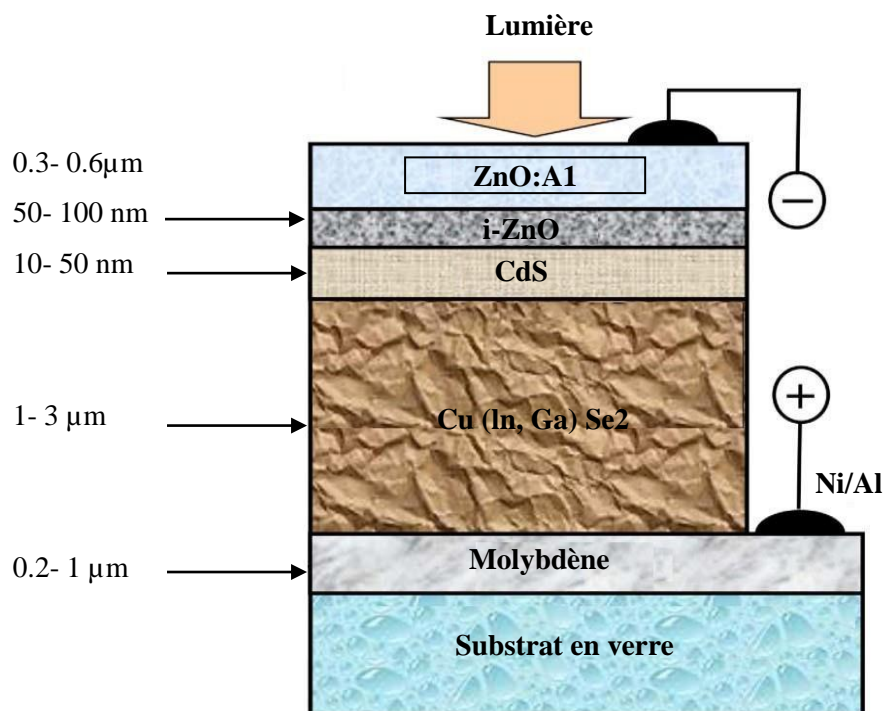


Fig. 1.9. Structure de la cellule classique à base d'absorbeur  $\text{Cu(In,Ga)Se}_2$  [3].

#### a) Couche absorbante

La couche absorbante de type P possède un fort coefficient d'absorption de l'ordre de  $10^5$

$5 \text{ cm}^{-1}$  dans le domaine du visible. La bande interdite gap est par conséquent direct mais avec une valeur optimale de 1,5 eV. Sa conductivité doit être de l'ordre de  $1 \text{ à } 10^{-2} (\Omega.\text{cm})^{-1}$ .

### ***b) Couche tampon (buffer)***

La couche tampon est située entre la couche absorbante et la fenêtre optique. Si un contact couche absorbante/fenêtre optique est directement réalisé, une jonction photovoltaïque peut exister. En revanche, son rendement sera limité par l'inadaptation des bandes interdites et les courants de fuite dus à la présence de zones désordonnées aux joints de grains. De ce fait, il est préférable d'introduire une fine couche, dite couche tampon, entre ces deux composés afin d'optimiser les performances de la cellule. Cette couche doit avoir les propriétés suivantes :

- Une bande interdite intermédiaire permettant une transition "souple" entre celle de l'absorbeur et de la fenêtre optique dont la valeur est comprise entre 2,4 et 3,2 eV.
- Une conductivité de type N pour former la jonction avec la couche absorbante. De plus, pour éviter les effets de fuites de courant, sa conductivité doit être plus faible que celle de la couche absorbante de l'ordre de  $10^{-3} (\Omega.\text{cm})^{-1}$
- Elle doit être morphologiquement très homogène et compacte pour éviter tout effet de court-circuit au niveau des joints de grains de la couche absorbante.

### ***c) Fenêtre optique***

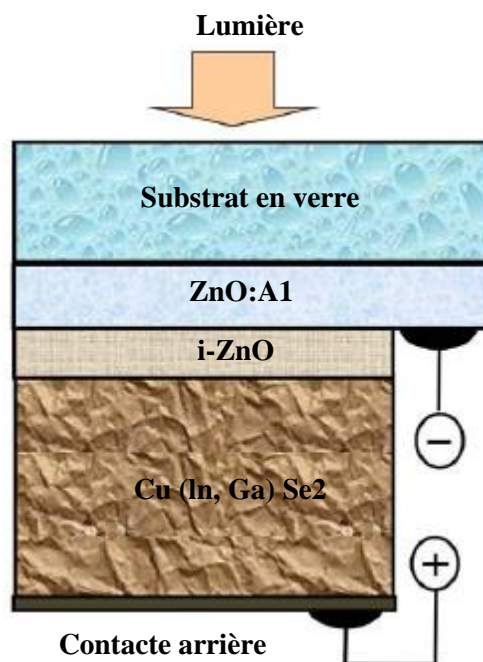
La fenêtre optique doit être simultanément transparente et conductrice dans le domaine du spectre solaire, la transmission des couches doit être supérieure à 80 % et la conductivité supérieure à  $10^4 (\Omega.\text{cm})^{-1}$ .

En couche mince, de telles propriétés sont obtenues en utilisant des composés appartenant à la famille des oxydes transparents conducteurs (OTC) dont les plus usuelles sont :  $\text{SnO}_2$ ,  $\text{SnO}_2:\text{F}$ ,  $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$  (ITO) et  $\text{ZnO}:\text{Al}$  (ZAO). Leur transparence est liée à la valeur de leur bande interdite tandis que leurs propriétés électriques dépendent de la composition des couches et d'un éventuel dopage. Généralement, on dépose une première couche non dopée de ZnO puis une deuxième couche soit du ZnO soit de l'ITO (indium tin oxyde) La couche ZnO (non-conductrice) peut être évitée si l'on dépose une couche tampon plus épaisse [3].

### 6.2.2. Structure superstrat

Actuellement les recherches portent plus particulièrement sur la cellule photovoltaïque en couches minces à base de CIGS pour le développement futur de la structure de tels capteurs photovoltaïques plus performants. L'originalité des recherches est basée sur la réalisation d'une cellule solaire à base de CIGS dans la configuration dite "superstrat" (voir le schéma de la Figure 1.9) par opposition à la cellule substrat classique. En effet jusqu'à présent les rendements élevés, comme mentionné précédemment, ont été obtenus sur des cellules standards nécessitant l'utilisation d'une couche tampon intermédiaire contenant du cadmium, élément maléfique pour l'environnement. Le rendement de conversion affiché actuellement en laboratoire pour une cellule superstrat classique est de 12.8 %.

La cellule dans la configuration superstrat est constituée des couches semi conductrices suivantes : Substrat de verre (SLG)/ couche oxyde conductrice et transparente (OTC)/couche tampon (i-ZnO) /absorbeur CIGS/contact arrière [3].



**Fig. 1.10. Structure superstrat de la cellule solaire Verre/ZnO : Al/i-ZnO/Cu (In, Ga) Se<sub>2</sub>/Ag en couches minces [3].**

### 6.2.3. Cellule tandem

La structure tandem à base  $\text{CuInSe}_2$  est formée par plusieurs photopiles, dont généralement les gaps sont décroissants vers le substrat. Ainsi, en combinant la cellule solaire petit gap ( $E_g \approx 1,1 \text{ eV}$ ) à base de  $\text{CuInSe}_2$  (configuration classique) et la cellule grand gap ( $E_g \approx$

1,7 eV) à base  $\text{CuGaSe}_2$ ) empilées (Figure 1.11) le rendement théorique qui on pourrait approcher est de 36 %.

Le gap élevé de  $\text{CuGaSe}_2$  permet d'augmenter la tension en circuit-ouvert en minimisant la densité de courant ce qui réduit les pertes dans les modules photovoltaïques [3].

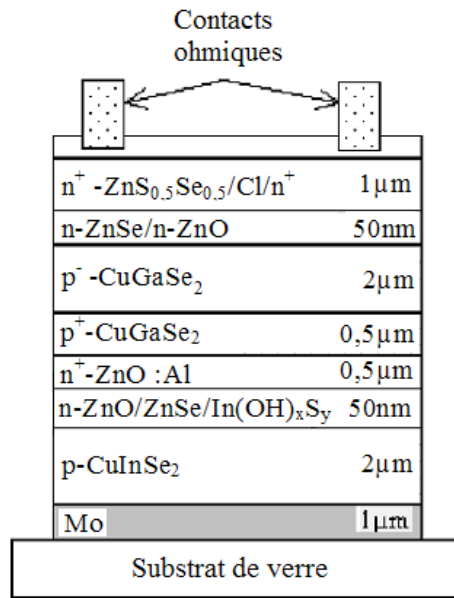


Fig. 1.11. Cellule tandem à base de  $\text{CuInSe}_2$  et  $\text{CuGaSe}_2$  [3].

### 6.3. Les Cellules photovoltaïques organiques

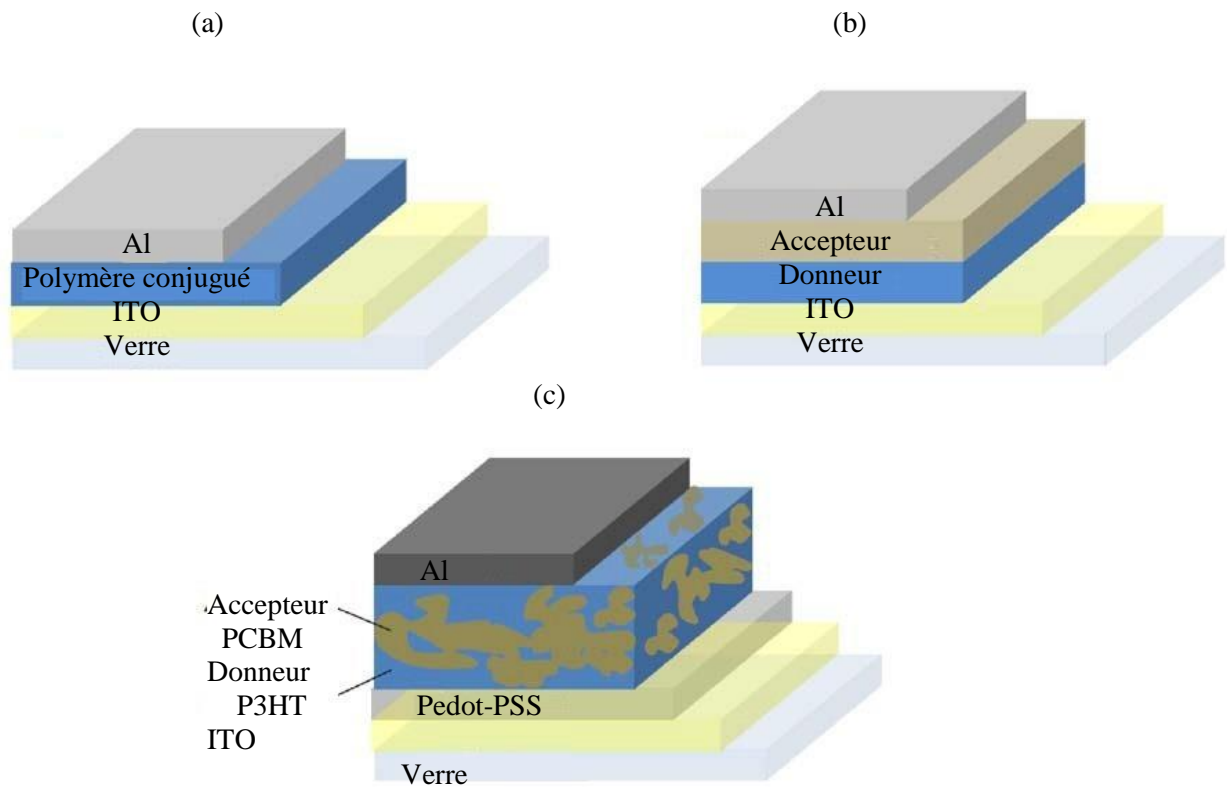
Le solaire organique est considéré comme une nouvelle technologie basée sur les colorants et leurs propriétés physiques et en particulier optiques[17].

#### 6.3.1. Cellules photovoltaïques organique

Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable. En effet, les cellules organiques peuvent être mises en forme facilement, avec des techniques issues de l'industrie. Face à la technologie utilisant les matériaux inorganiques, les cellules solaires à base de composés organiques connaissent un développement considérable.

En effet, les cellules organiques peuvent être mises en forme facilement, avec des techniques issues de l'industrie de la microélectronique, afin de fabriquer des cellules à différentes structures (figure 1-12). Les plus souvent il existe la structure monocouche (jonction

Schottky) et la structure bicouche (hétérojonction PN).



**Fig. 1.12. Structure d'une cellule de type Schottky (a), d'une cellule à hétérojonction PN (b) et d'une cellule à hétérojonction en volume (c) [3].**

Les structures monocouches sont formées d'un polymère conjugué unique déposé entre deux électrodes (métal ou ITO : Oxyde de l'indium dopé à l'étain (Indium Tin Oxyde).) (Figure 1-11(a)), tandis que la structure bicouche est composée de deux matériaux de natures différentes (donneur et accepteur d'électrons) mis en contact entre deux électrodes (figure 1-11 (b)). De plus, les quantités de matériaux utilisées sont relativement faibles, les films ayant des épaisseurs de 100 nm. L'ingénierie moléculaire permet en outre d'adapter les valeurs de la bande interdite et des niveaux d'énergie. Les cellules organiques peuvent être de plusieurs types [3].

### 6.3.2. Cellule bifaciale

Dans le cas de la cellule bifaciale (figure 1.13), on peut éclairer la cellule des deux faces. Les performances pour un éclairage à partir de la face arrière, sont moins bonnes que celles obtenues en éclairant à travers la face avant. Cette observation a toujours été mentionnée dans la bibliographie et son explication a été donnée par le fait que les porteurs photo-générés par l'éclairage de la face arrière ont des difficultés pour atteindre la jonction [3].

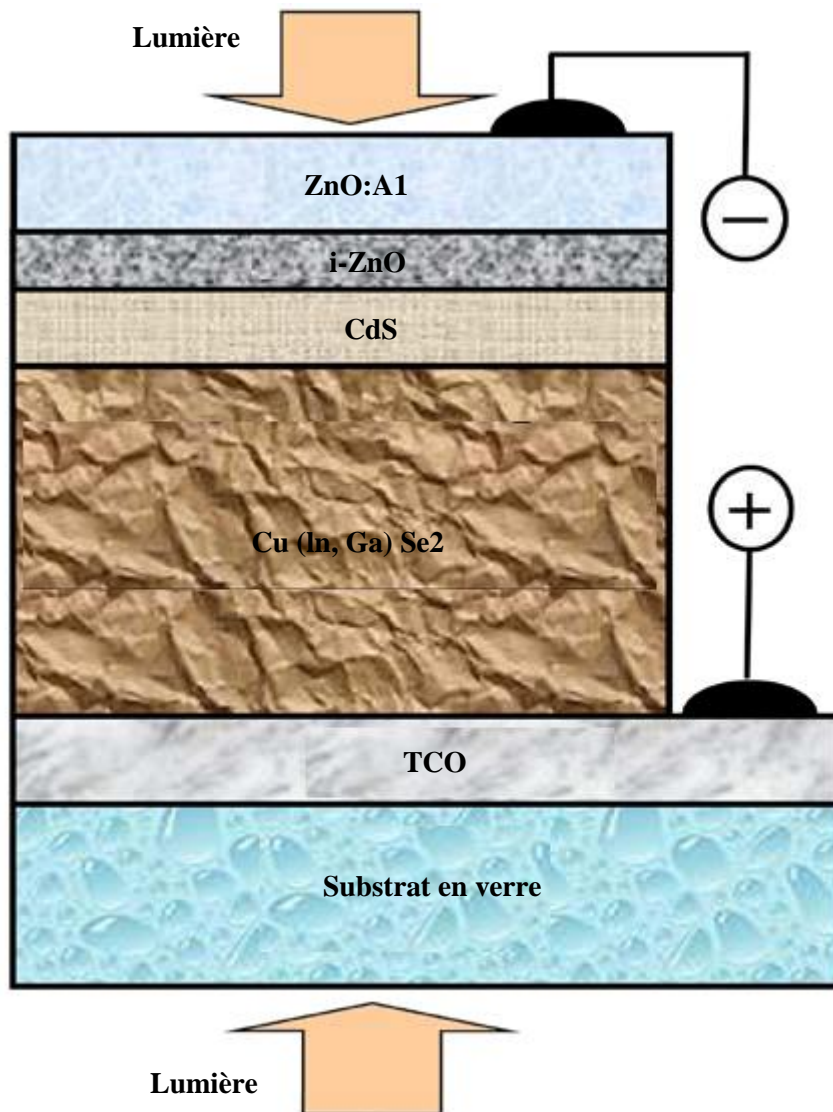


Fig. 1.13. Cellule solaire bifaciale à base de CIGS en couches minces [3].

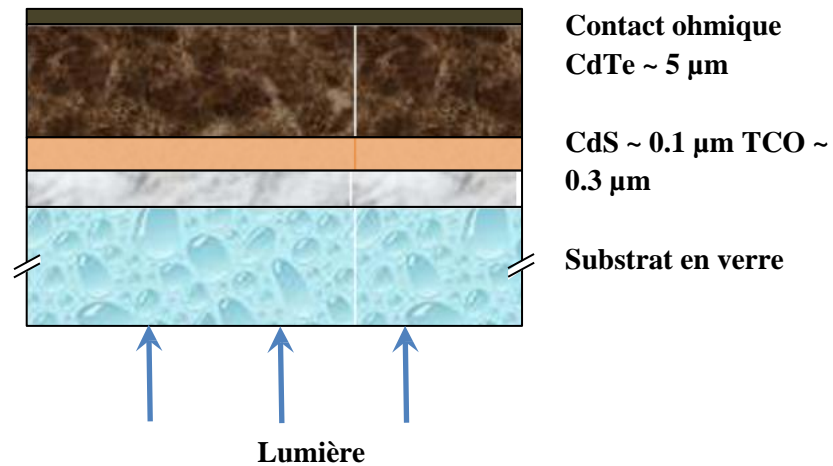
### 6.3.3. La filière CdTe

Le tellure de cadmium est un matériau bien adapté en couche mince pour son utilisation dans la conversion photovoltaïque en raison de ses propriétés :

- Une énergie de gap de 1,45 eV, très bien adaptée au spectre solaire.
- Un gap énergétique direct assurant une grande absorption optique.
- Matériau adapté aux techniques de croissances simples et à faible coût.

Le CdTe est naturellement de type n, sa conversion vers une conductivité p est assurée par un recuit à 400 °C. Pourtant, le CdTe est doté d'une forte absorption optique pour des radiations de longueurs d'onde proches de 800 nm, et pour des raisons purement expérimentales,

l'épaisseur déposée est de 3 – 7  $\mu\text{m}$ , sachant que l'épaisseur optimale est de l'ordre de 3  $\mu\text{m}$ . Le rendement de conversion est de l'ordre de 16 % en laboratoire, par contre les modules industriels ont des rendements de l'ordre de 10%. La figure 1.14 illustre la structure type de la cellule solaire à base de CdTe. La jonction est assurée par une couche de CdS. Pour des raisons environnementales, cette filière est toujours prise avec beaucoup de précaution car l'utilisation du cadmium pour la réalisation de la photopile est toujours la cible de plusieurs critiques. En effet, le Cd est un matériau polluant pour l'environnement [3].



**Fig. 1.14. Structure typique d'une cellule solaire à base de couche active CdT [3].**

## 7. Cellule solaire photovoltaïque à base de cristaux photoniques 1D et 2D

L'émergence des cellules en couche mince, et les limitations optiques qui lui sont associées, ont fait de la nano-photonique une boîte à outil incontournable pour la réalisation de dispositifs à haut rendement. Bien que son application aux cellules solaires photovoltaïques soit relativement récente, les concepts mis en jeu sont majoritairement une adaptation d'effets déjà utilisés pour d'autres composants optoélectroniques tels que les photos détectrices, les diodes électroluminescentes ou les sources lasers.

Le but donc est d'introduire les propriétés optiques des cristaux photoniques membranaires absorbantes, d'étudier leurs spectres d'absorption et de mettre en évidence les différents phénomènes physiques mis en jeu ainsi que les propriétés modales exploitées pour l'élaboration de cellules photovoltaïques. La membrane en cristaux photoniques est une couche ultramince absorbante en a-Si:H ayant une épaisseur arbitrairement fixée à 100nm, cette couche sera par la suite introduite dans une cellule complète et jouera le rôle de couche active.

La singularité de l'approche développée dans cette thèse consiste à mettre en œuvre cette

couche absorbante à partir d'une membrane à base de cristaux photonique et à optimiser numériquement son absorption sur l'ensemble du spectre utile, la Figure 1.15 montre la structure que nous allons considérer. Cette structure est à la fois du type CP1D (cristaux photoniques en unidimensionnels) et CP2D (cristaux photoniques en bidimensionnels). Ces définitions seront abordées plus tard dans le chapitre 3.

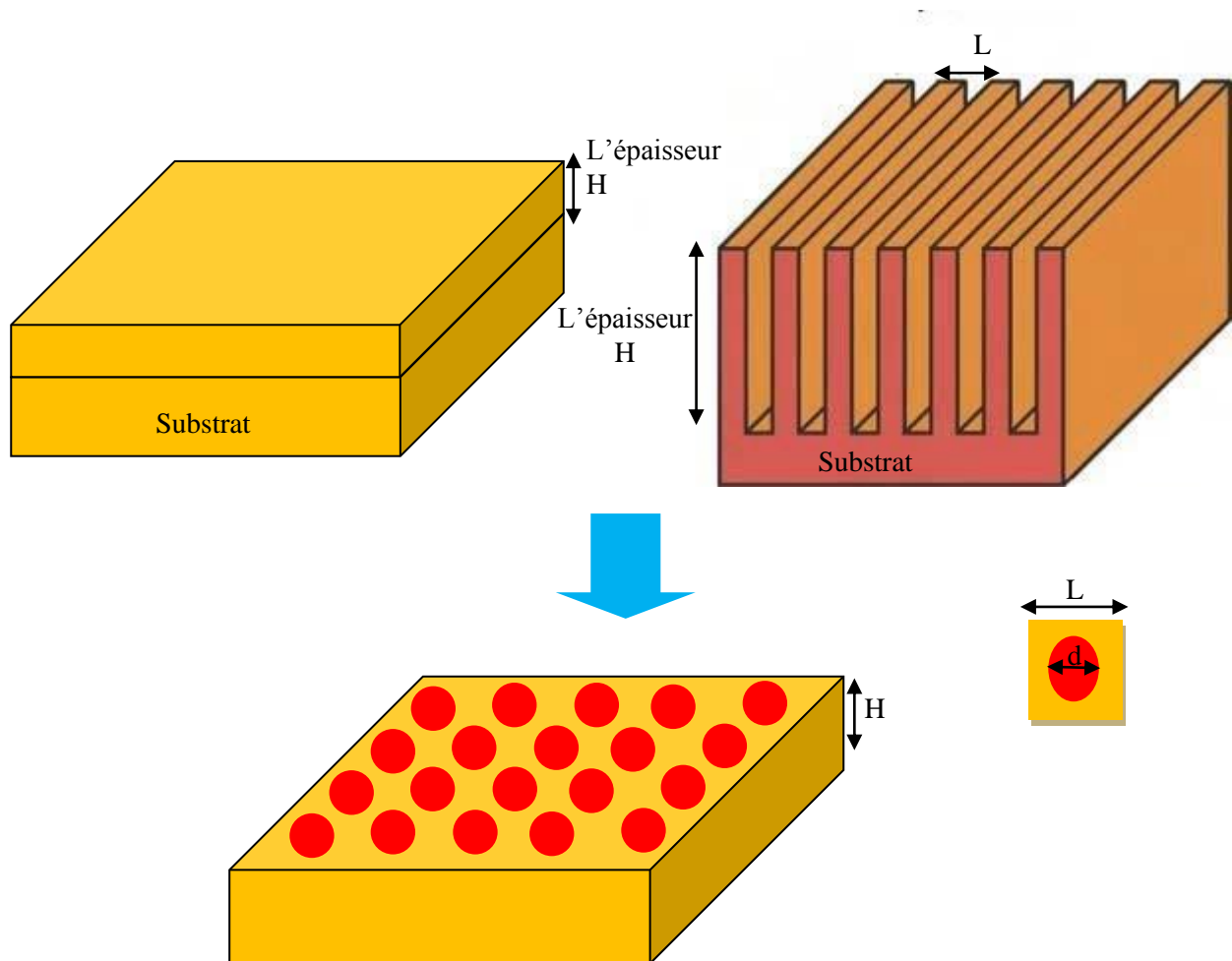


Fig. 1.15. Couches de 100nm d'épaisseur en a-Si : H pour une configuration non structurée, un CP1D sur substrat verre et un CP2D (ici à réseau carré), le milieu environnant est l'air.

## 8. Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque

Le développement accéléré des moyens de simulation numérique et de fabrication de nanostructures a constitué un creuset favorable pour l'utilisation des cristaux photonique dans le domaine des cellules solaires et ce qui a aussi donné lieu à une littérature imaginaire [18]. En conséquence, il est impossible de décrire de manière exhaustive l'ensemble de ces études.

Les effets d'antireflet n'interviennent pas dans le piégeage de la lumière mais peuvent être une conséquence de la nano-structuration [19] et sont, à ce titre, détaillés en début du

chapitre. Nous mettrons ensuite les résultats obtenus récemment avec des substrats texturés aléatoirement, des réseaux de diffraction et enfin avec des cristaux photoniques absorbants.

## 9. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions sur les cellules solaires, son pouvoir énergétique et les propriétés de son rayonnement. L'historique de l'énergie photovoltaïque, le principe de base de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque, l'exploitation de la caractéristique courant-tension de la cellule pour calculer ses différents paramètres physiques ainsi que les différentes filières photovoltaïques en couches minces. Nous avons présenté les différentes structures d'une cellule solaire en couches minces. Cette étude bibliographique nous a permis de spécifier le semi-conducteur le plus promoteur pour l'étude des cellules solaires en couches minces, Cu(In,Ga)Se(CIGS). Nous présentons ainsi la nouvelle structure à base des cristaux photoniques unidimensionnels et bidimensionnels dans le but d'améliorer les performances des cellules photovoltaïques.

# *Chapitre 2*

## **État de l'art sur les cellules solaires**

### **1. Introduction**

Aujourd'hui, la plupart des cellules solaires commercialisées sont produites en utilisant du silicium monocristallin ou polycristallin. Ces cellules peuvent atteindre des rendements photovoltaïques de l'ordre de 24.7% avec une lumière non concentrée [20]

Toutefois, les inconvénients majeurs sont le coût élevé du matériau et la forte consommation d'énergie au cours de la production. Les cellules solaires à couches minces de silicium intégrant du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) ou du silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu\text{c-Si:H}$ ) suscitent un intérêt croissant de la part des industriels. Les couches très minces ( $\sim 1 \mu\text{m}$  d'épaisseur de silicium contre des centaines de microns pour les cellules solaires basées sur du silicium monocristallin ou polycristallin) qui constituent les cellules permettent une faible consommation de matière.

La technologie des couches minces de silicium offre de nombreuses possibilités de production à la chaîne (modules de  $1 \text{ m}^2$  ou plus). En outre, les températures modérées ( $150 - 300^\circ\text{C}$ ) nécessaires à la production des couches minces de silicium induisent une faible consommation d'énergie au cours des processus industriels et offrent la possibilité d'utiliser une grande variété de substrats peu coûteux, comme le verre, l'acier inoxydable ou encore les matières plastiques [21].

La très faible épaisseur des cellules solaires leur permet d'être déposées sur des substrats flexibles, comme des films métalliques ou des feuilles de matière plastique. Enfin, le fait que les connexions fassent partie inhérente de la conception des modules solaires à couche mince, par opposition à des connexions extérieures dans le cas de cellules mono- ou poly-cristallines, simplifie considérablement le processus industriel.

Un désavantage lié à la technologie de silicium amorphe hydrogéné est le rendement photovoltaïque relativement faible et le phénomène de dégradation induit par la lumière qui conduit à une diminution du rendement initial. Des rendements stabilisés de l'ordre de 4 - 6% sont généralement obtenus pour des modules à jonction simple de silicium amorphe hydrogéné [22].

Le concept des cellules multicouches (également appelé concept des cellules multi-jonctions) est un concept intéressant qui permet de renforcer la stabilité des cellules à couches minces. Il permet en outre d'améliorer le rendement photovoltaïque.

Les cellules multi-jonctions se composent de plusieurs cellules simples déposées les unes sur les autres et élaborées sur la base d'alliages d'a-Si:H et/ou de  $\mu$ c-Si:H. Le rendement photovoltaïque stabilisé le plus élevé (12%) pour des cellules solaires de type tandem a été obtenu pour une configuration a-Si:H/ $\mu$ c-Si:H à l'Université de Neuchâtel [23]. Des rendements stabilisés de plus de 13% ont été atteints par Yang et al. 1997 pour des empilements triples (a-Si:H/ a-Si:Ge:H/a-Si:Ge:H). Toutefois l'objectif général des fabricants de cellules solaires à couches minces de silicium est d'obtenir des modules présentant des rendements stabilisés supérieurs à 10%.

La société Sharp commercialise déjà des modules de type tandem (a-Si:H/ $\mu$ c-Si:H) avec un rendement stabilisé de 8.5%. United-Solar a déclaré avoir obtenu des rendements stabilisés de l'ordre de 10.5% pour des modules solaires de petite dimension (0.09 m<sup>2</sup>) et de configuration a-Si:H/a-Si:Ge:H/a-Si:Ge:H [7].

## 2. Préparation des films métalliques

Un grand nombre de techniques est généralement utilisé pour la préparation de nanoparticules métalliques. On peut citer le dépôt en phase vapeur, la pulvérisation cathodique, l'ablation laser, la réduction citrique, la synthèse chimique en milieu liquide, la lithographie par faisceau d'électrons, la lithographie nano-sphère et l'évaporation thermique. Cette dernière technique étant très fiable et peu coûteuse permet l'élaboration de films de haute qualité [24].

L'équipement requis pour la technique d'évaporation thermique est souvent disponible dans les laboratoires spécialisés ou dans les centres de production. Ainsi, on peut aisément l'intégrer dans une chaîne de production de cellules solaires à couches minces. L'évaporation thermique consiste en l'évaporation d'une petite quantité de métal placée sur un filament chauffant de tungstène dans un système de dépôt permettant d'atteindre un vide de haute qualité.

Les films peuvent être de types métalliques d'Ag, d'Au et d'Al ainsi que des combinaisons de deux de ces métaux et qui seront déposées sur des substrats tels que le TCO (oxyde conducteur transparent), le silicium amorphe, le verre et le silicium monocristallin. L'épaisseur des dépôts, déterminée à l'aide d'un oscillateur à quartz, varie entre 0.5 et 50 nm.

La vitesse de dépôt variera entre  $0.2$  et  $10 \text{ \AA}\cdot\text{s}^{-1}$ . L'influence de la pression est analysée en déposant les films métalliques sous des pressions de  $5.10^{-4}$  et de  $5.10^{-5}$  mbar. Dans cet intervalle de valeurs de pression, aucun effet significatif n'a été observé sur la formation des nanoparticules. L'effet d'un traitement thermique (ou recuit) sur la morphologie des films métalliques doit être également étudié.

La température de recuit est variée de  $150^\circ\text{C}$  à  $300^\circ\text{C}$ . La durée du traitement thermique varie de 30 min à plusieurs heures. Dans le cas où les films métalliques sont recouverts par une couche d'a-Si:H (ou de  $\mu\text{c-Si:H}$ ), un traitement de recuit « involontaire » est appliqué. En effet, préalablement au dépôt de silicium (effectué à  $180^\circ\text{C}$ ), l'échantillon est placé (durant 1 h environ) dans la chambre du système de PECVD (le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma) qui doit atteindre une température de  $180^\circ\text{C}$ . Cette étape assure une qualité optimale des films de silicium déposés. Il est observé que le recuit du substrat conduit à des modifications structurales des films métalliques, particulièrement dans le cas de l'argent.

Tous les paramètres mentionnés ci-dessus ont été variés pour obtenir des structures particulières de film métallique (par exemple des nanoparticules de tailles variées ou encore des surfaces nanostructurées) dans le but d'atteindre des propriétés optiques spécifiques. La structure des films métalliques est analysée par microscopie électronique à balayage et par microscopie à force atomique.

Afin de juger l'influence des films métalliques sur les propriétés optiques et/ou électriques des échantillons ou cellules solaires préparées, les films métalliques sont déposés au travers d'un masque, de manière à ce qu'ils ne recouvrent que la moitié du substrat. Cette approche est privilégiée afin d'éliminer les problèmes d'inhomogénéité obtenus pour des substrats différents [7].

### **3. Propriétés des matériaux et cellules solaires en silicium**

#### **3.1. Propriétés structurales de l'a-Si : H**

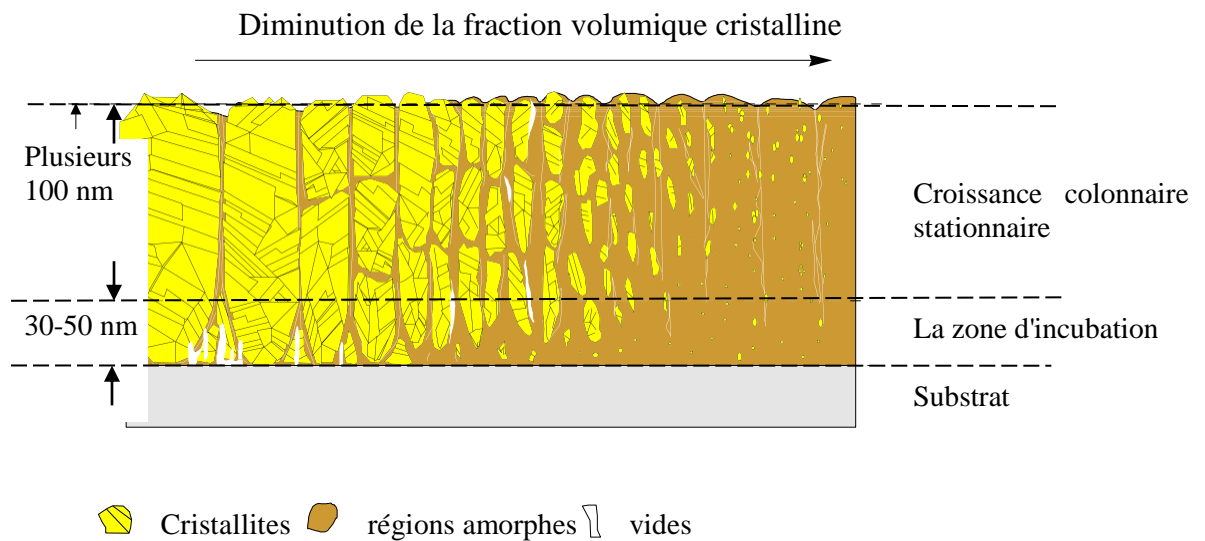
La structure atomique locale du silicium amorphe (a-Si) ressemble à celle de la phase cristalline, des différences peuvent cependant être observées à plus grande échelle. Le silicium cristallin présente le même réseau cristallographique que le diamant. Chaque atome de silicium tétraédrique a quatre voisins. Cette structure tétraédrique s'étend sur une distance importante, formant ainsi un réseau cristallin ordonné (cristal). Elle est créée par la stricte répétition d'une maille élémentaire périodique (Figure 2.1, gauche). Dans le silicium amorphe, des variations



uniquement de grains de silicium cristallin. Le  $\mu\text{-Si:H}$  est également connu sous le nom de silicium nanocristallin (n-Si). Une représentation schématique du  $\mu\text{-Si:H}$  est donnée en Figure 2.2. Dans les conditions de forte cristallinité, obtenue avec une concentration faible en silane, des colonnes constituées de grains de silicium cristallin homogène sont observées (Figure 2.2, gauche).

En fonction des conditions de dépôt et du substrat, les colonnes sont séparées les unes des autres par des régions de silicium amorphe hydrogéné ou des interstices [27].

En augmentant la concentration en silane, la fraction volumique cristalline diminue et des siliciums cristallins plus petits sont observés au sein d'une matrice de silicium amorphe. Pour des cellules solaires basées sur du  $\mu\text{-Si:H}$ , la composition du matériau choisi est celle correspondant à la zone de transition entre les phases amorphe et cristalline. La présence de joints de grains, de régions amorphes et d'interstices entre les grains de silicium cristallin conduit à une mobilité plus faible que dans le cas du poly-Si.



**Fig. 2.2. Diagramme schématique montrant la microstructure particulière du  $\mu\text{-Si:H}$  obtenu à haute fréquence par PECVD.**

La composition du film varie d'un silicium hautement cristallin à une phase largement amorphe [28]. En revanche, le silicium microcristallin hydrogéné est plus facile à produire en grande quantité car il peut être déposé à basse température en utilisant la méthode classique de dépôt de silicium amorphe hydrogéné, la technique de dépôt par PECVD. Il est à noter que le  $\mu\text{-Si:H}$  présente une meilleure stabilité que le silicium amorphe hydrogéné.

### 3.3. Propriétés optiques de silicium amorphe hydrogéné

Puisque dans le silicium amorphe hydrogéné la conservation de la quantité de mouvement  $k$  (vecteur d'onde) n'est plus conférée lors des transitions électroniques [29], le matériau se comporte comme un semi-conducteur «quasi-direct». Il présente une probabilité d'absorption lumineuse beaucoup plus importante dans le visible (énergie des photons supérieure à 1.8 eV) que le c-Si. Ainsi, pour des films d'a-Si:H, des épaisseurs de 500 nm environ sont suffisantes pour absorber de manière efficace des ondes lumineuses de longueur d'onde  $\lambda \leq 600$  nm.

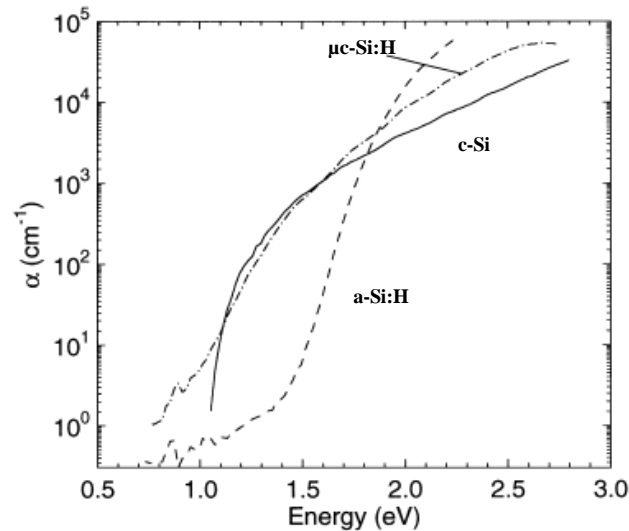
Le silicium amorphe hydrogéné absorbe efficacement la lumière entre 300 et 800 nm. Pour des énergies inférieures à 1.8 eV, l'absorption dans le silicium amorphe hydrogéné est déterminée par la densité des états localisés (états superficiels) et des liaisons pendantes (défauts profonds) du matériau [7].

### 3.4. Propriétés optiques du c-Si

Le silicium cristallin (c-Si) possède un gap de 1.12 eV à température ambiante et pression atmosphérique. C'est un semi-conducteur à gap indirect. Le minimum énergétique de la bande de conduction ne se trouve pas au même moment  $k$  que le maximum de la bande de valence. Pour des transitions directes d'électrons de la bande de valence vers la bande de conduction, les énergies des photons doivent être beaucoup plus grandes que celles de la bande interdite  $E_g$ . Les transitions optiques peuvent également se produire à des énergies plus faibles par un processus à deux étapes faisant intervenir non seulement des photons et des électrons mais aussi des phonons. Une conséquence du gap indirect est que l'absorption optique est réduite de manière significative dans le domaine du visible [7].

### 3.5. Propriétés optiques du $\mu\text{c-Si:H}$

Le spectre d'absorption optique présenté en Figure 2.3 montre un coefficient d'absorption supérieur pour le  $\mu\text{c-Si:H}$  que pour le c-Si, dans le domaine du visible (c.-à-d. pour des énergies supérieures à 1.8 eV).



**Fig. 2.3. Coefficient d'absorption  $\alpha$  du silicium cristallin (c-Si), du silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et du silicium microcristallin hydrogéné ( $\mu$ c-Si:H), mesuré par spectroscopie de déviation photothermique (PDS).**

Cet effet peut être expliqué par l'absorption lumineuse des régions amorphes du matériau et par le phénomène de diffusion de la lumière au sein du  $\mu$ c Si:H. Entre 1.1 eV et 1.6 eV, le  $\mu$ c-Si:H présente un coefficient d'absorption voisin de celui du c-Si. Ainsi, son absorption est supérieure dans le rouge et l'infrarouge comparé au cas de l'a-Si:H. Dans la zone d'absorption de la bande interdite (c.-à-d. pour des énergies inférieures à 1.1 eV), le coefficient d'absorption du  $\mu$ c-Si:H dépasse largement celui du c-Si et est légèrement plus élevé que celui de l'a-Si:H.

Ceci résulte de la présence des bandes localisées (aux joints des grains) et des défauts profonds, similaires à ceux trouvés dans le silicium amorphe hydrogéné [30].

#### 4. Dopage du silicium amorphe hydrogéné

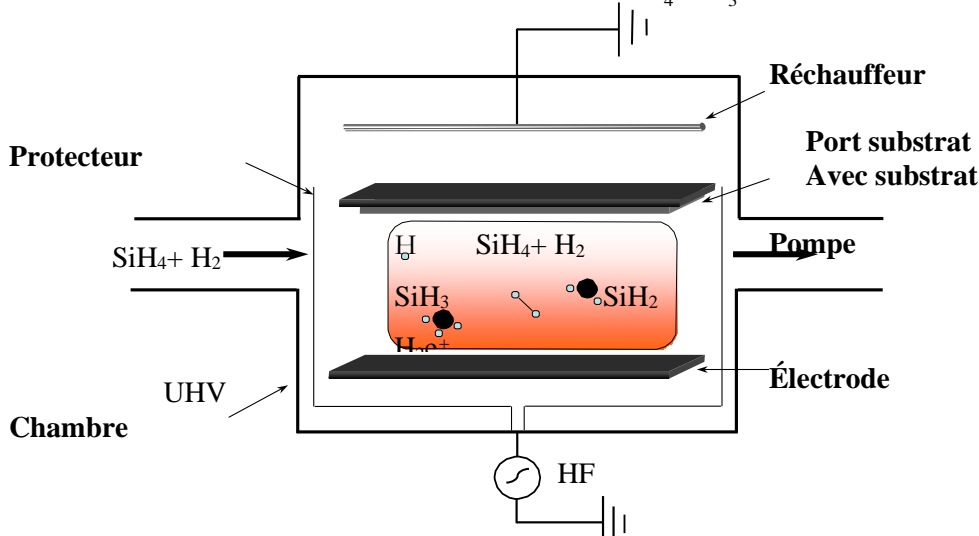
Le silicium amorphe a été préparé la première fois au milieu des années 60 par la technique d'évaporation thermique et pulvérisation. Mais, le matériau était fortement défectueux, difficile à doper, et en général peu convenable pour des applications des cellules.

#### 5. Dépôt du silicium amorphe hydrogéné par PECVD

Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) est une des méthodes les plus performantes pour déposer de l'a-Si:H. Les températures modérées communément utilisées en PECVD offrent la possibilité d'utiliser une large gamme de substrats comme le verre. La technique de PECVD ne nécessite qu'une faible consommation d'énergie dans un processus

industriel, comparée à une technique de dépôt de silicium cristallin, pour laquelle des températures supérieures à 1000°C sont requises. Une production plus rentable et un plus grand volume de production compensent les performances électriques plus faibles des cellules à base de silicium amorphe hydrogéné comparé aux cellules en c-Si. Pour réaliser des films de silicium amorphe hydrogéné, la décomposition du silane gazeux ( $\text{SiH}_4$ ) est la technique la plus utilisée. La dissociation thermique du silane se produit à des températures supérieures à 450°C mais conduit généralement à la croissance d'un matériau de piètre qualité[7].

La technique de PECVD fournit l'énergie de dissociation nécessaire, sous une pression voisine de  $10^{-8}$  mbar et à des températures modérées (typiquement  $\sim 200^\circ\text{C}$ ), par le biais d'un plasma créé par un champ électrique appliqué entre deux électrodes en parallèle. Une fréquence d'excitation de 13.56 MHz (RF-PECVD) est communément utilisée pour des applications de dépôt sur des surfaces étendues ( $\sim 1 \text{ m}^2$ ). La représentation schématique de la technique de PECVD, présentant le plasma créé par un champ électrique appliqué entre deux électrodes en parallèle et la décomposition de  $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$ , est montrée en Figure 2.4. Lorsque le  $\text{SiH}_4$  est employé comme gaz-source pour le processus de dissociation, des espèces chimiques neutres réactives ( $\text{SiH}$ ,  $\text{SiH}_2$ ,  $\text{SiH}_3$ ,  $\text{Si}_2\text{H}_6$ ,  $\text{H}$ ) et des espèces ionisées ( $\text{SiH}^+$ ,  $\text{SiH}_2^+$ ) sont créées dans le plasma par impacts électroniques. Les réactions de dissociation possibles, importantes pour la croissance des matériaux d'a-Si:H, sont données par les équations suivantes, lequel des deux produits de dissociation ( $\text{SiH}_2$  ou  $\text{SiH}_3$ ) contribue à la croissance des films de silicium.



**Fig. 2.4. Représentation schématique de la technique de PECVD, présentant le plasma créé par un champ électrique appliqué entre deux électrodes en parallèle et la décomposition de  $\text{SiH}_4 + \text{H}_2$  au sein du plasma [7].**

Les propriétés et la structure (microcristalline ou amorphe) des films obtenus dépendent des paramètres de dépôt, c.-à-d. du rapport des concentrations en silane et en hydrogène dans la phase gazeuse, de la fréquence d'excitation du plasma, de la température du substrat, de la puissance électrique des électrodes et de la pression totale de gaz. Les propriétés du matériau peuvent être déterminées par spectroscopie Raman.

Un des paramètres les plus importants du procédé concernant la structure finale du film est le rapport de la concentration en silane sur la concentration totale de gaz ( $SC = \frac{[SiH_4]}{[SiH_4 + H_2]}$ ) [7].

## 6. Fonctionnement des cellules solaires en a-Si : H

Contrairement au cas du silicium cristallin, le silicium amorphe hydrogéné est un matériau qui montre une grande densité de défauts et par conséquent des longueurs de diffusion courtes (c.-à-d. que la distance moyenne parcourue par les porteurs de charge avant qu'ils ne recombinent est courte). De plus, il présente une distribution de défauts qui dépend de la position du niveau de Fermi. De ce fait, une configuration de type p-n n'est pas envisageable pour ce matériau. Les cellules solaires basées sur silicium amorphe hydrogéné consistent en un empilement de couches p-i-n ou n-i-p.

Une couche absorbante intrinsèque (non intentionnellement dopée) présentant une faible densité de défauts est insérée entre les couches minces p et n. Les couches dopées assurent l'existence d'un champ électrostatique au sein de la couche intrinsèque. Une séparation instantanée des porteurs de charge photo générés dans la couche i est assurée par le champ électrique. Pour des cellules solaires basées sur du  $\mu c$ -Si:H, présentant des longueurs de diffusion plus élevées que le silicium amorphe hydrogéné, une configuration p-i-n (ou n-i-p) est également plus favorable.

## 7. Fonctionnement des cellules solaires en c-Si

Les cellules solaires à couches minces, c.-à-d. en silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) ou en silicium microcristallin ( $\mu c$ -Si:H), sont ici comparées aux cellules solaires conventionnelles basées sur du silicium cristallin (c-Si). Ces cellules sont généralement basées sur une jonction p-n, obtenue en variant le type de dopage dans le semi-conducteur. Lors de l'absorption lumineuse, les électrons sont excités de la bande de valence vers la bande de conduction, créant ainsi un trou dans la bande de valence.

Les deux types de porteur, les électrons et les trous, se déplacent au travers du cristal et participent au courant photonique. Les électrons et les trous résultant de l'absorption lumineuse dans le matériau massif peuvent atteindre par diffusion la zone de charge d'espace et le contact arrière, respectivement. La différence de potentiels entre les couches p et n est à l'origine de la formation de la zone de charge d'espace, présentant un champ électrostatique élevé. Celle-ci est associée à la jonction P-N et dépend du niveau de dopage. Elle possède généralement une épaisseur inférieure à  $1 \mu\text{m}$  pour une cellule solaire basée sur du silicium cristallin. Etant donné que le mode de déplacement des porteurs de charge est fait par diffusion), les cellules solaires en silicium cristallin sont encore appelées "cellules solaires à diffusion" [7].

## 8. Circuit équivalent pour une diode pin

La Figure 2.5 présente un circuit équivalent simple d'une diode pin qui peut être utilisé comme modèle pour les cellules solaires à couches minces de silicium. En négligeant les pertes et en considérant un signal d'entrée continue (sans effet capacitif), le comportement électrique d'une cellule solaire dans l'obscurité peut être décrit par une diode simple. Sous illumination, un courant photonique supplémentaire et de sens opposé  $i_{ph}$  est délivré par la cellule. Les pertes dans la diode peuvent être représentées par une résistance en parallèle (shunt)  $R_p$  et une résistance en série  $R_s$ . Cette dernière correspond à la somme de toutes les contributions à la résistance, c.-à-d. les résistances de la couche transparente (TCO), des contacts en Ag, des couches dopées, des interfaces et des fils électriques utilisés pour les mesures. La résistance en parallèle rend compte des courts circuits locaux (shunts) et dépend de la puissance lumineuse. La capacité  $C_p$  est associée à la capacité géométrique de la cellule solaire, elle est liée à la surface de la cellule et à l'épaisseur de la couche intrinsèque  $d_i$  par l'équation 2.3 :

$$C_p = \varepsilon_r \varepsilon_o \frac{A}{d_i} \quad (2.3)$$

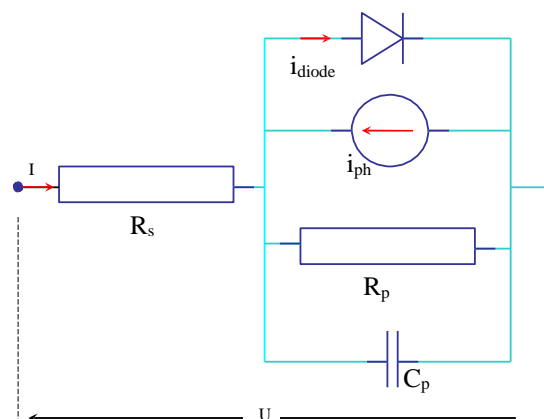


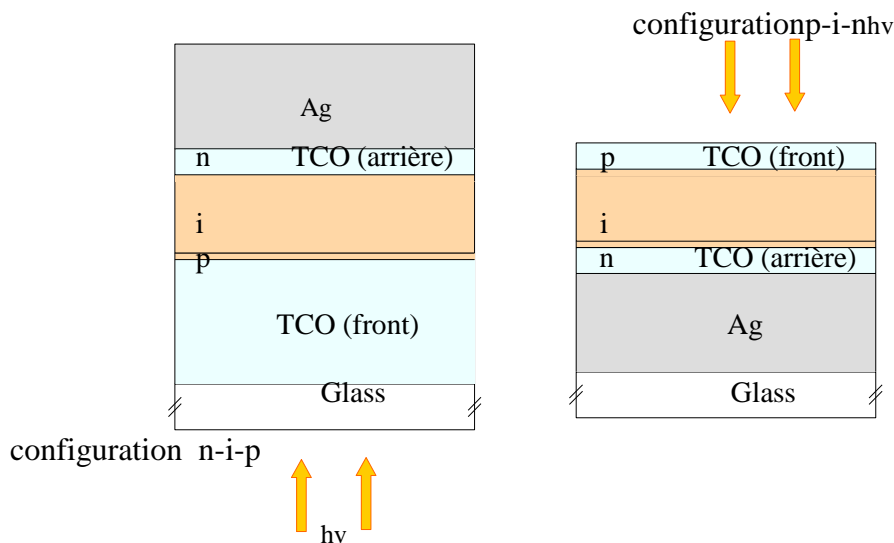
Fig. 2.5. Circuit équivalent pour une diode pin [7].

## 9. Cellules solaires en configuration p-i-n et n-i-p

Dans cette configuration, des cellules solaires à couches minces de silicium ont été élaborées selon deux configurations différentes, à savoir une configuration “p-i-n” et une configuration “n-i-p”. La Figure 2.6 montre la structure schématique basique utilisée pour les cellules de référence (c.-à-d. sans nanoparticules ou sans nanostructures) dans les deux configurations.

Les dénominations “p-i-n” et “n-i-p” font uniquement référence à l'ordre de dépôt des couches n, i et p. Quasiment toutes les cellules solaires produites aujourd'hui basées sur de l'a-Si:H ou du  $\mu\text{c-Si:H}$  sont éclairées à travers la couche p. Pour une lumière de courte longueur d'onde, la distribution des défauts dans les cellules en silicium amorphe hydrogéné est modifiée de manière significative dans la couche i (au voisinage de l'interface avec la couche dopée), ceci étant dû au fait que la distribution des défauts dépend du niveau de Fermi.

De ce fait, c'est principalement la réponse dans le bleu qui est altérée. Puisque la mobilité des trous dans l'a-Si:H et le  $\mu\text{c-Si:H}$  est plus petite que celle des électrons, il faut que les trous aient la plus petite distance possible à parcourir vers la jonction p pour atteindre une collection optimale. Cependant, il n'y a aucune différence fondamentale dans le fonctionnement des deux configurations puisque la réponse dans le rouge est pratiquement indépendante du côté où se fait l'éclairage. Les différences trouvées pour les deux configurations résultent de la différence de croissance des couches déposées.



**Fig. 2.6. Représentation schématique de cellules solaires en configuration p-i-n (à gauche) et n-i-p (à droite). La grille d'argent de la cellule n-i-p, normalement déposée sur le contact avant de TCO, n'est pas représentée [7].**

## 10. Les cellules solaires simples et multi-jonctions

La demande mondiale de l'énergie augmente et avec le soleil fournissant une source inépuisable et non-polluante de carburant, des objectifs de développement principaux ont été placés dans le domaine de l'énergie solaire. Le dispositif utilisé dans cette technologie produisant de puissance se nomme la cellule photovoltaïque ou la pile solaire, qui utilise l'énergie solaire pour la génération du courant électrique. Le principe de base de la conversion photovoltaïque est la génération d'une paire électron-trou dans un semi-conducteur après avoir absorbé un photon, et après la séparation, la collection des porteurs de charge se produit. Ceci provoque un courant et une tension électrique, menant à la production d'électricité. Parmi les différentes applications du silicium amorphe et ses alliages, leur utilisation dans le photovoltaïque a jusqu'à maintenant attiré la plus grande attention due à un certain nombre d'avantages.

En effet, c'est la première technologie en couche mince qui a avancé en masse en production. À partir de 2,4%, le rendement initial d'une cellule solaire de silicium amorphe hydrogéné de petites surfaces développées par Carlson en 1976 [31], a aujourd'hui atteint 15,2% [32]. Puisque ce matériau a l'inconvénient de la dégradation sous illumination prolongée [33], son rendement stabilisé a plus d'intérêt que le rendement initial.

### 10.1. Cellules solaires à jonction simple à base du a-Si

Une cellule solaire cristalline se compose d'un domaine de type p et d'un domaine de type n formés dans le même matériau, de ce fait créant une jonction PN. Le champ interne sépare les paires électron-trou photo-générées (ce qui ont de longues durées de vies dans c-Si) et empêche la recombinaison dans le dispositif. Les trous sont rassemblés sur le côté p, et les électrons sur le côté n.

Dans les cellules solaires de silicium amorphes et microcristallines, les longueurs de diffusion sont très courtes, dues aux mobilités des porteurs et les durées de vies courtes, qui sont alternativement, la conséquence d'un grand nombre d'états de défauts dans le matériau [31]. Dans le a-Si:H dopé, les longueurs de diffusion sont encore plus courtes, en raison d'une concentration plus élevée des défauts. Ainsi, dans ces cas, une cellule solaire ne peut pas être construite en empilant simplement un film de type p et de type n. Ce composant ne montrerait pas l'activité photovoltaïque, car les durées de vies des porteurs libres photo-générés sont trop courtes pour séparer n'importe quelle fraction significative d'eux. Par conséquent, une couche intrinsèque avec une densité relativement basse de défaut doit être incorporée entre la couche de type p et la couche de type n (Figure 2.8) tels que le chemin libre moyen (déterminé par le produit  $\mu\tau$  en

présence d'un champ) des porteurs les plus lents (trous) produits dans cette couche est assez grand pour les séparer dans l'espace des électrons photo-générés dans cette région [34].

En d'autres termes, même dans le cas où le champ  $E$  est très faible, la longueur de dérive est encore assez grande pour collecter la plupart des porteurs. Cependant, la longueur de diffusion étant seulement 100-200 nm, la présence d'une région avec un champ libre dans n'importe quelle longueur appréciable de la couche intrinsèque réduit rigoureusement le rendement de collection. Le champ électrique est plus élevé proche des contacts  $p^+$  et  $n^+$  [35], mais le champ appréciable est maintenu dans la majorité de la couche  $i$  (ceci peut être montré dans la solution de l'équation du Poisson), si cette couche n'est pas trop épaisse ou défectueuse.

Cependant, une cellule fonctionne près du point maximum de puissance c.-à-d. sous polarisation directe, et dans cette condition, le champ est réduit tels qu'une région de champ libre virtuelle se développe dans le centre de la couche  $i$ . Toute la région de déplétion devient alors plus petite que l'épaisseur de la couche  $i$  et le photocourant et en fonction de la tension. Par conséquent, ces structures  $p^+-i-n^+$  s'appellent typiquement les piles solaires de type de dérive, contrairement au pile solaire cristallin où le photocourant est indépendant de la tension externe (dispositifs de type diffusion) [36].

Les cellules solaires à base du silicium amorphe et microcristallin peuvent être déposées principalement en deux structures : les piles solaires de type superstrat et les piles solaires de type substrat Figure 2.7. Dans les cellules solaires de type superstrat, le support sur lequel les divers matériaux de la couche mince sont déposés sert à une fenêtre de la cellule, tandis qu'en piles solaires de type substrat, le support forme l'arrière de la cellule. Dans les cellules solaires de type substrat, on emploie l'acier inoxydable habituellement qui sert également de contact arrière. Des miroirs de métal couvert de polymère peuvent également être employés à cette fin. En structure de type superstrat, normalement le verre est employé comme support. Un miroir en polymère mince transparent peut également être employé, mais ceux-ci ont certaines limitations, qui dictent encore la température maximale permise dans d'autres étapes de processus.

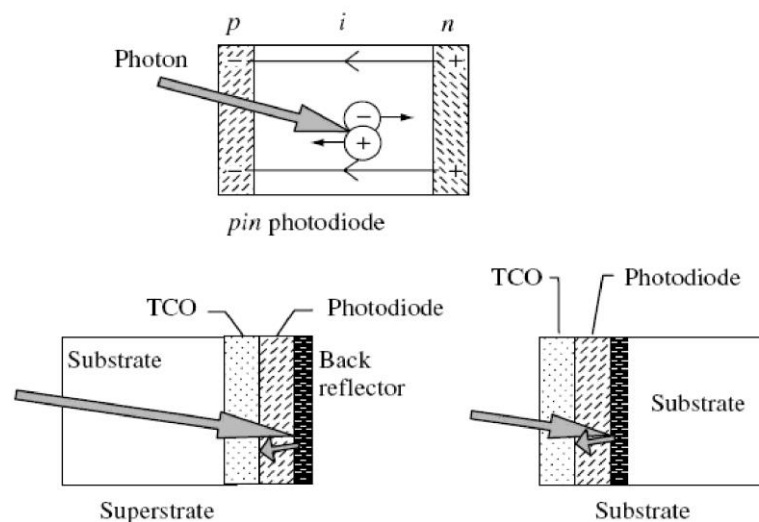
Par conséquent, les présentes cellules solaires de type superstrat consistent principalement en des structures  $p^+-i-n^+$  simple ou multifonction sur le verre. Dans cette version des piles solaires de type superstrat, le substrat de verre est couvert par une couche d'épaisseur 5000Å à 1µm texturée d'un oxyde transparent conducteur (TCO), ce (TCO) agit également en tant qu'électrode avant. Du  $\text{SnO}_2:\text{F}$ ,  $\text{ZnO}$  dopé, ou  $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$  (ITO) sont les matières généralement employées pour ce but. Les conditions pour ces matériaux d'électrode avant, sont : une

transmission élevée, une basse résistivité pour réduire au minimum les pertes de résistance série, une faible résistance de contact avec la couche de type p de la structure  $p^+i-n^+$  et une surface texturée rugueuse pour augmenter le piégeage de la lumière dans la couche active de la cellule par la dispersion.

Les tailles typiques des crêtes de TCO et des largeurs de grain sont dans l'ordre de plusieurs centaines de nanomètres. La rugosité de la surface TCO est largement repliée à l'interface de la couche n dans la structure  $p^+i-n^+$  et l'électrode arrière en métal puisque les couches intervenantes de semi-conducteur sont très minces, de sorte qu'il y ait également dispersion efficace à ce miroir comme l'interface.

Pour les cellules à simple jonction, trois couches basées sur silicium amorphe hydrogéné sont déposées au-dessus du TCO. L'épaisseur de la couche amorphe de type p est environ 50-100 Å et elle consiste de préférence en un film de large gap d'a-SiC:H dopé par le bore. Ce gap plus élevé de cette couche réduit l'absorption des longueurs d'onde bleues d'énergie élevée, permettant à une lumière au-dessus du bleu d'être absorbée dans la couche (intrinsèque) active.

La couche intrinsèque, le silicium amorphe hydrogéné non dopée (densité de défaut  $\sim 10^{15}/\text{cm}^3$ .) est déposée avec une épaisseur approximative de 3000 Å qui crée une couche de déplétion relativement épaisse et, dans laquelle, les porteurs de charge ont des durées de vies relativement plus longues.



**Fig. 2.7. Cellules solaires de type superstrat et les cellules solaires de type substrat.**

C'est dans la couche active de la cellule où la majeure partie du rayonnement solaire est absorbée et convertie en courant électrique par la génération, et la séparation sous l'influence du

champ électrique et la collection de ces paires électron-trou. Une couche typique de type n basée sur le silicium amorphe hydrogéné dopée au phosphore a une épaisseur de  $\sim 200 \text{ \AA}$ .

Les couches dopées devraient être aussi fine que possible en raison de leurs propriétés électroniques faibles (haute densité de défaut). La plupart des porteurs produits dans ces couches par l'illumination sont perdus à cause des recombinaisons et ne contribuent pas au photocourant.

Une couche de métal (Al/Ag) est déposée sur la couche n, qui sert d'électrode arrière et collecte le courant généré. Elle agit également en tant que réflecteur pour la lumière qui n'est pas encore entièrement absorbée. Parfois, une couche de TCO telle qu'oxyde de zinc (ZnO) dopé ou oxyde de d'indium (ITO) peut être insérée entre la couche n et le contact en métal. Parce que les trous ont une mobilité inférieure (environ 1/10 ème) par rapport aux électrons. Puisque la génération optique dans la couche i est plus grande sur le côté de l'entrée de la lumière, les trous doivent traverser une distance plus courte vers la couche p. Cette conception a généralement comme conséquence des rendements de conversion plus élevés qu'une structure où la lumière entre par la couche de type n.

En plus, de la technologie de fabrication des cellules solaires pour l'amélioration globale des performances, un autre aspect important à étudier rigoureusement est le phénomène de la dégradation induite par lumière observée dans les cellules à base du silicium amorphe hydrogéné [34]. La raison attribuée à ceci est une augmentation de la densité des liaisons pendantes.

## 10.2. Cellules solaires Multi-jonctions à base de silicium amorphe hydrogéné

Le rendement de conversion de la cellule peut être beaucoup amélioré comparé à celui d'une cellule solaire d'une structure simple jonction p-i-n si deux diodes ou plus de structure p-i-n avec des gaps optiques de préférence différents sont empilés l'un sur l'autre. Cela est à un certain nombre de raisons : (i) une utilisation plus efficace du spectre solaire dû à une meilleure absorption des différentes longueurs d'onde dans différentes couches i de différentes gaps optiques, (ii) amélioration de la collection des porteurs et réduction de la dégradation induite par lumière.

Ainsi les cellules empilées (également connues sous le nom de multijonction ou cellules tandem) ont des rendements stabilisés supérieurs par rapport aux cellules de simple jonction même si les cellules additionnelles ont le même gap que la première cellule. Une cellule multijonction peut être une double jonction, ou triple jonction etc ... [7].

## 11. Intérêt des nanostructures de silicium

### 11.1. Propriétés fondamentales du silicium cristallin

En dépit des excellentes propriétés électroniques du silicium massif, sa structure de bandes électroniques est responsable, du piètre rendement de recombinaison radiative de ses porteurs, comparé à celui qui prévaut pour les composés III-V utilisés en optoélectronique. En effet, dans le silicium, le maximum de la bande de valence se situe au point  $\Gamma$  de la première zone de Brillouin alors que le minimum de la bande de conduction se situe près du point X (Figure 2.8). La recombinaison d'un électron de la bande de conduction et d'un trou de la bande de valence doit donc se faire à l'aide d'une troisième particule, le phonon, pour pouvoir répondre à la conservation du moment cinétique. L'absorption ou l'émission du phonon rend le processus de recombinaison indirect puisqu'il nécessite l'interaction de trois particules (électron, trou, phonon). Il s'agit donc d'un processus de second ordre beaucoup moins probable que le processus direct dans l'arséniure de gallium (GaAs), par exemple, lequel est du premier ordre. La transition est donc assez peu probable avec des temps de décroissance de l'ordre de quelques ms.

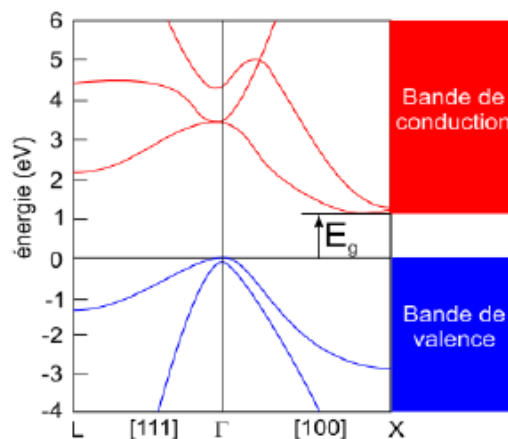


Fig. 2.8. Structure de bande du silicium massif cristallin [37].

### 11.2. Les nanostructures de silicium pour la conversion photovoltaïque

Deux grandes familles de cellules photovoltaïques existent actuellement ; la première est représentée par les cellules basées sur une seule jonction p-n et utilisant généralement le silicium sous forme cristalline comme matériau semi-conducteur. Cette technologie est la plus mature et prédomine donc le marché industriel. Cependant, sa limite majeure est le coût par Watt produit, qui a deux origines majeures : le prix du matériau et le rendement théorique maximal d'environ 30 %. Les couches minces constituent la seconde génération de technologie photovoltaïque qui vise à minimiser les coûts liés au matériau. Dans cette génération, nous distinguons le silicium

amorphe (a-Si), le sélénium de cuivre indium (CIS), le tellurure de cadmium (CdTe), entre autres. La production de ce type de cellules est moins coûteuse que la première génération puisqu'elle consomme moins de matériau semi-conducteur et ne nécessite pas de passer par l'étape de transformation du silicium en "de tranches". Le problème de cette seconde génération est le rendement moindre de ce type de cellules (14% en laboratoire) et la toxicité de certains éléments (cadmium) pour leur fabrication [37].

## 12. Pertes physiques dans une cellule solaire standard

Aujourd'hui, uniquement un quart de l'énergie solaire reçue peut être transformé en électricité par les cellules photovoltaïques. Le rendement de conversion est limité par les différents facteurs de pertes qui existent dans une cellule solaire et qui sont dus soit aux restrictions purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques induites par le processus de fabrication. Nous ne présenterons ici que les pertes physiques liées aux propriétés intrinsèques du matériau. A noter qu'il existe deux types de pertes physiques, qui représentent ensemble plus que 50% des pertes totales dans une cellule photovoltaïque ;

Les pertes par les photons de grande longueur d'onde qui ne sont pas absorbés par le matériau silicium et qui ne peuvent donc pas générer de pair électron-trou et sont donc perdus. Les mécanismes d'absorption assistée par phonons permettent néanmoins de repousser la limite inférieure de l'énergie correspondant au gap du matériau (1.052 eV au lieu de 1.124 eV dans le cas d'une absorption assistée par un phonon dans le silicium). Sous un éclairage de AM1.5, ces pertes sont évaluées à 23.5% dans le cas du silicium.

Les pertes dues à l'énergie excédentaire des photons. En effet, l'excès d'énergie, supérieur à la largeur de la bande interdite, est principalement dissipé sous forme de chaleur (thermalisation). Sous un éclairage de AM1.5, ces pertes sont évaluées à 33% de la puissance totale dans le cas du silicium [37].

## 13. Amélioration du rendement

Si toute l'énergie solaire était concentrée dans une bande spectrale étroite, les dispositifs actuels seraient déjà capables d'en convertir plus de 50%. Nous pouvons donc essayer d'adapter le spectre incident à une ou plusieurs photodiodes. Les exigences nouvelles portent donc ici sur les propriétés optiques des matériaux.

### 13.1. Les multijonctions

L'utilisation de plusieurs cellules de gaps différents, chacune optimisée pour une partie différente du spectre solaire, permet en principe d'augmenter le rendement des cellules solaires. Pour un nombre donné de cellules et un spectre d'insolation fixé, il existe un choix optimal des gaps donnant le rendement le plus élevé : par exemple, pour trois cellules sous concentration maximale, le rendement théorique maximum est de 63% (49% sans concentration). Ces dispositifs, parfois appelés "tandems", fonctionnent déjà, et ont démontré des rendements de 43 % (sous concentration). Ils sont extrêmement sophistiqués dans leur réalisation et dans leur utilisation, mais c'est le premier type de dispositifs à potentiel de rendement élevé effectivement réalisé.

C'est toujours aujourd'hui la seule manière démontrée d'obtenir des rendements de conversion de l'énergie solaire supérieurs à 30%. Les rendements les plus élevés ont été obtenus avec des structures basées sur des empilements de composés III-V en épitaxie. Des dispositifs tandem de grande taille comportant deux et trois jonctions ont aussi été réalisées avec des modules à base de couches minces de silicium amorphe, mais leurs rendements restent inférieurs à 15%. En fait, le gain incrémental de puissance acquis par l'ajout d'une cellule dans un tandem comprenant N jonctions, varie comme  $1/N^2$ . Si nous prenons en compte les imperfections du système, le gain espéré de l'ajout d'une cellule supplémentaire est voisin de zéro dès la quatrième cellule.

### 13.2. Les "transformateurs" optiques

Une voie alternative consiste en l'interconversion de photons en amont du dispositif, de manière à obtenir un spectre plus étroit en énergie. Considérons d'abord l'approche "addition de photons". Les photons dont l'énergie est trop faible peuvent être utilisés directement par une cellule photovoltaïque classique, pourraient être en principe convertis par un dispositif d'optique non linéaire en un nombre plus faible de photons d'énergie plus grande.

L'ensemble des photons de haute énergie est alors dirigé vers une cellule classique efficace dans ce domaine spectral. Les principales recherches sur le sujet se font en utilisant des matériaux dans lesquels un rayonnement infrarouge est absorbé par plusieurs ions d'une terre rare, qui transfèrent ensuite de manière cohérente leur énergie à un autre lanthanide, capable d'émettre efficacement à la fréquence double.

Les quelques tentatives faites jusqu'ici ont prouvé la faisabilité du concept, mais avec un

succès limité en termes de gain d'efficacité absolue : environ 3% des photons dans l'infrarouge dans la bande étroite d'absorption des terres rares utilisées [37].

#### 14. Contact avant de TCO

Indépendamment de la configuration, plusieurs conditions doivent être remplies pour obtenir des cellules solaires à haut rendement quantique. La couche de TCO utilisée pour réaliser le contact avant doit présenter une forte transparence entre 300 nm et 1100 nm (correspondant au domaine d'absorption du  $\mu\text{c-Si:H}$ ) et une conductivité élevée afin d'éviter les pertes ohmiques. Plus la couche de TCO est épaisse et plus sa conductivité latérale est grande. En revanche, augmenter l'épaisseur de la couche de TCO conduit également à un accroissement des pertes par absorption. Une autre possibilité pour améliorer la conductivité est d'augmenter la concentration en Al du ZnO.

Toutefois, dans ce cas, les pertes optiques dans le domaine spectral du rouge et de l'infrarouge sont augmentées. Il est donc nécessaire de trouver un compromis. Etant donné que les couches de silicium employées sont très minces, les cellules en a-Si:H et  $\mu\text{c-Si:H}$  développées de nos jours sont déposées sur un substrat rugueux afin d'améliorer le couplage et le piégeage de la lumière incidente et ainsi accroître l'absorption. La rugosité (ou texture) de la surface de ZnO peut être obtenue en plongeant le substrat de verre/TCO dans une solution d'acide chlorhydrique dilué. Néanmoins, au cours de notre étude, quasiment toutes les cellules ont été déposées sur un substrat plan. Les nanoparticules métalliques (ou autres nanostructures métalliques) peuvent conduire à une forte diffusion de la lumière en fonction de leur taille et de leur morphologie.

Afin de comprendre clairement l'influence des nanoparticules/nanostructures métalliques et de séparer leur contribution optique des phénomènes de diffusion obtenus avec une surface rugueuse, des substrats plans (recouverts ou non de nanoparticules/nanostructures) ont été utilisés. Pour atteindre des rendements quantiques élevés, il est nécessaire de tenir compte non seulement des propriétés optiques mais aussi des propriétés électriques. Pour cette raison, le facteur de remplissage (FF) et la tension en circuit ouvert (Voc) des cellules solaires basées sur de l'a-Si:H et particulièrement des cellules solaires en  $\mu\text{c-Si:H}$  (dont la croissance montre une plus grande sensibilité par rapport au substrat utilisé) ne doivent pas être altérés par le TCO [38].

#### 15. Conclusion

Dans ce chapitre, on a exposé les propriétés structurales et optiques du silicium amorphe

et microcristallin ont été comparées à celles du silicium monocristallin réalisé par dépôt chimique en phase vapeur assistée par plasma (PECVD). L'a-Si:H absorbe efficacement la lumière entre 300 and 800 nm. Le  $\mu\text{c-Si:H}$  absorbe la lumière dans le visible et l'infrarouge. L'a-Si:H et le  $\mu\text{c-Si:H}$  sont tous deux déposés par PECVD à une température de 180°C. Par la suite, nous avons comparé les cellules solaires basées sur le silicium monocristallin aux cellules solaires à couches minces de silicium du point de vu leurs structures et leurs fonctionnements. Les films d'oxydes conducteurs transparents (TCO), étant réalisés par le procédé de pulvérisation cathodique (ou sputtering).

# *Chapitre 3*

## **Les cristaux photoniques**

### **1. Introduction**

La notion de "cristaux photoniques" a été proposée pour la première fois en 1987, le premier cristal photonique a été réalisé en 1991. Les cristaux photoniques (CP), également connus sous le nom de structures à bandes interdites photoniques avec (abréviation BIP (en anglais, Photonic Band Gap, PBG)), ont été sujets à plusieurs travaux de recherches.

Les CP sont des systèmes très prometteurs pour des applications dans le domaine des ondes électromagnétiques, pour de réelles réalisations dans le domaine des micro-ondes, l'optoélectronique et les télécommunications optiques. Plusieurs travaux ont été réalisés sur les semi-conducteurs profitant des avancées technologiques en microélectronique.

Ces structures peuvent être obtenues par arrangement périodique de deux matériaux différents. Leur forme la plus simple est une structure périodique à une dimension composée d'un empilement de couches également appelé « miroir de Bragg ». Les cristaux photoniques ont la capacité d'inhiber la propagation de la lumière dans certaines directions pour une gamme de fréquences appelée la bande interdite photonique (BIP). Cette particularité optique intervient lorsque la longueur de maille du cristal est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de la lumière dans le milieu. Ce phénomène est dans une certaine mesure analogue à celui de l'ouverture de bandes interdites électroniques dans des cristaux atomiques de matériaux semi-conducteurs [39].

### **2. Bref historique sur les cristaux photoniques**

Ces dernières années, les matériaux à bande interdite photonique « BIP » ou cristaux photoniques ont suscité un intérêt important dans la communauté scientifique. Cet intérêt pour ces matériaux, dans lesquels l'indice de réfraction varie de façon périodique, est dû au fait qu'ils ont des propriétés optiques spécifiques. Le développement de ces nouveaux matériaux a ouvert des perspectives nouvelles pour la réalisation de nouveaux composants tels que des microcavités à haut facteur de qualité, des micro-guides à faibles pertes, des micro-sources lasers [39].

Les cristaux photoniques sont des matériaux la permittivité est modulé périodiquement selon une ou plusieurs dimensions l'espace.

L'idée originale développée par Yablonovitch [40], a été d'utiliser la bande interdite photonique (BIP), pour inhiber l'émission spontanée en annihilant la densité d'états des photons. Depuis, d'autres ont cru y déceler la solution idéale pour domestiquer le photon à l'échelle de la longueur d'onde, et rendre ainsi beaucoup plus compactes les dispositifs de l'optoélectronique et de l'optique guidée (et même le messie annonçant le traitement tout optique de l'information d'un bout à l'autre de la chaîne de communication).

C'est d'ailleurs pourquoi, une intense activité de recherche a investi le champ des cristaux photoniques bidimensionnels (beaucoup plus simple à fabriquer) réalisé dans le plan d'un guide d'onde (géométrie en guide d'onde): ce-dernier se charge et du confinement dans la troisième direction et de la compatibilité avec les technologies planaires de l'optique intégrée.

Dans le cas de [41], ils ont trouvé le terme microphotonique, ce dernier veut dire simplement que la taille de structures photoniques rencontrées est de dimension micrométrique. Mais pour autant, c'est le nanomètre qui constitue la référence d'échelle de dimension pour la conception et la fabrication (résolution lithographique, notamment) de dispositifs réellement performants.

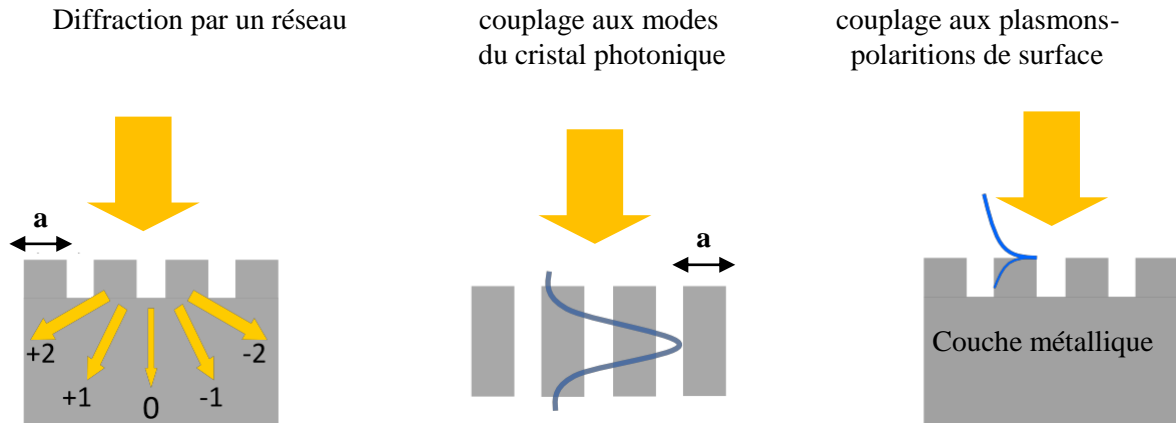
Les nouvelles voies ouvertes par les cristaux photoniques résident, dans les gammes de degrés de libertés qu'ils offrent pour le contrôle de la cinétique (piégeage, ralentissement) des photons, notamment en matière de résolutions angulaire, spatiale et spectrale.

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

Les auteurs de [42] ont introduit les caractéristiques optiques des principales structures exploitées pour le piégeage de la lumière dans des couches de faible épaisseur. L'intérêt de ces structures réside dans la possibilité d'augmenter fortement l'absorption sur certains intervalles de longueurs d'onde, en particulier près du gap des matériaux absorbants.

Les structures de piégeage de lumière à faible épaisseur ne peuvent bénéficier des approches d'optiques géométriques « classiques », comme des structurations antireflets pyramidales, mais doivent utiliser des approches d'optique ondulatoire. Le concept le plus simple est celui du réseau de diffraction ; des concepts plus élaborés sont les cristaux photoniques et les plasmons de surface. Ils sont représentés schématiquement sur la figure 3.1 [42].

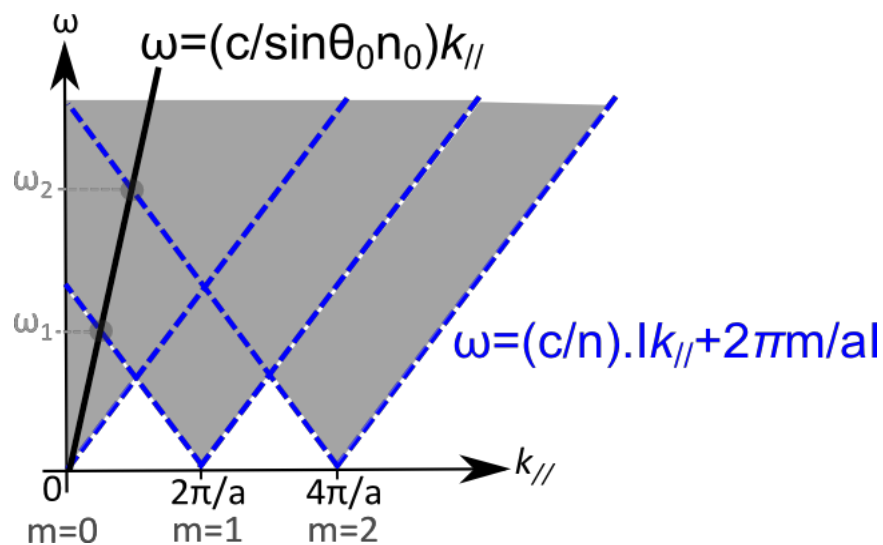
Dans un premier temps, nous chercherons à décrire ces effets séparément à l'aide de diagrammes de dispersion types, rassemblant l'essentiel de leurs propriétés physiques. Ces diagrammes permettent en effet de visualiser la relation existant entre la pulsation ( $\omega$ ) et la norme de la composante parallèle du vecteur d'onde (notée  $k_{//}$ ). Nous les utiliserons pour comprendre les propriétés de couplage de ces différentes structures, dans le but d'augmenter l'absorption de la lumière incidente [42].



**Fig. 3.1. Principales structures étudiées pour le piégeage de la lumière. Les deux premiers ordres sont représentés pour le réseau de diffraction. La période du réseau de diffraction et du CP est notée « a » [42].**

### 3.1. Diffraction de la lumière par un réseau

Le diagramme de dispersion d'un réseau de diffraction est représenté sur la figure 3.2 pour les deux premiers ordres de diffraction.



**Fig. 3.2. Diagramme de dispersion schématique d'un réseau de diffraction représenté pour les ordres de diffraction  $m=0,1$  et  $2$  et  $k_{//}>0$ . L'angle d'incidence de la lumière noté  $\theta_0$  est considéré ici non nul [2].**

On remarque sur cette figure la présence de plusieurs « lignes de lumière » (lignes en pointillés) définissant des « cônes de lumière » (zones engis). Ces cônes se répètent périodiquement tous les  $2\pi/a$  ( $a$  étant la période du réseau), ce qui correspond aux différents ordres de diffraction. Les ondes possédant un  $k_{//}$  situé dans le cône de lumière peuvent interagir avec les modes du réseau. Ainsi, pour une incidence  $\theta$  de la lumière, l'ordre  $\theta$  se propage quelle que soit la fréquence considérée car  $k_{//}$  est toujours compris dans le cône de lumière centré en  $\theta$ . Les ordres plus élevés (s'ils existent) apparaissent pour des fréquences croissantes :  $\omega_1$  pour l'ordre 1 et  $\omega_2$  pour l'ordre 2 [42].

Pour une application de piégeage de la lumière, il faut alors favoriser le couplage des ondes incidentes avec les ordres diffractés transmis ( $m > 0$ ) afin d'allonger leur chemin optique dans la couche de matériau actif située sous le réseau de diffraction. En diminuant l'épaisseur de cette couche jusqu'à ce qu'elle soit de l'ordre de la longueur d'onde, on quantifie les états optiques dans le matériau actif. On se rapproche alors davantage d'une configuration de type cristal photonique membranaire. Ce changement progressif de configuration s'accompagne d'une modification du diagramme de dispersion et des effets physiques exploités pour le piégeage de la lumière [42].

Le diagramme de bande d'un cristal photonique est représenté sur la figure 3.3 pour la première zone de Brillouin, par rapport au cas précédent, on note donc la discrétisation des états accessibles. On remarque de plus la présence de bandes interdites photoniques ou «BIP» aux limites de la première zone de Brillouin. Elles sont d'autant plus larges que la modulation de la permittivité est importante.

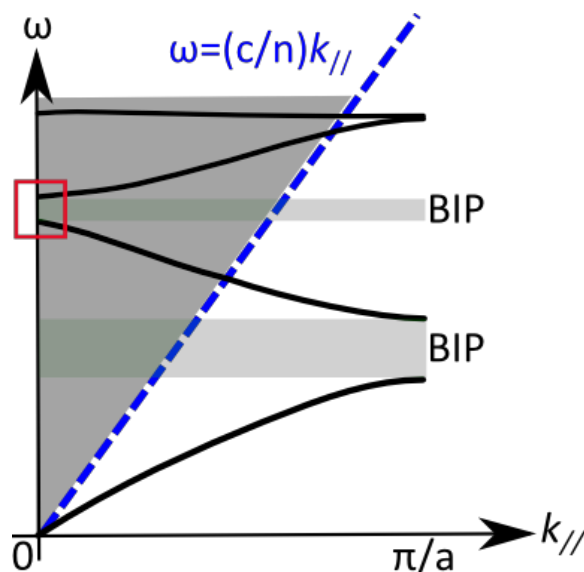
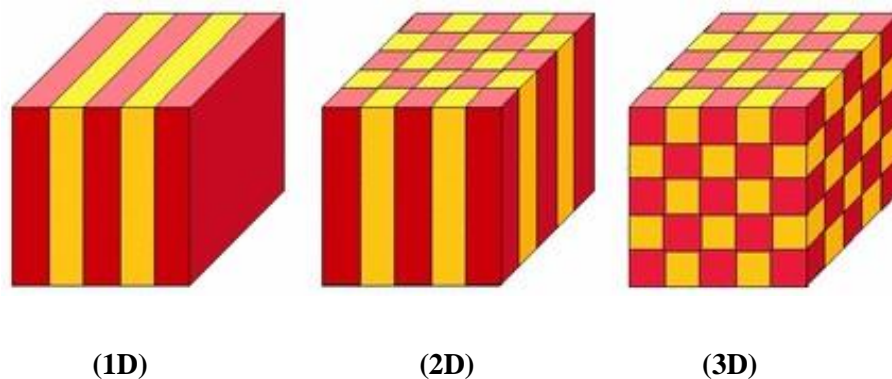


Fig. 3.3. Diagramme de dispersion schématisé d'un cristal photonique représenté dans la première zone de Brillouin (période du CP notée  $a$ ) et pour  $k_{//} > 0$ .

Aucun mode ne peut exister avec une fréquence située dans ces bandes interdites, les autres modes peuvent quant à eux interagir ou non avec les ondes de l'espace libre suivant leur valeur de  $k_{\parallel}$  et leur symétrie. Comme vu précédemment, une condition nécessaire pour coupler la lumière incidente avec les modes du cristal photonique est qu'ils soient situés au-dessus de la ligne de lumière. A titre d'exemple, considérons les modes encadrés en rouge sur la Figure 2.3 qui correspondent à une incidence quasi-normale ( $k_{\parallel} \approx 0$ ). On voit que ces modes sont disposés en bandes de part et d'autre de la BIP avec une courbure relativement faible. En couplant une onde incidente avec ces modes, il est alors possible de diminuer la vitesse de groupe des photons dans le cristal photonique membranaire absorbant, et donc d'optimiser leur temps de vie pour améliorer l'absorption [42].

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

Il s'agit en général de milieux diélectriques structurés dont la permittivité est modulée périodiquement selon une, deux ou trois directions. En pratique, la plupart des structures à cristaux photoniques sont réalisées au sein d'une couche mince d'indice de réfraction élevée et ayant une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde. Il est donc préférable d'employer un cristal photonique membranaire. Ce dernier correspond aux cristaux photoniques qui sont intégrés au sein d'un guide d'onde plan, ce qui permet un confinement réfractif de la lumière dans l'épaisseur de la couche. Le contrôle latéral de la lumière est assuré par un effet diffractif dans une, deux ou trois directions de l'espace, selon le type de structuration considéré (voir figure 3.4) [42].



**Fig. 3.4. Représentation schématique de cristaux photoniques : unidimensionnels (1D), bidimensionnel (2D) et tridimensionnel (3D) [39].**

## 4. Différent type des cristaux photoniques

### 4.1. Les Cristaux photoniques unidimensionnel (réseau de Bragg)

Un cristal photonique unidimensionnel (1D) est composé de l'alternance périodique dans une seule direction de l'espace de deux milieux diélectriques de constantes diélectriques respectives  $\varepsilon_1$  et  $\varepsilon_2$  (figure 3.5). Le miroir de Bragg constitué d'un empilement successif de couches de deux indices de réfractifs différents forme un cristal photonique à une dimension. Les bandes interdites ou « gap » de cette structure, appelée également miroir de Bragg, sont sensibles à l'angle d'incidence de l'onde. Ainsi pour obtenir un contrôle des bandes interdites quel que soit l'angle d'incidence, il faut étendre la périodicité de la structure à 2 ou 3 dimensions. Les structures 1D sont utilisées comme miroirs diélectriques ou filtres optiques [39].

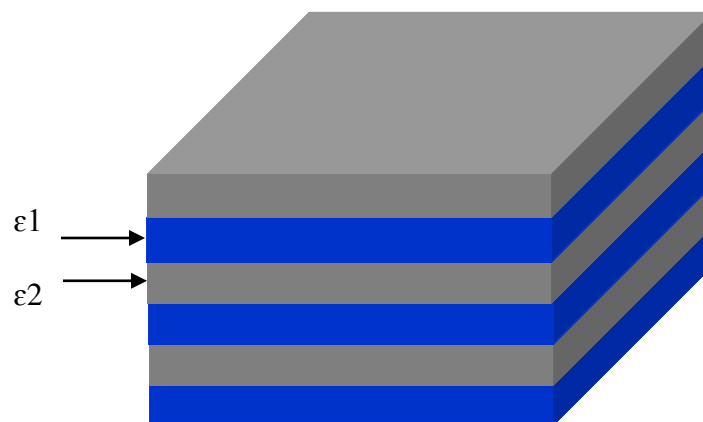


Fig. 3.5. Schéma d'un miroir de Bragg constitué d'un milieu diélectrique périodique [39].

Le fait d'introduire un défaut ou de rompre la périodicité d'une structure permet, par exemple, d'autoriser la propagation d'une onde de fréquence  $\omega_0$  comprise dans la bande interdite photonique. Des filtres très sélectifs peuvent être ainsi réalisés. Une simple couche plus épaisse que les autres dans la structure, peut constituer ce défaut (Figure 3.6).

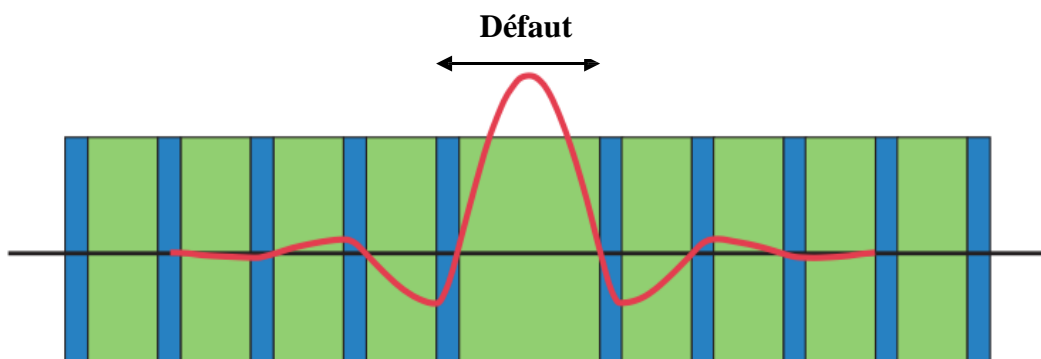
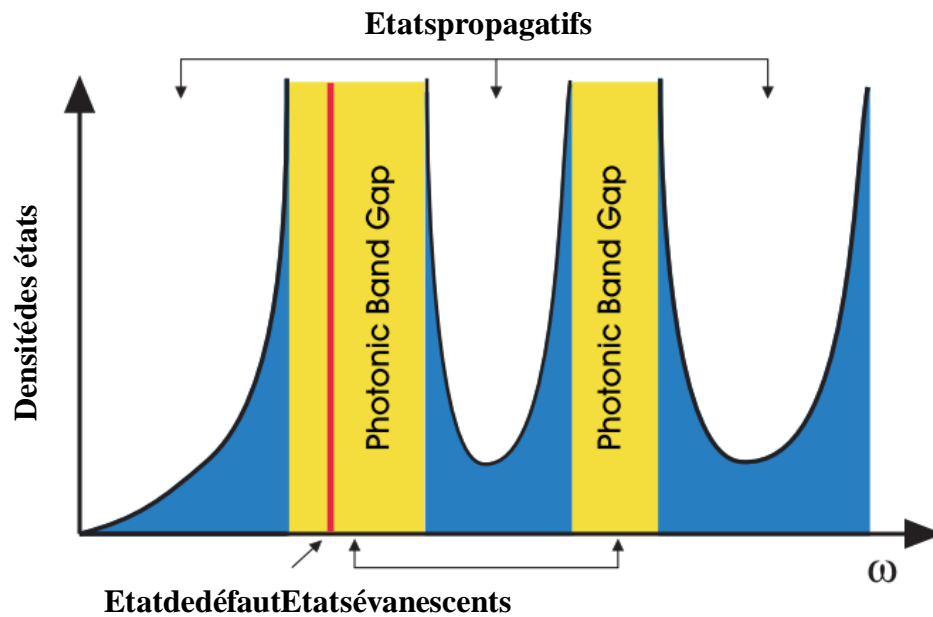


Fig. 3.6. Défaut dans une structure périodique unidimensionnelle, formé par l'élargissement d'une couche [39].

Pour étudier l'influence d'un défaut, on se restreint à l'axe de propagation et on considère un mode dont la fréquence  $\omega$  appartient à la bande interdite photonique. Il n'y a pas de modes propagatifs à la fréquence  $\omega$  dans le réseau périodique même si un défaut est introduit dans la structure. La rupture de périodicité nous empêche de décrire les modes du système avec le vecteur d'onde  $k$ , mais il est possible de déterminer si une certaine fréquence peut supporter des états propagatifs dans le reste du cristal. Dans ce cas, on peut diviser en espaces de fréquence les régions dans lesquelles les états sont propagatifs ou évanescents, ce qui est illustré figure 3.7.

Les défauts permettent à des modes localisés d'exister, avec des fréquences incluses dans la bande interdite photonique [39].

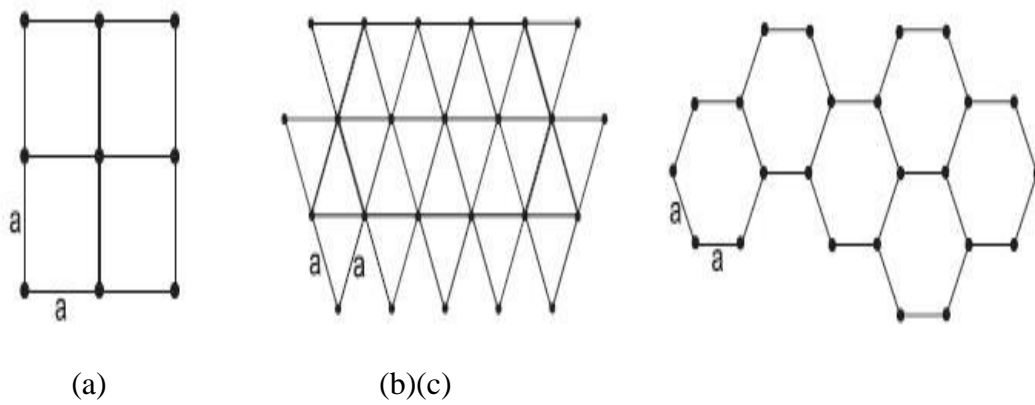


**Fig. 3.7. Division de l'espace des fréquences dans les états propagatifs et évanescents.**

Dans ce schéma, la densité d'états (nombre de modes permis par unité de fréquence) est nulle dans les bandes interdites du cristal (zone jaune). Les modes ne peuvent exister dans ces régions que s'ils sont évanescents, et si la périodicité est rompue par un défaut (trait rouge) [39].

#### 4.2. Les cristaux photoniques bidimensionnels

Un cristal photonique bidimensionnel est une structure qui présente une modulation périodique de la permittivité diélectrique suivant deux directions de l'espace, et homogène dans la troisième. Il existe plusieurs façons de réaliser ces structures bidimensionnelles. Les structures 2D se regroupent principalement suivant trois familles de réseaux qui sont le réseau carré, triangulaire et hexagonal (figure 3.8) [39].

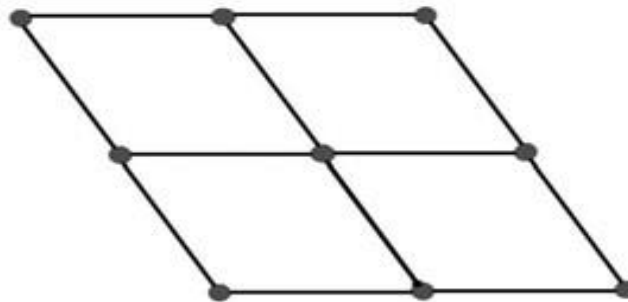


**Fig. 3.8. Structure 2D : (a) Structure carrée, (b) triangulaire et (c) hexagonale [39].**

La représentation des diagrammes de bandes se fait pour des composantes du vecteur d'onde variant le long des directions de hautes symétries. Ces points de haute symétrie se trouvent dans la première zone de Brillouin qui fait partie du réseau réciproque.

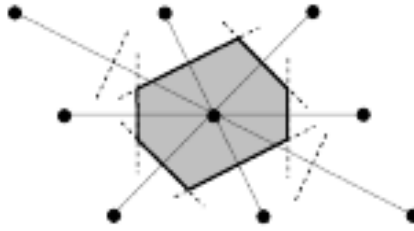
#### 4.2.1. Réseau direct et réseau réciproque

Considérons la structure périodique à deux dimensions représentée sur la figure 3.9. Sur cette figure apparaissent quatre mailles élémentaires, l'ensemble de ces mailles constitue un réseau direct



**Fig. 3.9. Réseau direct d'une structure à deux dimensions**

Nous pouvons aussi obtenir une maille élémentaire de même surface en traçant les lignes qui relient un nœud donné à tous ses voisins, puis on trace les médiatrices de ces segments. Le plus petit volume enclos de cette façon, comme le montre la figure 3.10, est la maille élémentaire de Wigner–Seitz.

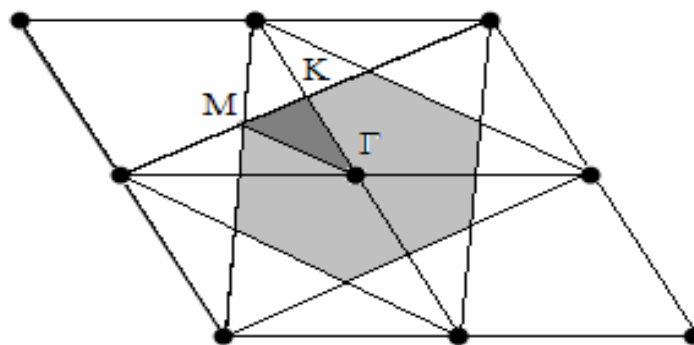


**Fig. 3.10. Maille élémentaire Wigner - Seitz du réseau direct [39].**

De cette manière nous pouvons obtenir le réseau réciproque de chaque structure et à tout le réseau direct on peut faire correspondre un réseau réciproque

#### 4.2.2. Zone de Brillouin irréductible

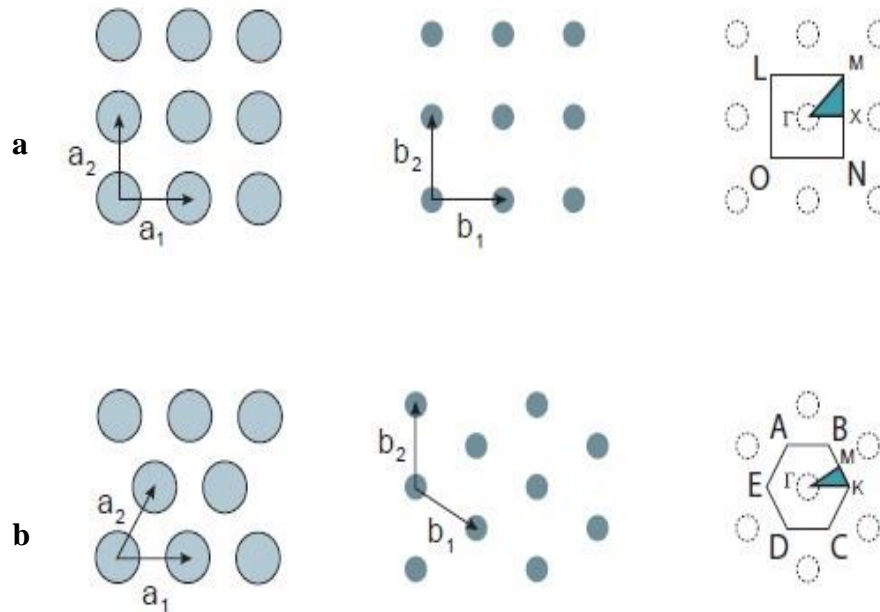
Des études théoriques sur des ondes planes se propageant dans un milieu à deux dimensions ont montré que la fréquence de ces ondes forme une fonction périodique du vecteur  $\vec{a}$  qui définit la direction de propagation, dans le réseau réciproque. La plus petite aire issue de ces vecteurs  $\vec{a}$  est une zone fondamentale qui s'appelle la première zone de Brillouin. Pour construire cette zone, nous plaçons au centre de la cellule l'origine  $\Gamma$  du réseau réciproque. Nous traçons un nombre suffisant de vecteurs joignant l'origine aux nœuds voisins de ce même réseau. Nous construisons ensuite les médiatrices de ces vecteurs. La plus petite aire interceptée par ces médiatrices est la zone de Brillouin irréductible qui contient l'ensemble des vecteurs d'ondes du photon qui permettent de décrire de façon complète le diagramme de bandes. La figure 3.11 en donne un exemple de la zone de Brillouin irréductible.



**Fig. 3.11. Construction de la zone de Brillouin irréductible défini dans un réseau réciproque.**

La figure 3.12 donne une représentation graphique des réseaux réciproques, de la première zone de Brillouin et de la zone de Brillouin irréductible pour les réseaux 2D carrés et triangulaire. Pour le réseau carré, la première zone de Brillouin est un carré (LMNO) dont le

centre est le point  $\Gamma$  de coordonnée  $(0,0)$ .



**Fig. 3.12. Réseau réel, réciproque, première zone de Brillouin et zone de Brillouin irréductible pour les réseaux 2D (a) carré et (b) triangulaire [39].**

La zone de Brillouin irréductible est alors un triangle communément appelé ( $\Gamma X M$ ) dont la surface est  $1/8$  de celle de la première zone de Brillouin. Dans le cas du réseau triangulaire, les vecteurs du réseau réel ne sont plus colinéaires à ceux du réseau réciproque. La première zone de Brillouin est un hexagone ( $ABKCDE$ ) et sa zone de Brillouin irréductible est un triangle ( $\Gamma M K$ ) dont la surface est  $1/12$  de celle de la première zone de Brillouin.

### 4.3. Les cristaux photoniques tridimensionnels

Les cristaux photoniques 3D existent dans la nature depuis toujours, le premier cristal photonique 3D a été fabriqué en 1990 par K.M Ho et al. Il était formé de sphères de silicium arrangées selon une structure diamant. Mais l'histoire retient généralement la célèbre Yablonovitch, structure 3D pour les micro-ondes fabriquée en 1993 par E. Yablonovitch en perçant des trous dans du plexiglas selon trois angles azimutaux séparés de  $120^\circ$  et faisant un angle de  $35^\circ$  par rapport à la normale. De nombreuses méthodes de fabrication de structures 3D ont été proposées [39]. Les cristaux photoniques 3D, constituent la seule structure qui permette d'obtenir une bande d'énergie interdite dans toutes les directions de l'espace (figure 3.13 et 3.14).

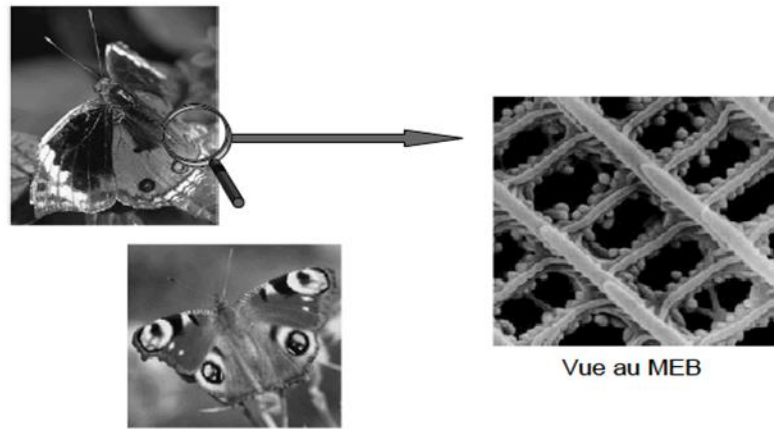


Fig. 3.13. Un exemple de structure photonique 3D : les ailes de papillon [41].

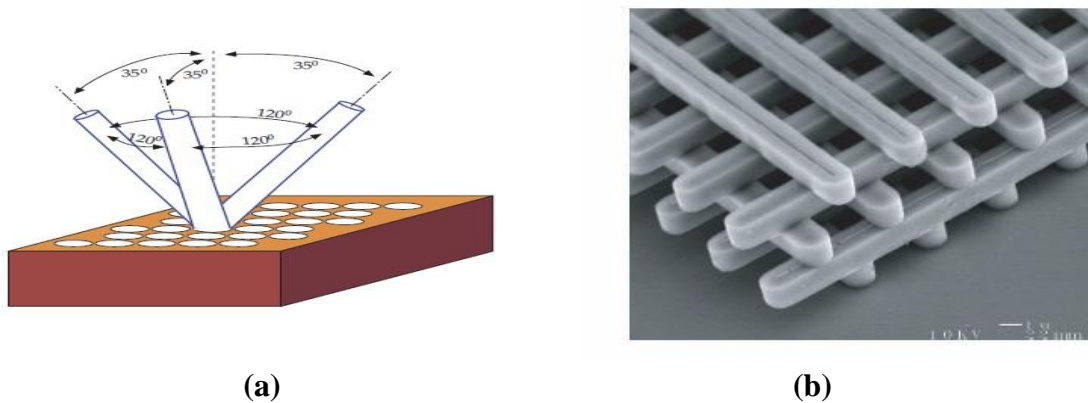


Fig. 3.14 . (a) Représentation schématique de structures 3D de« la Yablonovitch », (b) Image d'unCP3D « tas de bois » [39].

### 5. Les cristaux photoniques 1D

Un cristal photonique unidimensionnel est un milieu imaginaire de dimension 1 dont on a structuré périodiquement l'indice optique ; milieu qu'il ne faut pas confondre avec un objet de dimensionnalité réduite à une, dans un monde réel de dimension trois.

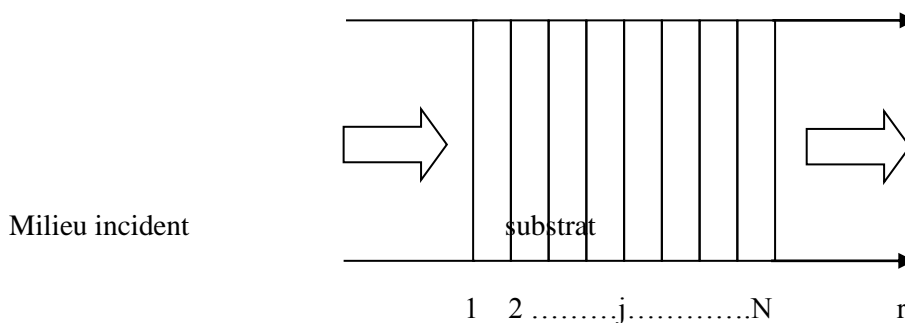


Fig. 3.15. Cristal photonique 1D : la propagation est normale au plan des couches [41].

Cette situation imaginaire correspond approximativement au cas réel d'un empilement périodique de couches dont les dimensions latérales sont grandes devant la période de l'empilement et que l'on considère selon la seule direction ou incidence verticale au plan des

couches (figure 3.15). La mise en œuvre d'empilements de couches diélectriques ne date pas d'hier et fait partie, depuis des décennies, de l'arsenal des opticiens pour le contrôle du signal optique. Ils disposent en particulier des outils de modélisation et de conception de ces structures périodiques, fondés sur la résolution des équations de Maxwell en utilisant la technique dite des matrices de transfert.

Il s'agit, en bref, de suivre à la trace les composantes transmises et réfléchies du champ électromagnétique, lors de leur traversée des interfaces et des couches, auxquels sont attribuées des matrices de transfert, dont le produit permet de déterminer les coefficients de transmission et de réflexion de l'empilement considéré. L'emblématique miroir de Bragg nous en fournit un exemple bien connu : il s'agit d'un empilement périodique de couches alternées quart d'onde d'indices différents [41].

## 6. Courbes de dispersion d'un milieu périodique 1D

### 6.1. Structure et description des courbes de dispersion

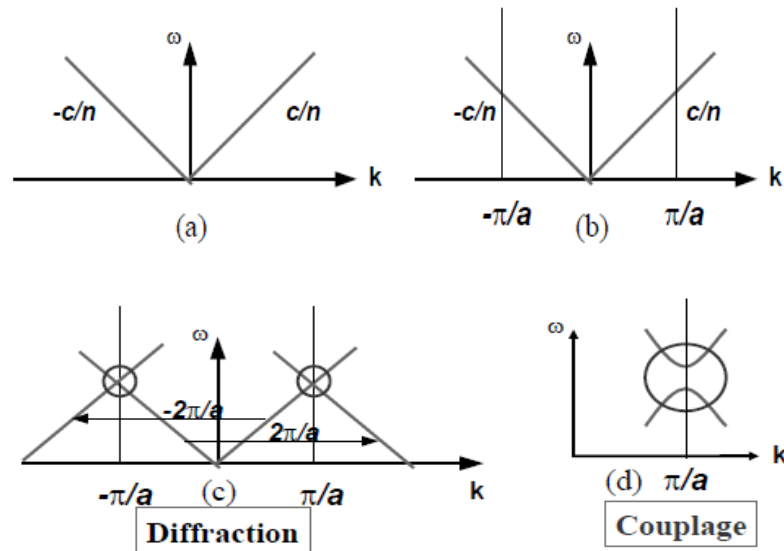
La genèse des courbes de dispersion est illustrée sur la figure 3.16. Dans le cas du milieu homogène (figure 3.16 a), les caractéristiques de dispersion sont simplement des droites d'équation  $\omega = \pm \frac{c}{n} k$ , relatives aux ondes propagatrices et aux ondes propageant en contre propagation, que nous appellerons « contre propagatrices », respectivement, qui s'ignorent mutuellement. La structuration périodique du milieu entraîne les processus de diffraction se traduisant par des translations successives (ordres de diffraction : voir figure 3.16 b) des caractéristiques de dispersion de nombres entiers (positifs ou négatifs) de fois  $\frac{2\pi}{a}$ : la périodicité de période  $a$  dans l'espace réel introduit une périodicité de période  $\frac{2\pi}{a}$  de l'espace dit réciproque des vecteurs de propagation.

On observe sur la Figure 3.16c que les caractéristiques de dispersion des modes se propageant dans des directions opposées se croisent en des points de coordonnées :

$$(\omega, k) = \left( \frac{c}{n} p \frac{\pi}{a}, \pm p \frac{\pi}{a} \right) \quad (3.1)$$

Exprimant le fait que les ondes propagatrices et contre propagatrices peuvent désormais se coupler par les processus de diffraction. On est donc en présence d'un phénomène de dégénérescence en ces points particulier puisque deux modes se propageant dans des directions opposées sont censés coexister pour le même point de fonctionnement  $(\omega, k)$ .

Cette coexistence ne durera que le temps qui sera nécessaire à leur couplage diffractif, à l'issue duquel la dégénérescence sera finalement levée, d'autant plus fortement que le couplage sera efficace. On parle alors plutôt d'un « anti-croisement » entre les modes couplés conduisant à la formation d'une bande interdite photonique (Figure 3.16 d) dont la largeur est fonction croissante du taux de couplage, lequel est lui-même fonction croissante de l'amplitude de modulation périodique de l'indice optique [39].



**Fig. 3.16.** Les courbes de dispersion des modes optiques dans un milieu périodique sont dominées par les processus de diffraction et de couplage entre modes [39].

### 6.2. Approche qualitative

Les miroirs de Bragg sont des empilements de couches de matériaux diélectriques de permittivités différentes. Considérons un miroir comportant deux types de couches de longueur et de permittivité  $(a_1, \epsilon_1)$  et  $(a_2, \epsilon_2)$ . Prenons  $\epsilon_1 < \epsilon_2$  et appelons  $a$  la période spatiale de l'empilement (Figure 3.17). Supposons qu'une onde plane électromagnétique arrive en incidence normale aux couches et essayons de déterminer sa propagation dans le miroir. En pressant le cas particulier d'un réseau de Bragg on peut obtenir :

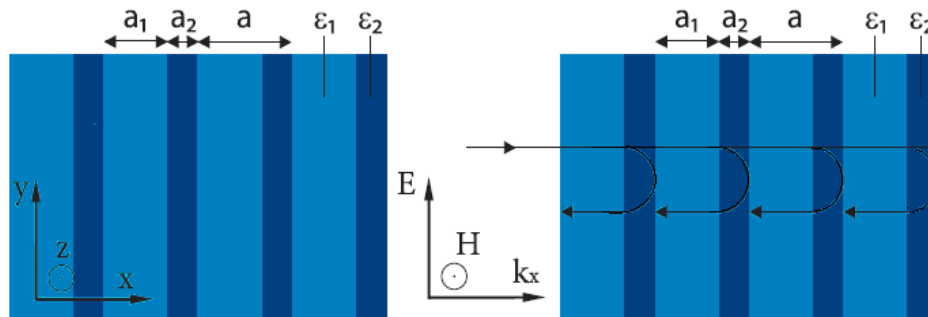
$$n_1 a_1 + n_2 a_2 = \lambda_B / 2 \tag{3.2}$$

Avec :  $n_1 = \sqrt{\epsilon_1}$  et  $n_2 = \sqrt{\epsilon_2}$

$\lambda_B$  : la longueur d'onde de Bragg.

Les ondes réfléchies sont alors en phase. Celles-ci interfèrent constructivement pour donner naissance à une onde réfléchie dans le milieu incident. Cette particularité optique

intervient lorsque la longueur de maille du cristal est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de la lumière dans le milieu. Ce phénomène est dans une certaine mesure analogue à celui de l'ouverture de bandes interdites électroniques dans des cristaux atomiques de matériaux semi-conducteurs. Si le nombre de couches est suffisant, il permet d'atteindre des coefficients de réflectivité très élevés [43].



**Fig. 3.17. Représentation schématique d'un miroir de Bragg constitué de 2 types de couches de permittivité  $\epsilon_1$  et  $\epsilon_2$ . La maille du cristal est  $a=a_1+a_2$ . Nous considérons une onde plane électromagnétique polarisée suivant l'axe (Oy). A droite, schémas des réflexions sur des mailles successives pour  $\lambda=\lambda_B$  (longueur d'onde de Bragg) [43].**

Pour que cette lumière soit réfléchi quel que soit son angle d'incidence, il faut étendre la périodicité du cristal photonique à deux ou trois dimensions. Les matériaux usuels (*polymères, verre, oxydes, ...*) que l'on trouve dans la nature ont des indices de réfraction qui dépassent rarement 1.6, cela fait que les cristaux photoniques sont obtenus de façon artificielle en structurant périodiquement et de diverses manières des matériaux différents [43].

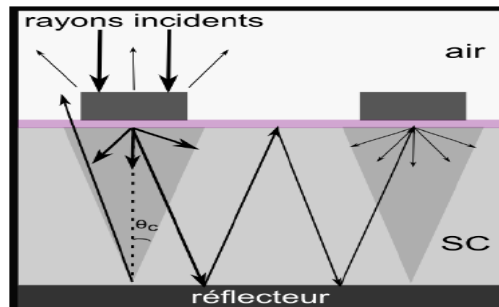
## 7. Etat de l'art de la photonique pour le photovoltaïque

L'émergence des cellules en couche mince, et les limitations optiques qui y sont associées, ont fait de la (nano) photonique une boîte à outil incontournable pour de dispositifs à haut rendement. Le développement accéléré des moyens de simulation numérique et de fabrication de nanostructures a constitué un creuset favorable pour de telles études, ce qui a donné lieu à une littérature prolifique [44]. En conséquence, il est impossible de décrire de manière exhaustive l'ensemble de ces études.

Les effets d'anti-reflet n'interviennent pas dans le piégeage de la lumière mais peuvent être une conséquence de la nano structuration [45] et sont à ce titre détaillés en début de chapitre.

### 7.1. Substrats texturation aléatoire

Comme nous l'avons vu précédemment, une texturation aléatoire à la surface d'une couche absorbante permet d'augmenter son absorption en diminuant la réflexion et en multipliant le nombre d'angles de propagation en son sein, ce qui augmente le chemin optique moyen de la lumière. Une façon d'introduire ces surfaces est de déposer les différentes couches de la cellule de manière quasi-conforme sur un substrat texturé aléatoirement, ce qui engendre la structuration de la face avant (Figure 3.18).



**Fig. 3.18. Schéma représentatif du phénomène de diffusion de la lumière par des microstructures en face avant d'une cellule solaire. Une réflexion totale interne est réalisée pour  $\theta > \theta_c$  [42].**

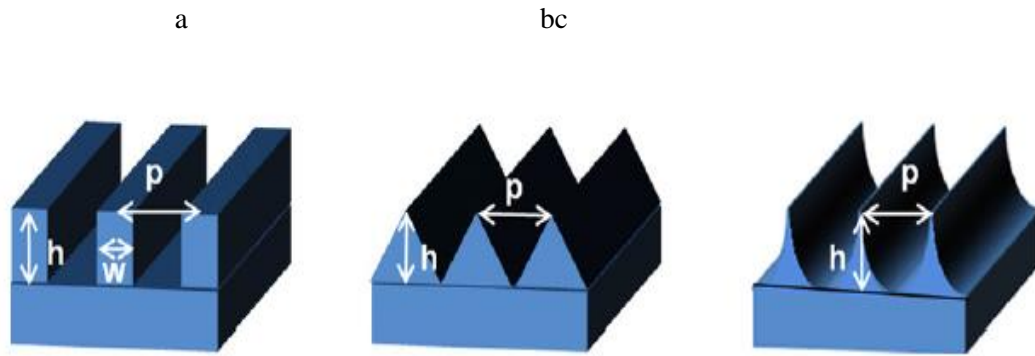
Ainsi, la version commerciale de ces substrats texturés aléatoirement est régulièrement utilisée comme référence pour évaluer expérimentalement l'efficacité des méthodes de piégeage de la lumière. En déposant les différentes couches sur substrats verres, il est alors possible d'obtenir un gain optique significatif sans trop modifier les propriétés électriques de la cellule [42].

L'utilisation de ce genre de substrats résulte en la diffusion de la lumière qui conduit à une augmentation de l'absorption dans la couche active de la cellule, ceci se traduit par un accroissement du courant photovoltaïque [46,45] et il a été établi que l'augmentation de l'absorption pour de telles structures pouvait être décrite en tenant compte de la fraction de lumière.

### 7.2. Réseaux de diffraction

Plusieurs auteurs ont également étudié l'influence du profil des réseaux. Par exemple, Naqavi et al. ont simulés trois types de réseaux 1D en face arrière (binaire, sinusoïdal ou en « dents de scie »).

Dans ce qui suit, nous allons considérer seulement les configurations qui exploitent spécifiquement les réseaux de diffraction. L'idée d'intégrer de telles structures au sein d'une cellule solaire en couches minces a été émise dès 1983 par Sheng et al.



**Fig. 3.19. Design 1D PCs avec différent profil : (a) rectangulaire ; (b) triangulaire ; and (c) circulaire [46].**

Cette thématique a alors pris une importance accrue avec la diminution des épaisseurs des couches actives et s'est généralisée à différents matériaux et différentes configurations (réseaux simples en face avant ou arrière de la cellule, dépôt conforme des couches de la cellule sur un substrat structuré, double réseau, etc.).

Le mécanisme de base permettant d'augmenter l'absorption aux grandes longueurs d'onde peut être vue de plusieurs manières suivant la configuration considérée. Ainsi, cela peut consister à diffracter la lumière avec un angle de propagation le plus grand possible de manière à ce que le chemin optique soit maximisé (notamment via une réflexion totale interne sur la face avant), ou encore à coupler la lumière incidente avec les modes guidés se propageant dans la couche absorbante. Aux faibles longueurs d'onde, les réseaux de diffraction peuvent également contribuer à l'augmentation de l'absorption en diminuant les pertes par réflexion en face avant, comme mentionné plus haut [42].

Plusieurs facteurs peuvent néanmoins limiter l'efficacité des réseaux de diffraction. Il s'agit par exemple de l'absorption parasite importante qui a lieu dans le métal lorsqu'un réseau est formé directement dans le réflecteur en face arrière de la cellule. Cet effet peut être atténué en déposant une couche d'oxyde entre la couche active et le réseau métallique. Une autre limitation relève des propriétés intrinsèques des réseaux de diffraction. En effet, ces derniers sont optimisés pour une gamme spectrale restreinte et un angle d'incidence donné, ce qui a priori s'accorde mal avec une application photovoltaïque.

Ainsi, l'optimisation des réseaux de diffraction (strictement périodiques) doit être effectuée en raisonnant sur l'ensemble du spectre pour établir des conclusions valides. Contrairement aux substrats texturés aléatoirement, ces structures permettent un contrôle précis des propriétés optiques de la cellule grâce à l'ajustement de leurs paramètres géométriques (période, profondeur de gravure, facteur de remplissage, etc.).

De ce fait, il est possible de concevoir un réseau de diffraction optimisé autour d'une longueur d'onde donnée de manière à améliorer l'absorption intégrée de la cellule ou directement son rendement. Ce dernier point résume l'enjeu de nombreuses études qui se sont attelées à définir la géométrie idéale pour ces réseaux en tenant compte de trois effets principaux : les effets d'anti-reflets, l'efficacité de la diffraction et l'absorption parasite au niveau du réflecteur [42].

### 7.3. Cristaux photoniques absorbants

Nous avons vu précédemment que les cristaux photoniques, pouvaient être utilisés pour assister l'absorption en tant qu'élément externe à la couche active. Cela inclut par exemple les cristaux photoniques en face arrière des cellules (couplés ou non à des réseaux de diffraction) pour l'allongement du chemin optique ou encore l'exploitation de leurs propriétés optiques ajustables pour la création de réflecteurs intermédiaires au sein de cellules tandem [47, 48]. Une autre configuration consiste à structurer directement la couche absorbante en un cristal photonique afin de renforcer l'interaction lumière-matière.

Au préalable, il est nécessaire de faire la distinction entre une corrugation superficielle de la couche active et la création d'un cristal photonique membranaire absorbant. Dans le premier cas, il s'agit d'améliorer le couplage entre la lumière incidente et les modes quasi-guidés dans la couche active qui sont peu perturbés par la structuration. A l'inverse, dans le second cas, on cherche à coupler la lumière incidente avec les modes propres guidés du cristal photonique membranaire absorbant. Ces derniers sont caractérisés par une vitesse de groupe faible (« modes de Bloch lents »), ce qui permet d'ajuster le temps de vie des photons (à environ  $10^{-15}$  -  $10^{-14}$  s) dans la couche absorbante et d'augmenter leur absorption. Cela peut être effectué dans une gamme spectrale précise grâce au contrôle des paramètres du cristal photonique, ce qui diffère d'autres approches telles que celles utilisant des substrats texturés aléatoirement. En outre, cette structuration est particulièrement efficace pour la collection de la lumière comme évoqué plus haut pour les structures biomimétiques. Ces effets ont tout d'abord été mis à profit par Seassal et al. Pour augmenter l'absorption de 58% réel dans une couche de a-Si :H de 100nm d'épaisseur grâce à une structuration 1D et cela, en vue de son intégration dans une cellule solaire complète [49].

Il a ensuite été démontré par simulation qu'une optimisation des paramètres géométriques de cristal photonique 1D absorbants (période et facteur de remplissage) permettait d'augmenter l'absorption de manière significative (+35% entre 300nm et 750nm pour une

couche de 100nm du silicium amorphes hydrogénés) et que l'absorption dans les cellules obtenues était robuste vis-à-vis des paramètres du cristal photonique et de l'angle d'incidence de la lumière [50]. En parallèle, d'autres groupes de recherche ont prolongé ce concept pour différentes configurations et différents matériaux. Ainsi, Chutinan et al. Ont montré par simulation que la structuration d'une couche active de silicium cristallin (c-Si) de  $2\mu\text{m}$  d'épaisseur en un cristal photonique 2D optimisé permettait d'augmenter le rendement de la cellule de 11% [51]. Bien que ces résultats soient instructifs sur un plan théorique, la structure proposée dans cette étude est néanmoins irréalisable. Par la suite, les propriétés optiques de cristal photonique 2D absorbants en a-Si :H ont été étudiées au début de cette thèse afin de concevoir leur intégration dans une cellule en couches (ultra)minces optimisée [52].

Ce travail a souligné la supériorité des cristal photonique 2D par rapport aux cristal photonique 1D en termes d'insensibilité à la polarisation de la lumière et d'absorption maximale atteignable, et a montré qu'une augmentation de l'absorption de 27% réelle dans la couche active était possible du fait de la structuration 2D (réseau carré).

Des structures plus complexes, faisant intervenir un cristal photonique 2D à double facteur de remplissage (défini verticalement) dans une couche de 400nm de c-Si ont fait l'objet d'une étude théorique qui rapporte des gains en absorption intégrée d'environ 25% par rapport à une cellule de référence non structurée [53]. De même, des réseaux 1D à facteur de remplissage (défini latéralement) gravés dans une couche de silicium polycristallin ont été utilisés pour renforcer l'absorption dans le proche infra-rouge (920nm-1040nm) par un facteur 3 et pour des angles d'incidence allant jusqu'à  $40^\circ$  [54]. Il est intéressant de noter que dans cette structure, les modes sont distribués en « dents de scie » ce qui participe à l'allongement du chemin optique de la lumière. L'effet de la profondeur de gravure a également été mis en avant par Zanotto et al. pour des cristal photonique 1D formés dans une cellule à base de a-Si:H (épaisseur=100 nm ou 300 nm) ou de c-Si (épaisseur= 500 nm ou 1000 nm) [55]. Pour une gravure totale, les gains peuvent alors s'élever jusqu'à 12,4% pour du a-Si:H et 36,5% pour du c-Si. Cependant, il apparaît qu'une gravure partielle de la couche active est préférable, car elle permet un gain significatif du courant de court-circuit tout en facilitant la réalisation des cellules ainsi conçues. Dans ce cas, l'augmentation de l'absorption s'explique entre autres grâce au couplage de la lumière incidente avec les modes quasi-guidés de la structure. La présence d'une couche non structurée sous la corrugation permet de briser la symétrie du système et d'augmenter le nombre de modes accessibles pour le couplage avec les ondes incidentes [56].

Plus récemment, cette étude a été généralisée en considérant également des réseaux 2D

(carrés et triangulaires) et différentes épaisseurs de la couche active [57]. Les simulations optiques montrent que des réseaux 2D triangulaires optimisés peuvent conduire aux mêmes absorptions que pour des réseaux 2D carrés, bien que leur  $J_{sc}$  soit légèrement inférieur. De plus, les auteurs ont cherché à comparer les valeurs de  $J_{sc}$  obtenues pour les configurations optimisées avec celles calculées dans le cadre de la limite de Yablonovitch. Il apparaît que ces valeurs restent inférieures à la limite théorique (Yablonovitch) lorsqu'on considère l'ensemble du spectre utile, mais que l'introduction d'un « désordre contrôlé » dans la structure permet d'accroître un peu plus son absorption. Cette approche, basée sur la localisation d'Anderson, participe en effet à l'augmentation du temps de vie des photons dans la couche absorbante et donc de leur probabilité d'absorption [58].

Un autre groupe de recherche [56] a également étudié la gravure partielle de la couche active (« système hybride » formé à partir d'un cristal photonique membranaire sur une fine couche non structurée) pour ces mêmes matériaux (c-Si, a-Si:H) mais aussi pour des semi-conducteurs III-V (InP et GaAs).

Les structures analysées, cristal photonique 1D et réseau 2D carré de nano-trous ou de nano-piliers gravés sur la moitié de la couche active, possèdent une période et un facteur de remplissage fixe et seule l'influence des épaisseurs des couches est étudiée. Pour une épaisseur totale de 300nm, les différentes configurations « hybrides » présentent un gain optique par rapport à une référence non structurée et possédant une couche anti-reflet optimisée. Dans le cadre de cette étude, il apparaît que l'absorption dans la configuration utilisant des nano-piliers est supérieure à celle utilisant des nano-trous pour les matériaux à gap direct. Pour le a-Si:H et le c-Si, les gains obtenus dans ces deux configurations sont quasiment équivalents. En augmentant l'épaisseur totale jusqu'à 1 $\mu$ m pour les différents matériaux excepté le silicium amorphe (limitation sur la longueur de diffusion des porteurs de charge), deux tendances apparaissent selon la nature du gap. Pour les matériaux à gap direct, la nano-structuration partielle de la couche ne permet pas d'augmenter l'absorption par rapport à une couche plane avec une couche d'AR optimisée (observé dès 600 nm en épaisseur). Cela n'est pas le cas pour le c-Si (gap indirect), comme mis en évidence dans [57].

Le passage de ces études théoriques à la fabrication de cristaux photoniques absorbants s'est déroulé en plusieurs étapes. Dans un premier temps, le concept a été validé sur la base de démonstrateurs optiques consistant en une couche ultramince de a-Si:H simple déposée sur un substrat de verre et gravée en cristal photonique 1D via lithographie holographique et gravure par plasma[59].

Les mesures optiques ont montré une augmentation de l'absorption d'environ 50% sur l'ensemble du spectre par rapport à une couche plane, conformément aux résultats de simulation. Dans un second temps, un réseau carré de trous a été transféré dans un empilement complet comprenant des couches transparentes conductrices (TCO), la couche active de a-Si:H et un réflecteur d'argent en face arrière [60]. Les spectres d'absorption mesurés par sphère intégrante ont mis en évidence une augmentation de l'absorption sur l'ensemble de spectre avec en particulier, pour les grandes longueurs d'onde (>550 nm), la présence de plusieurs pics correspondant aux modes quasi-guidés.

La filière technologique conduisant aux cellules « photonisées » a enfin été présentée et les échantillons obtenus ont été caractérisés par des mesures de micro-réflexivité afin de souligner l'homogénéité des paramètres du cristal photonique sur la surface des échantillons [57]. Dans le même temps, Mallick et al. ont mis en évidence une augmentation de l'efficacité quantique externe (EQE) dans le proche infra-rouge grâce à la structuration en cristal photonique 2D d'une couche ultramince (335 nm) de c-Si [61]. Il faut néanmoins préciser que cette dernière démonstration expérimentale a été réalisée sur une jonction latérale en l'absence de réflecteur et de ce fait, elle apporte plus une preuve de concept qu'une cellule opérationnelle pour le PV. Un problème propre à la fabrication de ces cellules, à savoir l'effet des recombinaisons de surface sur les flancs du cristal photonique structuré par gravure par plasma, a été soulevé dès 2010 [62] avant d'être étudié plus spécifiquement par simulations optoélectroniques dans [63, 64].

## 8. Conclusion

Les cristaux photoniques (CP) désignent des structures diélectriques, modulées de façon périodique sur une ou plusieurs directions de l'espace, et qui permettent le contrôle des ondes électromagnétiques à l'échelle de la longueur d'onde. Cette modulation périodique, à l'échelle de la longueur d'onde est opérée dans une ou plusieurs directions de l'espace. Cette périodicité est à l'origine de leurs propriétés particulières, notamment l'existence de bandes interdites photoniques interdisant la propagation de la lumière. La succession périodique de couches d'indices différents, entretient des phénomènes de réflexions constructives, qui vont empêcher les longueurs d'ondes respectant la condition de Bragg de se propager dans ce système (sur une distance plus ou moins grande). Nous avons vu que ces cristaux photoniques sont très prometteurs pour la réalisation de composants optiques planaires compacts et originaux.

# Chapitre 4

## Résultats de simulations

### 1. Introduction

Afin de répondre aux besoins des ingénieurs de concevoir des dispositifs optiques de très petites tailles, il est nécessaire d'être en mesure de faire face à la conception et l'optimisation de ces dispositifs de manière efficace. A priori, la conception et l'optimisation de ces dispositifs s'avèrent très difficile car des solutions analytiques ne peuvent pas être obtenues étant donné la complexité de certaines géométries.

Il semble risquer pour les ingénieurs de construire des dispositifs complexes sans avoir à l'avance une très bonne approximation des performances attendues, vue la complexité et la difficulté de leur fabrication. D'où la nécessité de concevoir et d'optimiser efficacement et numériquement ces dispositifs avant leur réalisation. Pour cela, il faut faire appel à l'analyse numérique. La modélisation en micro et nanophotonique, nécessaire à l'optimisation fine des dispositifs optiques avancés, implique de résoudre numériquement les Equations aux Dérivées Partielles (EDP) de Maxwell dans un espace à trois dimensions de façon précise et rapide [65].

La modélisation est très interdisciplinaire en particulier la modélisation électromagnétique, impliquant à la fois la physique, les mathématiques appliquées et l'informatique. La compréhension de la physique du problème nanophotonique est essentielle pour le choix des hypothèses de modélisation, le choix d'une méthode efficace et la définition d'un algorithme optimisé. On ne peut pas parler de modélisation numérique sans une analyse mathématique rigoureuse.

Elle constitue une part importante, voire la plus importante, dans le processus de développement d'une méthode numérique efficace. L'analyse numérique est nécessaire pour l'analyse et le contrôle des erreurs dans un algorithme. Elle est aussi nécessaire dans l'étude de convergence et de conditionnement des solveurs itératifs dans la résolution du système d'équations linéaires obtenu après transformation des équations de Maxwell.

On peut dire, en général, que l'analyse numérique permet ici de vérifier l'efficacité du choix du modèle numérique utilisée pour résoudre les équations de Maxwell appliquées aux problèmes nanophotonique. Enfin, le développement d'un algorithme de calcul numérique optimal repose sur une bonne connaissance de la programmation (codage, debug).

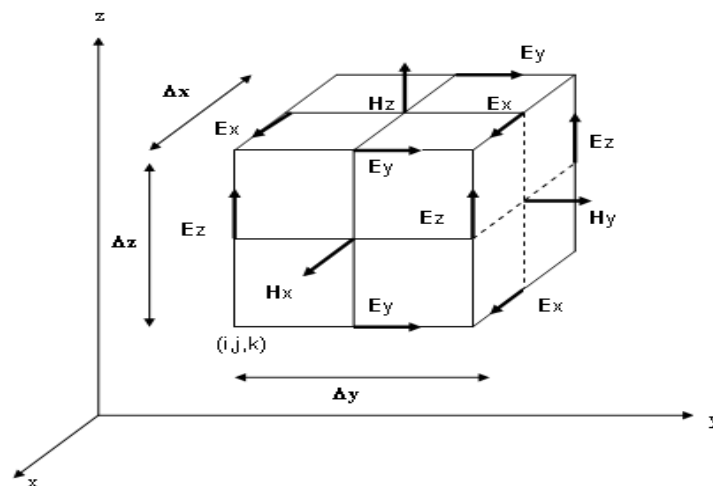
## 2. La méthode FDTD

La méthode des différences finies dans le domaine temporelle (FDTD) est une méthode qui permet de résoudre des équations différentielles avec une dépendance temporelle. Elle a été développée pour la première fois par Yee [66] en 1966, mais le nom FDTD a été donné par Taflove [67]. Plusieurs travaux ont permis d'étendre son domaine d'application notamment dans la conception et l'optimisation de dispositifs photoniques [68]. La méthode permet de résoudre les équations de Maxwell dans le temps et dans l'espace, en approximant directement les opérateurs différentiels dans les équations par des différences finies :

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] \quad (4.2)$$

Les quatre autres équations sont symétriquement équivalentes aux deux précédentes et sont obtenus par l'échange de manière cyclique des indices et des dérivés par rapport à x, y et z. Les équations de Maxwell décrivent une situation dans laquelle la variation temporelle du champ E est une fonction de la variation spatiale du champ H, et vice versa. La méthode FDTD résout les équations de Maxwell en discrétisant d'abord les équations via les différences centrales dans le temps et l'espace, puis résout numériquement ces équations dans le logiciel.



**Fig. 4.1. Cellule cubique de Yee [66].**

La méthode la plus courante pour résoudre ces équations est basée sur le maillage de Yee [66]. Elle calcule les composantes des champs E et H à l'intérieur et à l'extérieur d'une grille en des points espacés de Δx, Δy, Δz. Les composantes des champs E et H sont ensuite entrelacées dans les trois dimensions de l'espace comme représenté sur la figure 4-1. En outre, le temps est divisé en des points discrets espacés de Δt. Les composantes du champ E sont ensuite calculées à

des instants  $t = n \Delta t$  et les composantes du champ  $H$  aux instants  $t = (n + 1/2) \Delta t$ , où  $n$  est un entier représentant l'étape de calcul. Par exemple, le champ  $E$  à un instant  $t = n \Delta t$  est égal au champ  $E$  à l'instant  $t = (n-1) \Delta t$ , plus un terme supplémentaire calculé à partir de la variation spatiale, ou boucle, du champ  $H$  au temps  $t$ . Ce processus permet de résoudre les équations de Maxwell de manière itérative sans inversion de matrice.

La condition de stabilité de la méthode avec le schéma de Yee peut être exprimée en fonction de la taille du maillage [69] : La méthode FDTD permet de simuler la propagation d'une onde sortante d'un objet vers l'infini. Or la discrétisation des équations de Maxwell doit être tronquée à la frontière du volume délimitant le calcul. Ces conditions sur les frontières ont fait l'objet de plusieurs travaux [70,67] jusqu'à l'apparition des conditions de Bérenger dite PML (Perfectly Matched Layer) [71]. En théorie, les conditions PML sont quasi-parfaites dans leur absorption des ondes sortantes. Elles consistent à entourer l'espace de calcul par des couches parfaitement absorbantes qui permettent d'atténuer les ondes qui les traversent, sans réflexion. Les PML peuvent augmenter considérablement la mémoire et le temps de calcul (le nombre d'inconnues peut être même doublé) ce qui constitue un inconvénient.

### 3. L'implémentation de la FDTD dans FullWave

Afin d'implémenter la FDTD dans FullWave, les paramètres à la fois physiques et numériques sont nécessaires. La modélisation des cristaux photoniques nécessite en général un gros investissement en programmation et en analyse numérique et constitue une activité exigeante en compétence et en temps. Plusieurs méthodes de simulations sont utilisées pour l'étude de ces matériaux, comme la méthode des différences finies dans le domaine temporel (Finite Difference Time Domain, FDTD), la méthode des ondes planes (Plane Wave Expansion, PWE), la méthode de la décomposition en mode propre (Eigen Mode Expansion, EME),...etc. La méthode FDTD et la méthode des ondes planes sont les plus utilisées pour la modélisation. Nous avons utilisé les modules BandSOLVE et le FullWAVE pour modéliser des structures à bande interdite photonique 2D. Dans notre cas, nous avons utilisé le BandSOLVE pour calculer les diagrammes des bandes interdites et le FullWAVE pour calculer l'intensité du mode de défaut.

Dans ce travail, nous utilisons les cristaux photoniques pour améliorer l'absorption de la lumière dans les cellules solaires faites par deux types de matériaux (le Silicium: Si et le Silicium amorphe hydrogéné : a-Si: H). Nous concevons par simulation numérique les propriétés optiques de ces matériaux dans différents types de structures (cristaux photoniques sans motif, 1D et cristaux photoniques 2D), en utilisant la méthode des différences finies temporelle (FDTD). Les paramètres des cristaux photoniques étudiés sont optimisés via des simulations numériques pour

obtenir une longueur du trajet de pénétration de la lumière maximale et ainsi avoir une absorption améliorée. Nous avons étudié les performances de la structure considérée et déterminé les paramètres géométriques (période de réseau et facteur de remplissage) qui permettent une meilleure absorption. Une variété de configurations de la structure pour les différents paramètres de la structure a été implémentée via le programme mode solveur et ceci pour fournir une prédiction théorique pour certaines géométries qui conduisent à une bonne performance de la cellule solaire.

## **4. Propriétés optiques et conception d'un cristal photonique absorbant**

### **4.1. Propriétés optiques**

Dans ce chapitre, nous nous attacherons à présenter plus en détail notre approche qui sera illustrée avec un cristal photonique membranaire absorbant. Dans un premier temps, nous décrirons la méthodologie employée pour calculer les propriétés optiques des différentes structures étudiées. Ensuite, nous proposerons une analyse des propriétés de couplage des modes exploités pour le piégeage de la lumière à partir de la théorie des modes couplés.

En second lieu, nous reviendrons sur les propriétés optiques du cristal photonique membranaire absorbant CP1D et CP2D à réseau carré en Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) afin d'identifier les mécanismes responsables de l'allure de leurs spectres d'absorption. Le but est d'apporter les éléments qui permettent de comprendre pourquoi l'introduction d'une nanostructuration de type CP dans une couche ultramince conduit à une augmentation de son absorption sur l'ensemble du spectre considéré.

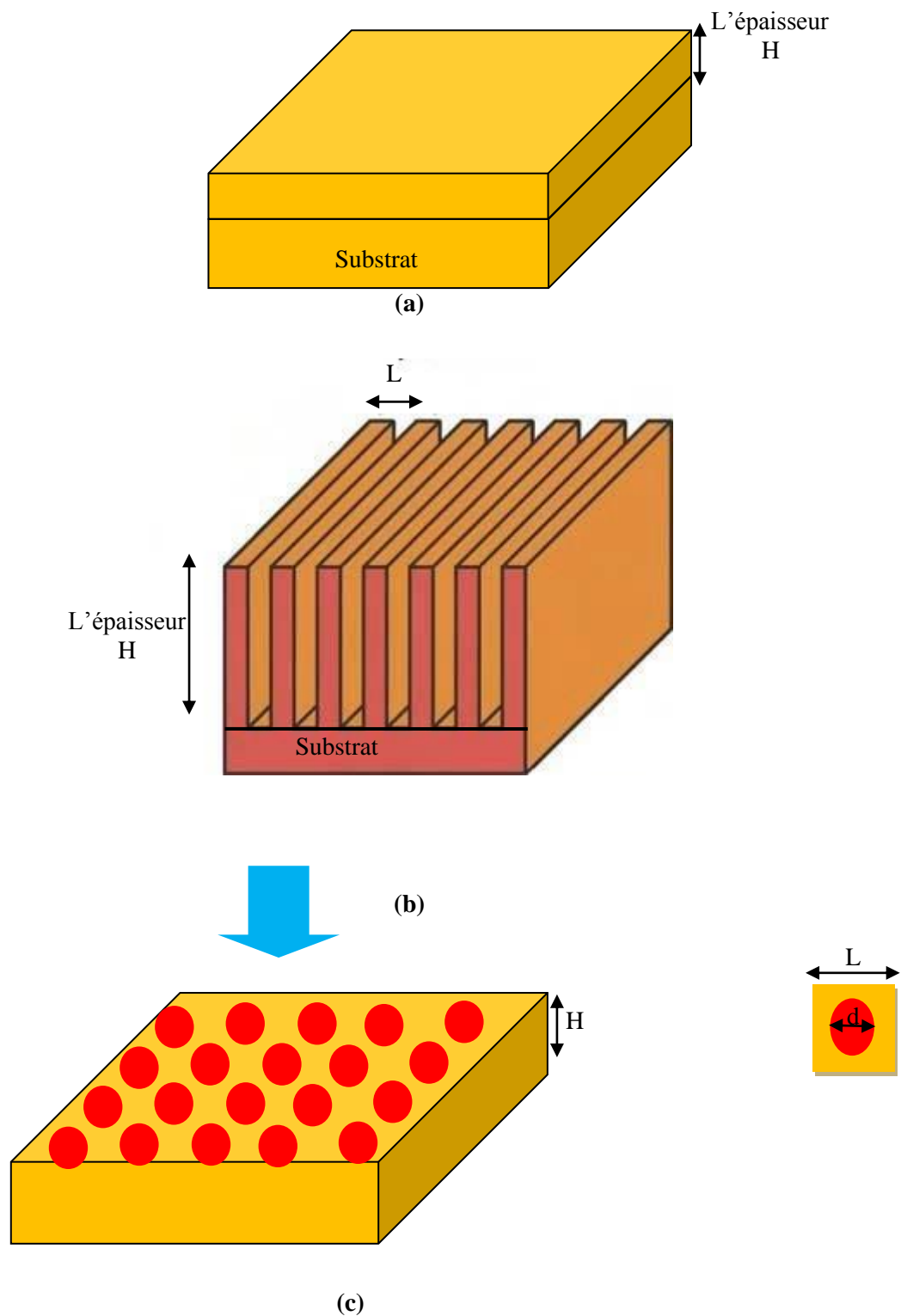
Tous les résultats sont obtenus principalement grâce à des simulations basées sur la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD). En effet, cette méthode modale de Fourier est particulièrement bien adaptée pour traiter la propagation d'une onde électromagnétique arrivant sur un milieu périodique tel qu'un cristal photonique.

### **4.2. Conception d'un cristal photonique absorbant**

La structure servant de base à cette discussion est une couche absorbante en Silicium et en Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Cette dernière ayant une épaisseur fixe de 100 nm. Cette couche sera par la suite introduite dans une cellule complète et jouera le rôle de couche active. La singularité de l'approche développée dans cette thèse consiste à structurer cette couche absorbante en une membrane à cristal photonique et à optimiser numériquement son absorption sur l'ensemble du spectre utile.

Dans cette section, nous considérerons à la fois des structures sans motifs, des CP1D et des CP2D membranaires présentant une période et une largeur de trous notés  $L$  et  $D$ ,

respectivement. Ces configurations sont illustrées sur les figures 4.2 a, b et c.



**Fig. 4.2. (a) Structure de cellule solaire en couche non structurée sur un substrat de verre, (b) cristal photonique à une dimension, (c) cristal photonique à deux dimensions, avec un réseau de trous circulaires.**

La lumière incidente peut alors être piégée dans des résonances qui correspondent à une longueur d'onde associée aux paramètres physiques et géométriques des trois structures. Par souci de comparaison, la troisième structure de cellule solaire est constituée par un cristal photonique bidimensionnel 2D avec deux configurations de réseau, triangulaire et carrée, de trous circulaires.

La période est la même dans les deux directions de l'espace, ce qui permet une indépendance de la topographie de la structure dans les deux directions planes de l'espace.

Les principaux paramètres du CP sont la période  $L$  et le facteur de remplissage  $ff$  défini comme étant le rapport entre le diamètre des trous d'air sur la période. Le facteur de remplissage  $ff$  est alors donnée par :

$$ff = \left(1 - \frac{\pi d^2}{4L^2}\right) \quad (4.3)$$

Avec :

$d$  étant le diamètre des trous d'air.

Les épaisseurs de toutes les configurations sont considérées constantes et égale à 100 nm.

La conception et la simulation deviennent très importantes avant le processus de la fabrication. Les outils numériques utilisés pour les simulations sont basées sur la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) [72], il a été utilisé pour étudier l'influence des paramètres géométriques de la structure sur l'absorption dans la gamme des longueurs d'onde 380-750nm. En utilisant la même méthode de simulation, on observera aussi l'absorption de la couche sans motifs laquelle est déposée sur le verre.

## 5. Résultats et discussions

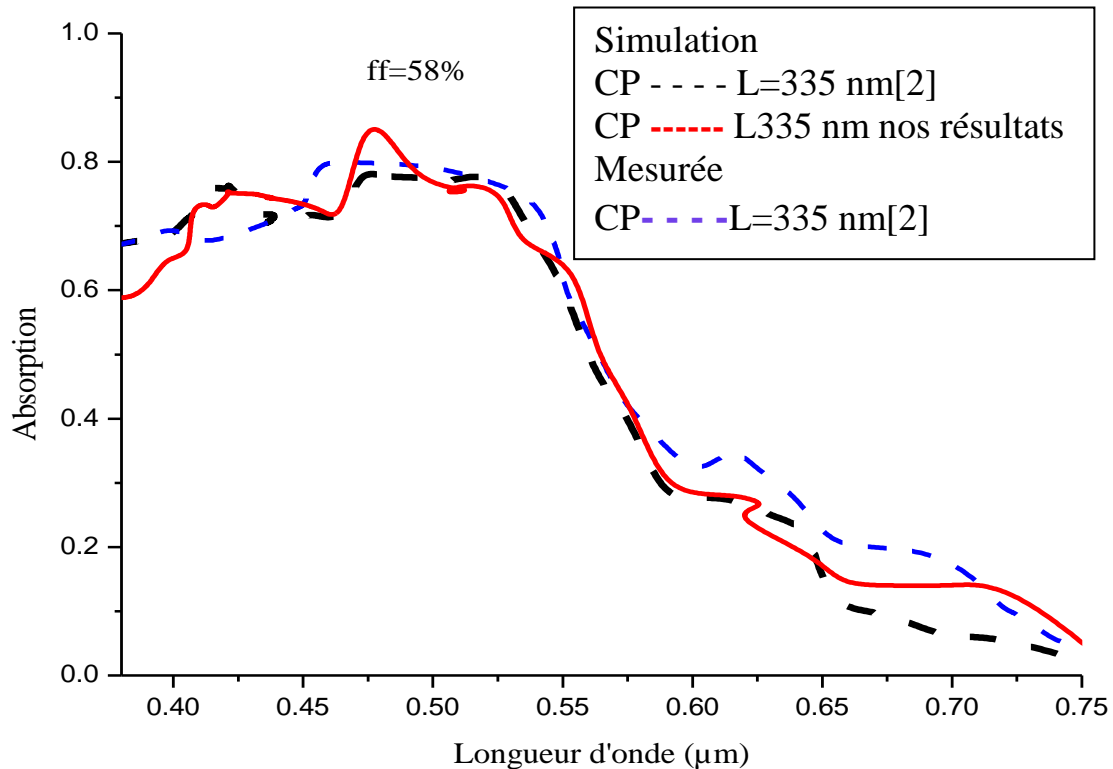
Dans la référence [2], les auteurs ont utilisé une analyse rigoureuse d'onde de couplage (RCWA) à l'aide du simulateur CAMFR pour obtenir l'absorption d'une couche du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) déposée sur le verre, dans une plage de longueur d'onde 380-750 nm.

L'absorption des cristaux photoniques est optimisée en faisant varier la période et le facteur de remplissage sous une incidence normale de la lumière et pour une épaisseur fixe de la couche à cristal photonique 1D. Pour une épaisseur égale à 100 nm de la couche absorbante de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Les spectres d'absorption obtenus sont montrés dans la figure 4.3.

Dans la même figure nous avons présentés notre simulation pour la même structure. A partir de la figure, on constate que nos résultats sont en bon accord avec les résultats de simulation et les mesures dans [2]. Ce qui nous donne une confiance dans les résultats obtenus

par le logiciel Rsoft.

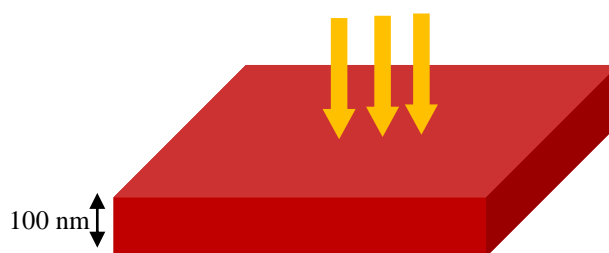
Ces spectres présentent une faible efficacité d'absorption lorsque la longueur d'onde est supérieure à 575nm. Cela est dû à la diminution rapide du coefficient d'extinction  $k$  du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H).



**Fig. 4.3. Mesure et simulation des spectres d'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) avec une épaisseur de 100 nm.**

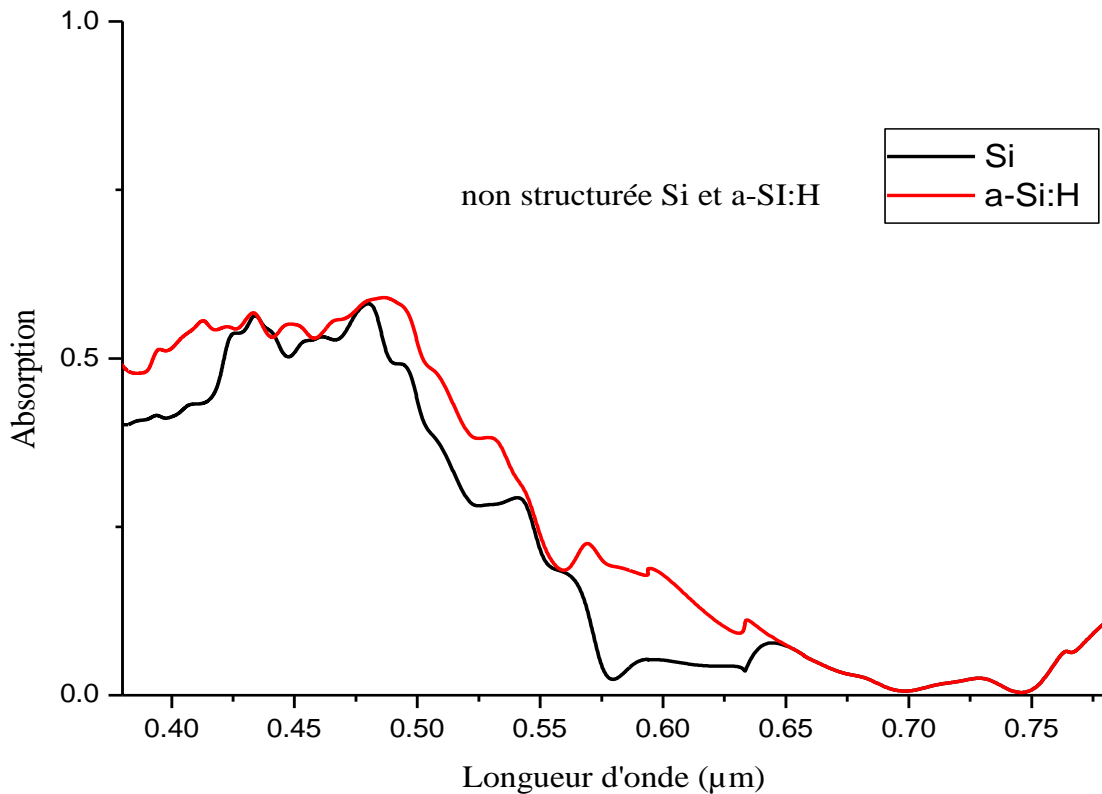
### 5.1. Structure de couche sans motifs faite par (Si et a-Si:H)

La figure 4.4 représente une couche absorbante non structurée à base de Silicium ou à base de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) dont l'épaisseur est 100 nm. La couche absorbante est exposée à un faisceau de lumière sous incidence normale. Dans cette partie nous avons calculé puis tracé l'absorption dans la couche mince, pour les deux matériaux.



**Fig. 4.4. Couche absorbante non structurée à base de Si ou de Si-a:H.**

La figure 4.5 montre le spectre d'absorption de la couche non structurée pour le Silicium (Si) et le Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Il est clair que dans la couche sans motif réalisée à base de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), absorbe la lumière incidente mieux que la structure en Silicium.



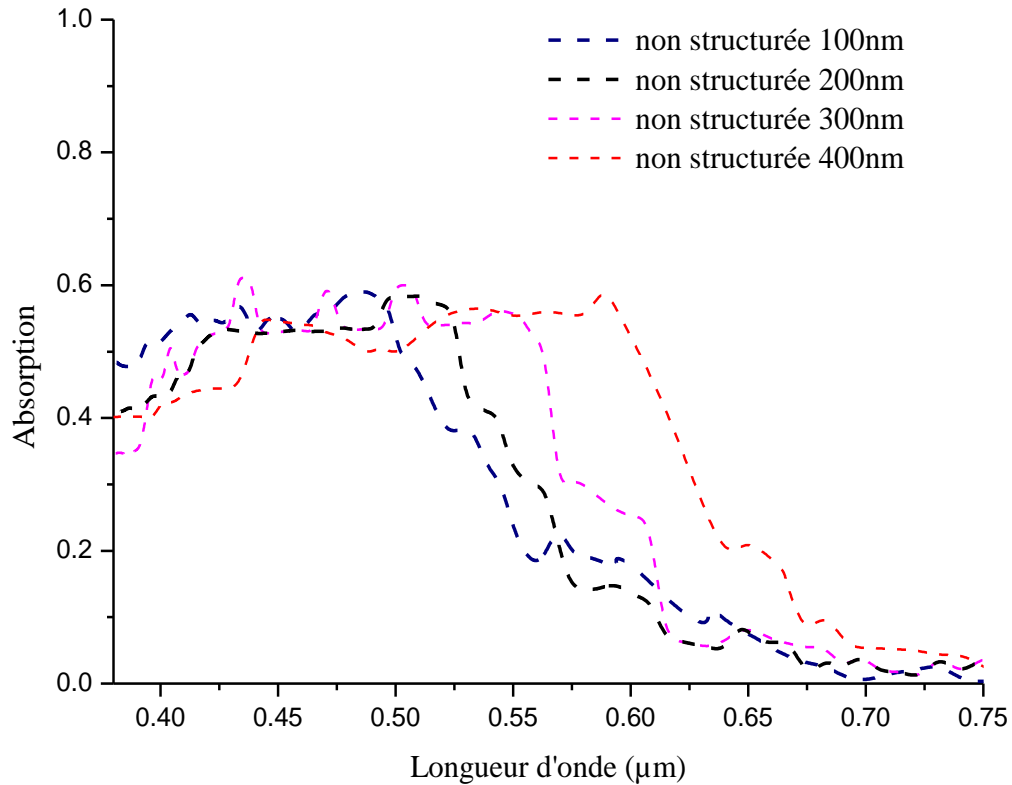
**Fig. 4.5. Spectres d'absorption de la couche non structurée de Silicium et de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) d'une épaisseur  $H = 100$  nm. [73 -74].**

Ceci est dû au fait que les valeurs du coefficient d'extinction du a-Si:H sont plus élevées par rapport à celles du Si dans cette gamme spectrale.

Au-delà de la longueur d'onde de 500 nm, le coefficient d'extinction du matériau est faible. Par conséquent, des épaisseurs de quelques micromètres sont nécessaires pour assurer l'absorption de la lumière incidente en une seule passe à l'intérieur de la couche active. Dans notre cas, l'épaisseur de la couche est limitée à 100 nm, ce qui explique la diminution de l'absorption observée entre 500 nm et 720 nm.

La figure 4.6, montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde pour les différentes valeurs de  $H$  pour une couche de a-Si:H. Il est clair que les spectres d'absorption augmentent avec l'augmentation de la valeur de l'épaisseur ( $H$ ). Ces spectres présentent une diminution de l'efficacité d'absorption lorsque la longueur d'onde est supérieure à 525 nm. Cela est dû à la

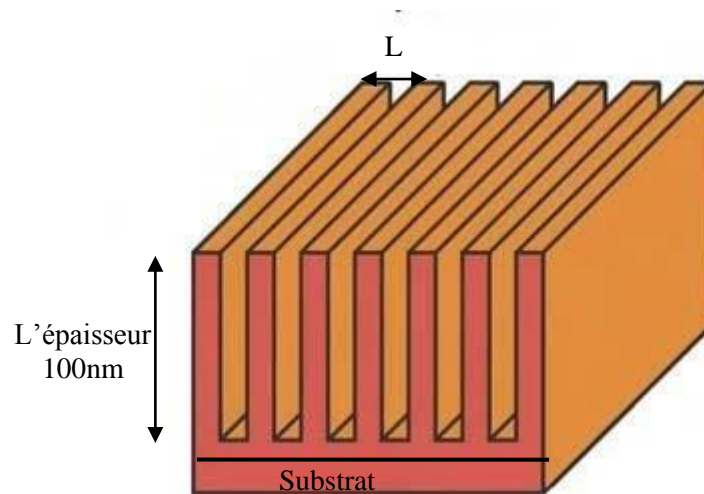
rapidité d'augmentation du coefficient d'extinction  $k$  de la couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) qui tend rapidement vers zéro.



**Fig. 4.6. Spectres d'absorption de la couche non structurée avec des valeurs différentes de l'épaisseur.**

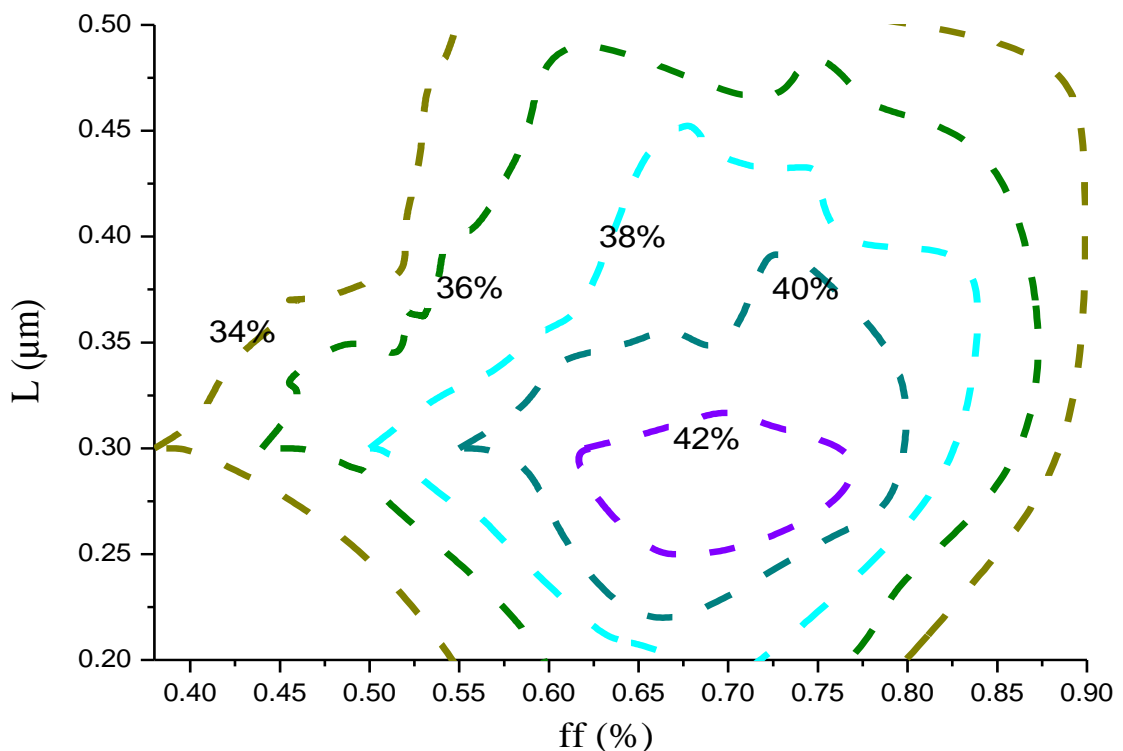
## 5.2. Structure à cristal photonique 1D

La figure 4.7 représente le schéma d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) structurée en un cristal photonique unidimensionnel CP1D. Pour étudier l'effet de formation de motifs sur l'absorption d'une membrane intégrée à cristal photonique unidimensionnelle à base de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) d'épaisseur  $H=100$  nm. Nous faisons tout d'abord varier simultanément le facteur de remplissage  $ff$  et la période  $L$  et en considérant une lumière incidente normale.



**Fig. 4.7.** Le spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde sur la surface frontale d'une couche structurée 1D.

En utilisant la méthode FDTD, on observe l'absorption d'un cristal photonique 1D en Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) déposés sur verre avec l'épaisseur  $H =$  de 100 nm. Le contour de cartographie correspondant à l'efficacité d'absorption est indiqué sur la figure 4.8



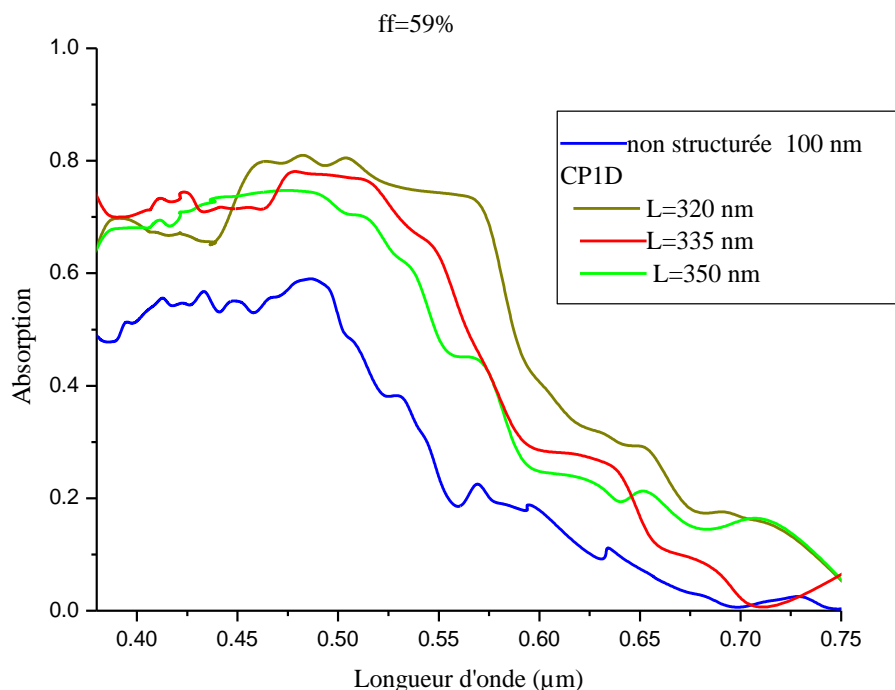
**Fig. 4.8.** Efficacité intégrée d'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) sur verre d'épaisseur 100 nm, en fonction de la période  $L$  et du facteur de remplissage  $ff$  (en%).

Par rapport à l'échantillon d'une couche non structurée de la même épaisseur du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) qui absorbe environ 34% de l'intensité de la lumière solaire intégrée sur la même plage spectrale. Nous avons montré que l'absorption est augmentée à plus de 42% avec  $L = 300$  nm et  $ff$  compris entre 62 à 76% dans le cas d'un CP1D.

Pour présenter l'effet de la structuration sur l'absorption intégrée d'une membranaire à CP1D on va varier simultanément la période et le facteur de remplissage ( $L$  et  $ff$ ), tout en gardant l'épaisseur de la couche fixe à 100 nm.

En utilisant le simulateur Rsoft [72], nous avons calculé les paramètres optimaux pour évaluer l'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si :H) déposée sur le verre. Le facteur de remplissage initial a été fixé à 59%. Ensuite, l'itération de la simulation est effectuée pour des valeurs données de la période ( $L = 0.320$   $\mu\text{m}$ ,  $L = 0.335$   $\mu\text{m}$  et  $L = 0.350$   $\mu\text{m}$ ).

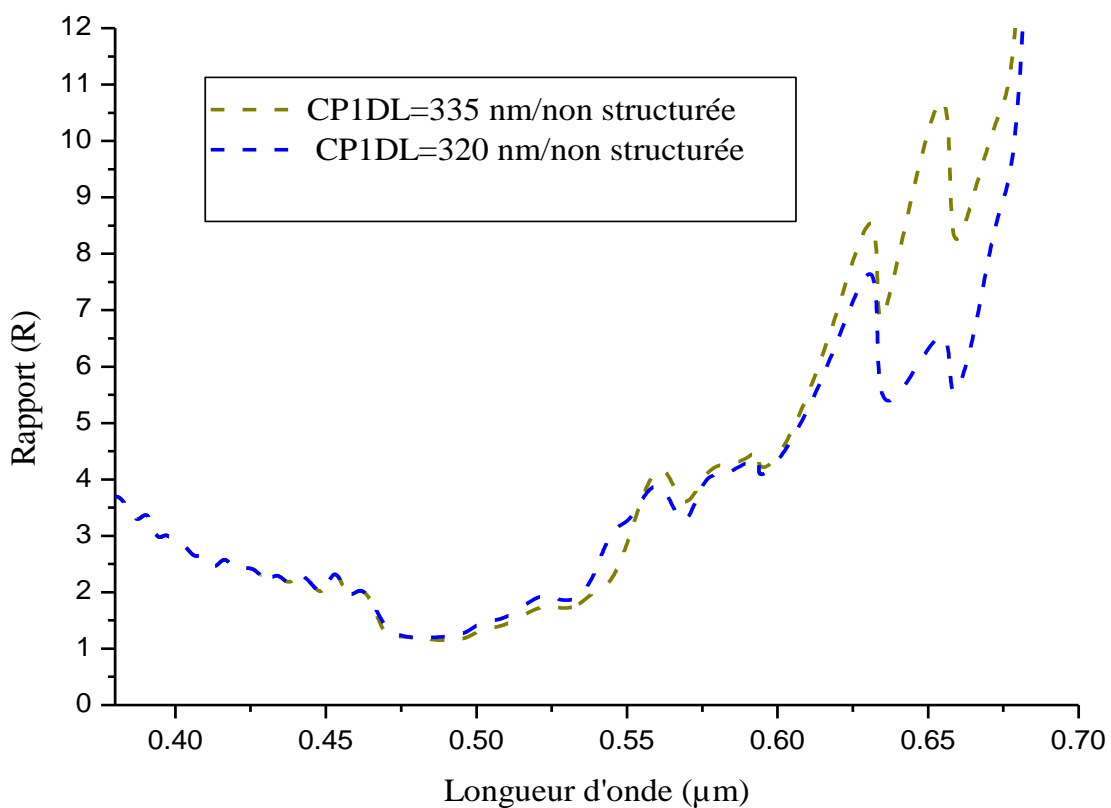
On calcule, également, l'absorption dans la couche non structurée avec la même épaisseur  $H = 100$  nm. La figure 4.9 montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la période  $L$ . A partir de la figure, il est clair que le spectre d'absorption diminue avec l'augmentation de la valeur de la période ( $L$ ). En revanche, nous pouvons observer que les structures à cristaux photoniques unidimensionnels (PC1D) absorbent la lumière incidente mieux que la couche non structurée.



**Fig. 4.9.** Spectre d'absorption de la structure 1D PPC, avec un facteur de remplissage de 59% et pour différentes valeurs de période  $L = 0.320$   $\mu\text{m}$ ,  $L = 0.335$   $\mu\text{m}$ ,  $L = 0.350$   $\mu\text{m}$  et une couche non structurée d'épaisseur  $H = 100$  nm.

On trace sur la figure 4.10, le rapport d'amélioration d'absorption entre de la couche à motif et celle sans motif, avec la même épaisseur  $H$ .

Le rapport ( $R$ ) entre l'absorption de la couche à motif et celle sans motif est d'environ 3,52 et 1,5 entre 380 et 500 nm, où l'efficacité d'absorption de la couche non structurée est constante autour de 50%. Dans ce domaine spectral, le coefficient d'extinction du a-Si:H est tellement grand que la longueur d'absorption est plus faible que l'épaisseur de la couche. Au-dessus de 500 nm, les valeurs absolues de l'absorption sont réduites, du fait du coefficient d'absorption plus faible du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Le taux d'absorption donc augmente avec la diminution du coefficient d'extinction  $k$ .



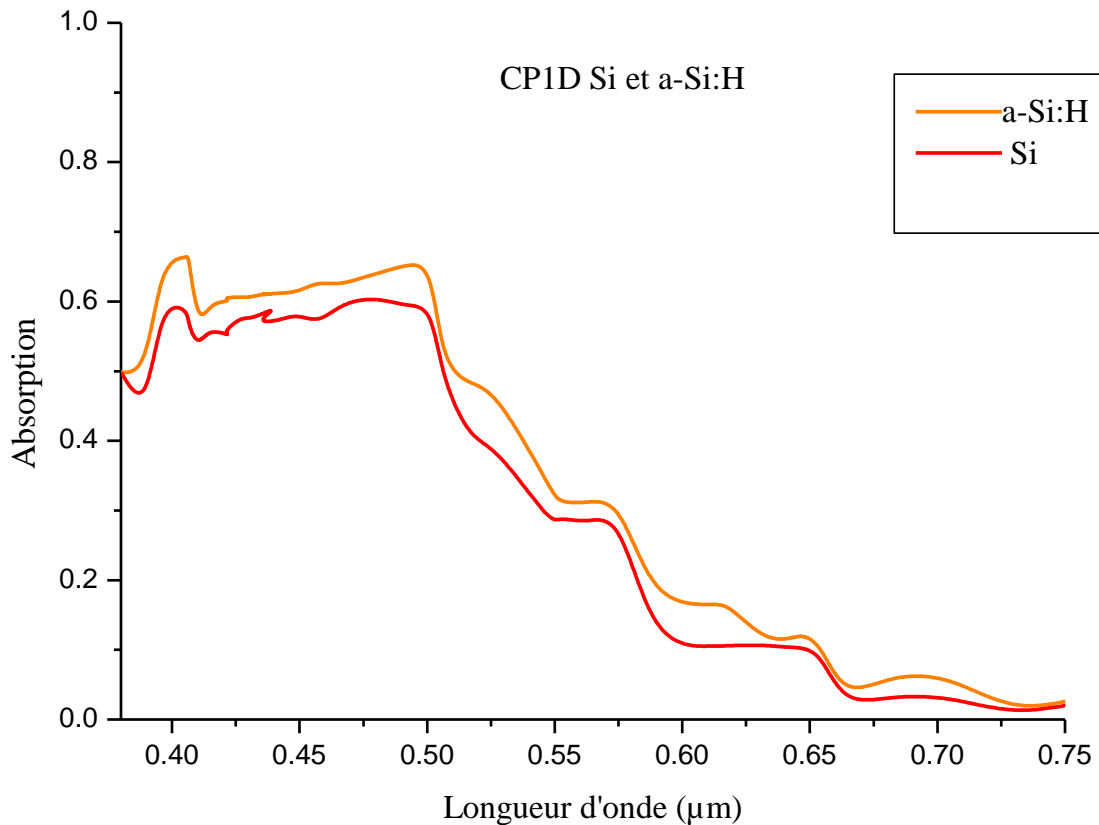
**Fig. 4.10.** Le rapport d'absorption entre les couches à motifs et sans motifs d'épaisseur 100 nm.

Maintenant, on compare l'absorption de la membrane du cristal photonique unidimensionnel à base de Silicium avec la même épaisseur avec celle du a-Si:H. Les paramètres optimaux sont ( $L = 310$  nm et  $ff = 65\%$ ) pour la configuration 1D. Les absorptions intégrées résultantes pour les deux types de matériau sont présentées dans la figure 4.11.

L'absorption des cristaux photonique est optimisée en faisant varier les deux paramètres, la période  $L$  et le facteur de remplissage  $ff$ , sous une incidence normale de la lumière et pour une épaisseur fixe de la couche CP 1D dans la gamme de longueur d'onde

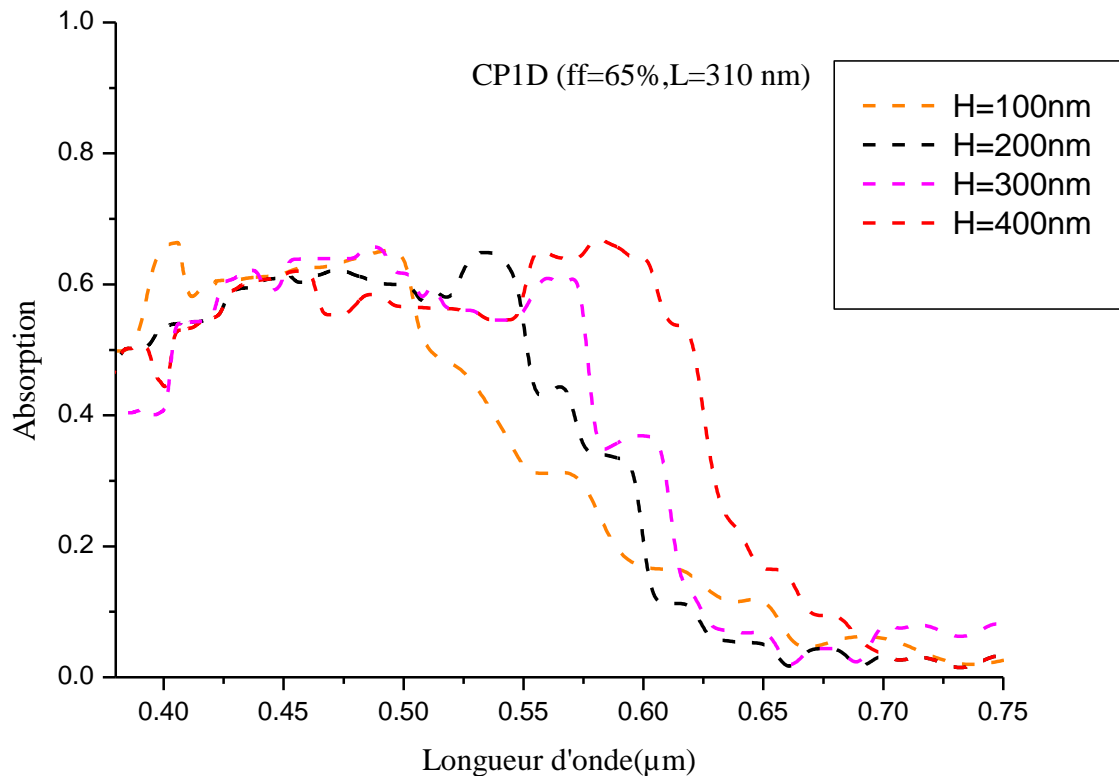
variant de 380 à 750 nm. Nous avons fixé le facteur de remplissage à 65% avec une période  $L$  de 310 nm.

Il est clair que dans la couche réalisée à base de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), absorbe la lumière incidente mieux que la structure en Silicium.



**Fig. 4.11. Spectres d'absorption du cristal photonique 1D de Silicium et du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) avec la même épaisseur  $H = 100$  nm. [73-74].**

Une série de simulations, pour le calcul de l'absorption, pour différentes valeurs de l'épaisseur de  $H=100$  nm à  $H=400$  nm est effectuée. La figure 4.12, montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde pour les différentes valeurs de  $H$ . Il est clair que les spectres d'absorption augmentent avec l'augmentation de la valeur de l'épaisseur ( $H$ ). Pour des longueurs d'onde supérieures à 525 nm, on constate que l'efficacité d'absorption de ces spectres diminue. Cela est dû à la rapidité de diminution du coefficient d'extinction  $k$  du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), qui tend rapidement vers zéro. En revanche, nous pouvons observer que les structures à CP1D absorbent la lumière incidente mieux que la couche non structurée entre 380 nm et 750 nm.

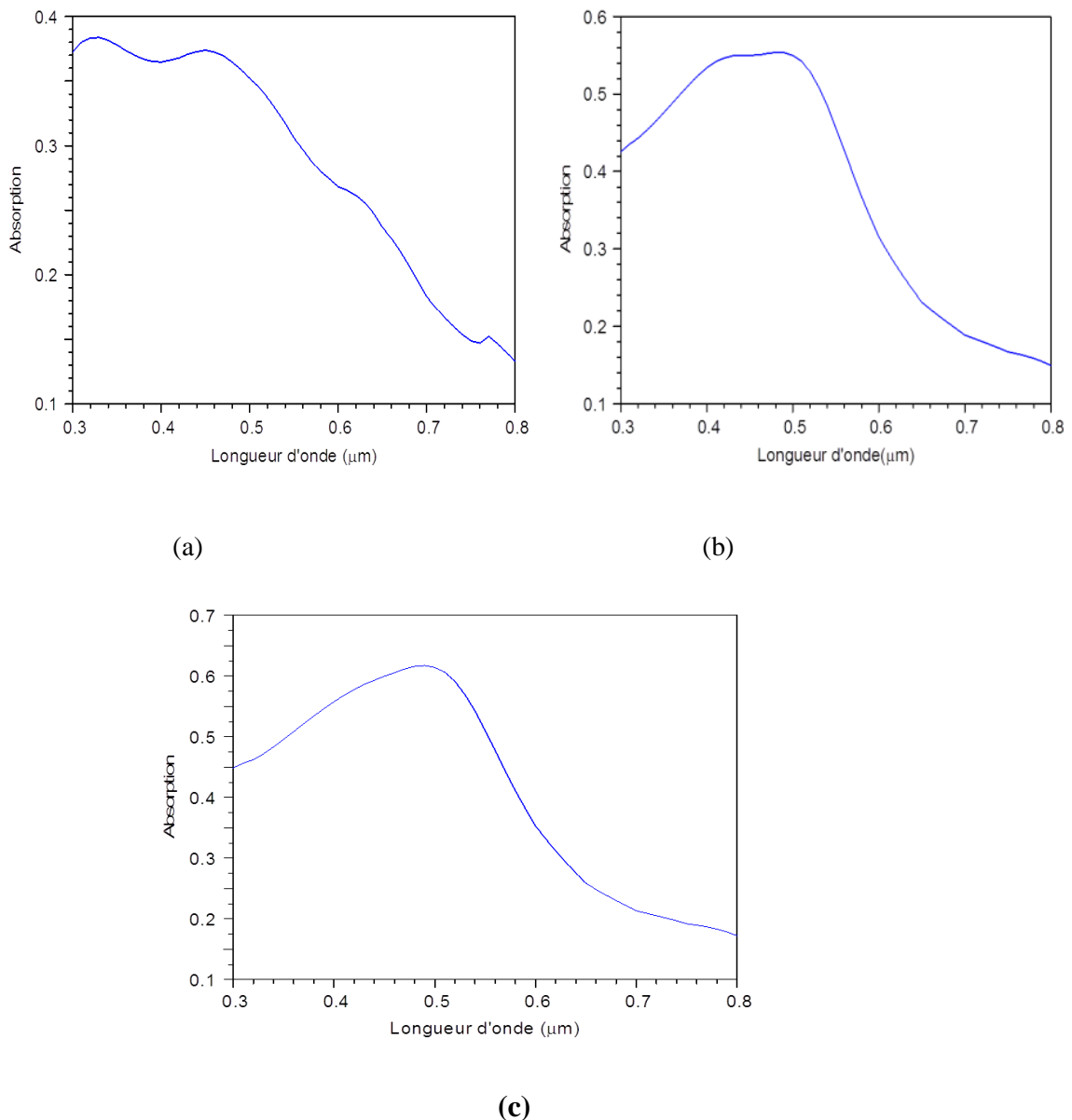


**Fig. 4.12.** Spectre d'absorption d'une structure à CP-1D avec un facteur de remplissage  $ff=65\%$ ,  $L = 310$  nm et différentes valeurs d'épaisseur  $H = 100$  nm,  $200$  nm,  $300$  nm et  $400$  nm pour la polarisation TE.

Maintenant on va étudier l'absorption en fonction du nombre de périodes ; c'est-à-dire l'absorption en fonction de la longueur d'onde sur la face avant pour les différentes nombre de période  $N$  du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), déposé sur un substrat de verre.

Tout d'abord, on va fixer les paramètres géométriques aux valeurs suivantes :  $L=350$  nm,  $H = 100$  nm et le facteur de remplissage initiale  $55\%$ . Ensuite, nous faisons varier le nombre de périodes  $N = 3, 5$  et  $9$ .

Les spectres d'absorption obtenus pour les déférentes structures sont représentés sur la figure 4.13. Il est clair que le spectre d'absorption caractéristique d'une épaisseur  $100$  nm d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) augmente avec le nombre de période  $N$  pour le domaine des faibles longueurs d'onde grâce à l'effet d'anti-reflet induit par le réseau. On constate aussi une décroissance importante de l'absorption au-delà de  $550$  nm.



**Fig. 4.13.** Le spectre d'absorption de la structure à CP1D, (a)  $N=3$ . (b)  $N=5$ . (c)  $N=9$ ,  $L=350$  nm et  $ff=55\%$ .

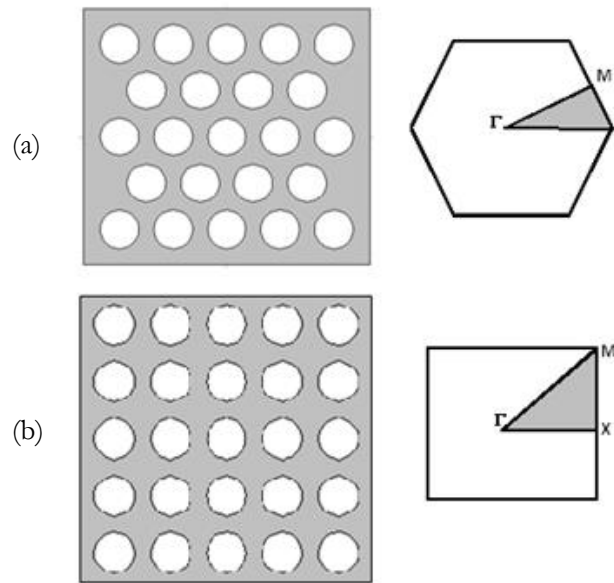
### 5.3. Les cellules solaires à cristaux photoniques bidimensionnelles

Avant d'aborder l'étude des cellules solaires à base de cristaux photoniques bidimensionnelles, on va présenter un bref rappel sur les cristaux photoniques bidimensionnelles à réseau carré et triangulaire.

#### 5.3.1. Diagramme de bandes

Un cristal photonique est caractérisé par son diagramme de bandes. Ce dernier représente l'ensemble des diagrammes de dispersion, il est constitué des fréquences propres de la structure déterminées pour tous les vecteurs d'ondes dont l'extrémité se situe sur le contour formé par les points de haute symétrie de la première zone de Brillouin ( $\Gamma$ , X, M) pour le réseau carré et ( $\Gamma$ , K,

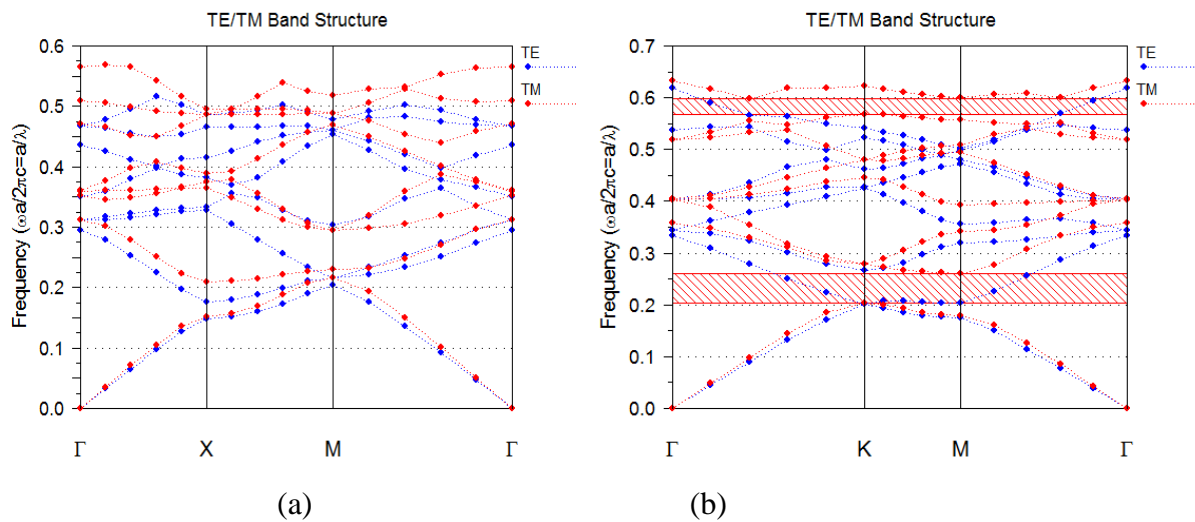
M) dans le cas d'un réseau triangulaire, comme il est schématisé sur la figure 4.14 [75-76]. Donc, pour avoir la structure de bandes photoniques, il faut balayer la zone de Brouillon irréductible.



**Fig. 4.14. (a) Réseau triangulaire avec sa première zone de Brillouin, (b) Réseau carré avec sa première zone de Brillouin.**

Dans les cristaux photoniques bidimensionnels, les relations de dispersion dépendent de la polarisation de la lumière. On peut séparer le champ électromagnétique en deux modes de polarisations indépendantes, la polarisation TE (Transverse Electric) et la polarisation TM (Transverse Magnétique). La figure 4.15(a) représente les diagrammes de bandes pour les réseaux carré et triangulaire et pour les deux polarisations TE et TM. La structure étudiée correspond à une matrice bidimensionnelle formée par des trous d'air ( $\epsilon_1 = 1$ ) percés dans le silicium ( $\epsilon_2 = 12.25$ ). Ces diagrammes ont été calculés par la méthode de décomposition en ondes planes. Le diamètre des trous est égal à  $0,288a$  dans les deux structures, ce qui correspond à des facteurs de remplissages différents selon le réseau ( $ff=0,26$  pour le réseau carré et  $ff=0,30$  pour le réseau triangulaire). Une bande interdite photonique pour la polarisation TM est obtenue pour le réseau triangulaire.

Dans le cas du réseau triangulaire (figure 4.15(b)), une bande interdite photonique (BIP) est observée pour la polarisation TM pour  $a/\lambda=0,21 - 0,27$ . Pour la polarisation TE, aucune bande interdite n'apparaît. Cependant le réseau carré présente l'absence de la bande interdite photonique pour les deux polarisations TE et TM. En effet, la plus grande BIP est obtenue avec un réseau triangulaire de trous d'air dans un diélectrique en polarisation TM.



**Fig. 4.15.** Diagramme de bandes d'un cristal photonique (réseau triangulaire) gravé dans une matrice de silicium ( $\epsilon_{\text{substrat}} = 12.25$ ) : (a) réseau carré, (b) réseau triangulaire.

### 5.3.2. Cartes des bandes

La carte des bandes représente les bords de bandes interdites pour un réseau donné en fonction de certains paramètres géométriques du cristal. La carte des bandes nous renseigne sur les propriétés des bandes interdites photoniques en particulier la largeur et la position des bandes interdites ouvertes en fonction du facteur de remplissage  $ff(\%)$  (ou du rapport  $d/2L$ ) pour chaque type de polarisation (TE et TM). Cependant, deux paramètres peuvent encore être ajustés : l'indice de la matrice et le facteur de remplissage en air.

En effet, une carte des bandes interdites est très pratique pour déceler des paramètres du cristal photonique en vue d'une application. Il est préférable de faire un graphique, nommé carte photonique, pour connaître la localisation des bandes interdites photoniques en fonction de certains paramètres du cristal.

La figure 4.16 illustre un exemple d'une carte de bandes dans le cas d'une matrice de permittivité  $\epsilon_1=12.25$  de trous d'air ( $\epsilon_2=1$ ) de section circulaire de rayon  $r$ , répartis selon un réseau triangulaire. Une bande interdite s'ouvre pour  $ff = 11\%$  en polarisation TE et pour  $ff=63\%$  en polarisation TM. Il est clair que des bandes interdites photoniques en polarisation TE plus larges s'ouvrent même pour des faibles facteurs de remplissage. La région de bande interdite complète correspond à l'intersection des bandes interdites TE et TM.

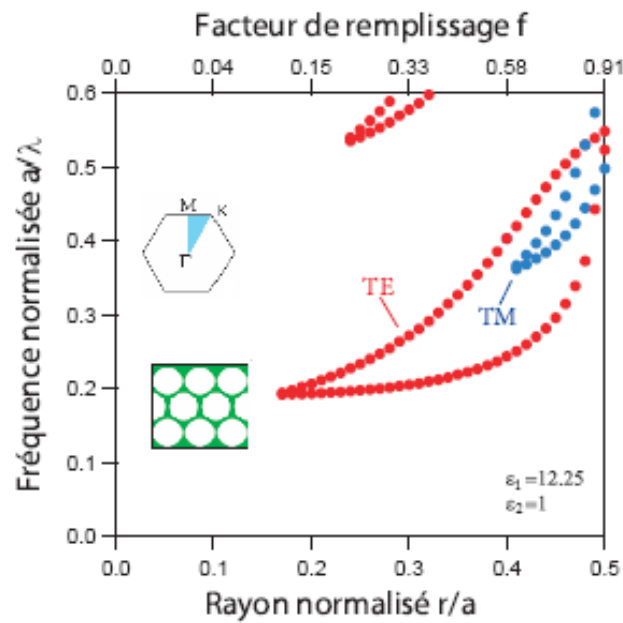


Fig. 4.16. Carte des bandes interdites d'un réseau triangulaire pour les deux polarisations dans le cas d'une matrice de permittivité  $\epsilon_1=12.25$  [77].

### 5.3.3. Définition de la structure étudiée

La structure d'étude qui nous intéresse ici est un cristal photonique bidimensionnel à réseau carré de trous d'air cylindrique plongés dans une matrice de Silicium d'indice de réfraction  $n_1$  supérieur à celui du motif élémentaire ( $n_2=1$ ). La structure fait 21 rangés de long et 21 rangées de large, le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement  $L=380$  nm,  $ff=62.5\%$ ,  $d=225$  nm comme il est schématisé sur la figure 4.17(a). Pour vérifier notre structure, nous avons donné sur la figure 4.17(b) la distribution de l'indice de réfraction de la couche diélectrique.

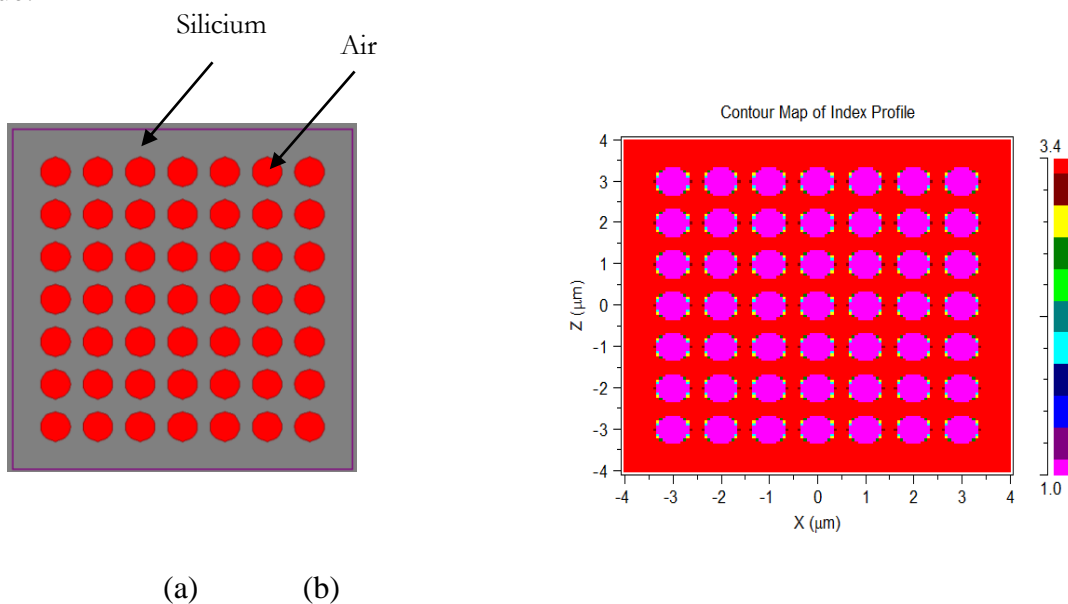


Fig. 4.17. (a) Schéma d'un CP2D carré composé de trous d'air dans le Silicium (b) Distribution de la constante de permittivité.

Le diagramme de bandes ou diagramme de dispersion est constitué des fréquences propres de la structure déterminée pour tous les vecteurs d'ondes dont l'extrémité se situe sur le contour défini par les points de haute symétrie ( $\Gamma$ MK $\Gamma$ ) de la première zone irréductible, dite zone de Brillouin. Pour obtenir le diagramme de bandes, la structure précédente est éclairée par une onde plane. Nos résultats concernent des structures optimisées pour un facteur de remplissage  $ff= 62,5\%$ .

### 5.3.4. Le diagramme de bande interdite photonique

La figure 4.18, montre le diagramme de bande calculé par la méthode des ondes planes (méthode PWE), pour un cristal 2D à réseau carré caractérisé par un facteur de remplissage au voisinage de 62%. Dans ces conditions, le cristal étudié ne présente aucune bande de type TE (en bleu) par contre deux bandes interdites photoniques de type TM apparaissent pour des longueurs d'ondes réduites ( $a/\lambda$ ) comprises entre 0.25- 0.27 et 36-39.

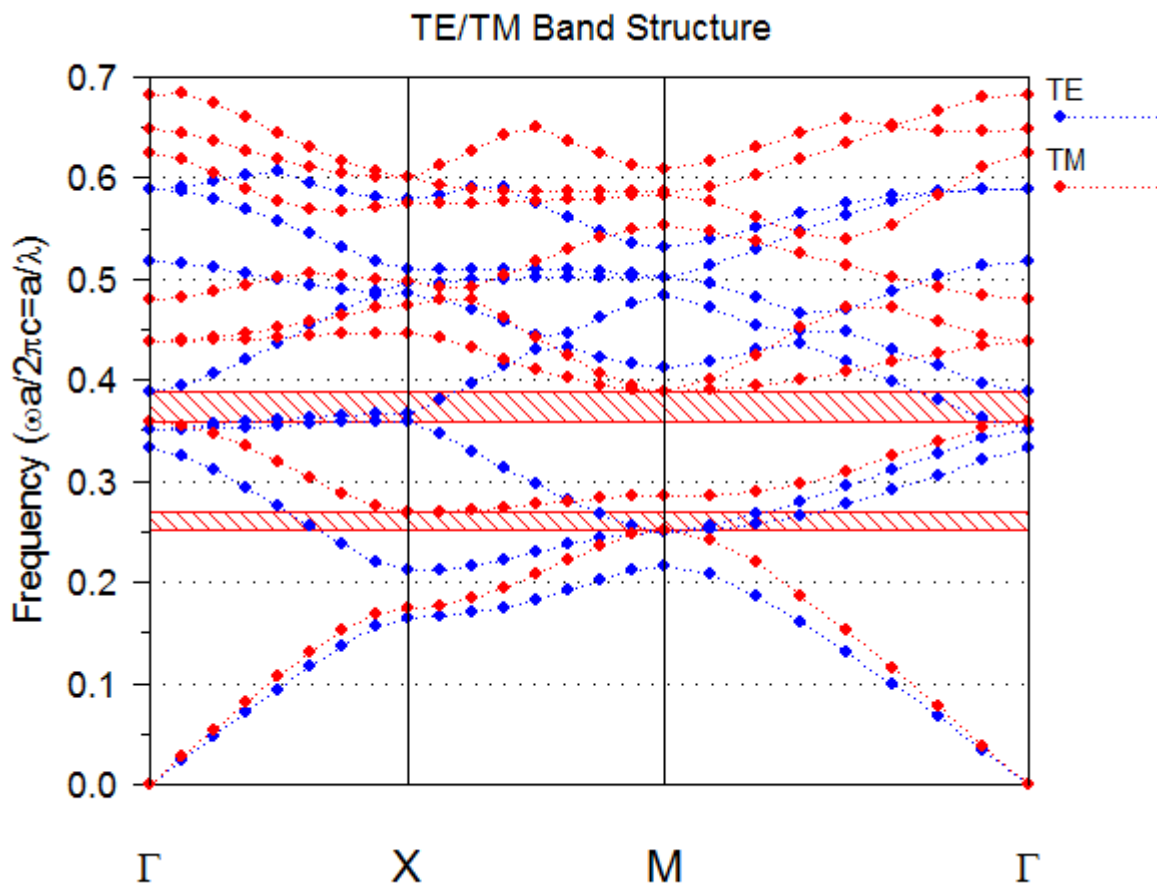
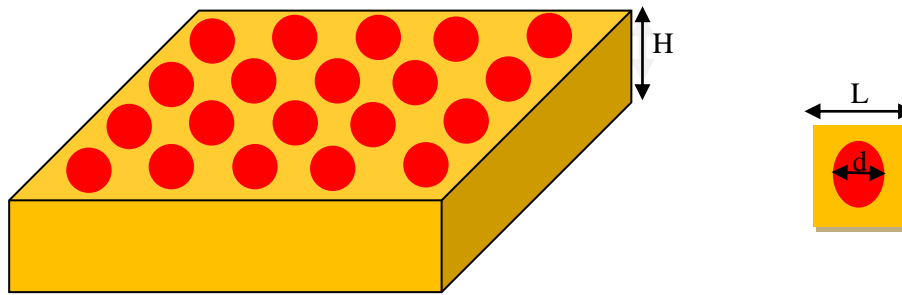


Fig. 4.18. Diagramme de bande d'un CP2D pour  $a= 0.3 \mu\text{m}$  et  $d= 0.225 \mu\text{m}$ .

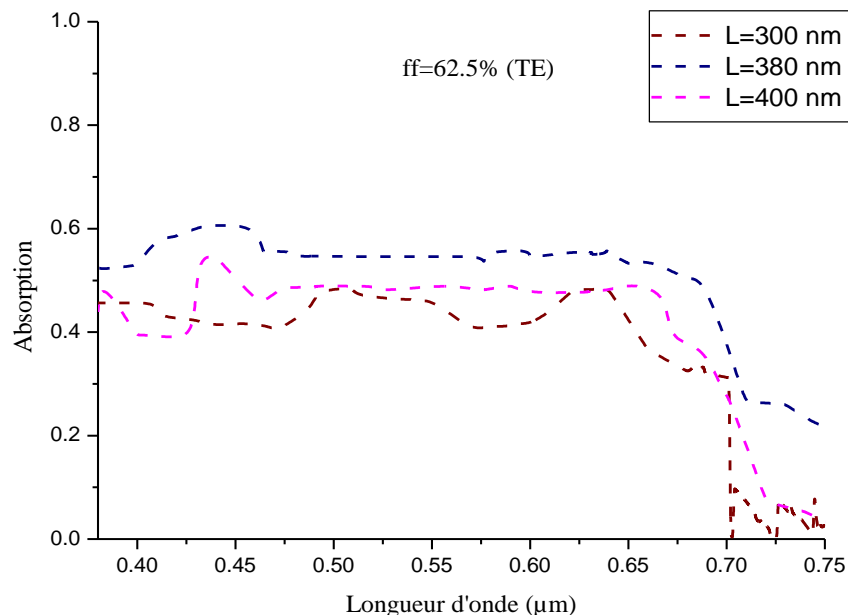
La figure 4.19 présente la structure d'un cristal photonique bidimensionnel à réseau carré et dont le motif est un trou circulaire.



**Fig. 4.19. Cristal photonique à deux dimensions (2D) à réseau carré de trous circulaire.**

**a. Cristaux photoniques 2D absorbants à réseau carré de Silicium**

Pour étudier les variations de l'absorption photonique d'un Cristal photonique bidimensionnels CP2D à réseau carré à base de Silicium, on va modéliser la structure connectée avec des périodes différentes ( $L$ ) pour l'épaisseur  $H = 100$  nm. Les résultats obtenus pour différents périodes (300 nm, 380 nm et 400 nm) et  $ff=62\%$  sont montrés sur la figure 4.20. Nous observons qu'avec l'augmentation de la période, l'absorption spectrale se déplace vers les longueurs d'onde les plus élevées.



**Fig. 4.20. Les spectres d'absorption d'un CP2D de réseau carré de Silicium avec différentes périodes ( $L$ ) pour l'épaisseur  $H = 100$  nm.**

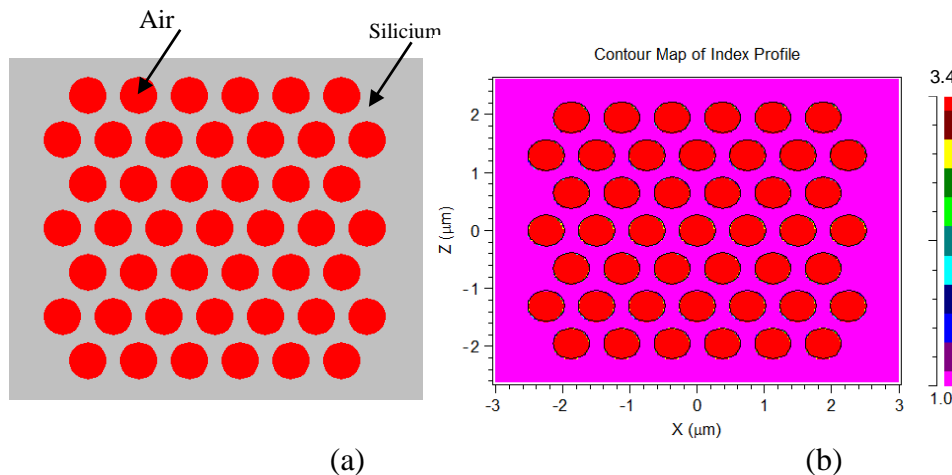
Ainsi, nous pouvons observer qu'à de faibles longueurs d'onde, le cristal photonique bidimensionnel membranaire à réseau carré de trous d'air a un effet d'antireflet, mais pour des

longueurs d'onde élevées, les spectres d'absorption diminuent par rapport au coefficient d'extinction  $k$  ( $k$  diminue rapidement). D'autre part, d'après les résultats de la figure 4.15, on peut observer l'absorption à des longueurs d'onde supérieures à 600 nm. On peut conclure que le facteur de remplissage optimal pour un réseau carré de Silicium est d'environ 62%.

### *b. Cristaux photoniques 2D absorbants à réseau triangulaire de Silicium*

#### 5.3.5. Définition de la structure triangulaire

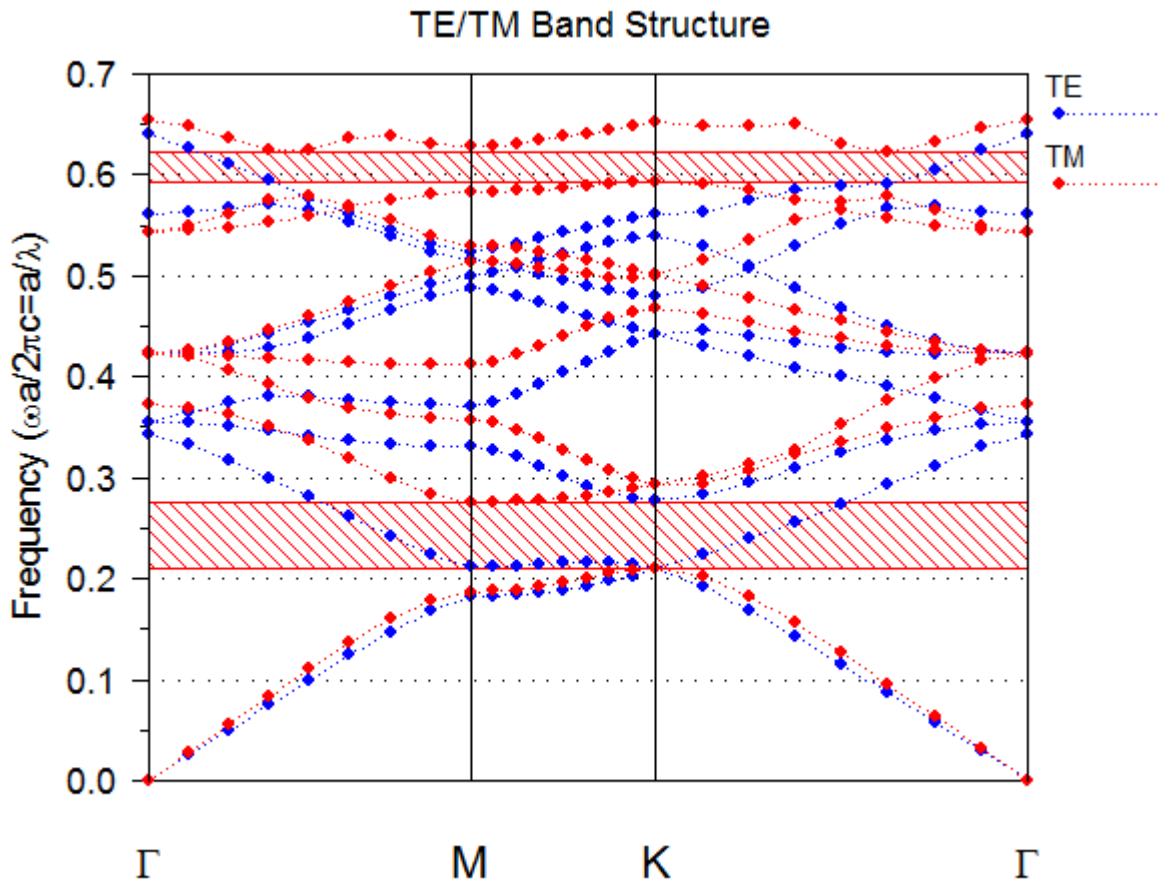
Dans cette section nous avons calculé le diagramme de dispersion d'une structure triangulaire composé de 21X21 rangés de trous d'air cylindrique plongés dans une matrice de Silicium d'indice de réfraction  $n_1$  supérieur à celui du motif élémentaire ( $n_2=1$ ). Le paramètre de maille et le rayon des trous sont respectivement  $L=380$  nm,  $ff=62.5\%$ ,  $d=0.225$   $\mu\text{m}$  comme il est schématisé sur la figure 4.21(a). Pour vérifier notre structure, nous avons donné sur la figure 4.21(b) la distribution de l'indice de réfraction de la couche diélectrique.



**Fig. 4.21. (a) Schéma d'un CP2D triangulaire composé de silicium, (b) Distribution de la constante de permittivité.**

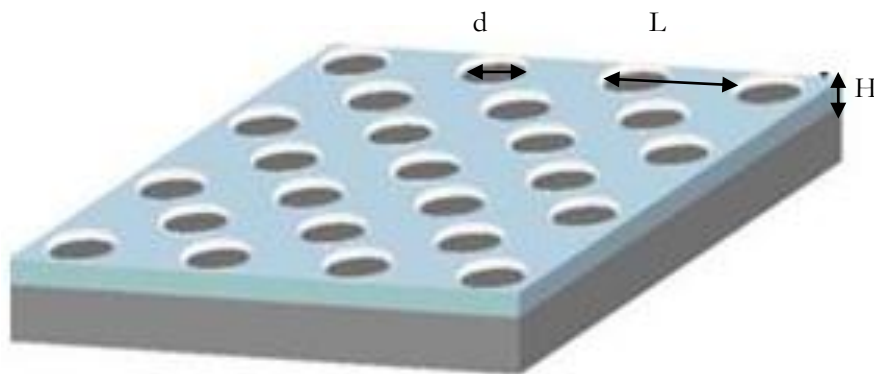
#### 5.3.6. Le diagramme de bande interdite photonique

Dans cette partie, nous avons calculé puis tracé les diagrammes de bandes pour différentes valeurs de  $n_2$ . Les résultats obtenus montrent clairement que pour ce type de structure ; la bande interdite photonique ouverte est seulement de type TM par contre pour le mode TE aucune bande interdite n'est ouverte. Dans ces conditions, le cristal présente deux bandes ou la plus large se situe dans la région des longueurs d'ondes réduites comprise entre 0.21 et 0.275.



**Fig. 4.22. Diagramme de dispersion d'une structure triangulaire composée de trous d'air plongés dans le Silicium.**

La figure 4.23 montre la structure d'un cristal photonique à deux dimensions structuré en un réseau triangulaire de trous circulaires.

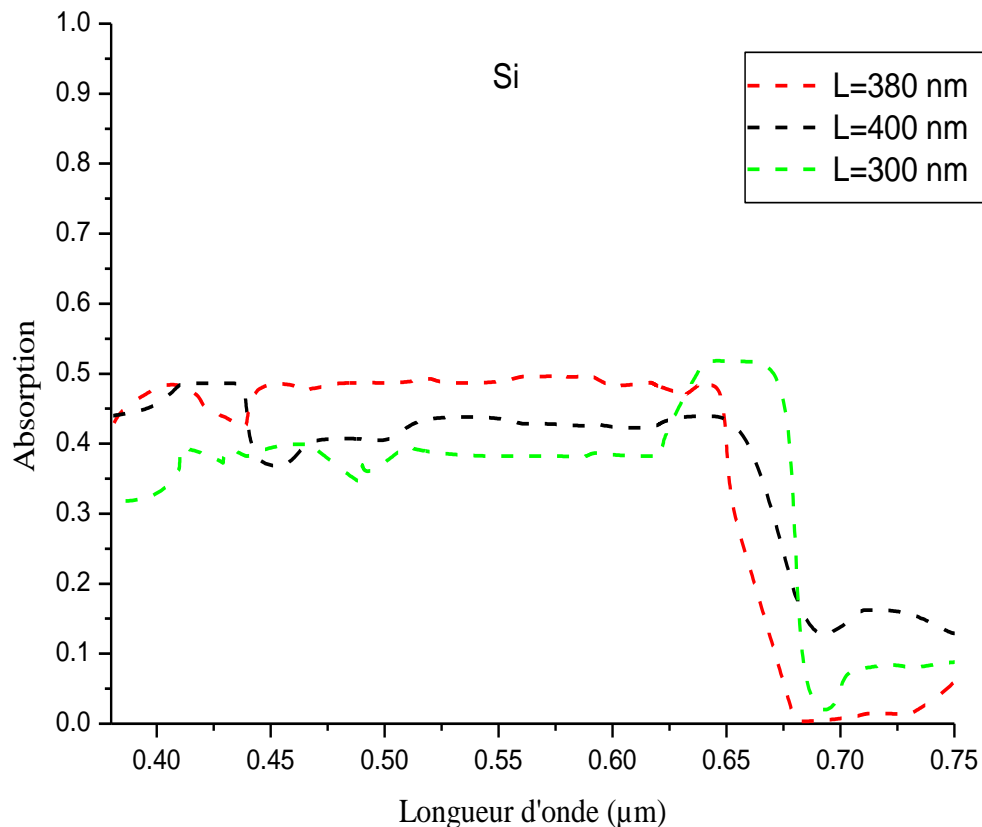


**Fig. 4.23. Cristal photonique à deux dimensions (2D SSP), avec un réseau triangulaire de trous circulaires.**

La figure 4.24 présente les spectres d'absorption d'un réseau triangulaire d'épaisseur 100

nm d'une couche mince de Silicium avec un facteur de remplissage fixe de l'ordre de 62% pour différentes périodes. D'après la figure 4.24, on peut constater que l'absorption pour les structures de Silicium s'étend vers des longueurs d'onde plus élevées pour les trois valeurs de  $L$ . L'absorption peut atteindre la longueur d'onde 650 nm en raison de l'ouverture de la bande interdite photonique dans cette gamme de fréquence.

Au-delà de cette valeur, l'absorption diminue rapidement à cause du coefficient d'extinction qui s'annule dans cette gamme de spectres.



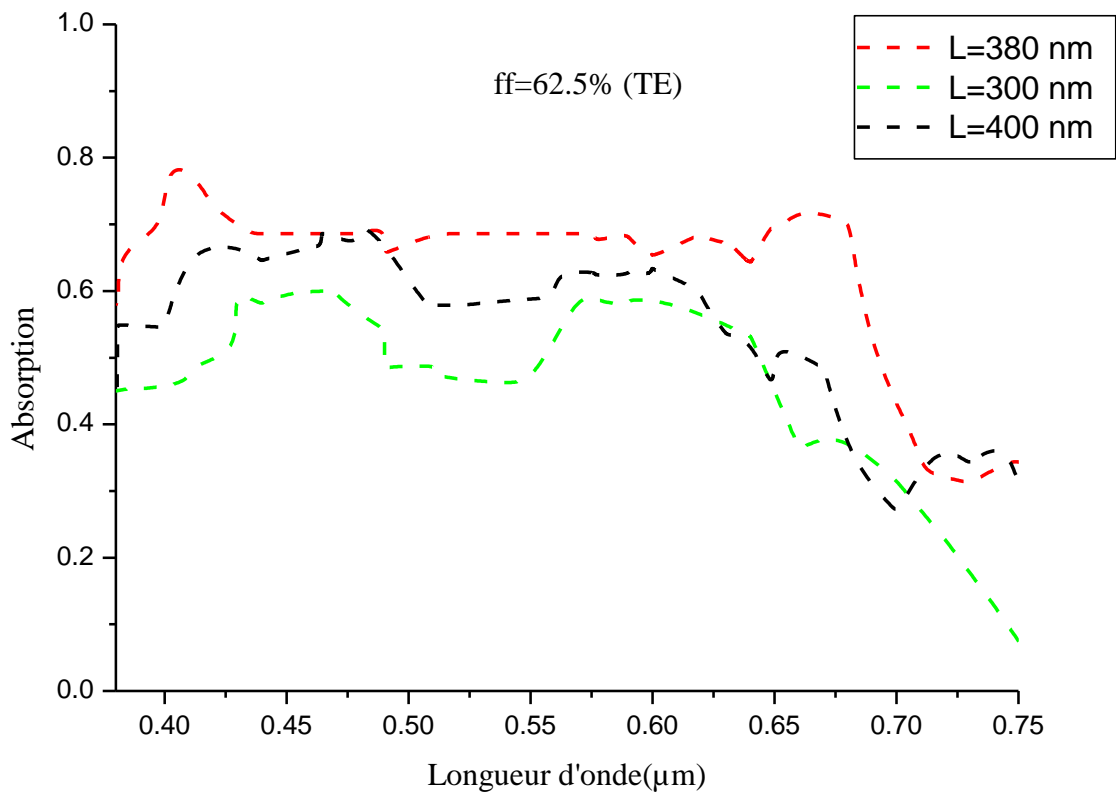
**Fig. 4.24.** Les spectres d'absorption d'un CP2D de réseau triangulaire de Silicium pour différentes périodes ( $L$ ) pour l'épaisseur  $H = 100$  nm [73 -74].

### *c- Cristaux photoniques 2D absorbants à réseau carrée de a-Si:H*

Nous avons effectué des simulations, pour obtenir l'absorption d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H), dans le spectre de longueur d'onde 380-750 nm. On a choisi l'épaisseur de la couche égale à 100 nm avec des périodes allant de 300 nm à 400 nm et un facteur de remplissage constant  $ff=62\%$ .

Dans le cas d'un cristal photonique 2D, l'absorption pour les trois périodes de réseau de la couche a-Si:H augmente pour toutes les longueurs d'ondes. On peut aussi observer que le Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) absorbe la lumière incidente mieux que la couche de

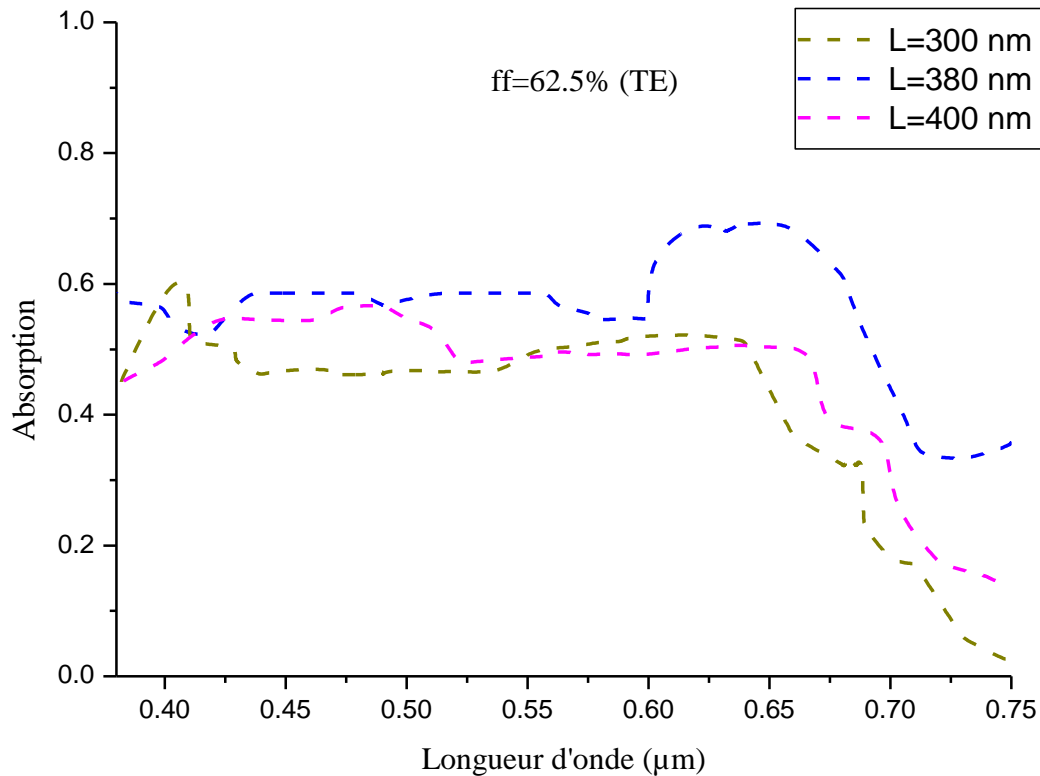
Silicium dans la partie visible du spectre solaire.( figure 4.25.)



**Fig. 4.25.** Effet de la matrice carrée 2D PC de trous circulaires en mode TE, avec un facteur de remplissage fixe et des différentes périodes (L), sur le spectre d'absorption de la couche a-Si:H[74].

#### *d. Cristaux photoniques 2D absorbants à réseau triangulaire de a-Si:H*

La figure 4.26 montre le spectre d'absorption en fonction de la longueur d'onde pour différentes valeurs de la période. Le spectre d'absorption d'un réseau triangulaire d'épaisseur 100 nm de à base d'une couche mince du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) a le même comportement d'absorption que dans le cas d'un réseau carré du Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Il est observée ici que le spectre d'absorption est légèrement supérieure à celle au triangulaire. D'après les résultats obtenus, nous pouvons conclure que l'absorption optique dans les deux réseaux de nano trous de silicium amorphe hydrogéné (carrés et triangulaires) est meilleure que celle des nano trous de silicium entre 380 nm et 750 nm.



**Fig. 4.26.** Spectre d'absorption de la couche  $a\text{-Si:H}$  d'un CP 2D de réseau triangulaire et de trous circulaires, avec facteur de remplissage constant pour différentes périodes ( $L$ ) [74].

## 6. Discussions des résultats obtenus

L'objectif dans cette partie est d'introduire les propriétés optiques des cristaux photoniques membranaires absorbants, d'étudier leurs spectres d'absorption et de mettre en évidence les différents phénomènes physiques mis en jeu ainsi que les propriétés modales exploitées.

La structure servant de base à cette discussion est une couche ultramince absorbante en Silicium amorphe hydrogéné ( $a\text{-Si:H}$ ) d'épaisseur arbitraire fixée à 100 nm. Cette couche sera par la suite introduite dans une cellule complète et jouera le rôle de couche active.

Pour cela, nous considérerons dans ce qui suit, à la fois un cristal photonique unidimensionnel avec substrat de verre et un cristal photonique bidimensionnel membranaire présentant une période et une largeur de trous notés  $L$  et  $D$ , respectivement. Les absorptions correspondant à ces configurations sont illustrées sur la Figure 4.22. Pour présenter clairement l'effet de la structuration, l'absorption intégrée des CP membranaires est au préalable optimisée en faisant varier simultanément  $L$  et le rapport  $D/L$  sous incidence normale de la lumière et pour une épaisseur fixe de la couche. Les paramètres optimaux calculés par la méthode FDTD sont

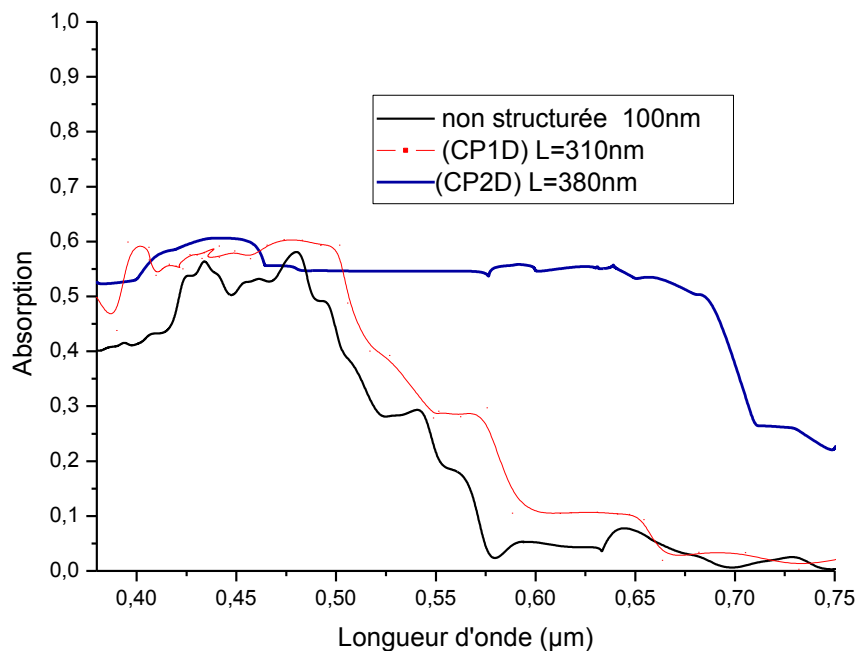
( $L=310$  nm,  $D/L=59\%$ ) pour la configuration unidimensionnelle (1D) et ( $L=380$  nm,  $D/L=62.5\%$ ) pour la configuration bidimensionnelle (2D). Les absorptions intégrées résultantes sont présentées dans le Tableau 4.1.

Configuration	Absorption intégrée	Gain relatif/couche non structurée
Non structurée	32%	/
CP1D optimisé	42%	1.3
CP2D optimisé	61%	1.9

**Tab. 4.1. Les absorptions intégrées résultantes.**

D'une part, pour un volume en matériau plus faible, on observe que les membranes structurées absorbent davantage la lumière incidente que la couche de référence. Les gains relatifs par rapport à la couche non structurée s'élèvent jusqu'à 1.9.

D'autre part, on remarque que la configuration 2D conduit à une absorption plus élevée que la configuration 1D, ce qui a été corroboré par d'autres études théoriques [78-79]. Les spectres d'absorption obtenus sont représentés sur la figure 4.27.



**Fig. 4.27. Spectres simulés en incidence normale de la lumière pour la polarisation TE correspondant à une couche non structurée et aux CP 1D et 2D membranaires optimisés [73]**

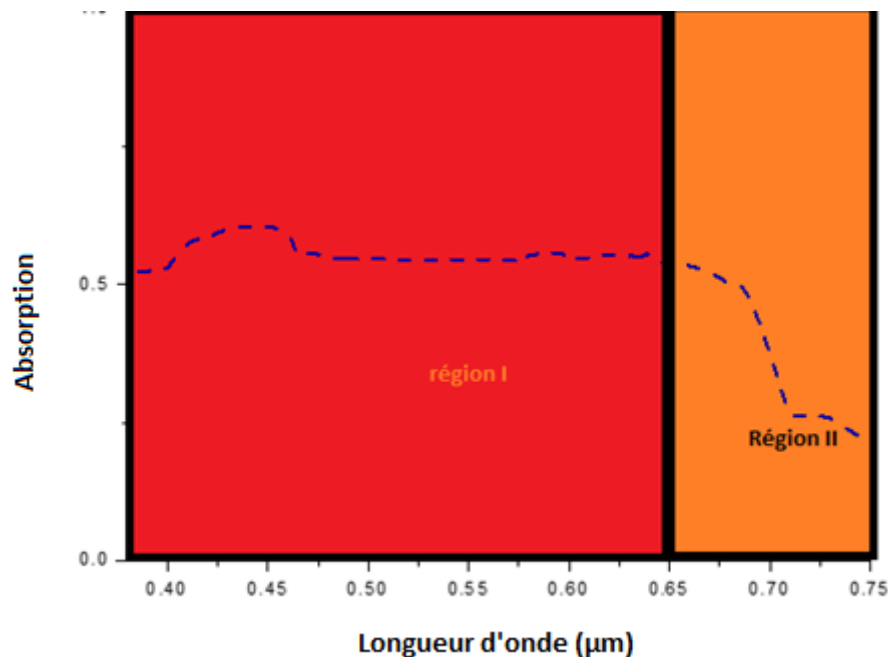
Les spectres correspondant aux CP membranaires diffèrent fortement du spectre de la couche de référence. En effet, l'absorption est presque toujours plus élevée quelle que soit la longueur d'onde considérée, ce qui est en accord avec les valeurs d'absorptions intégrées du Tableau 4.1.

En particulier, l'absorption entre 400 -700 nm du cristal photonique 2D est plus importante pour le cristal photonique 1D, que pour la couche non structurée. Il est clair que pour les cristaux photoniques unidimensionnels et les cristaux photoniques bidimensionnels, l'allure du spectre dépend de la polarisation de la lumière en incidence normale.

Finalement, en termes d'insensibilité à l'absorption intégrée maximale atteignable, les résultats de simulation indiquent qu'il est préférable de travailler avec un cristal photonique unidimensionnel (CP1D) et avec un cristal photonique bidimensionnel membranaire (CP2D) pour une application photovoltaïque.

Après avoir mis en évidence les gains en absorption intégrée dans les cristaux photoniques absorbants, nous nous intéressons dans ce qui suit à l'interprétation des différentes régions du spectre.

Deux mécanismes principaux interviennent dans le contrôle de l'absorption : les effets d'anti-reflet (AR) et l'effet transparent. Ces effets gouvernent l'absorption dans des régions distinctes, comme le montre la figure 4.28.



**Fig. 4.28. Spectres simulés en incidence normale de la lumière correspondant à une couche de CP-2D membranaire optimisé.**

**Région I :** Pour les longueurs d'onde inférieures à environ 650 nm, la profondeur de pénétration est plus faible que l'épaisseur de la couche du fait des valeurs élevées du coefficient d'absorption dans cette région. L'augmentation de l'absorption dans la région I s'explique alors par la structuration de la couche absorbante et l'anti-reflet dans le cristal photonique membranaire.

**Région II :** Le coefficient d'extinction du Silicium est faible pour des longueurs d'onde au-delà d'environ 650 nm à 800 nm. Dans le cas présent, l'épaisseur de la couche est limitée à 100 nm,

ce qui explique l'absorption observée pour la de référence est diminué par rapport au coefficient d'extinction  $k$ , cela s'explique alors par la structuration de la couche absorbante laquelle est transparent dans le cristal photonique membranaire.

## 7. Analyse des résultats

Nous avons choisi comme point de départ pour notre étude une cellule solaire à base de Silicium amorphe hydrogéné (a- Si :H) dont l'épaisseur de la couche active est seulement de 100 nm. En l'absence de structures photoniques spécifiques, cette couche ultramince souffre d'une faible absorption (en particulier près du gap du matériau) limitant ainsi le rendement de la cellule.

Afin d'adresser ce problème, nous avons proposé de graver totalement cette couche pour former un cristal photonique et d'optimiser ses paramètres (période  $L$  et facteur de remplissage en air  $ff_{air}$ ) afin d'augmenter la densité locale d'états photoniques aux grandes longueurs d'onde [9]. Les premières études réalisées par simulation optique ont montré que la structuration d'une couche de Silicium amorphe hydrogéné (a- Si :H) isolée en un CP1D membranaire permettait d'augmenter l'absorption intégrée de 38% en valeur relative pour des paramètres optimisés.

En analysant ce gain, nous avons démontré qu'il résultait de la combinaison de plusieurs mécanismes : aux faibles longueurs d'onde ( $< 400$  nm environ), la nano-structuration induit un effet d'anti-reflet du fait de la diminution de l'indice effectif (champ électromagnétique concentré partiellement dans les trous du cristal photonique). Aux longueurs d'onde élevées ( $>550$ nm environ) des pics d'absorption supplémentaires apparaissent. Ceci est la conséquence du couplage de la lumière incidente avec les modes de Bloch lents du cristal photonique lorsque les conditions portant sur la symétrie et le facteur de qualité des modes sont réunies. Cette approche (forte perturbation dans la couche active) est donc différente d'une corrugation superficielle qui favorise le couplage des ondes incidentes avec les modes quasi-guidés de la couche non structurée sous-jacente. En modélisant les propriétés optiques d'une membrane isolée supportant un mode unique via la théorie des modes couplés, nous avons montré que l'absorption intégrée était maximisée lorsque les pertes externes étaient supérieures aux pertes par absorption. L'absorption obtenue à une longueur d'onde donnée dépend également de ces paramètres et est optimisée à la fréquence de résonance du mode dans les conditions de couplage critique (compensation des pertes externes et des pertes par absorption). Ainsi, lorsque cette membrane est symétrique verticalement, l'absorption est limitée à 50%. Les valeurs observées sur les spectres simulés sont supérieures à cette limite.

Ceci s'explique par le caractère multi-mode de nos cristaux photoniques (CP) membranaires. En effet, lorsque la densité de modes adressables est suffisante, ces modes

peuvent interagir et amener l'absorption au-delà de 50% sur une large gamme spectrale (jusqu'à une centaine de nanomètres) [78]

La seconde partie de cette étude consistait à étendre notre approche dans le cas des cristaux photoniques bidimensionnels (CP2D) membranaires absorbants [79]. Pour ce faire, nous nous sommes restreints au cas d'un réseau carré de trous qui présente l'avantage d'être facilement réalisable par lithographie holographique. Les simulations optiques ont mis en avant les avantages de cette configuration par rapport au cas 1D, à savoir une insensibilité à la polarisation de la lumière en incidence normale et des gains en absorption intégrée plus importants (+17% en valeur absolue par rapport au CP1D membranaire isolé).

Nous avons cherché à maximiser l'absorption de la cellule en étudiant différentes configurations grâce à la variation simultanée de la période et du facteur de remplissage en air du cristal photonique.

## 8. Conclusion

Pour résumer, nous avons utilisé la méthode des différences finies temporelle (FDTD) pour étudier les propriétés optiques des CP1D sans motif, et CP2D avec réseau triangulaire et carrés de deux types de matériaux Si et Silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H). Les résultats montrent que l'amélioration significative de l'absorption optique se produit pour les deux réseaux triangulaires et carrés en comparaison avec la couche CP1D sans motif et en fonction des paramètres géométriques sur un spectre de 380-750 nm. En utilisant le solveur de mode, une étude d'optimisation a été effectuée afin de déterminer les meilleurs paramètres géométriques conduisant à une meilleure absorption et donc une cellule solaire plus efficace. Les résultats obtenus montrent que, pour les valeurs de réseau optimisés, la période et le facteur de remplissage, l'absorption optique dans les deux réseaux de nano-trous amorphes de silicium hydrogéné est meilleure que celle des nano-trous de silicium. D'autre part, on trouve que la structure carrée absorbe la lumière plus efficacement que la structure triangulaire.

Dans la structure 1D, il a été montré que les spectres d'absorption augmentent avec la valeur de la période ( $L$ ) et la valeur de l'épaisseur de la couche. Nous pouvons observer aussi que les structures PC1D absorbent la lumière incidente mieux que la couche non structurée.

## Conclusion générale

Afin de converger vers l'amélioration de l'absorption des cellules solaires à base des cristaux photoniques, des absorbeurs en couches minces ont été développés dans ce travail. Les études entreprises au long de cette thèse ont porté sur des cellules solaires en couches minces, donnant naissance aux cellules dites de 2<sup>ème</sup> génération. Aujourd'hui, les performances délivrées par les cellules dépendent de façon critique de la morphologie de la couche mince absorbante, en particulier pour mettre en jeu la qualité d'absorption dans les cellules à couches minces. Cette problématique est au cœur de l'étude présentée dans ce manuscrit de thèse.

Notre démarche consiste à étudier des cellules solaires à base de deux types de matériaux (Si et a-Si:H) et de proposer différentes configurations géométriques; non structurées, 1D et 2D (carrée et triangulaire), afin de trouver la meilleure combinaison donnant lieu à une meilleure absorption.

Dans un premier temps, pour optimiser la cellule solaire à base CP (1D et 2D), nous avons procédé à la simulation de cette dernière à l'aide de la méthode des différences finies temporelle (FDTD). On a varié les paramètres géométriques des structures étudiés, à fin d'obtenir une meilleure efficacité d'absorption, cette simulation est réalisée à l'aide du logiciel Rsoft qui fournit une prédiction théorique de l'absorption en fonction des paramètres géométriques.

Pour la structure 1D il a été montré que les spectres d'absorption augmentent avec l'augmentation de la période (L) et de l'épaisseur (H). Il est aussi noté que les structures 1D PC absorbent la lumière incidente mieux que la couche non structurée.

Dans un deuxième temps on a proposé une autre conception de cellule solaire CP sous forme d'un réseau, 2D (carrée et triangulaire), à base de Si et d'a-Si:H. Les spectres d'absorption de ces structures sont étudiés en fonction des paramètres géométriques (facteur remplissage et la période) et physiques (Si et a-Si:H).

Dans ce contexte, nous avons étudié l'absorption des couches minces en fonction de la longueur d'onde pour l'application dans les cellules solaires. Ainsi, nous avons essayé d'obtenir une densité photonique élevée des états dans la couche 1DPC et 2DPC, en positionnant la bande interdite photonique dans la région non absorbante de la matière PV et le bord de la bande interdite photonique dans la région faiblement absorbante. Nous avons conçu par simulation numérique la géométrie de la cellule solaire faite par cristaux photoniques 1D afin d'améliorer l'absorption. Nous avons étudié les performances de la structure considérée et déterminé les paramètres géométriques (période et facteur de remplissage) qui permettent une meilleure

absorption. Les résultats obtenus montrent que l'absorption de la structure à motifs 1D est considérablement améliorée par rapport à la couche sans motif. Cette absorption est encore meilleure pour une structure 2D. Les résultats de simulation ont aussi montré que l'efficacité d'absorption de la lumière solaire en fonction des paramètres géométriques sur un spectre de 380-750 nm d'un CP2D de a-Si:H est meilleure par rapport à une couche de Si. Dans cette étude, nous avons observé que la structure carrée de CP2D absorbe la lumière incidente mieux que la structure triangulaire.

En résumé, les résultats obtenus montrent que ; pour des valeurs optimisées de réseau (facteur remplissage et la période) l'absorption optique dans les deux matrices de nano trous de silicium amorphes hydrogéné est mieux que celle des nano trous de silicium. Nous avons également constaté que l'absorption de la configuration de réseau carré est légèrement plus élevée que celle d'un réseau triangulaire.

Comme perspectives, nous proposons l'étude et le développement des cellules solaires à base d'autres types de matériaux compatibles à l'optique intégrée et des cristaux photonique 3D.

## **Annexe A- PRODUCTION SCIENTIFIQUE**

### **A.1 PUBLICATIONS DANS DES REVUES INTERNATIONALES A COMITE DE LECTURE**

- 1- A.Ouanoughi, A. Hocini and D. Khedrouche «Enhanced absorption of solar cell made of photonic crystal by geometrical design » Front. Optoelectron.2016, 9(1): 93–98. (2016) Springer.
- 2- A.Ouanoughi, A. Hocini and D. Khedrouche « Study of the Absorption in Solar Cells with 2D Photonic Crystals » Acta Physica Polonica A, 127 (4), 1205-1207,2015.

### **A.3 CONFERENCES SANS ACTES, PRESENTATION ORALE**

- A.Ouanoughi, A. Hocini « enhancement of solar cell efficiency using 1D photonic crystal » AES, 2012, Sharjah. AEU 2013
- A.Ouanoughi, A. Hocini « enhancement of solar cell absorption in 1D photonic crystal solar cell based on geometrical adjustments crystal » 2013, Jordan.

### **A.4 COMMUNICATIONS PAR AFFICHE**

- A.Ouanoughi, A. Hocini and D. Khedrouche « Study of the Absorption in Solar Cells with 2D Photonic Crystals » APMAS 2014, Turkey.
- A. Ouanoughi, A. Hocini, D. Khedrouche«study of the optical absorption in solar cell using 1D photonic crystal » May 19-20, M'Sila, Algeria.

## Références

- [1] P. Anthony “vers une amélioration des performances et de La durabilité de cellules photovoltaïques Organiques par l’application d’un film Composite multifonctionnel, ” Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, Février, 2014.
- [2] G. Guillaume, “Cristaux photoniques pour le contrôle de l’absorption dans les cellules solaires photovoltaïques silicium ultramines,” Thèse de doctorat, École Doctorale Matériaux de Lyon, Octobre, 2012.
- [3] I. Bouchama, “Contribution à l’amélioration des performances des cellules solaires  $\text{CuIn}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ ,”Thèse de doctorat, Université de Sétif ,2011.
- [4] E. Yablonovitch, “Inhibited spontaneous emission in solid-state electronics,” *Physical Review Letters*, 1987, pp. 2059-2062.
- [5] D.M. Chapin, C.S. Fuller et G.L. Pearson, “A New Silicon p-n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power,” *Journal of Applied Physics* ,1954
- [6] D .Hassina, “Cellules solaires photovoltaïques plastiques nanostructures,” Thèse de doctorat, université d’Angers, 2009.
- [7] M. Étienne, “ Accroissement de l’absorption lumineuse au sein de cellules solaires a couches minces de silicium par addition de nanoparticules et nanostructures métalliques,” Thèse de doctorat, Ecole doctorale sésames Metz, 2009.
- [8] A. E. St. John, “Multiple internal reflection structure in a silicon detector which is obtained by sandblasting,” U.S. Patent No. 3,487,223, 1969.
- [9] Y. Park, E. Drouard, O.E. Daif, X.Letartre, P. Viktorovitch, A. Fave, A. Kaminski, M. Lemiti, and C. Seassal,”Absorption enhancement using photonic crystals for silicon thin film solar cells”, *Optics Express*, 17:14312–14321, 2009
- [10] N. Palit,” Amorphous Silicon based Solar Cells: Experimental Characterisation and Computer Modelling”, Thèse de doctorat, Université d’India.
- [11] C. A. Wolden, J. Kurtin, J. B. Baxter, I. Repins, S. E. Shaheen,J. T. Torvik, A. A. Rockett, V. M. Fthenakis, and E. S. Aydil. ,” Photovoltaic manufacturing,” *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 29,030801, 2011.
- [12] P. A. Basore,”Defining terms for crystalline silicon solar cells,”*Progress in. Photovoltaics: Research and Applications*, 2,177–179, 1994.
- [13] P. Spinelli, V. E. Ferry, J. van de Groep, M. van Lare, M. A. Verschuuren, R. E. I. Schropp, H. A. Atwater, and A. Polman,” Plasmonic light trapping in thin-film si solar cells”, *Journal of Optics*, 14:024002, 2012.
- [14] M. A. Green, *Third Generation Photovoltaics: Advanced Solar Energy Conversion*, Springer, New York, 2003.
- [15] A. V. Shah, H. Schade, M. Vanecek, J. Meier, E. Vallat-Sauvain, N. Wyrsh, U. Kroll, C. Droz, and J. Bailat,”Thin-film silicon solar cell technology”, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 12:113–142, 2005.
- [16] [http://www. spectroscopie d’absorption dans l’uvvisible.com](http://www.spectroscopie d'absorption dans l'uvvisible.com).
- [17] B. salaheddine “effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires ” UniversitéFerhat Abbas,Setif ,2011
- [18] E.T. Yu and J. van de Lagemaat,”Photon management for photovoltaic”, *MRS Bulletin*, 36:424–428, 2011.
- [19] B. Lipovsek, M. Cvek, A. Campa, J. Krc, M. Topic,” Analysis and Optimisation of Periodic Interface Textures in Thin-Film Silicon Solar Cells,” in *EUPV5*, 2010
- [20] Green M.A., Emery K., King D.L., Hishikawa Y., Warta W., “Solar Cell Efficiency Tables(version

- 28)”, *Progress in Photovoltaic: Research and Applications*, vol. 14, 455-461,2006.
- [21] Deng X. and Schiff E.A., “Amorphous Silicon-based Solar Cells”, *Handbook of Photovoltaic Science and Engineering from Antonio Luque and Steven Hegedus*, John Wiley & Sons, Chichester ,505-565, 2003.
- [22] Shah A., Torres P., Tscharnner R., Wyrsh N., Keppner H., “Photovoltaic technology: The case for thin-film solar cells”, *Science*, vol. 285, 692-698,1999.
- [23] Meier J., Keppner H., Dubail S., Droll U., Torres P., Pernet P., Ziegler Y., Selvan J., Cuperus J., Fischer D., Shah A., *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, vol. 507,139-144,1998.
- [24] Gupta R., Dyer M.J., Weimer W.A., “Preparation and characterization of surface plasmon resonance tunable gold and silver films”, *J. of Applied Physics*, vol. 92, 5264-5271,2002.
- [25] Willemen J.A., “Modelling of Amorphous Silicon Single- and Multi-Junction Solar Cells”, Ph.D thesis, Delft University of Technology, 1998.
- [26] Luysberg M., Hapke P., Carius R., Finger F., “Structure and growth of microcrystalline silicon: Investigation by TEM and Raman spectroscopy of films grown at different plasma excitation frequencies”, *Philosophical Magazine A*, vol. 75, 31-47,1997.
- [27] Tzolov M., Finger F., Carius R., Hapke P., “Optical and transport studies on thin microcrystalline silicon films prepared by very high frequency glow discharge for solar cells applications”, *Journal of Applied Physics*, vol. 81, 7376-7385,1997 .
- [28] Finger F., Vetterl O., Carius R., Lambertz A., Scholten C., Houben L., Luysberg M., “Microcrystalline silicon solar cells: relationship between material properties and device performance”, *Proceedings of the Eleventh International School of Condensed Matter Physics*, Varna, Bulgaria, 26 (2000).
- [29] Jackson W.B., Kelso S.M., Tsai C.C., Allen J.W., Oh S.J., “Energy dependence of the optical matrix element in hydrogenated amorphous and crystalline silicon”, *Phys. Rev. B*, vol. 31 (1985) 5187-5198.
- [30] Jackson W.B., Johnson N.M., Biegelsen D.K. “Density of gap states of silicon grain boundaries determined by optical absorption”, *Applied Physics Letters*, vol. 43 (1983) 195197.
- [31] D.L .Staebler, W., C.R., “Reversible conductivity changes in discharge-produced amorphous Si”, *.Appl.Phys.Lett.*31, 292, 1977.
- [32] D.E. Carlson, and C.R.Wronski,” Amorphous silicon solar cells.Appl”, *Phys. Lett*, Vol. 28, pp. 671-673. 1976.
- [33] J. Yang, S. Guha,”Amorphous silicon alloy materials and solar cells near the microcrystallinity”, *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 557-239, 1999.
- [34] R. Holland et L. Simpson,” A free field EMP coupling and scattering code”, *IEEE, Transaction on Nuclear Sciences*, vol. 6, n°24, pp. 2416-2421,1997.
- [35] R.A .Street,j. Kaklios, , and T.M. Hayes,” Thermal equilibration in doped amorphous silicon”,*Phys .Rev.B* 34, 3030, 1986.
- [36] E.Chow , S.Lin , S.Johnson , P.Villeneuve , J.Joannopoulos , J.Wendt , G.Vawter ,W.Zubrycki ,H. Hou , A.Alleman ,”three-dimensional control of light in a two – dimensional photonic crystal slab”, *eNature*, 407, 983, 2000.
- [37] B. D. Rezgui, ” Etude des propriétés optiques, électriques et structurales de nanoparticules de silicium insérées dans une matrice diélectrique et étude de leur intégration pour des cellules photovoltaïques à haut rendement ”, Thèse de doctorat, l’institut national des sciences appliquées de Lyon, 2010.
- [38] W.d. Boer, M. Hack ,”A comparative study of single and double carrier injection in amorphous silicon alloys.*Journal of Non-Crystalline Solids*”, Volumes 77-78, Part 1, 2 December, 491-494,1985.
- [39] A.Benmerkhi, ”Optimisation Du Confinement De La Lumière Dans Des Cavités A Cristaux

- Photoniques ”, Thèse de doctorat, Université Mentouri, Algérie, 2009.
- [40] Kittel, C., Introduction to solid-state physics. 1971: John Wiley.
- [41] F.Merliche, ”Structuration 1D et 2D de matériaux diélectriques par ablation laser nanoseconde : applications aux couches minces et monocristaux de LiNbO<sub>3</sub> et couches minces de TiO<sub>2</sub>”, Université de Metz, 2008.
- [42] J.M.Lourtioz, C.Delalande, A.Levenson, H.Rigneault, P.Viktorovitch, ”Les cristaux photoniques de la microphotonique à la nanophotonique”, Paris, 2005.
- [43] J.D. Giannopoulos, R.D. Meade, and J.N. Winn, ” Photonic Crystals: Modeling the Flow of Light”, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1995.
- [44] T. Kondo, S. Matsuo, S. Juodkakis, V. Mizeikis , H. Misawa, ”Multiphoton fabrication of periodic structures by multibeam interference of femtosecond pulses, Appl”, Phys. Lett., 82, 2758 ,2003.
- [45] E.T. Yu and J, ”van de Lagemaat. Photon management for photovoltaics”, MRS Bulletin, 36:424–428, 2011.
- [46] S. Domínguez, , O. García, M. Ezquer, M.J. Rodríguez, A.R. Lagunas, J. Pérez-Conde, J. Bravo, Elsevier B.V.10,46-53 ,2012.
- [47] B. Lipovsek, M. Cvek, A. Campa, J. Krc, M. Topic, ”Analysis and Optimisation of Periodic Interface Textures in Thin-Film Silicon Solar Cells”, in EUPV5, 2010.
- [48] J. G. Mutitu, S. Shi, C. Chen, T. Creazzo, A. Barnett, C. Honsberg, and D. W. Prather”, Thin film solar cell design based on photoniccrystal and diffractive grating structures”, Optics Express, 16:15238–15248 ,2008.
- [49] A. Bielawny, C.Rockstuhl, F. Lederer, and R. B. Wehrspohn, ”Intermediate reflectors for enhanced topcell performance in photovoltaicthin-film tandemcells”, Optics Express, 17:8439–8446, 2009.
- [50] C. Seassal, Y. Park, A. Fave, E. Drouard, E. Fourmond, A. Kaminski, M. Lemiti, X. Letartre, and P, ”Viktorovitch.Photonic crystal assisted ultra-thin silicon photovoltaic solar cell”, Proceedings of SPIE,7002:700207–700207–8 ,2008.
- [51] Y. Park, E. Drouard, O. El Daif, X. Letartre, P. Viktorovitch, A. Fave, A. Kaminski, M. Lemiti, and C. Seassal, ”Absorption enhancement using photonic crystals for silicon thin film solar cells”, OpticsExpress, 17:14312–14321,2009.
- [52] A. Chutinan, N. P. Kherani, and S. Zukotynski, ”High-efficiency Nphotonic crystal solar cell architecture”, Optics Express, 17:8871–8878 ,2009.
- [53] G. Gomard, E. Drouard, X. Letartre, X. Meng, A. Kaminski, A. Fave, M. Lemiti, E.-Caurel, and C.Seassal, ”Twodimensionalphotonic crystal for absorption enhancement in hydrogenated amorphous siliconthin film solar cells”, Journal of Applied Physics, 108:123102, 2010.
- [54] S. B. Mallick, M.Agrawal, and P. Peumans. Optimal light trapping inultra-thin photonic crystal crystalline silicon solar cells. Optics. Express, 18:5691–5706, 2010.
- [55] Y. Lee, Ch. Huang, J. Chang, and M.Wu, ”Enhancedlight trapping based on guided mode resonance effect for thin-film silicon solar cells with twofilling-factor gratings”, Optics Express, 16:7969–7975, 2008.
- [56] S. Zanotto, M.Liscidini, and L. C. Andreani, ” Light trappingregimes in thin-film silicon solar cells with a photonic pattern”, Optics Express, 18(5):4260–74, 2010.
- [57] J. Buencuerpo, L. E. Munioz-Camuniez, M. L. Dotor, and P. A.Postigo, ”Optical absorption enhancement in a hybrid system photonic crystal - thin substrate for photovoltaic applications”, Optics Express, 20(S4):A452–A464, 2012.
- [58] D. S. Wiersma, ”Disordered photonic structures for highly efficient thin film Nsolar cells”, Optical Nanostructures for Photovoltaics, page PWA1, 2010.
- [59] A. Bozzola, M.Liscidini, and L. C. Andreani, ” Photonic light trapping versus lambertian limits in thin film silicon solar cells with 1D and 2D periodicp”, Opt. Express20, A224–A244 ,2012.

- [60] O. El Daif, E. Drouard, G. Gomard, A. Kaminski, A. Fave, M. Lemiti, S.Ahn, S. Kim, P.R. i Cabarrocas, H. Jeon, and Ch. Seassal”, Absorbing one-dimensional planar photonic crystal for amorphous siliconsolar cell”, *Optics Express*, 18:A293–A299 ,2010.
- [61] G. Gomard, X. Meng, E. Drouard, K. El Hajjam, E. Gerelli, R. Peretti, A. Fave, R. Orobtcouk, M. Lemiti, and Ch. Seassal”, Light harvesting by planar photonic crystals in solar cells: the case of amorphoussilicon”, *Journal of Optics*, 14:024011, 2012.
- [62] S. B. Mallick, M. Agrawal, A. Wangperawong, E. S. Barnard, K. K. Singh, R. J. Visser, M. L. Brongersma, and P. Peumans”, Ultrathin crystalline-silicon solar cells with embedded photonic crystals”, *Applied Physics Letters*, 100:053113 ,2012.
- [63] X. Meng, G.Gomard, O. El Daif, E.Drouard, R.Orobtcouk, A.Kaminski, A. Fave, M. Lemiti, A. Abramov, P. R. i Cabarrocas, and C. Seassal”, Absorbing photonic crystals for silicon thin-film solar cells: Design, fabrication and experimental investigation”, *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 95, Supplement 1:S32 – S38 ,2011.
- [64] G. Gomard, O. El Daif, E. Drouard, X. Meng, A. Kaminski, A. Fave, M. Lemiti, E. G.Caurel, P. R. i Cabarrocas, and Ch.Seassal”, Design and fabrication of photonic crystal thin film photovoltaic cells”, *Photonics for Solar Energy Systems III*, 7725:77250M, 2010.
- [65] E. Ozbay. Plasmonics”, Merging photonics and electronics at nanoscale dimensions .*Science*, vol. 311, no. 189, 2006.
- [66] K. S. Yee”, Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media”, *IEEE Trans. Antennas Propag*, 14, 3, 302-307 ,1966.
- [67] U. Schroter, S. Seider, S. Tode, and D. Heitmann”, Surface plasmon reflection at edges and resonance effects in metal bars”, *Ultramicroscopy* 68 ,1997.
- [68] B. Wang and G. P. Wang”, Surface plasmon polariton propagation in nanoscale metal gap waveguides”. *Optics Letters* 27, 2004.
- [69] A. Toflove and S. C. Hagness, “Computational Electromagnetics, the Finite-Difference Time-Domain Method “, Artech House, Norwood, MA, second edition, 2005.
- [70] R. Holland et L. Simpson, “A free field EMP coupling and scattering code”, *IEEE, Transaction on Nuclear Sciences*, vol. 6, n°24, pp. 2416-2421, 1997.
- [71] O. El Daif, E. Drouard, G. Gomard, A. Kaminski, A. Fave, M. Lemiti, S.Ahn, S. Kim, P.R. i Cabarrocas, H. Jeon, and Ch. Seassal. Absorbing one-dimensional planar photonic crystal for amorphous siliconsolar cell. *Optics Express*, 18:A293–A299, 2010.
- [72] RSoft Design Group, FullWAVE, Inc. 200 Executive Blvd. Ossining, NY 10562.
- [73] A. Ouanoughi, A. Hocini, D. Khedrouche "Study of the Absorption in Solar Cells with 2D Photonic Crystals", *Acta Physica Polonica A*, 127 (4), 1205-1207,2015.
- [74] A. Ouanoughi, A. Hocini, D. Khedrouche "Enhanced absorption of solar cell made of photonic crystal by geometrical design" *Front. Optoelectron.*2016, 9(1): 93–98. 2016.
- [75] B. Wild, «Etude expérimentale des propriétés optiques des cristaux photoniques bidimensionnels et de leur accordabilité», Thèse de doctorat n° 3573, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 2006.
- [76] A. Kahlouche, " Étude des potentialités de couches minces sol-gel dopées par des nanoparticules magnétiques pour la conception de cristaux magnéto-photoniques" Thèse de doctorat, Université de M'sila. 2015.
- [77] C. CAËR, «Cristaux photoniques à fente: vers une photonique silicium hybride à exaltation localisée du champ électromagnétique», Thèse de doctorat, Université Paris-Sud, 2014.
- [78] R. Peretti, G. Gomard, C. Seassal, X. Letartre and E. Drouard. Modal approach for tailoring the absorption in a photonic crystal membrane. *Journal of Applied Physics*, 111:123114–1 –

123114–7, 2012.

- [79] G. Gomard, E. Drouard, X. Letartre, X. Meng, A. Kaminski, A. Fave, M. Lemitte, E. Garcia-Caurel, and Ch .Seassal. Two-dimensional photonic crystal for absorption enhancement in hydrogenated amorphous silicon thin film solar cells. *Journal of Applied Physics*, 108:123102, 2010.

---

**Résumé :**

Une cellule photovoltaïque est un composant électronique qui, exposé à la lumière (photons), produit de l'électricité grâce à l'effet photovoltaïque qui est à l'origine du phénomène. Notamment grâce aux innovations technologiques, un pas important a été franchi dans ce sens grâce à la mise en place d'une filière utilisant des couches minces, réduisant significativement la quantité de matériau actif nécessaire. Du fait de leur faible épaisseur, ces couches souffrent d'une faible absorption de la lumière, ce qui limite le rendement de conversion des cellules.

Pour répondre à ce problème et pour le contrôle de variation de l'absorption dans les cellules solaires photovoltaïques, nous proposons de structurer la couche active des cellules solaires en cristal photonique (CP) absorbant. Cette structure périodique assure simultanément une absorption efficace de la lumière aux faibles longueurs d'onde par le piégeage des photons dans la couche active (ici en silicium amorphe hydrogéné) pour les longueurs d'onde situées dans le domaine visible.

Dans le cadre de cette étude, des simulations optiques ont été utilisées de manière à optimiser les paramètres du CP, engendrant ainsi une augmentation de l'absorption dans la couche active sur l'ensemble du spectre utile. Les structures étudiées dans cette thèse sont les cristaux photonique unidimensionnel, bidimensionnel de silicium amorphe hydrogéné et le silicium structuré à (réseaux de miroir de Bragg, réseau triangulaire et carrée) et non structuré.

Nous avons pu conclure que :

- La configuration 1D conduit à une absorption plus élevée que la configuration non structurée.
- D'autre part, on peut dire que l'absorption optique dans les deux réseaux de nano-trous amorphes de silicium hydrogéné est meilleure que celle des nano-trous de silicium. D'autre part, on trouve que la structure carrée absorbe la lumière plus efficacement que la structure triangulaire.

**Mots Clés :** Cellules solaires photovoltaïques, cristaux photoniques, piégeage de la lumière, silicium amorphe hydrogéné, silicium.