

IV.1 Introduction

La structure périodique des matériaux à l'échelle de dimensions avoisinant les longueurs d'ondes des photons (cristaux photoniques) a permis la réalisation de milieux pouvant interdire la propagation de la lumière dans des bandes entières de fréquences (bandes interdites photoniques ou BIP).

Parmi ces méthodes de plus il existe plusieurs simulateurs qui ont été conçus pour faciliter cette tâche comme le f2p, le MIT Photonic-Bands, FIMMWAVE, FIMMPROP et Rsoft CAD de modélisation on peut citer la méthode couplée analyse rigoureuse de la vague (RCWA).

Cette partie sera consacrée à l'étude des spectres d'absorption dans une couche non structurée et structurée (cristaux photoniques (CPs)), pour différent matériaux tel que (Si, a-Si : H, GaAs, InP), pour différentes configurations. L'absorption pour plusieurs configurations sont alors calculés en fonction des variations des paramètres physique (l'indice de réfraction « n » et le coefficient d'extinction k) et les paramètres géométriques tel que : une couche non structurée et structurée cristaux photoniques 1D et 2D. Nous avons utilisé au cours de ce chapitre le logiciel de simulation DiffractMOD et Fullwave de RsoftCAD.

IV.2 caractérisation optique des échantillons intégrant un CP

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

IV.2.1 Loi d'absorption de la lumière – loi de Béer-Lambert

Soit une lumière monochromatique traversant une solution absorbante de concentration C contenue dans une cuve d'épaisseur l .

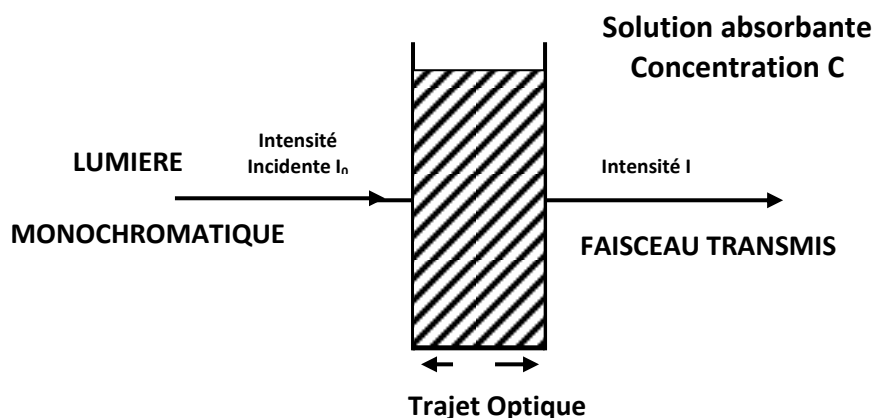


Figure IV.1 : une lumière monochromatique traversant une solution absorbante de concentration C contenue dans une cuve d'épaisseur l [24].

Une partie de ce rayonnement sera absorbée par l'échantillon et une partie sera transmise. Bouguer, Lambert et Bér ont étudié les relations qui existent entre I_0 et I : l'intensité d'une lumière monochromatique traversant un milieu où elle est absorbée décroît de façon exponentielle :

$$I = I_0 e^{-klc} \quad (\text{IV.1})$$

- * 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

Cette équation peut se réécrire

$$* \text{Log } (I_0/I) = klC/2.3 = \epsilon lC \quad (\text{IV.2})$$

$$* \text{log } (I_0/I) \text{ est appelé absorbance (A)} \quad (\text{IV.3})$$

$$* I/I_0 = T \text{ est la transmission} \quad (\text{IV.4})$$

$$* \% T \text{ est la transmittance} \quad (\text{IV.5})$$

ϵ : est le coefficient d'extinction molaire ; c 'est une caractéristique de la substance étudiée à une longueur d'onde donnée. Si C est la molarité, ϵ est en $\text{L.mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$.

On obtient alors la relation connue sous le nom de loi de Bér-Lambert :

$$A = - \log T = \epsilon lC \quad (\text{IV.6})$$

IV.2.2 Design d'un CP absorbant

L'objet de cette partie est d'introduire les propriétés optiques des CP 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 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 structurer cette couche absorbante en une membrane CP et à optimiser numériquement son absorption sur l'ensemble du spectre utile. Dans cette section, nous considérerons à la fois des CP1D et des CP2D membranaires présentant une période et une largeur de trous notés L et D , respectivement. Ces configurations sont illustrées sur la Figure IV.2

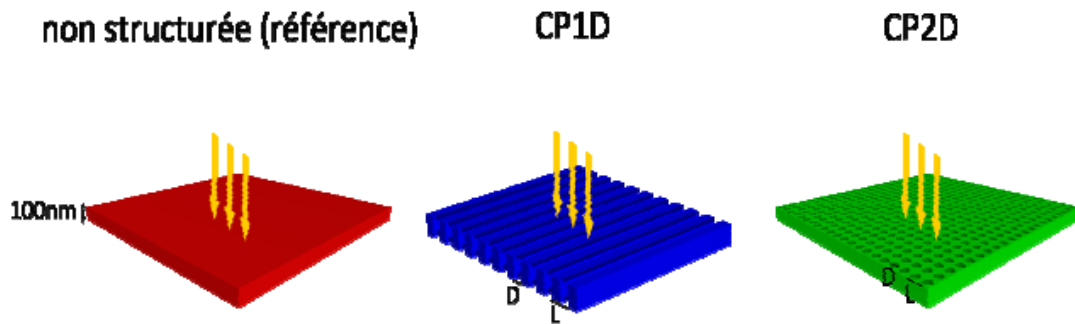


Figure IV.2 : Couches de 100nm d'épaisseur en $a\text{-Si:H}$ simulées par RCWA pour une configuration non structurée, un CP1D et un CP2D (ici à réseau carré) membranaire. Le milieu environnant est l'air [6].

IV.3 Propriétés optiques de certain matériaux différents

Les matériaux transparents de la couche absorbante, tout comme les semi-conducteurs qui composent la cellule solaire sont caractérisés par leurs propriétés optiques, soient l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction. Le coefficient d'extinction k est la partie imaginaire de l'indice de réfraction complexe n selon l'équation suivante :

$$\mathbf{n}(\lambda) = n(\lambda) - ik(\lambda) \quad (\text{IV.7})$$

➤ Distribution de l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction de (Si-a)

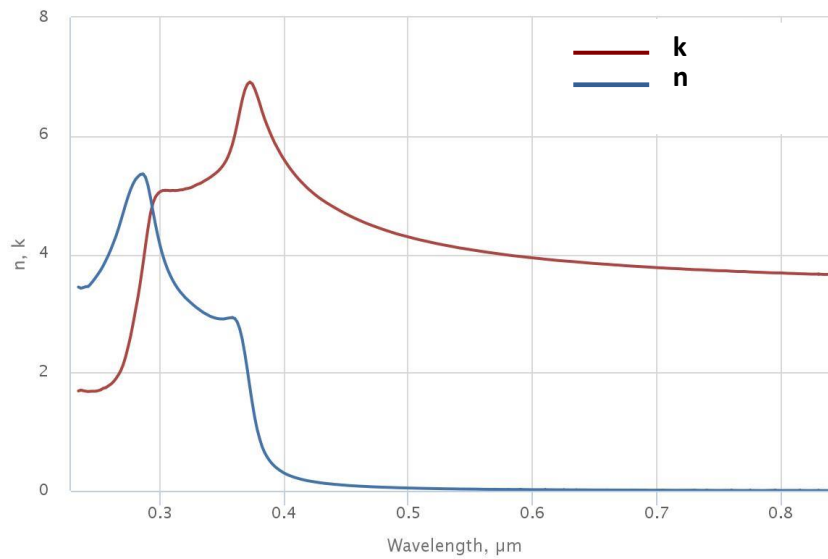


Figure IV.3 : Spectre de réfraction de la couche nom structuré à bas d'a- Si . Le (n) représente l'indice de réfraction et le (K) représente les pertes [25].

➤ istribution de l'indice de réfraction de GaAs

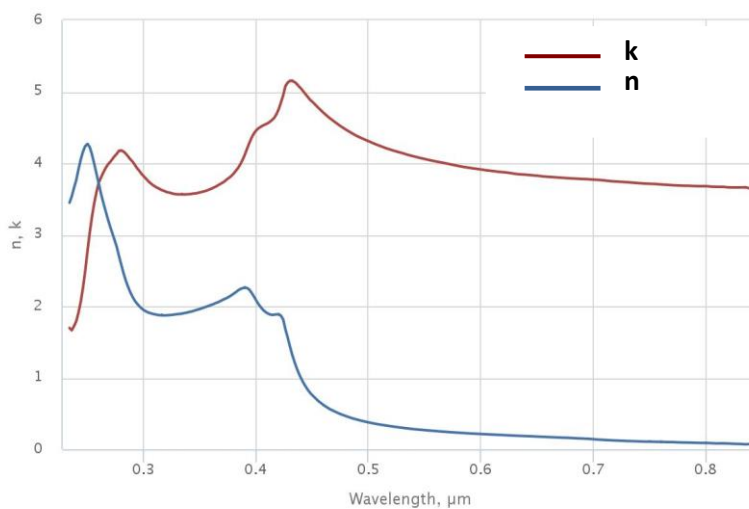


Figure IV.4 : Spectre de réfraction de la couche nom structuré à bas de GaAs. Le (n) représente l'indice de réfraction et le (K) représente les pertes [25].

➤ **Distribution de l'indice de réfraction de InP**

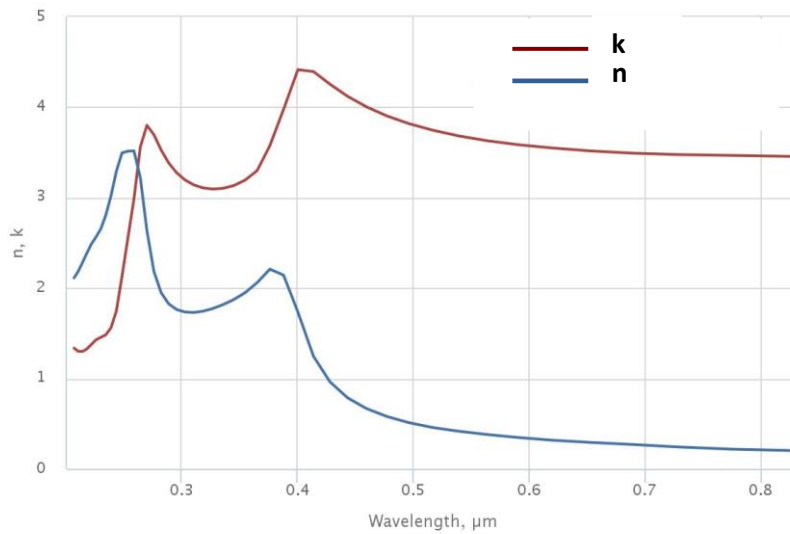


Figure IV.5 : Spectre de réfraction de la couche non structurée à base de InP. Le (n) représente l'indice de réfraction et le (k) représente les pertes [25].

Les semi-conducteurs ont la particularité d'avoir un coefficient d'extinction élevé à partir de leur seuil d'absorption en longueur d'onde (GaAs, InP, Si-a, ...). Ainsi, ils absorbent les photons d'énergie égale ou supérieure à leur gap. La valeur de coefficient d'extinction de a-Si: H est élevée par rapport à celles de GaAs et InP dans la gamme spectrale (0.3 - 0.8 μm).

Pour amplifier notre absorption, il est nécessaire d'avoir utilisé des structures cristaux photoniques 1D et 2D.

IV.4 Etude de l'absorption de la couche active de la cellule PV :

IV.4.1 Structure a CP-1D

Dans cette partie, nous introduisons l'empilement des couches constituant nos cellules solaires en justifiant le choix des matériaux retenus et l'épaisseur des couches. Les propriétés optiques de la cellule « photonisée » seront ensuite discutées notamment à l'aide de spectres d'absorption. L'empilement de base considéré se compose, de la face arrière à la face avant de la cellule, d'une couche d'argent (Ag), d'une couche d'oxyde de zinc (ZnO), de la couche active à semi-conducteurs (GaAs, InP, a-Si : H, ...) et finalement d'une autre couche d'oxyde conducteur transparent (TCO en anglais) en oxyde d'indium dopé à l'étain ($\text{In}_2\text{O}_3\text{-SnO}_2$, ITO). Un réseau carré de trou est ensuite formé dans la couche d'ITO et dans la couche active pour former la cellule solaire « photonisée » représentée sur la Figure IV.6

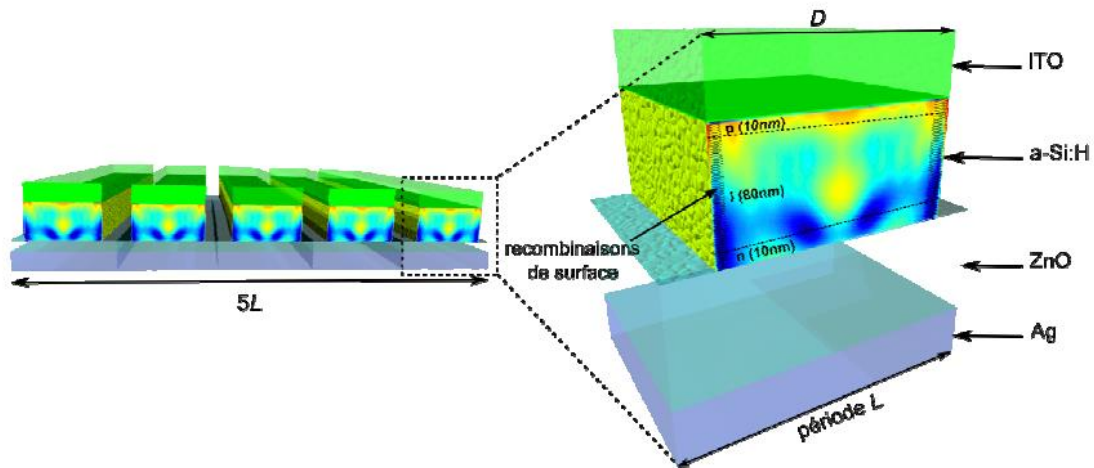


Figure IV.6 : Design de la cellule solaire étudiée avec ses principaux paramètres géométriques. Un CP1D à réseau carré est gravé dans la couche d'ITO et dans la couche active. Les paires e^-h^+ générées dans l'a-Si : H sont collectées via les couches TCO environnantes [6].

Nous verrons plus loin que dans cette configuration, la lumière incidente est absorbée préférentiellement dans la couche active. Les épaisseurs des couches résultent d'un compromis entre les propriétés électriques et optiques de la cellule, entre autres. Ainsi, la couche d'ITO possède une épaisseur de 50 nm, ce qui assure un transport latéral des charges efficace sur plusieurs micromètres jusqu'aux contacts métalliques, tout en limitant l'absorption parasite de la lumière dans cette couche et la quantité de ce matériau coûteux.

L'épaisseur de la couche active est seulement de 100 nm [18m]. Cette épaisseur permet de collecter correctement les porteurs car la longueur de diffusion des porteurs minoritaires est d'environ 300nm pour le a-Si : H [17m]. Pour limiter la rugosité à la surface du ZnO et créer une barrière contre la diffusion de l'Ag dans le silicium, une épaisseur de 100nm a été choisie pour le TCO en face arrière. Une telle épaisseur est compatible avec son absorption et sa conductivité plus faible que pour l'ITO

Car l'absorption parasite est restreinte et les charges traversent verticalement la couche de ZnO. Enfin, la couche d'Ag est épaisse de 50nm.

Dans cette section, nous considérerons des membranaires CP-1D, présentant une période et une largeur de trous notés L et D , respectivement. Ces configurations sont illustrées sur la figure IV.6.

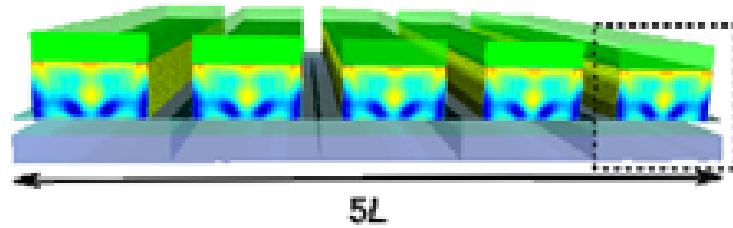


Figure IV.7 : Cellule à CP1D schématisée sur cinq périodes [6].

IV.4.2 Spectres d'absorptions et de réflexions à CP-1D

Pour présenter clairement l'effet de la structuration, l'absorption intégrée des Membranaires CP est au préalable optimisée en faisant varier simultanément L et le rapport D/L sous une incidence normale de la lumière et pour une épaisseur fixe de la couche. Les paramètres optimaux sont ($L=450\text{nm}$, $D/L=32,5\%$) pour la configuration 1D [6].

Dans la suite de ce travail on a essayé de présenter clairement l'effet de la structuration CP-1D sur l'absorption intégrée en faisant varier le matériau de la couche active. Nous avons d'abord comparé la couche non structurée et structurée CP-1D sous une incidence normale de la lumière et pour une épaisseur fixe de la couche calculés par la méthode RCWA.

IV.4.2.1 Le spectre de réflexions

On utilise la méthode RCWA, nous avons simulé la réflexion d'une simple couche non structurée et structurée CP-1D pour différents matériaux, dans la gamme de longueur 380-750 nm d'onde.

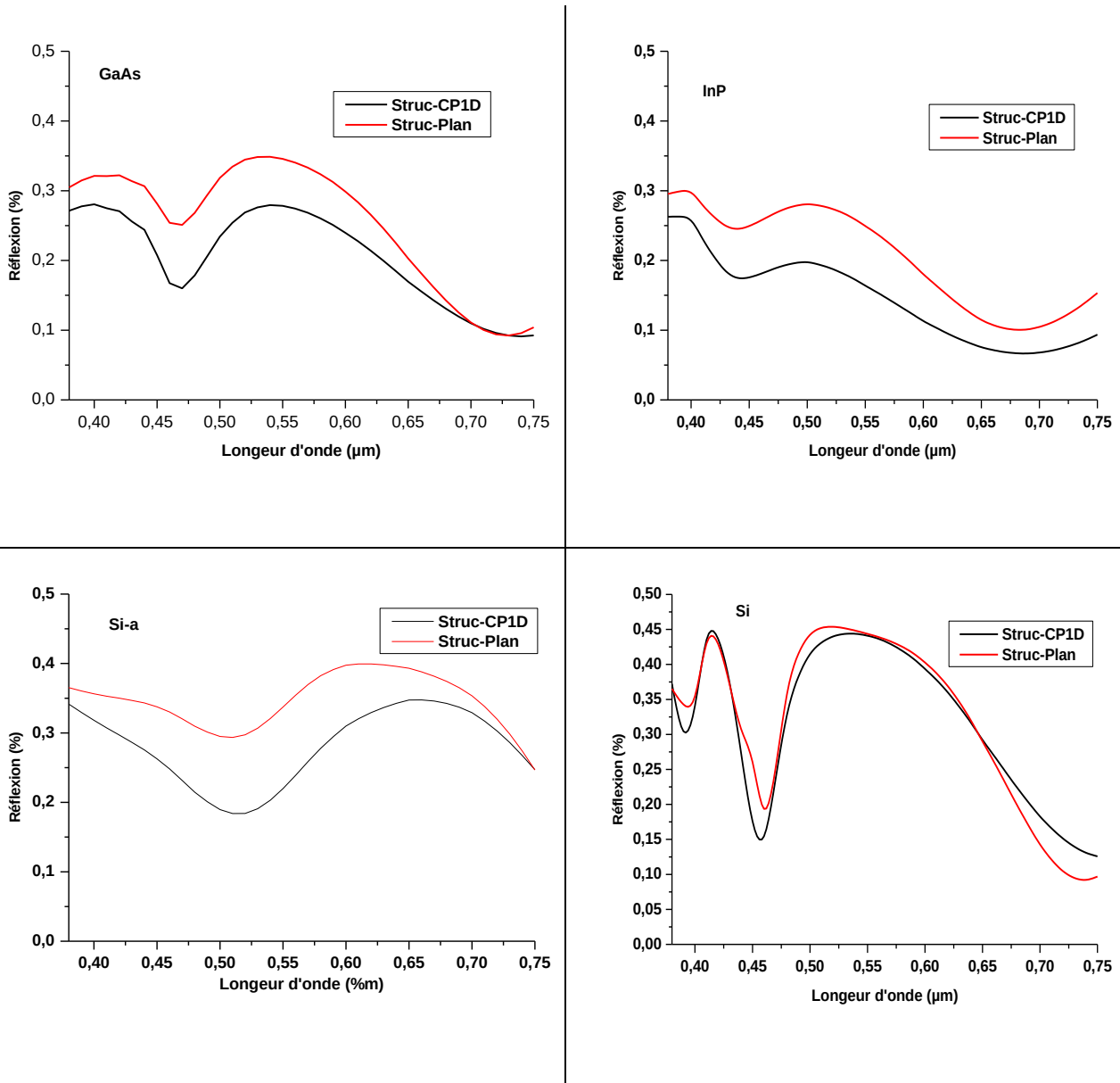


Figure IV.8 : Spectre de réflexion de la membrane 1D comparé à la plane simple

La figure IV-8, montre la réflexion en fonction de la longueur d'onde pour les différents matériaux. Il est clair que les spectres de réflexions diminuent lorsqu'on utilise des structures CP-1D. Ces spectres présentent une efficacité d'absorption lorsque on utilise des structures CP-1D.

IV.4.2.2 Le spectre d'absorption

Dans cette section, On utilise la même méthode RCWA, nous avons simulé l'absorption d'une simple couche non structuré et structuré à CP-1D pour différent matériaux (GaAs, Inp, Si, Si : H), dans la gamme de longueur 380-750 nm d'onde.

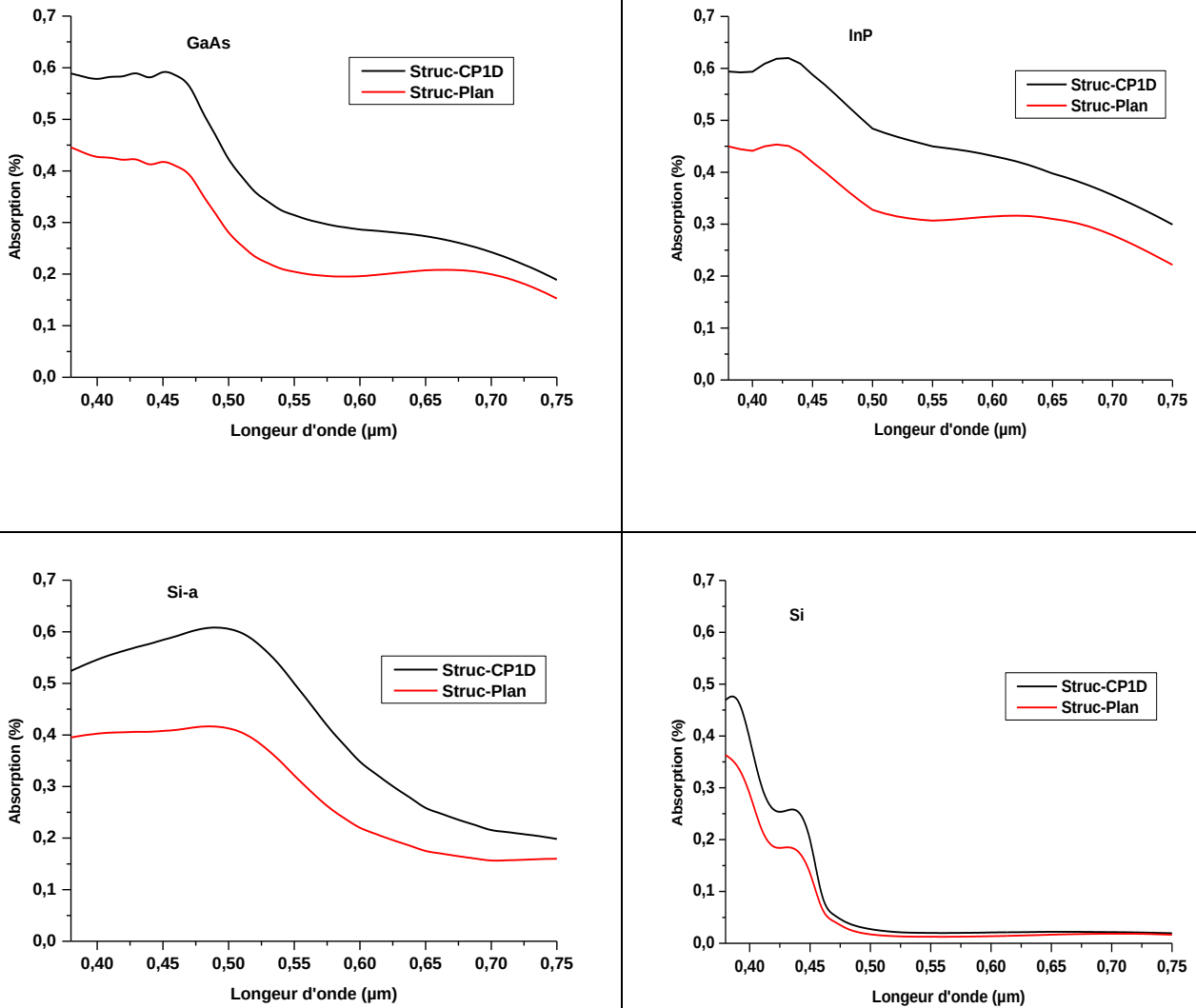


Figure IV.9 : Les spectres d'absorptions pour une couche active non structuré et structuré CP-1D en fonction de longueur d'onde.

Egalement, On calcule l'absorption dans la couche non structurée avec la même épaisseur $H = 100$ nm. La figure IV-9 montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde sur l'avant face pour des différentes de matériaux (GaAs, Inp, Si, Si : H). Il est clair que les valeurs des spectres d'absorptions de Si et minimale pour les autres matériaux. En revanche, nous pouvons observer que les structures CP-1D absorber la lumière incidente mieux que la couche non structurée.

IV.5 Membrane absorbante à cristal photonique 2D

Pour étudier les variations de l'absorption photonique d'un cristal photonique bidimensionnels CP-2D, on va modéliser la structure connectée avec configurations ($L=300\text{nm}$, $D/L=80\%$) [6]. pour différent matériaux.

Dans cette partie de simulation on a utilisé la méthode des différences finies (Finité Différence Time Domain), permet ici de résoudre les équations de Maxwell dans le temps et dans l'espace, et permet le maillage spatial se fait de manière régulière en découpant le domaine de simulation 3D en sous-domaines cubiques (cellule de Yee).

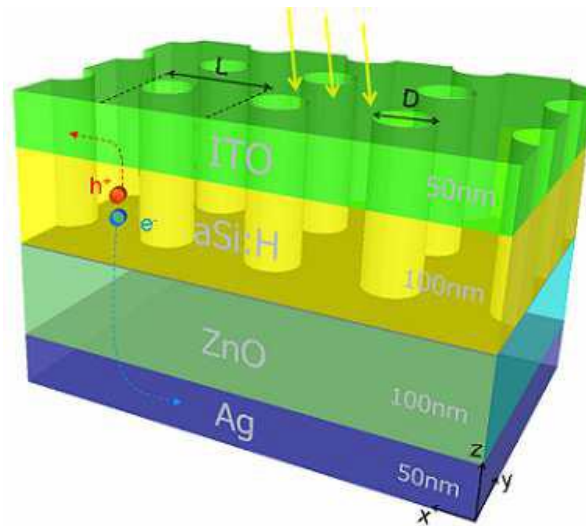


Figure IV.10 : Design de la cellule solaire étudiée avec ses principaux paramètres géométriques. Un CP2D à réseau carré est gravé dans la couche d'ITO et dans la couche active. Les paires e^-h^+ générées dans l'a-Si: H sont collectées via les couches TCO environnantes [6].

➤ Le spectre d'absorption d'une CP-2D

L'objectif fixé dans cette partie est de comprendre, comment le cristal photonique peut « piéger la lumière » et quels sont les paramètres mis en jeu pour maximiser l'absorption. Pour cela nous allons faire une étude :

On compare l'absorption de certains des matériaux différents dans la structure CP2D

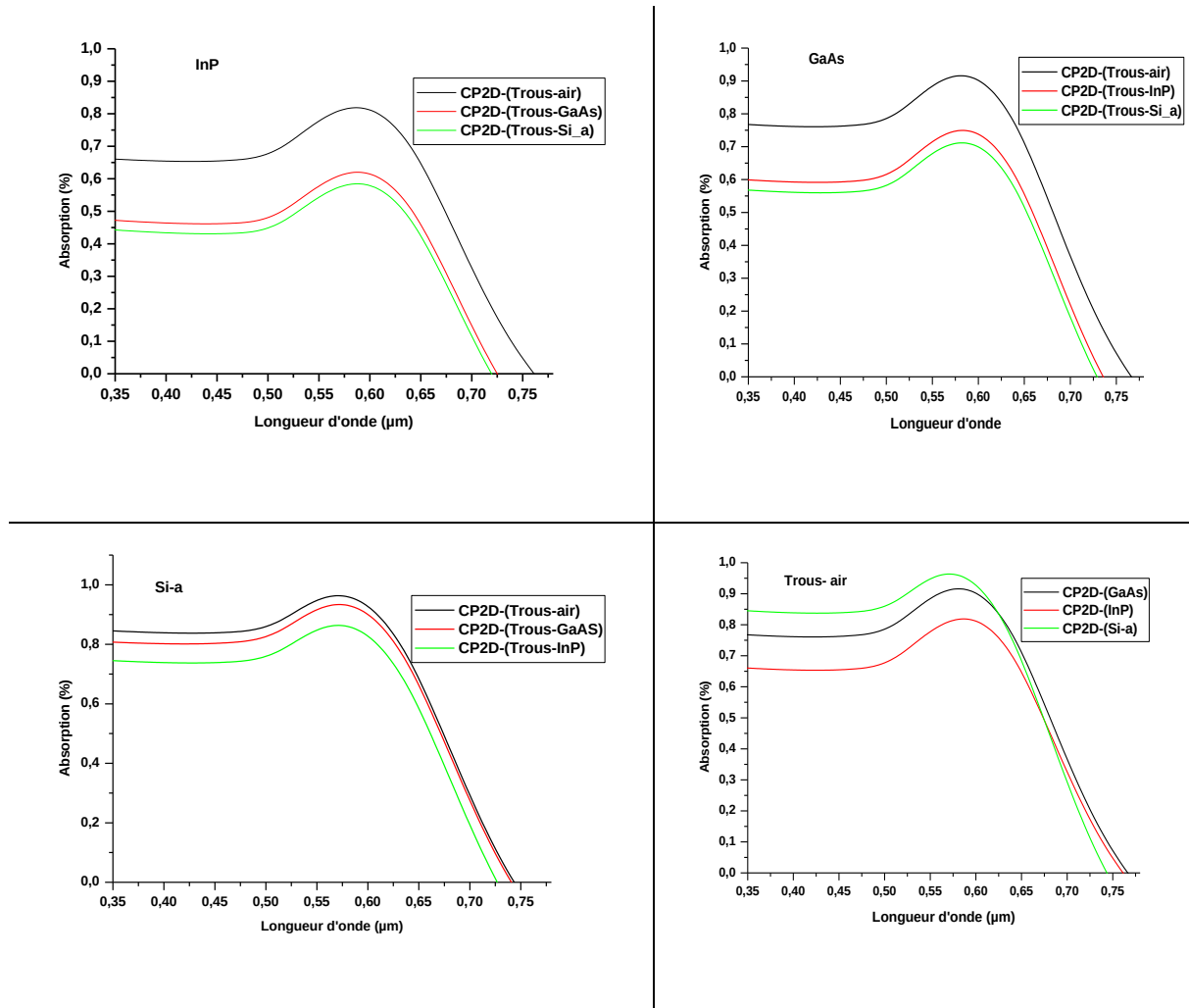


Figure IV.11 : Spectre d'absorption de la membrane à CP-2D pour différents matériaux

La figure IV.11 montre l'absorption en fonction de la longueur d'onde, pour des structurations similaires et pour différents types de matériaux, si l'on compare les spectres d'absorption pour les membranes remplies d'air avec des membranes remplies avec les matières suivantes (InP, GaAs, Si-a), on constate que l'absorption est légèrement plus élevée sur la plage de longueurs d'onde [400-600] nm. Cela est dû à un effet antireflet généré par l'introduction des trous d'air diminuant l'indice effectif de membranaire. Ce type d'effet a été observé

On reconnaît pour la cellule à CP-2D le spectre d'absorption caractéristique d'une couche de (InP, GaAs et Si-a) de 100 nm d'épaisseur, avec en particulier une décroissance importante de l'absorption au-delà de 600 nm. On trouve l'augmentation de l'absorption aux faibles longueurs d'onde grâce à l'effet d'anti-reflet induit par le réseau de trous et la création de pics d'absorption aux grandes longueurs d'onde via le couplage de la lumière incidente avec les modes de Bloch lents CP-2D membranaire.

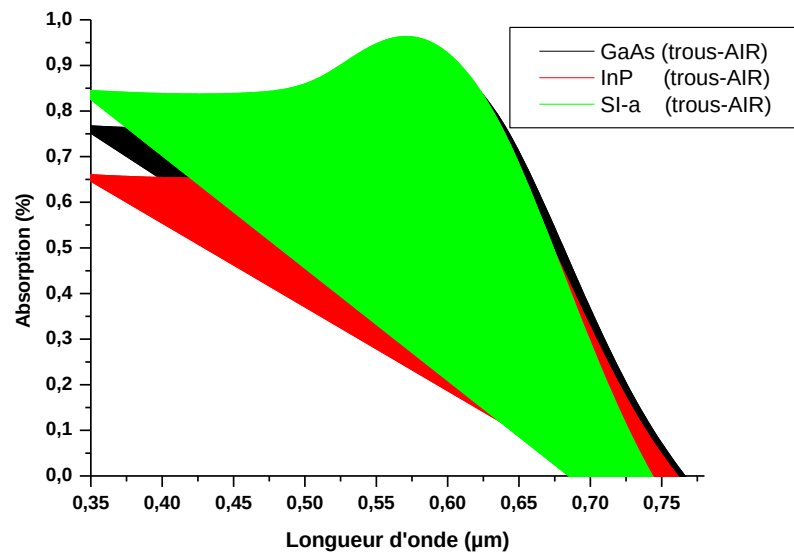


Figure IV.12 : *Spectre d'absorption de la membrane à CP-2D pour différents matériaux remplis d'air*

Par une comparaison, on observe que les membranes structurées remplies d'air absorbent davantage la lumière incidente que les membranes structurées remplies de matériaux utilisés dans l'étude. Les gains relatifs obtenus s'élèvent jusqu'à 91%, ce qui justifie l'intérêt de cette étude. On remarque que la configuration 2D conduit à une absorption plus élevée que la configuration 1D.

Ainsi, l'Absorption dans toutes les membranes remplies d'air plus élevée que l'absorption dans les membranes rempli de matériaux utilisés dans l'étude.

A noter que l'absorption dans toutes les membranes remplies d'air élevés Mais le meilleur est la membrane de a-Si: H

IV.6 Conclusion

L'objectif de ce chapitre était de concevoir des cellules à CP2D et étudier leurs propriétés optiques. Les simulations optiques et opto-électriques ont mis en évidence les points suivants :

- ❖ La possibilité d'augmenter significativement l'absorption intégrée dans la couche active par rapport à une cellule non structurée.
- ❖ Démonstration de l'augmentation de l'absorption d'une couche absorbante via sa structuration en CP 1D planaire

- ❖ Les membranes structurées absorbent davantage la lumière incidente que la couche de référence
- ❖ La configuration 2D conduit à une absorption plus élevée que la configuration 1D
- ❖ L’Absorption dans toutes les membranes remplies d'air meilleur que rempli de matériaux utilisés dans l'étude.

Les points mentionnés ci-dessus tendent à démontrer que notre approche permet d’augmenter significativement l’absorption intégrée des cellules et d’améliorer leur rendement. Les résultats de simulation soulignent également la faisabilité des structures proposées.