

MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE



UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERRI DE TIZI-OUZOU  
FACULTE DES SCIENCES  
DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



LABORATOIRE DE PHYSIQUE ET CHIMIE QUANTIQUE

## MEMOIRE DE MASTER

Filière : Physique  
Option : Nanophysique

Présenté par :  
**MAHSEUR Tah Yacine**

Thème

*Modélisation par la méthode FDTD de la texturisation de surfaces pour l'amélioration des propriétés optiques de cellules photovoltaïques*

Devant le jury d'examen composé de :

LAMROUS	Omar	PROFESSEUR	U.M.M.T.O.	Président
BOUKELLAL	Ali	PROFESSEUR	U.M.M.T.O.	Examineur
KEBCI	Zahia	Maître de Conférences B	U.M.M.T.O.	Examineur
BRAIK	Macilia	Maître de Conférences B	U.M.M.T.O.	Examineur
ZAIBA	Soraya	Maître de Conférences B	U.M.M.T.O.	Rapporteur

Soutenu publiquement le : 11/07/2023

# Résumé

**Mots-clés :** *FDTD, couches antireflets, métamatériaux, texturisation de surfaces, cellules photovoltaïques*

## Abstract

*This work presents a theoretical study of the FDTD modeling of surface texturing for the improvement of the optical properties of photovoltaic cells. The aim is to reduce the reflection and increase the absorption of light in the silicon substrate. To do this, we propose to use conventional or metamaterial-based antireflection coatings, as well as nanostructures of different shapes and sizes. The results show that surface texturing allows to control the wavefront, the coupling and the phase of the electric field, and to improve the performance of solar cells. This work opens interesting perspectives for the design and optimization of optoelectronic devices using metamaterials.*

**Key words :** *META-SURFACE, TEXTURATION, PHOTOVOLTAÏQUE, FDTD.*

*Je dédie ce travail  
à mes Parents  
à mon frère  
à mes sœurs*

*MAHSEUR Tah Yacine*

# Remerciements

*Ce travail préliminaire à la recherche a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique et Chimie Quantique (LPCQ) de l'Université Mouloud MAMMERI de Tizi Ouzou .*

*Mes premiers remerciements vont à MADAME ZAIBA SORAYA, ma promotrice , j'ai bien eu de la chance de m'initier au travail de la recherche avec elle ,je ne m'attendais vraiment pas du tout à rencontrer une personne aux qualités humaines extraordinaires, à la bienveillance naturelle et à la gentillesse inégalée , je vous en serai à jamais reconnaissant à votre patience envers mes vastes lacunes d'études.Merci.*

*Avant d'entamer la présentation du travail en question, je tiens à remercier le Professeur Abdelaziz MEZGHRANE, directeur du laboratoire LPCQ pour son accueil,au sein du Laboratoire (LPCQ).*

*Je remercie également l'ensemble des enseignants de l'UMMTO qui ont contribué à ma formation tout au long de mon cursus au sein de cette université.*

*Je suis honoré et je remercie Professeur Omar LAMROUS d'avoir accepté de présider le jury, et le Professeur BOUKELLAL Ali , d'examiner ce travail. Merci pour votre disponibilité. Je remercie les Maîtres de Conférences KEBCI Zahia et BRAIK Macilia d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

*Je remercie l'ensemble de mes amies de la promotion, pour vos agréables souvenirs.*

*Je remercie mes ami(e)s Houssam, Kamel,Nabil ,Youcef, Ferzi, sans oublier les doctorantes Cylia Sarah,Amer,Lilya pour leurs conseils et leur disponibilité à tout moments et tous les autres dont je ne peux pas citer les noms.*

*Mes derniers remerciement et non des moindres, sont adressés à mes parents et sans lesquels je n'aurais pas réaliser ce travail.*

# Table des matières

Table des matières . . . . .	i
Table des figures . . . . .	ii
<b>Introduction Générale</b>	<b>1</b>
<b>1 COUCHES ANTIREFLETS ET METAMATERIAUX</b>	<b>3</b>
1.1 Introduction . . . . .	3
1.2 Cellules photo-voltaïques . . . . .	3
1.3 Couches antireflets . . . . .	4
1.3.1 Introduction . . . . .	4
1.3.2 Principe de fonctionnement d'une couche antireflet conventionnelle . . . . .	5
1.3.3 Couche antireflet - cas bicouche et multicouche . . . . .	7
1.4 Les métamatériaux . . . . .	8
1.5 Conclusion . . . . .	11
<b>2 Considérations de simulations</b>	<b>12</b>
2.1 Introduction . . . . .	12
2.2 Méthode des Différences Finies dans le Domaine Temporel (FDTD) . . . . .	12
2.3 Modélisation des propriétés optiques de nano-structures . . . . .	15
2.4 Modélisation d'une méta-surface micro-texturée . . . . .	16
2.5 conclusion . . . . .	18
<b>3 RÉSULTATS ET DISCUSSIONS</b>	<b>19</b>
3.1 INTRODUCTION . . . . .	19
3.2 Étude des propriétés optique de couches antireflets . . . . .	19
3.2.1 Etude de la Réflectance et la Puissance absorbée d'une Couche Anti-Reffet . . . . .	19
3.2.2 Étude de l'effet de pointe sur les propriétés optiques d'une couche antireflet : . . . . .	22
3.2.3 Étude de l'intensité transmise et puissance absorbée dans la structure . . . . .	23
3.2.4 Propriétés optiques d'une couche antireflet en incidence oblique de la lumière . . . . .	28
3.3 Conclusion . . . . .	31
<b>Conclusion générale</b>	<b>32</b>
<b>Bibliographie</b>	<b>32</b>

# Table des figures

1.1	Evolution du coefficient d'absorption du silicium et de la profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde[29]. . . . .	4
1.2	(gauche) Vue de l'œil du papillon (droite )image SEM de l'œil du papillon [30] . . . . .	5
1.3	(a) Schéma descriptif d'une couche antireflet (mono- couche) (b) Spectre de réflectance dela couche[31] . . . . .	6
1.4	Schéma descriptif d'une multicouche antireflet [30] . . . . .	8
1.5	Principe de fonctionnement d'une méta-surface (a) Selon la construction de Huygens (b) Grâce à l'introduction de décalages de phase pour chaque ondelette sphérique au moyen de résonateurs optiques sub-longueur d'onde [34] . . . . .	9
1.6	Représentation des ondes incidente, réfléchié et transmise par une surface à gradient phase [36] . . . . .	9
1.7	Exemple d'une couche antireflet formée par un réseau de croix en or disposé sur une couche de MgF2 déposée sur un substrat de germanium [37] . . . . .	10
1.8	Image MEB de texturisation de surface (a) nano-plots (b) grille de nano-fils (c) nano-donuts (d) nano-hélices (e) nano-pyramide, fabriqués par technique d'écriture laser [38] . . . . .	11
1.9	(a) Spectre de réflexion (b) Spectre de transmission (c) Efficacité de couplage de surfaces nano-structurées de différentes formes [38] . . . . .	11
2.1	Cellule élémentaire de Yee à 3D . . . . .	14
2.2	Schéma descriptif des considérations de modélisation d'une couche antireflet . . . . .	16
2.3	Schéma descriptif de la méthode de mesure de la réflectance et du spectre de la puissance absorbée. . . . .	17
2.4	Schéma descriptif de la méthode de mesure (a) de la distribution de l'intensité et la puissance absorbée par la structure (b) le profil de la phase . . . . .	18
3.1	Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la périodicité (b) la largeur du sommet (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire. . . . .	20
3.2	Spectre de variation la puissance absorbée par la structure en fonction (a) la largeur du sommet (b) la périodicité (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire. . . . .	21
3.3	Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la périodicité (b) la largeur du sommet (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire. . . . .	21
3.4	Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la largeur du sommet (b) la périodicité (c) la hauteur de la nano-pyramide à base carrée. . . . .	22

3.5	Spectre de variation la réflectance et la puissance absorbée normalisée à la puissance incidente pour deux valeurs de la largeur du sommet pour les deux types de nanopyramides (base circulaire et base carrée) . . . . .	23
3.6	Distribution de l'intensité transmise dans la nanostructure (base carrée, base circulaire) comparée au substrat pour trois valeurs de la longueur d'onde ( 400, 545, 600 ) nm . . . . .	25
3.7	Distribution de la puissance absorbée ( $\frac{W}{m^3}$ ) dans la nanostructure (base carrée, base circulaire) comparée au substrat pour trois valeur de la longueur d'onde ( 400, 545, 600 ) nm . . . . .	26
3.8	Distribution de la phase du champ électrique dans le plan (XOY) à la surface du substrat pour les deux structures (base carrée et base circulaire) pour trois longueurs d'onde ( 400, 545, 600 ) nm comparée au substrat. . . . .	27
3.9	Variation de la phase du champ électrique à la surface du substrat pour les deux structures selon X et Y ( base circulaire et base carrée ) pour trois longueurs d'onde (400, 545, 600) nm comparée au substrat. . . . .	28
3.10	Variation du spectre de la réflectance en fonction de l'angle d'incidence pour les deux structures (pyramides à base circulaire et base carrée . . . . .	29
3.11	Variation du spectre de la réflectance en fonction de l'angle d'incidence pour les deux structures (pyramides à base circulaire et base carrée . . . . .	30

# Introduction Générale

En 1998 Thomas Ebbesen a mis en évidence la transmission extraordinaire [1]. L'étude proposée par Ebbesen et ses collaborateurs appelés « tamis à photons », consiste en de trous nanométriques formés dans un film métallique. Cette structure présente alors une transmission inhabituelle, plusieurs ordres de grandeurs supérieures à ce qui est prédit. Cette amélioration de la transmission est due à l'activation des "plasmons de surface", mouvements collectifs d'électrons à la surface d'un matériau conducteur. Les métamatériaux sont alors nés. Cette nouvelle génération de matériaux permet de manipuler la lumière dans des domaines où l'optique classique a atteint ses limites. Une nouvelle optique a vu alors le jour. Cette nouvelle optique est basée sur l'interaction des ondes diffusées par des nanostructures formant des 'nano-antennes' plus petites que la longueur d'onde. Les interactions lumière- matière sont alors confinées localement et permettent de résoudre les problèmes auxquels sont confrontés les ingénieurs en optiques traditionnelles et ouvre la voie à de nouveaux concepts. Ces matériaux sont conçus pour avoir un indice de réfraction négatif [2], un indice de réfraction nul [3], perméabilité accordable [4], fort indice de réfraction [5] et d'autres propriétés électromagnétiques exotiques n'existant pas dans la nature. Ces nouveaux matériaux ont permis alors le développement de dispositifs optiques tel que les 'méta-Lenses' des systèmes permettant la focalisation de la lumière dans la limite de diffraction [6]-[7][8] [9], les couches antireflets conduisant à la réduction de la réflexion par l'interface [10] et d'autres applications. Les couches antireflet à base de métamatériaux est une des solutions proposées pour l'amélioration des propriétés optiques de cellules solaires et par conséquent les rendements de ces dernier. Le challenge est d'augmenter l'efficacité des cellules solaires et la réduire le rapport coût/watt[11]. Plusieurs solutions ont été alors proposées : différents matériaux ont été utilisés, tels que le silicium cristallin (c-Si)[12] , le silicium amorphe (a-Si)[13] , arséniure de gallium (GaAs)[14], cuivre indium séléniure de gallium (CIGS) cadmium tellure (CdTe)[11] [15], matière organique [16] et tandem cellules solaires en combinant plusieurs matériaux[17].

L'absorption, la réflexion et la transmission ont un impact direct sur L'efficacité de la cellule solaire. Lors de l'utilisation de la couche antireflet, le choix des caractéristiques du matériau formant la couche est un paramètre crucial et qui doit être optimisé pour obtenir les meilleures performances de la cellule solaire.

Récemment, différents éléments diffractifs et plasmoniques ont été utilisés pour stimuler l'absorption et les rendements de conversion d'énergie des cellules solaires tels que les nanofils (NW)[18] nanopilierscite[19] , nanotrous[20] , nanopyramides[21], nanocônes[22]ou nanoétoiles[23] . D'autres études ont également employé des nanostructures, formées de diélectriques pour améliorer les caractéristiques d'absorption de cellules l'intérieur la couche active [[24][25][26]] ou des nanoparticules métalliques pour améliorer les caractéristiques d'absorption de cellules[27][28].

---

La fabrication de cellules efficaces, nécessite une conception plus complexe et donc un effet sur le coût de production. L'utilisation des outils de simulation numérique est une méthode efficace pour optimiser les configurations de la couche antireflet et réduit donc les possibilités d'expérimentation.

Dans ce mémoire, nous nous intéressons à la modélisation numérique des propriétés optiques de cellules photovoltaïques à base de silicium, en utilisant la méthode FDTD. Nous allons étudier l'effet de la texturisation de surfaces sur la réflexion, la transmission et l'absorption de la lumière par la couche antireflet.

Ce manuscrit est composé de trois chapitres. Le premier sera consacré à la description des couches antireflets conventionnelles et celle basé sur les métamatériaux. Dans le second chapitre nous allons présenter brièvement la méthode de simulation utilisée à savoir, la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD). Nous décrirons également les considérations de simulations ; description des structures objet d'étude et les modèles utilisés pour la modélisation des propriétés optiques de ces structures. Le dernier chapitre sera consacré aux résultats de la simulation et leurs discussions. Nous terminerons ce travail par une conclusion générale et des perspectives.

# COUCHES ANTIREFLETS ET METAMATERIAUX

## 1.1 Introduction

Les avancées considérables dans les techniques de nano-fabrication telle que la nano-lithographie ont permis la réalisation de structures métalliques ou diélectriques de taille nanométrique, permettant ainsi l'exploitation de propriétés particulières afin de développer des systèmes optiques avec diverses fonctions. Les métamatériaux sont des matériaux révolutionnaires, présentant des propriétés inhabituelles. Ils sont formés par un assemblage de motifs ou de structures de taille sub-longueur d'onde ; diélectriques ou métalliques. La disposition de ces motifs permet de contrôler le comportement de la lumière et donc d'adapter le fonctionnement de ces dispositifs. L'une des fonctions de ces matériaux est la réduction de la réflexion. Cette propriété peut être exploitée dans des dispositifs optoélectroniques tel que les cellules photovoltaïques. Dans ce chapitre nous nous intéresserons particulièrement à cette propriété. Nous commencerons par décrire brièvement le principe de fonctionnement d'une cellule solaire. Nous allons également discuter le principe de fonctionnement d'une couche antireflet conventionnelle et celle basée sur les métamatériaux.

## 1.2 Cellules photo-voltaïques

Une cellule solaire est un dispositif optoélectronique qui convertit la lumière du rayonnement solaire en électricité. Elle est constituée d'un matériau semi-conducteur, tel que le silicium. Ce dernier est dopé avec des impuretés pour créer une région de charge positive (la région de type  $p$ ) et une région de charge négative (la région de type  $n$ ). Lorsque la lumière atteint la cellule solaire, elle est absorbée par le silicium et permet donc à un électron dans la bande de valence de passer à la bande de conduction et de crée des paires électron-trou dans la jonction  $p - n$ . Les électrons sont alors attirés par la borne positive de la cellule, tandis que les trous sont attirés par la borne négative. Cela crée un courant électrique qui peut être utilisé pour alimenter des appareils ou être stocké dans une batterie. Le silicium massif domine le marché photovoltaïque actuel. L'abondance de ce matériau, fait de lui un meilleur candidat pour des dispositifs peu coûteux. Cependant, sa bande interdite (ou gap) est légèrement trop faible pour le fonctionnement optimal des cellules solaires et comme elle est indirecte, son coefficient d'absorption est relativement faible. Néanmoins, il reste le plus utilisé pour ce type de

dispositifs. Le silicium a un gap indirect ( $E_g = 1.12$  eV à 300 °K), correspondant à une longueur d'onde  $\lambda_g = 1107$  nm. Il en résulte alors que tout photon dont l'énergie est inférieure à l'énergie du gap ne peut contribuer à l'effet photoélectrique.

L'efficacité d'une cellule solaire est déterminée par un certain nombre de facteurs, notamment le type de matériau semi-conducteur utilisé, l'épaisseur du matériau et la quantité de lumière absorbée. Les cellules solaires les plus efficaces sont faites d'arséniure de gallium, mais elles sont aussi les plus chères. Les cellules solaires en silicium sont moins efficaces, mais elles sont moins coûteuses. La figure 1.1 donne l'évolution du coefficient d'absorption du silicium ainsi que la profondeur de pénétration des photons [29]. On voit clairement de ces courbes que les courtes longueurs d'onde sont mieux absorbées mais pénètrent très peu dans le matériau. Alors que les grandes longueurs d'onde pénètrent mieux mais sont peu absorbées.

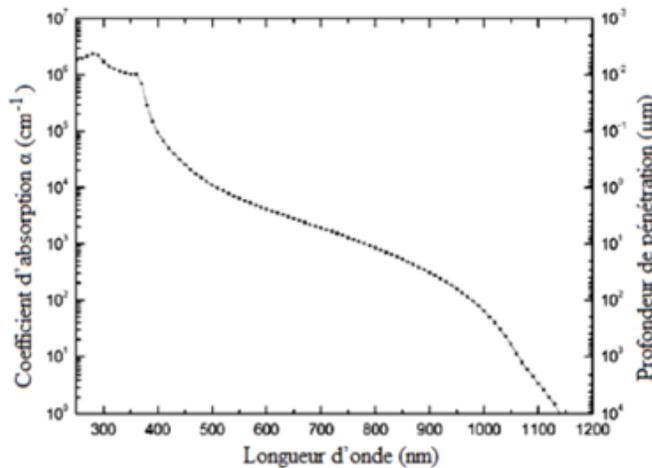


FIGURE 1.1 – Evolution du coefficient d'absorption du silicium et de la profondeur de pénétration des photons en fonction de la longueur d'onde[29].

## 1.3 Couches antireflets

### 1.3.1 Introduction

Dans ce paragraphe, nous allons décrire brièvement les principes de fonctionnement des couches antireflets. Les revêtements antireflets ont été largement utilisés pour réduire la réflexion, un effet indésirable, dans des systèmes optoélectroniques tel que ; les cellules photovoltaïques et ce, afin d'augmenter la transmission et donc l'absorption de ces derniers. Cette technique a été inspirée directement de la nature tel que : l'œil du papillon « moth eyes » ou ailes de cigales « cicada Wings » [30]. Les yeux de papillon ont des caractéristiques particulières. Ils ont la capacité de voir dans l'obscurité. Ils sont en fait constitués de milliers de minuscules écailles hexagonales.

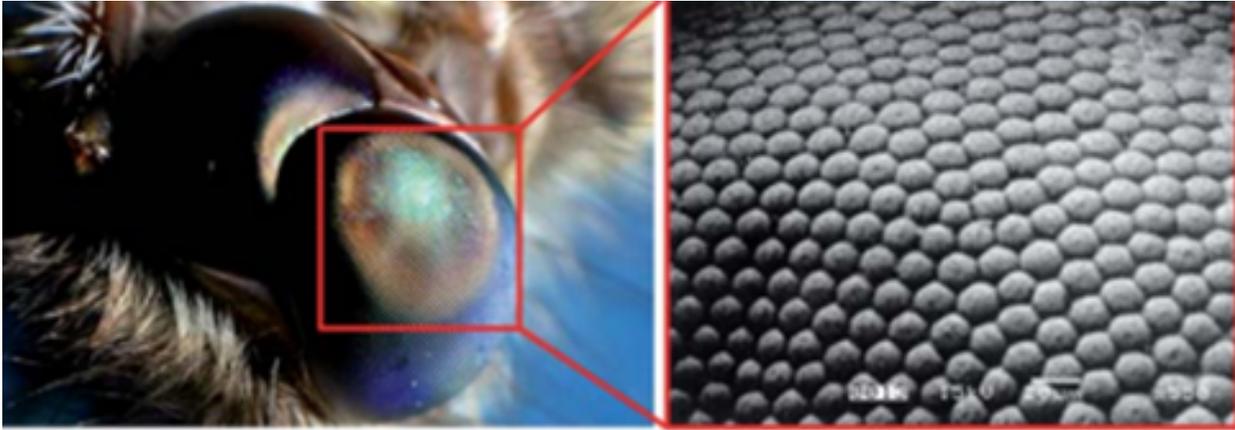


FIGURE 1.2 – (gauche) Vue de l'œil du papillon (droite) image SEM de l'œil du papillon [30]

La réflexion est un phénomène optique se produisant lorsque la lumière se propage entre deux milieux d'indice de réfraction différents. A l'interface des deux milieux, une partie de la lumière est transmise et l'autre partie est réfléchi. Le taux de réflexion dépend alors des indices de réfraction des deux milieux. A titre d'exemple, en incidence normale, pour une interface air-verre ( $n=1.52$ ), le taux de réflexion avoisine les 4 %. Alors qu'il atteint respectivement 30 et 36 % pour une interface air-Silicium ( $n=3.47$ ) ou air-Germanium ( $n=4$ ) autour d'une longueur d'onde de 550 nm [31]. L'augmentation des performances d'une cellule photovoltaïque peut être réalisée en augmentant le taux d'absorption dans la couche de silicium. Ceci peut être achevé par l'augmentation de l'épaisseur de la couche, ce qui se traduit alors par l'élévation du coût du matériau. La réflexion est considérée dans ce type de système comme la principale source de pertes optiques. En effet, le fort taux de réflexion conduit à la réduction de la transmission dans la couche et donc la diminution de l'absorption. Sachant que les propriétés optiques des matériaux particulièrement la réflexion et la transmission sont des phénomènes qui dépendent de la longueur d'onde de la lumière incidente, et pour améliorer les propriétés optoélectroniques des cellules photovoltaïques, il faut tirer profit de tout le rayonnement électromagnétique solaire dans le domaine UV-Visible. Pour cela, il faut concevoir des systèmes fonctionnant sur une large gamme de longueur d'onde. Pour confiner la lumière dans le substrat, la couche antireflet a été proposée comme solution. On distingue alors deux différents systèmes. Le premier une couche antireflet conventionnelle. Elle consiste à déposer sur le substrat une mono ou multicouche de différentes épaisseurs et indice de réfraction. Les métamatériaux représentent la seconde solution. Il s'agit pour ce cas, d'inscrire sur la surface du substrat des motifs sub-longueur d'onde de différentes formes, taille, périodicité et formés dans divers matériaux. Ils présentent de meilleurs avantages que les couches antireflets conventionnelles.

#### 1.3.2 Principe de fonctionnement d'une couche antireflet conventionnelle

Les couches antireflets conventionnelles (ARC) sont formées d'une couche simple ou un empilement de diélectriques. Ils servent à réduire le taux de réflexion du substrat sur lequel ils sont déposés. En 1936, JOHN STRONG [32] a démontré théoriquement qu'une simple couche déposée sur un substrat peut réduire la réflectivité à un taux de 0 % pour une certaine valeur de la longueur d'onde et ne pouvait pas fonctionner pour une large gamme de longueur d'onde. Cette étude a mis en évidence les limites de ce dispositif qui ne peut être utilisé pour les cellules solaires.

### 1.3.2.1 Couche antireflet – cas d’une mono-couche

Une monocouche est formée par le dépôt d’une couche d’un diélectrique d’indice de réfraction  $n_{ARC}$  et d’une épaisseur  $d_{ARC}$  sur un substrat d’indice  $n_s$ . Le principe de fonctionnement de cette couche antireflet est basée sur les interférences destructives des ondes réfléchit par les deux faces de cette monocouche (Voir figure 1.3 (a)).

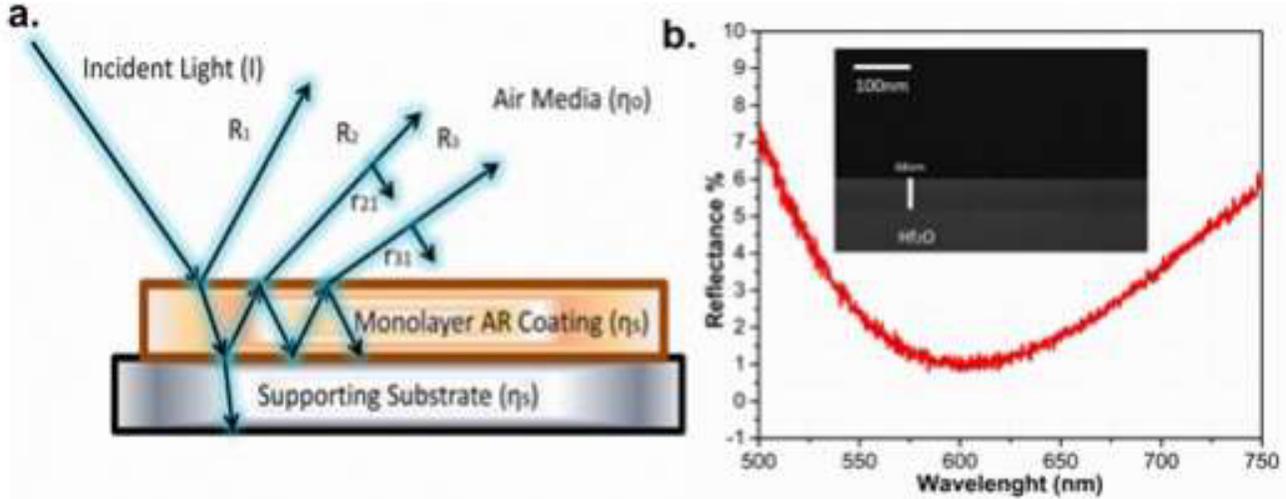


FIGURE 1.3 – (a) Schéma descriptif d’une couche antireflet (mono- couche) (b) Spectre de réflectance de la couche[31]

En négligeant l’absorption et la diffusion, la réduction de la réflexion par la couche antireflet devient possible lorsqu’on a interférences destructives des ondes réfléchis. Ceci ne peut se réaliser que si les coefficients de réflexion de l’interface air-ARC et ARC-substrat sont égaux. En incidence normale, le coefficient de réflexion de la couche antireflet s’exprime par :

$$R = \left( \frac{n_{air}n_s - n_{arc}^2}{n_{air}n_s + n_{arc}^2} \right)^2 \quad (1.1)$$

La réflexion est alors annulé si l’indice de réfraction de la couche antireflet est égal à la racine carré de l’indice du substrat soit :

$$n_{arc} = \sqrt{n_{air}n_s} \quad (1.2)$$

D’autres part, en incidence normale, les interférences destructives entre les rayons réfléchis sont obtenus si le déphasage entre ces deux rayons est égal à  $(2m + 1)\pi$  correspondant à une différence de marche :

$$\delta = 2n_{arc} \cdot d_{arc} \quad (1.3)$$

$$\Phi = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot 2n_{arc} \cdot d_{arc} = (2m + 1)\pi \quad (1.4)$$

La condition que doit satisfaire alors l’épaisseur de la couche est donnée alors par :

$$d_{arc} = (2m + 1) \frac{\lambda}{4n_{arc}} \quad (1.5)$$

L'épaisseur minimum de la couche antireflet s'exprime par :

$$d_{arc} = \frac{\lambda}{4n_{arc}} \quad (1.6)$$

La couche antireflet fonctionne alors comme une lame quart-onde. Nous constatons clairement de ces équations qu'une adaptation de l'indice de réfraction de la couche ainsi que de son épaisseur est nécessaire pour réduire la réflectance du substrat. Toutefois, nous devons rappeler que cette adaptation est réalisée pour un fonctionnement du système pour une certaine longueur d'onde (voir figure 1.3 (b)). Pour un dispositif fonctionnant en large bande une monocouche ne peut être la solution pour la réduction de la réflexion et l'amélioration des propriétés du système tel que le cas d'une cellule solaire.

### 1.3.3 Couche antireflet - cas bicouche et multicouche

Ces systèmes sont formés par un empilement de couches diélectriques à indice constant (saut d'indice) ou indice variable (gradient d'indice), ils constituent une autre solution pour palier au problème de la limitation des performances des cellules solaires par le phénomène de la réflexion. Considérons un système formé par deux couches diélectriques d'indice de réfraction et d'épaisseur respectivement  $(n_1, d_1)$  et  $(n_2, d_2)$ . Dans le cas d'une double couche, la condition d'interférence à satisfaire pour annuler la réflexion des deux couches se traduit par :

$$n_1 \cdot d_1 = n_2 \cdot d_2 \quad (1.7)$$

D'autres part, les indices de réfraction de chaque couches obéissent à la loi suivant :

$$n_1 \cdot n_2 = n_s \quad (1.8)$$

Dans le cas d'un système formé par un empilement de plusieurs couches d'indices et d'épaisseur  $(n_i d_i)$  respectivement (voir figure ??), la lumière réfléchi par deux interfaces successives (i,j), est donnée par :  $R_{ij} = |r_{ij}| \exp(-2(\delta_i + \delta_j))$

Avec  $r_{ij} = \frac{(n_i - n_j)}{(n_i + n_j)}$  ; le coefficient de réflexion et  $\delta_i$  est la différence de marche donnée par :

$$\delta_i = \frac{2\pi}{\lambda} \cdot n_i \cdot d_i \cos \theta_i$$

$\theta_i$  étant l'angle de réfraction sur la l'interface i. Les rayons réfléchi par les différentes interfaces :

$$R_{01} = |r_{01}| \quad (1.9)$$

$$R_{12} = |r_{12}| \exp(-2\delta_1) \quad (1.10)$$

$$R_{23} = |r_{23}| \exp(-2(\delta_1 + \delta_2)) \quad (1.11)$$

$$R_{34} = |r_{34}| \exp(-2(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3)) \quad (1.12)$$

$$R_{4s} = |r_{4s}| \exp(-2(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3 + \delta_4)) \quad (1.13)$$

La réflexion totale de la multicouche correspond alors à la somme des différents termes :

$$R_{total} = R_{01} + R_{12} + R_{23} + R_{34} + R_{4s} \quad (1.14)$$

Une optimisation donc des différents paramètres de la couches antireflet ; indices de réfraction ainsi que les épaisseurs des différentes couches est nécessaires pour déterminer la configuration correspondant à une réflectance nulle [30].

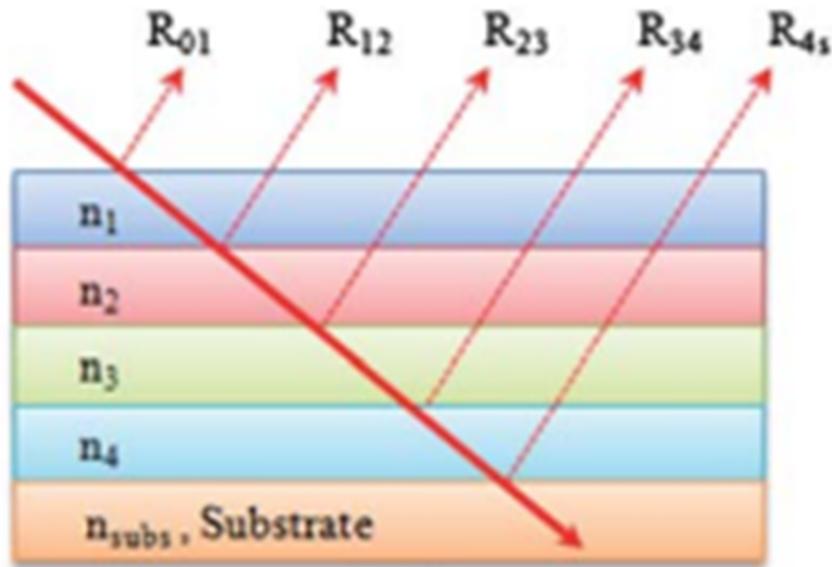


FIGURE 1.4 – Schéma descriptif d'une multicouche antireflet [30]

## 1.4 Les métamatériaux

Les méta-matériaux sont des matériaux artificiels conçus pour avoir des propriétés n'existant pas dans la nature. Ils sont composés de petites structures de différentes formes, de tailles et de matériaux, disposées d'une manière périodique ou a périodique. Ces structures interagissent différemment avec le rayonnement électromagnétique que les matériaux naturels. Ils ont permis la mise en évidence de nombreuses propriétés électromagnétiques exotiques et phénomènes optiques inexistant dans les systèmes optiques classiques. Les méta-surfaces sont des éléments optiques 2D composés de réseaux de nano-éléments tels que des nanostructures, des nano-piliers et autres particules diélectriques ou métalliques, permettant d'éviter une longue propagation en introduisant, le long du chemin optique, des changements abrupts de la phase, de l'amplitude et/ou de la polarisation sur une échelle d'épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde[33]. Elles permettent le contrôle du front d'onde, en réduisant la perte d'efficacité des éléments diffractifs. La figure 1.5, illustre le fonctionnement d'une méta-surface en se basant sur le principe de Huygens, selon lequel chaque point de l'espace reçoit l'onde électromagnétique et devient à son tour une source sphérique secondaire [34]. Le champ électromagnétique dans un point quelconque de l'espace prend en compte la contribution de chaque point source. Dans le cas d'une méta-surface, des modifications locales des points sources sont engendrés par la nano-structure. Il en résulte ainsi que la diffusion du faisceau lumineux par les nano-objets, qui est conçue de façon à engendrer un décalage de phase linéaire entre les nano-éléments, se traduisant par une modification du front d'onde (voir la figure 1.5 (a) et (b)).

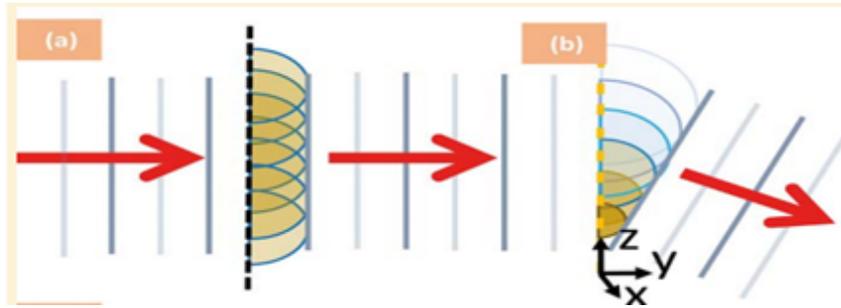


FIGURE 1.5 – Principe de fonctionnement d’une méta-surface (a) Selon la construction de Huygens (b) Grâce à l’introduction de décalages de phase pour chaque ondelette sphérique au moyen de résonateurs optiques sub-longueur d’onde [34]

En effet, à cette échelle les lois de l’optique géométrique ne sont plus valables [35]. Les angles de réfraction et réflexion sont contrôlés par le gradient de la phase généré par les ondes diffusées par chaque motif. Les lois de Descartes s’expriment alors [36] :

$$\begin{cases} n_t \sin \theta_t - n_i \sin \theta_i = \frac{1}{k_0} \frac{d\phi}{dx} \\ \cos \theta_t \cdot \sin \varphi_t = \frac{1}{n_t k_0} \frac{d\phi}{dy} \end{cases} \text{Loi de la transmission généralisée} \quad (1.15)$$

$$\begin{cases} \sin \theta_r - \sin \theta_i = \frac{1}{n_i k_0} \frac{d\phi}{dx} \\ \cos \theta_r \cdot \sin \varphi_r = \frac{1}{n_i k_0} \frac{d\phi}{dy} \end{cases} \text{Loi de la réflexion généralisée} \quad (1.16)$$

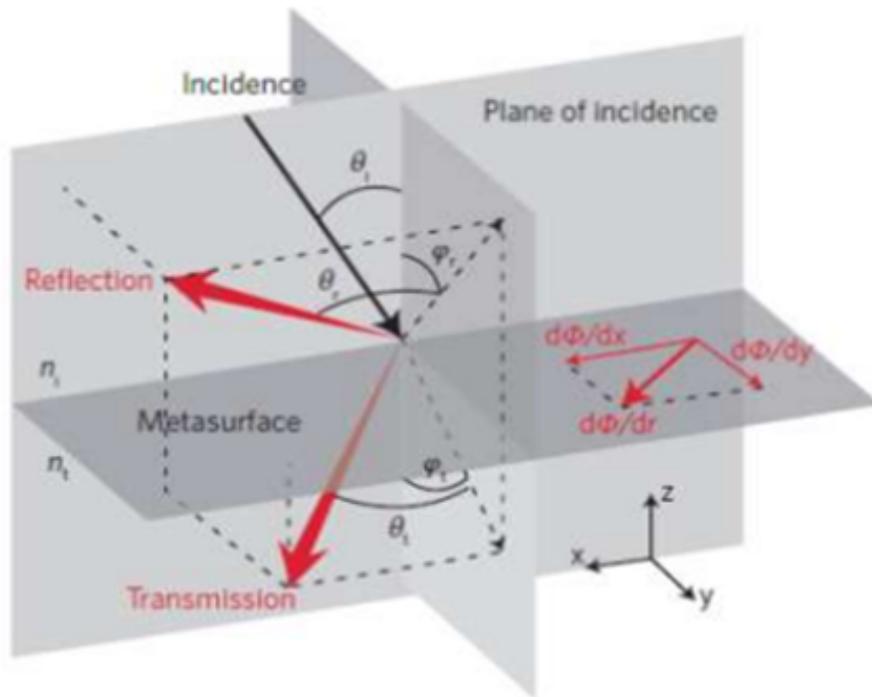


FIGURE 1.6 – Représentation des ondes incidente, réfléchi et transmise par une surface à gradient phase [36]

## 1.4. LES MÉTAMATÉRIAUX

L'un des avantages d'utiliser des métamatériaux pour les revêtements antireflets est leur capacité à avoir une permittivité effective conçue. Cela résout le problème de trouver des matériaux de revêtement appropriés qui satisfont à l'exigence d'adaptation d'indice. La figure 1.7 illustre un exemple de couche antireflet basé sur les métamatériaux[37]. Ce système est formé par une structure périodique de croix en or disposé sur une couche  $MgF_2$  déposée sur un substrat en germanium. Les motifs ont une taille sub-longueur d'onde, typiquement : une périodicité  $P=1.2\ \mu\text{m}$ , une largeur totale de  $L=0.9\ \mu\text{m}$  et largeur du bras de la croix de  $W=0.5\ \mu\text{m}$ . La figure 1.7 (d), montre le spectre de réflexion et transmission du métamatériau. On voit clairement que la réflectance est inférieure à 10 % pour une longueur d'onde autour de  $5\ \mu\text{m}$ . Cette couche antireflet fonctionne pour les longueurs d'onde dans l'infra-rouge.

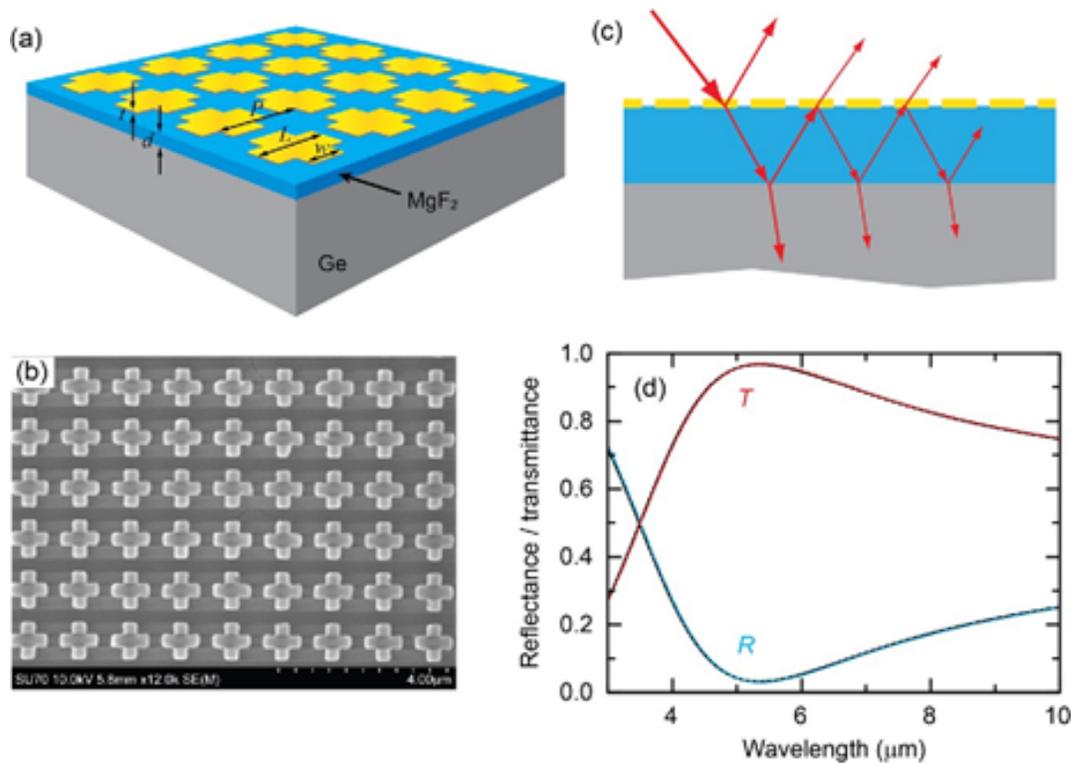


FIGURE 1.7 – Exemple d’une couche antireflet formée par un réseau de croix en or disposé sur une couche de  $MgF_2$  déposée sur un substrat de germanium [37]

En 2019 A. Tellal et ses collaborateurs, ont présenté une étude expérimentale sur les propriétés optiques de surfaces nano-structurées. En effet, ils ont mesuré le spectre de réflexion et transmission d’une lame de verre sur laquelle a été inscrit des motifs de différentes formes en polymère en utilisant une technique d’écriture laser basée sur l’absorption à deux photons (voir figure 1.8). La figure 1.9 résume les principaux résultats de cette étude. Elle a montré que la texturisation de surfaces permet non seulement de réduire la réflectance mais elle constitue un guide d’onde planaire. En effet, le taux de couplage dans la structure correspondant à  $1-(T+R)$  (avec R le taux de réflexion et T le taux de transmission) est différent de 0. Ce couplage provient de la réorientation de la direction de propagation d’une partie du faisceau incident. Donc une partie de la lumière reste confinée dans le système et peut être exploitée dans des applications tel que le photovoltaïque. La lumière est piégée dans la nanostructure et donc n’est pas perdue par transmission. Les nanostructures ainsi formées permettent la manipulation et la capture de la lumière dans le substrat.

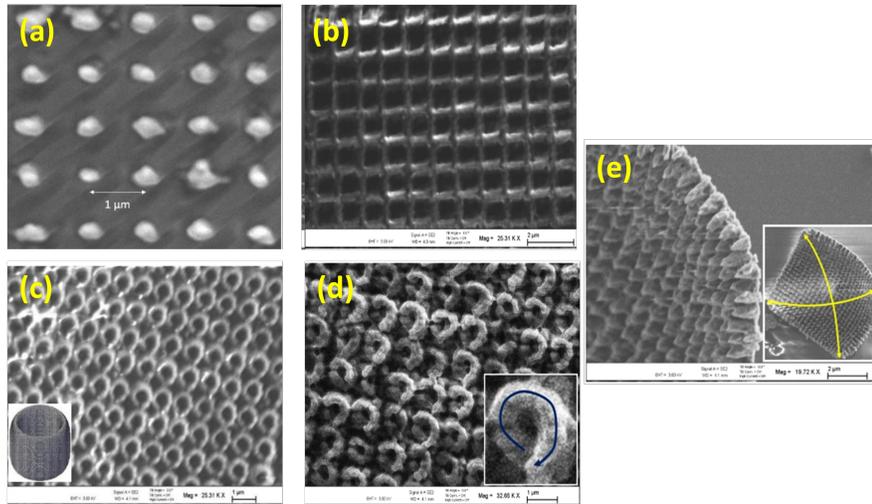


FIGURE 1.8 – Image MEB de texturisation de surface (a) nano-plots (b) grille de nano-fils (c) nano-donuts (d) nano-hélices (e) nano-pyramide, fabriqués par technique d’écriture laser [38]

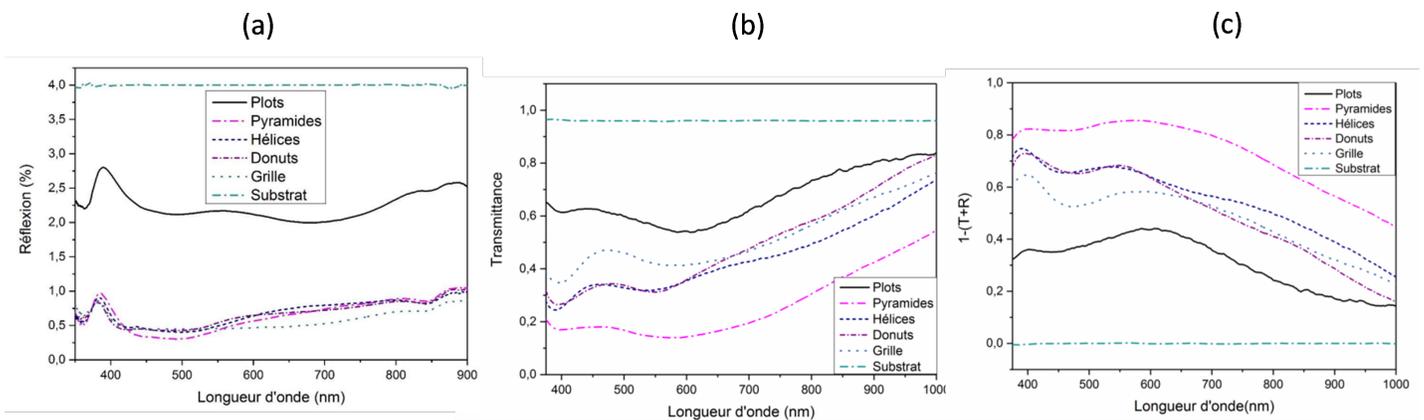


FIGURE 1.9 – (a) Spectre de réflexion (b) Spectre de transmission (c) Efficacité de couplage de surfaces nano-structurées de différentes formes [38]

## 1.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons décrit brièvement les cellules solaires et leurs principes de fonctionnement. Nous avons identifié les phénomènes optiques limitant les propriétés de ces cellules. Nous avons par la suite décrit les solutions proposés pour l’amélioration des performances des cellules photovoltaïques. Nous avons présenté les couches antireflets conventionnelles ainsi que les couches antireflets basées sur les métamatériaux.

# Considérations de simulations

## 2.1 Introduction

L'utilisation de la simulation pour évaluer et optimiser les paramètres de conception de dispositifs physiques avant leur fabrication est un outil très important. La méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) est un outil très puissant pour la modélisation des propriétés optiques de dispositifs dont les tailles caractéristiques sont de l'ordre de la longueur d'onde. La FDTD permet de simuler avec précision des géométries de formes arbitraires et des matériaux non linéaires pour concevoir des composants dans une large gamme d'applications, telles que les cristaux liquides, les nanoparticules, la plasmonique, les cristaux photoniques, les cellules solaires, les métamatériaux. . .etc. Dans ce chapitre nous allons en première partie décrire brièvement la méthode des différences finies dans le domaine temporel. Nous donnerons par la suite un aperçu sur le code de calcul utilisé dans cette étude. Nous présenterons également les considérations de simulations et les méthodes utilisées pour la simulation des propriétés optiques des dispositifs proposés.

## 2.2 Méthode des Différences Finies dans le Domaine Temporel (FDTD)

La méthode des différences finies dans le domaine temporel FDTD (Finite Difference Time Domain), basée sur le schéma de Kane Yee, est l'une des méthodes les plus utilisées pour la modélisation de la propagation ainsi que la diffusion d'une onde électromagnétique. Introduite par K. Yee en 1966, la FDTD est une méthode de résolution numérique des équations de Maxwell [35]. Elle permet de modéliser l'interaction de la lumière avec des nano-objets de différentes géométries, tailles et natures physiques. Comme nous l'avons précédemment souligné, la méthode des différences finies dans le domaine temporel, se base sur la résolution des équations de Maxwell doublement discrétisée en utilisant le schéma des différences centrées. Cette discrétisation permet de calculer avec une bonne approximation les dérivées partielles dans le temps ainsi que l'espace. Les équations de Maxwell sont définies comme suit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \operatorname{div} \vec{D} = \rho_{libre} \\ \overrightarrow{\operatorname{rot}} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0 \\ \overrightarrow{\operatorname{rot}} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} + \vec{j}_{libre} \end{array} \right. \quad (2.1)$$

Dans un repère cartésien elles s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left[ \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right] \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left[ \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right] \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left[ \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right] \\ \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right] \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right] \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left[ \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right] \end{array} \right. \quad (2.2)$$

A ces quatre équations il est nécessaire d'ajouter les relations constitutives qui caractérisent un milieu.

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (2.3)$$

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (2.4)$$

Nous remarquons de ces équations les variations spatiales du champ électrique  $\vec{E}$  dépendent des variations temporelles du champ magnétique  $\vec{H}$ . Le traitement numérique des équations différentielles aux dérivées partielles sus-décrites nécessite une discrétisation spatiale et temporelle. Le volume calculé est alors un rectangle parallélépipède qu'on divisera en  $(N_x, N_y, N_z)$  cellules, chacune de volume élémentaire  $(\Delta x \times \Delta y \times \Delta z)$  tel que  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  sont les pas de discrétisation dans les trois directions respectivement (figure 2.1).

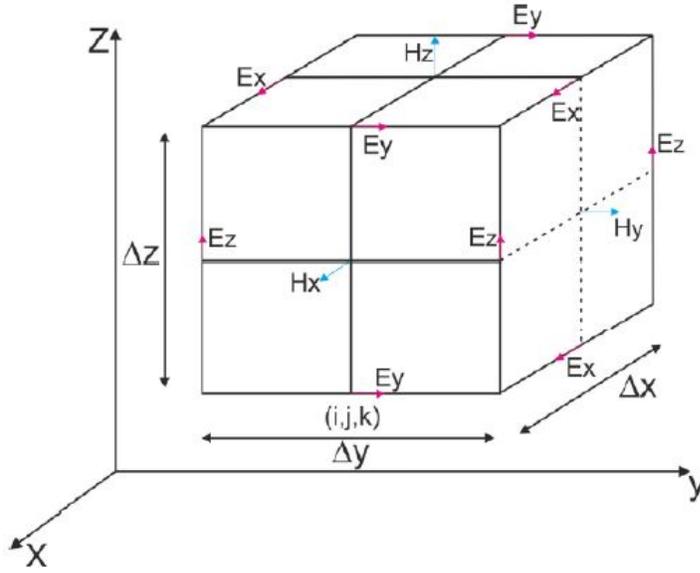


FIGURE 2.1 – Cellule élémentaire de Yee à 3D [35].

Les dérivées temporelles et spatiales des composantes des vecteurs champ magnétique  $\vec{H}$  et champ électrique  $\vec{E}$  ( $H_x, H_y, H_z, E_x, E_y$  et  $E_z$ ) sont calculées en utilisant le développement de Taylor au premier ordre. Soit  $U$  l'une de ces composantes, on adoptera alors la notation de Yee :

$$U(x_i, y_j, z_k, t) = U_{i,j,k}^n$$

Les dérivées spatiales de  $U$  sur un nœud s'expriment alors par :  $(x_i, y_j, z_k)$

$$x_i = i \cdot \Delta x$$

$$y_j = j \cdot \Delta y$$

$$z_k = k \cdot \Delta z$$

$$\left[ \frac{\partial U}{\partial x} \right]_{j,k,n} = \frac{U_{i+\frac{1}{2},j,k}^n - U_{i-\frac{1}{2},j,k}^n}{\Delta x} + 0 \left( [\Delta x]^2 \right)$$

$$\left[ \frac{\partial U}{\partial y} \right]_{i,k,n} = \frac{U_{i,j+\frac{1}{2},k}^n - U_{i,j-\frac{1}{2},k}^n}{\Delta y} + 0 \left( [\Delta y]^2 \right)$$

$$\left[ \frac{\partial U}{\partial z} \right]_{i,k,n} = \frac{U_{i,j,k+\frac{1}{2}}^n - U_{i,j,k-\frac{1}{2}}^n}{\Delta z} + 0 \left( [\Delta z]^2 \right)$$

$$\left[ \frac{\partial U}{\partial t} \right]_{i,j,k} = \frac{u_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} - U_{i,j,k}^{n-\frac{1}{2}}}{\Delta t} + 0 \left( [\Delta t]^2 \right)$$

L'algorithme proposé par Yee utilise la discrétisation développée précédemment pour la résolution du système d'équations 2.2. Les composantes du champ magnétique  $\vec{H}$  qui est transversal au champ électrique, sont calculées au centre des faces de ce volume, tandis que celles du champ électrique  $\vec{E}$  sont calculées suivant les arrêtes de ce dernier. La méthode des différences finies dans le domaine temporel, impose une limite à  $\Delta t$  afin de préserver le principe de causalité. En effet, la vitesse de propagation de l'information ne doit en aucun cas dépasser celle de la lumière dans le milieu. Dans le cas d'un maillage uniforme dans les trois directions, cette condition est appelée condition de stabilité numérique et s'exprime par [39] :

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{max} \sqrt{\frac{1}{\Delta x^2} + \frac{1}{\Delta y^2} + \frac{1}{\Delta z^2}}} \quad (2.5)$$

Cependant, il convient de noter que la méthode FDTD a également ses limites et ses inconvénients, tels que la nécessité d'une grille fine pour résoudre les structures à petite échelle et les limitations en termes de stabilité et de dispersion numérique.

## 2.3 Modélisation des propriétés optiques de nano-structures

### Description du logiciel de calcul FDTD

Dans cette étude nous utilisons un code commercial développé par Lumerical [40]. Il propose une large gamme d'outils de simulation, notamment des simulations par la méthode des différences finies dans le domaine temporelle (FDTD). Lumerical est largement utilisé dans l'industrie et le monde universitaire et est devenu un outil standard dans le domaine de la conception et de la simulation photonique. Il se présente sous forme d'interface graphique qui rend son utilisation intuitive.

Pour réaliser une simulation il faut passer par les étapes suivantes :

- **La structure** : Lumerical propose une large variété de structures des formes de bases (rectangle, cercle, triangle...) ou des structures plus complexes. Il offre également une large bibliothèque de matériaux (tables d'indices). Il permet également d'utiliser des modèles théoriques pour la modélisation des indices de réfractifs des milieux.
- **La région de simulation** : est une région de l'espace où est effectuée la simulation. Elle peut être à deux ou trois dimensions. Elle contient la structure à modéliser. Les conditions aux limites de cette région de simulation doivent être imposées. Le logiciel propose plusieurs conditions (PML, Périodiques, Symétriques...). Le choix de ces conditions dépend du type de simulation.
- **Le Maillage** : correspond au pas de discrétisation spatiale nécessaire pour la méthode. Ce maillage est un maillage non-uniforme, qui dépend de la longueur d'onde utilisée et l'indice de réfraction du matériau. Cependant, il est possible d'imposer et d'affiner le maillage dans une région de la cellule. La valeur du maillage dépend de la taille de la structure à simuler.
- **La Source** : Plusieurs sources sont alors proposées par le modèle. Dans notre travail nous avons utilisé une onde plane en incidence normale ou oblique, caractérisée par : le vecteur d'onde  $\vec{k}$  **selon l'axe (OZ)**, le champ électrique est quant à lui polarisé selon l'axe (OX). Pour les besoins de la simulation nous utiliserons des sources monochromatiques et des sources polychromatiques.
- **Les Moniteurs** : sont des outils de mesure de propriétés optiques de la structure. Le logiciel propose des moniteurs de différentes dimensions (point, ligne, surface ou volume). permet la mesure de propriétés optiques de la structure. Le moniteur 'profil de champ et puissance' quant à lui permet de mesurer dans une région de l'espace les composantes en tous points du champ électrique, magnétique, le vecteur de Poynting et la puissance. Ce moniteur permet donc d'afficher le **profil du champ** électrique, la phase et l'intensité. Il permet également de mesurer la puissance transmise à travers ce moniteur et par conséquent la transmission ou la réflexion de la structure selon sa position par rapport à cette dernière. Toutefois, il est important de signaler que les amplitudes du champ électrique sont normalisées par rapport à l'amplitude incidente.

## 2.4 Modélisation d'une méta-surface micro-texturée

Dans ce paragraphe, nous allons décrire le modèle utilisé pour l'étude d'une méta-surface agissant comme une couche anti-reflet. Pour cela, nous avons effectué une simulation en 3D. La structure est constituée d'un réseau régulièrement espacé de nano-pyramides tronqués en silicium, déposés sur un substrat en silicium. Pour modéliser cette structure, nous avons appliqué des conditions aux limites périodiques dans les directions  $x$  et  $y$ , ainsi que des PML (Perfectly Matched Layer) dans la direction  $z$ . Dans cette étude, nous avons simulé une cellule unitaire composée d'une nano-pyramide. La périodicité des nano-structures est déterminée par la taille de la cellule de calcul. Les caractéristiques du matériau utilisé, c'est-à-dire le silicium, sont données par une table d'indice [41]. L'angle d'incidence de la lumière est déterminé par l'angle entre le vecteur d'onde  $\vec{k}$  et l'axe  $Oz$ . La figure 2.2 présente le schéma illustratif de la cellule de calcul. On appelle, " $a$ " la largeur de la base, " $b$ " la largeur du sommet, " $h$ " la hauteur de la pyramide et " $P$ " la périodicité des nanostructures. Pour caractériser la couche antireflet, nous avons utilisé plusieurs moniteurs de type profil de champ et puissance ;. Le moniteur (1), placé avant la source, permet de mesurer la puissance réfléchiée par la structure. Le moniteur (2), situé au sommet de la nano-structure, et le moniteur (3), positionné dans le substrat à une profondeur de  $0.5 \mu\text{m}$  de la base du nano-cône, permettent de mesurer la puissance transmise. La différence entre les puissances transmises par ces deux moniteurs (2 et 3) donne la puissance absorbée par la structure. Étant donné que les amplitudes des champs sont normalisées par rapport à celle de l'onde incidente, le résultat de cette étude fournit la réflectance ainsi que le rapport de puissance absorbée par rapport à la puissance incidente, respectivement.

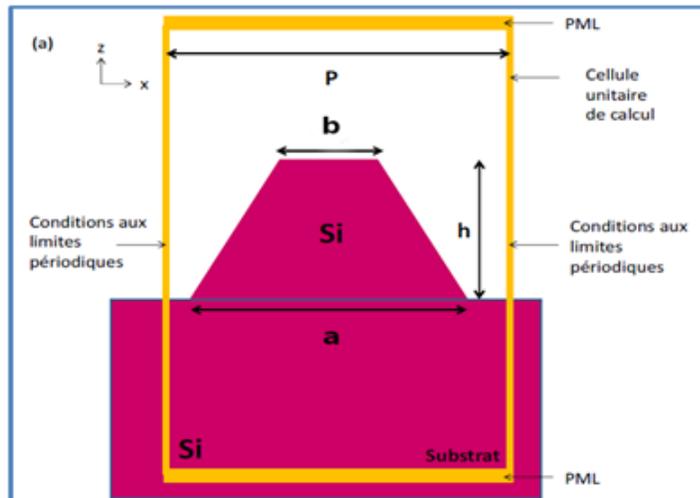


FIGURE 2.2 – Schéma descriptif des considérations de modélisation d'une couche antireflet

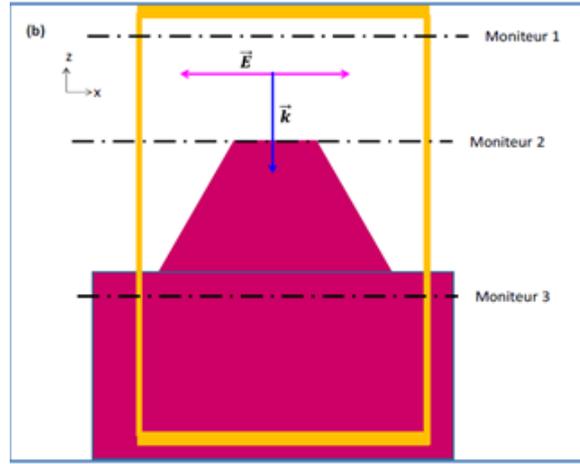


FIGURE 2.3 – Schéma descriptif de la méthode de mesure de la réflectance et du spectre de la puissance absorbée.

Nous avons également calculé la distribution de l'intensité de champ électromagnétique ainsi que la puissance absorbée par la structure dans le plan (XOZ). Pour cela nous avons utilisé deux moniteurs, le premier à deux dimensions (XOZ) permet directement de donner la distribution de l'intensité du champ normalisée à l'intensité incidence. Le second à trois dimensions, donne la distribution de la puissance absorbée par la structure (voir figure 2.4 (a)). En effet, la puissance absorbée par unité de volume peut être calculée à partir de la divergence du vecteur de Poynting tel que [40] :

$$P_{ABS} = -\frac{1}{2}Re(\vec{\nabla} \cdot \vec{P}) \quad (2.6)$$

Cette expression peut être réduite à ce qui suit :

$$P_{ABS} = -\frac{1}{2}\omega|E|^2imag(\epsilon) \quad (2.7)$$

" $\epsilon$ " étant la permittivité du milieu considéré et est donné par la table d'indice utilisée et proposée par le logiciel [41]. Afin de mettre en évidence les mécanismes mis en jeu dans cette étude, nous avons calculé le profil de phase généré par les champs diffusés par les nanostructures. Pour cela nous avons utilisé un moniteur plan (XOY) placé à la surface du substrat (voir la figure 2.4 (b)).

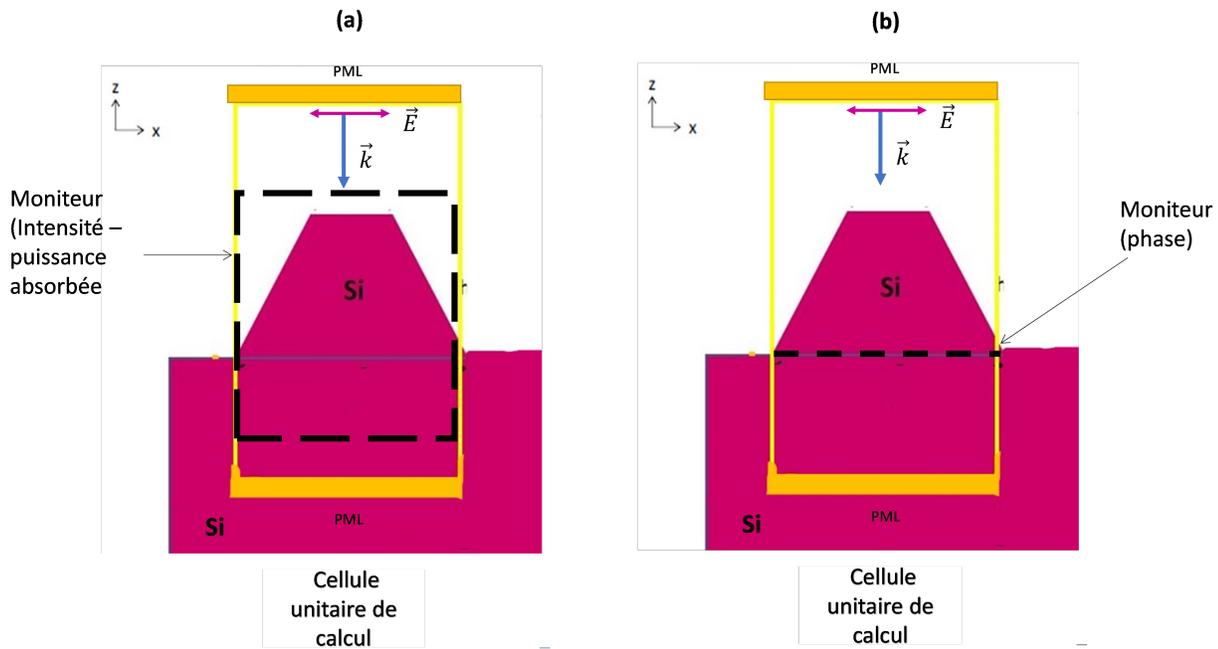


FIGURE 2.4 – Schéma descriptif de la méthode de mesure (a) de la distribution de l'intensité et la puissance absorbée par la structure (b) le profil de la phase

## 2.5 conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la méthode de calcul utilisée pour simuler les différentes nanostructures. Cette méthode est la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) et nous avons utilisé un code commercial développé par LUMERICAL. Nous avons également présenté les différentes considérations de simulation pour les structures étudiées. Les résultats de cette étude sont détaillés dans le chapitre 3 de ce manuscrit.

# RÉSULTATS ET DISCUSSIONS

## 3.1 INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à l'étude des propriétés optiques d'une couche antireflet formée par un assemblage périodique de nano-pyramides. Nous avons étudié deux types de pyramides ; l'une à base circulaire et l'autre à base carrée. Dans une première étape nous avons calculé les spectres de réflexion et d'absorption en fonction des paramètres de tailles de la nano-pyramide. Afin de mettre en évidence les mécanismes responsable de la diminution du taux de réflexion du système ainsi formé, nous avons modélisée la distribution de l'intensité du champ électrique et la puissance absorbée dans la nanostructure. Nous avons également calculé le profil de phase généré par les champs diffusés par les nanostructures. Dans le dernier paragraphe nous avons souhaité étudier l'influence de l'angle d'incidence de la lumière sur les propriétés optiques du système formé par les nano-pyramides. Nous terminerons ce chapitre par une conclusion.

## 3.2 Étude des propriétés optique de couches antireflets

Afin de caractériser les couches anti-reflets en fonction de la forme et la taille nous avons calculé pour les différentes structures la réflectance et la puissance absorbée par chaque structure. Pour mettre en évidence, l'effet de la forme, nous avons réalisé des simulations pour deux types de pyramides : pyramide à base circulaire et pyramide à base carrée.

### 3.2.1 Etude de la Réflectance et la Puissance absorbée d'une Couche Anti-Reflet

Dans cette partie nous allons nous intéresser aux propriétés optiques de la couche anti-reflet excitée avec une onde électromagnétique couvrant une gamme de longueur d'onde allant de 300 à 1100 nm en incidence normale.

#### 3.2.1.1 Pyramide à base circulaire :

La figure 3.1 représente la réflectance d'une (ARC) en fonction de la périodicité, la largeur du sommet ainsi que la hauteur de la pyramide. Les différentes courbes de réflectances sont comparés à celle du substrat. Nous remarquons de ces dernières, que la réflectance des ARC diminue en présence

de la nanostructure. Nous notons que les formes pointues présentent de meilleures caractéristiques. En effet, lors de la variation de la largeur du sommet de la pyramide nous constatons que la structure en pointe ( $b=0.1 \mu\text{m}$ ) présente une réflectance inférieure à 5 %, alors que pour une valeur de  $b=0.5 \mu\text{m}$  (correspondant à un nano-piliers cylindrique), la réflectance dépasse les 15 %. Il est à noter également que la couche anti-reflet ainsi conçue fonctionne sur une large gamme de longueur d'onde allant de l'ultraviolet au proche infrarouge. L'augmentation de la réflectance lorsque la largeur au sommet (1.1 (b)) augmente est due à l'augmentation de l'angle d'incidence de la lumière sur la nanostructure. En effet, la lumière est incidence normale par rapport à la surface du substrat. Cependant l'angle d'incidence de la lumière par rapport à la surface latérale de la nano-pyramide n'est pas égale à 0. Il dépend des paramètres de la pyramide ( $a, b$  et  $h$ ). Nous observons également que la réflectance diminue avec l'augmentation de la hauteur de la pyramide (figure 3.1 (c)). Cette amélioration des propriétés optiques du système est causée par une meilleure injection de la lumière par les réflexions multiples sur les surfaces latérales des nano-pyramides. Nous signalons toutefois, que les résultats obtenus sont en bon accord à ceux présentés par A. Kundu et ses collaborateurs [42].

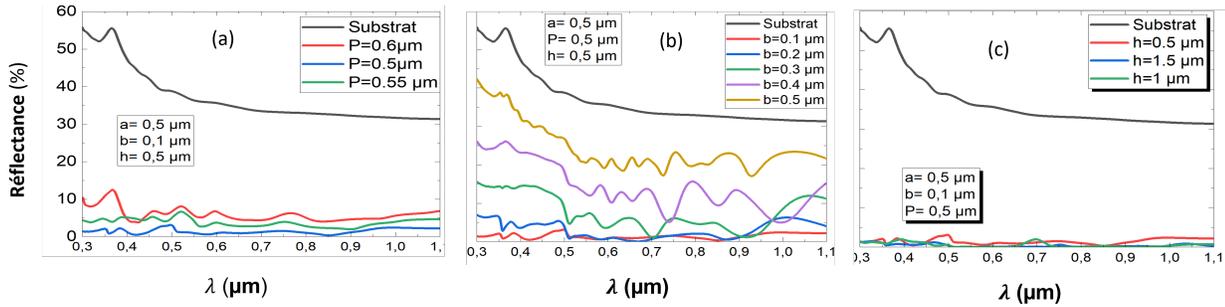


FIGURE 3.1 – Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la périodicité (b) la largeur du sommet (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire.

La figure 3.2 illustre la variation de la puissance absorbée par la structure formée par le nano-pyramide et le substrat, comparée à la puissance absorbée par le substrat en absence du nano-objet. Nous constatons que la puissance absorbée augmente avec la diminution de largeur du sommet. Nous remarquons également que la puissance absorbée varie sensiblement avec la périodicité et la hauteur de la nanostructure. Ces résultats sont en bon accord avec la variation de la réflectance de la structure. L'amélioration de l'absorption est attribuée à un meilleur confinement de la lumière dans la nanostructure. Cependant, nous constatons une forte absorption de la structure pour les faibles longueurs d'onde. Cette absorption diminue avec l'augmentation de la longueur d'onde. Ce constat est en corrélation directe avec les propriétés d'absorption du silicium. En effet, le spectre d'absorption du silicium montre une forte absorption dans le bleu (voir figure 1.1 chapitre 1).

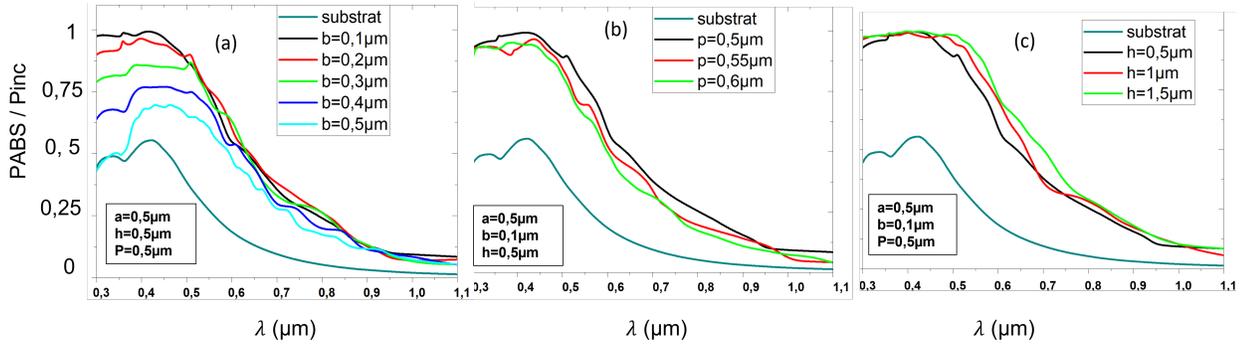


FIGURE 3.2 – Spectre de variation la puissance absorbée par la structure en fonction (a) la largeur du sommet (b) la périodicité (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire.

### 3.2.1.2 Pyramide à base carrée

Pour mettre en évidence l'effet de la forme de la nanostructure sur les propriétés optiques, nous avons réalisé des simulations similaires à celles présentées dans le paragraphe 3.2.1.1. Les figures 3.3 et 3.4 présentent la réflectance et la puissance absorbée en fonction de la largeur au sommet, la périodicité et la hauteur de la nano-pyramide.

Nous constatons que la tendance de variation de la réflectance est similaire à celles observée pour une nano-pyramide à base circulaire. Cependant, pour une largeur au sommet  $b=0.5 \mu\text{m}$  (voir figure 3.3 (a)), la réflectance est identique à celle du substrat. Ceci est corroboré par le fait que cette structure correspond à un agencement cote à cote de nano-cubes (largeur de la base est égale à la largeur du sommet), une structure équivalente une surface continue similaire au substrat. Cet effet n'a pas été observé dans le cas de la structure formée par des nano-pyramides à base circulaire. Dans ces conditions et dans le cas d'une nano-pyramide à base circulaire, cette dernière correspond à une association de nano-piliers cylindrique.

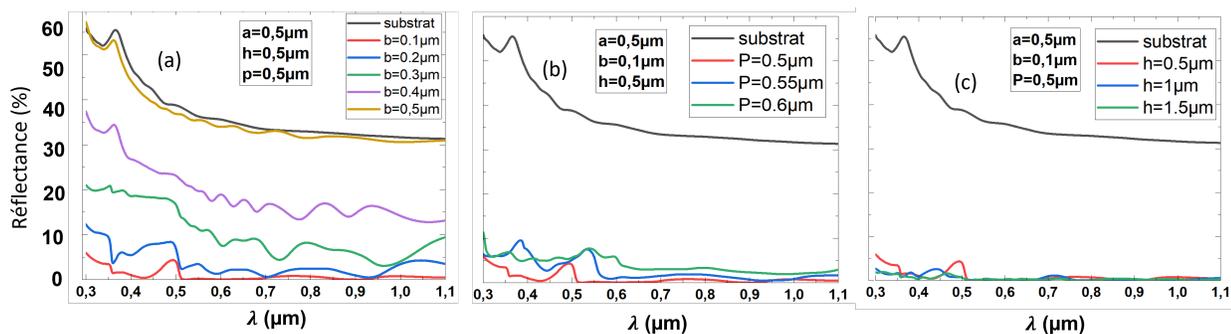


FIGURE 3.3 – Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la périodicité (b) la largeur du sommet (c) la hauteur de la nano-pyramide à base circulaire.

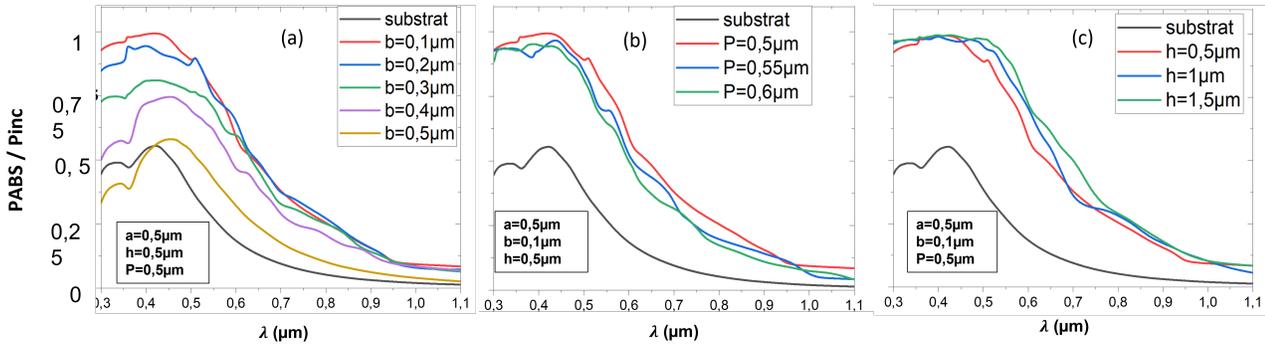


FIGURE 3.4 – Spectre de variation de la réflectance en fonction (a) la largeur du sommet (b) la périodicité (c) la hauteur de la nano-pyramide à base carrée.

### 3.2.2 Étude de l'effet de pointe sur les propriétés optiques d'une couche antireflet :

Nous avons souhaité voir l'impact de la pointe sur les caractéristiques de la couche antireflet. Pour cela, nous avons réalisé une simulation pour deux valeurs de la largeur du sommet de la nano-pyramide (base carrée et base circulaire). La figure 3.5 résume les résultats obtenus. Nous remarquons que la réflectance et la puissance absorbée ne sont pas très affectées par ce paramètre. En effet, un écart maximum de 6% entre les résultats obtenus par les deux structures est relevé. Ce constat permet de confirmer que les résultats obtenus dans les précédentes études et qui montre que la structure correspondant à  $b=0.1 \mu\text{m}$  présente des caractéristiques optimales. Du point de vue technologiques, les structures à sommet tronqué sont facilement réalisables que celle présentant des pointes. Les couches antireflets ainsi proposées sont donc des solutions accessibles et peu coûteuses par les techniques de fabrication actuelles. Elles ne nécessitent donc pas des moyens de fabrication de haute résolution [42].

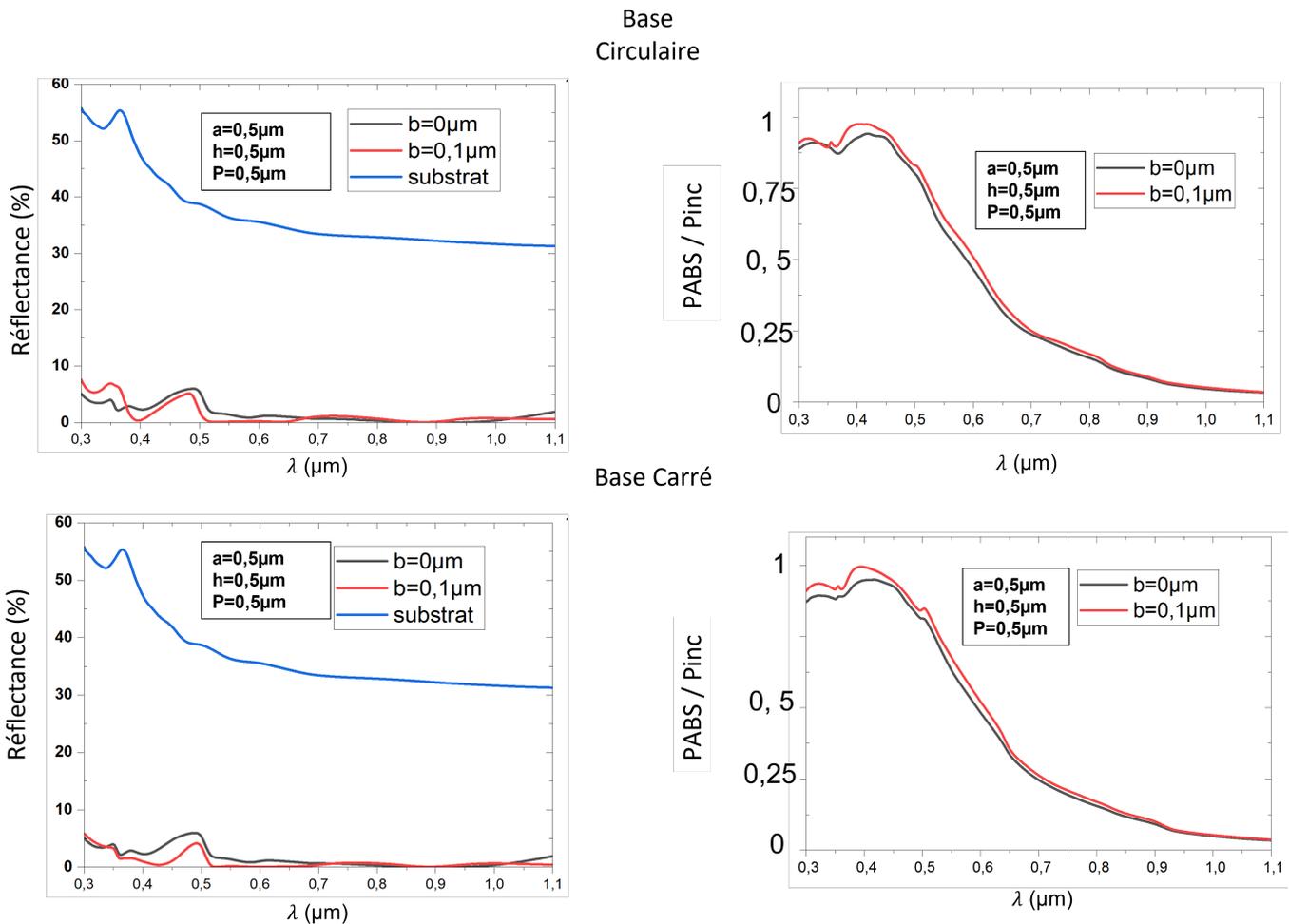


FIGURE 3.5 – Spectre de variation de la réflectance et de la puissance absorbée normalisée à la puissance incidente pour deux valeurs de la largeur du sommet pour les deux types de nano-pyramides (base circulaire et base carrée) .

### 3.2.3 Étude de l'intensité transmise et puissance absorbée dans la structure

Dans ce paragraphe nous allons nous intéresser à l'intensité injectée dans le substrat en présence de la nanostructure. A cet effet, nous avons calculé la distribution de l'intensité du champ électrique dans le plan (XOZ) pour trois valeurs de la longueur d'onde (400, 545, 600 nm) en incidence normale du champ électrique. Les résultats obtenus sont résumés dans la figure 3.6. Nous avons également calculé la distribution de la puissance absorbée dans la nanostructure (voir figure 3.7). Nous remarquons l'augmentation du confinement de la lumière dans la structure et une diminution de l'absorption avec l'augmentation de la longueur d'onde. Ces résultats sont conformes à ceux obtenus dans le paragraphe 3.2.1 et en bon accord avec les propriétés optiques du silicium (Voir figure 1.1 du chapitre 1). Pour une longueur d'onde de 400 nm, nous observons sur la figure 3.6) que la lumière est confinée dans la nano-pyramide. Alors que pour les autres longueurs d'onde (545 et 600 nm), la lumière passe dans le substrat. Ce confinement est dû à la faible profondeur de pénétration des courtes longueurs d'onde

dans le cas du silicium. Toutefois, nous remarquons que la nanostructure améliore les propriétés d'absorption du substrat. Cette augmentation est due à l'augmentation de la lumière transmise dans la structure, une conséquence directe de la diminution de la réflectance. Ce qui aura pour conséquence l'amélioration des propriétés des cellules photovoltaïques ainsi formés. En outre, cette étude a montré qu'une nano-pyramide à base circulaire présente de meilleures propriétés que la nano-pyramide à base carrée.

Afin d'expliquer la réduction de la réflectance en présence de la nanostructure, nous avons calculé la phase du champ électrique dans le plan (XOY) à la surface du substrat et ce, pour les trois longueurs d'onde. Les résultats obtenus sont récapitulés dans la figure 3.8 Nous constatons sur ces cartes que le profil de phase n'est pas constant comme c'est le cas pour le substrat. En effet, dans le cas de la nano-pyramide à base circulaire, le profil de phase est à géométrie cylindrique. Alors que pour les nano-pyramides à base carrée, le profil de phase suit une géométrie carrée. La figure 3.9 donne l'évolution du profil de la phase selon X et Y. Cette variation de la phase a une conséquence directe sur la direction des rayons réfléchis et transmis, qui ne sont plus dans le plan d'incidence tel prédit par les lois de l'optique géométrique classique. Les lois de l'optique géométrique sont donc remplacées par les lois de Descartes généralisées. En effet, dans les équations (1.15 et 1.16), les angles des rayons réfléchis et transmis dépendent de la variation de la phase selon x et y. Ces nouvelles orientations du rayon réfléchi conduisent à la diminution de la réflectance. Cette diminution est causée alors par la réinjection du rayon réfléchi dans la structure. En effet, lorsque la lumière arrive sur une nano-pyramide, une partie de la lumière est réfléchie par la structure. Ce rayon rencontre par la suite une autre nano-pyramide qui permet de transmettre une partie de ce rayon dans la nanostructure. Les réflexions multiples sur les parois des nano-pyramides voisines conduisent à l'augmentation de l'intensité transmise et la réduction de la réflectance et par conséquent à l'augmentation de l'absorption.

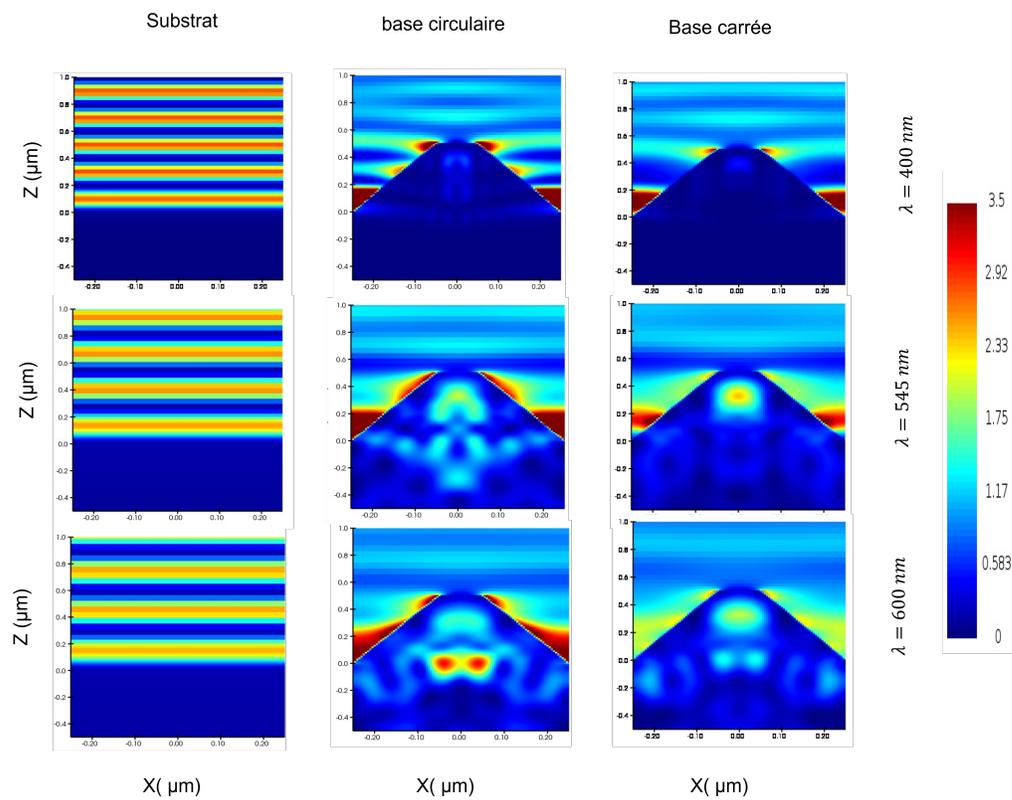


FIGURE 3.6 – Distribution de l'intensité transmise dans la nanostructure (base carrée, base circulaire) comparée au substrat pour trois valeurs de la longueur d'onde ( 400, 545, 600 ) nm

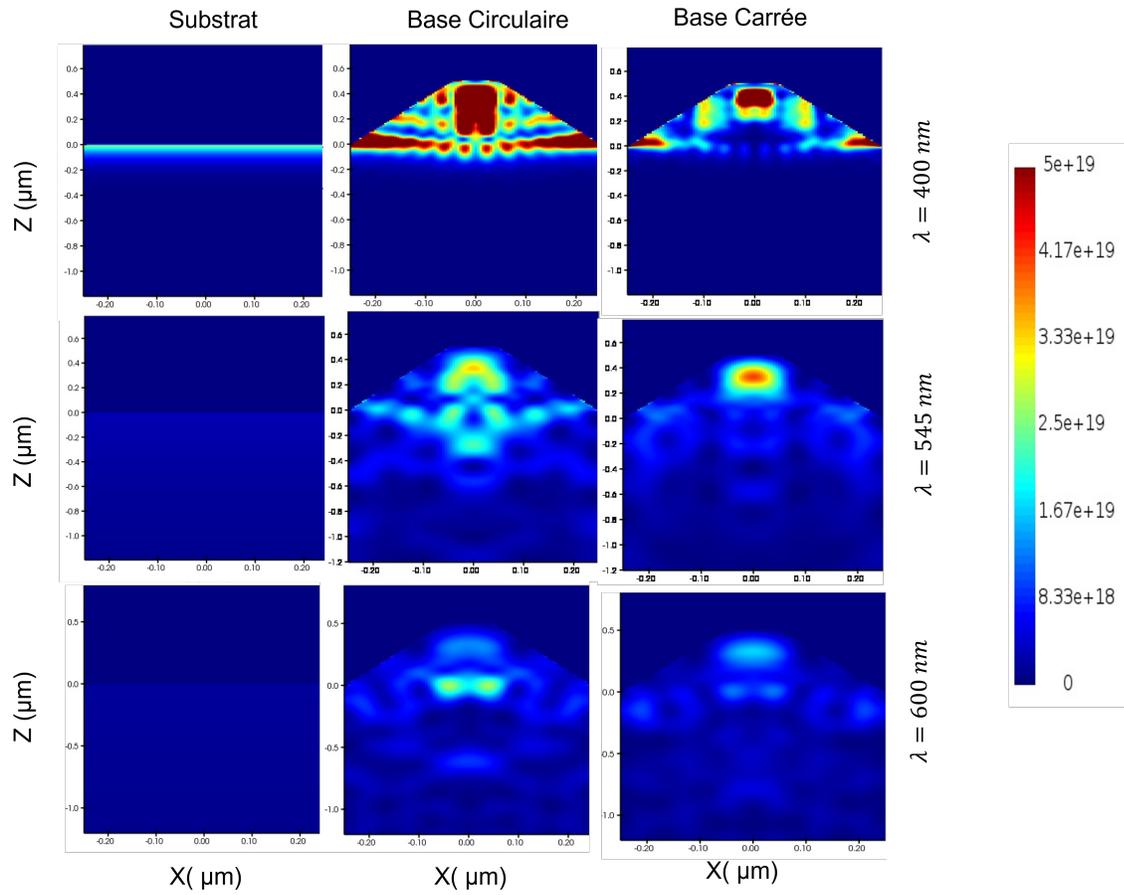


FIGURE 3.7 – Distribution de la puissance absorbée ( $\frac{W}{m^3}$ ) dans la nanostructure (base carrée, base circulaire) comparée au substrat pour trois valeurs de la longueur d'onde ( 400, 545, 600 ) nm

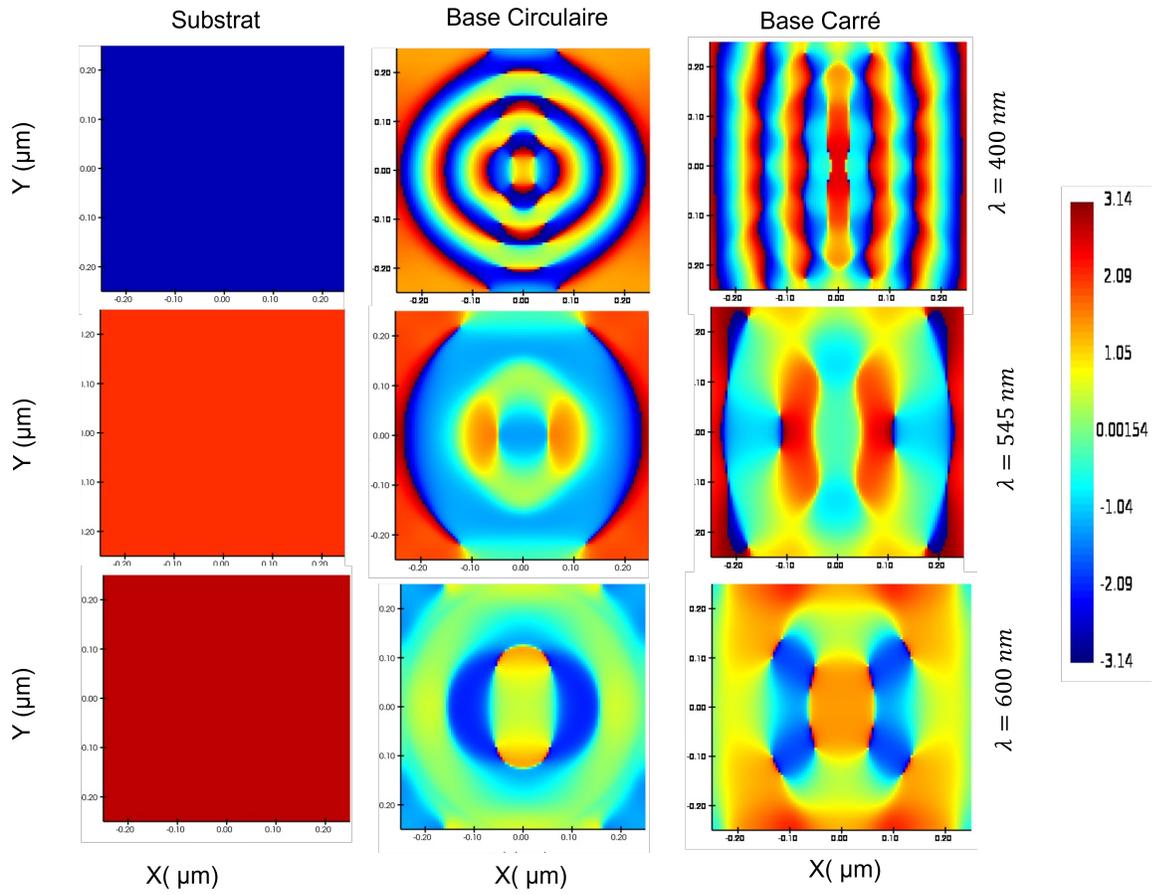


FIGURE 3.8 – Distribution de la phase du champ électrique dans le plan ( $XOY$ ) à la surface du substrat pour les deux structures (base carrée et base circulaire) pour trois longueurs d'onde ( 400, 545, 600 ) nm comparée au substrat.

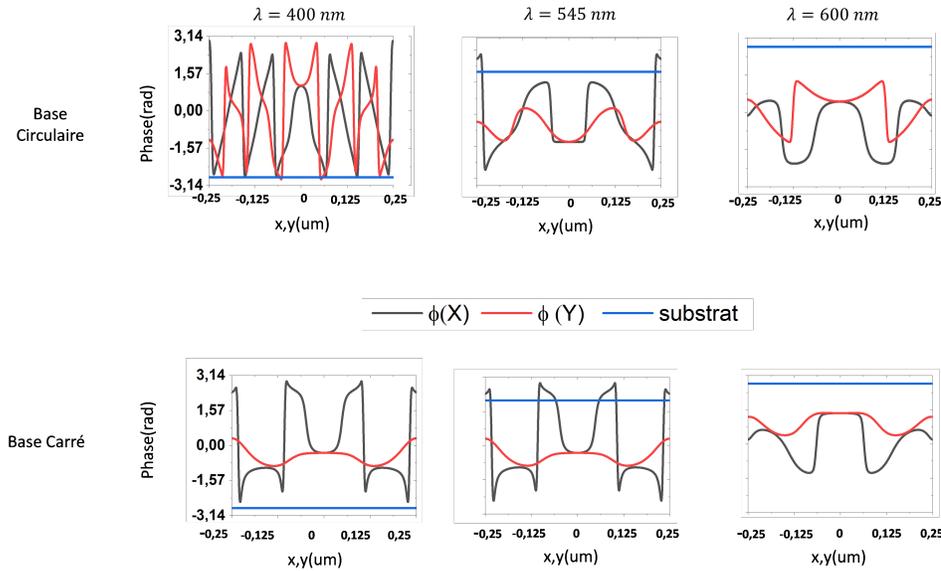


FIGURE 3.9 – Variation de la phase du champ électrique à la surface du substrat pour les deux structures selon X et Y ( base circulaire et base carrée ) pour trois longueurs d’onde (400, 545, 600) nm comparée au substrat.

### 3.2.4 Propriétés optiques d’une couche antireflet en incidence oblique de la lumière

Dans ce paragraphe nous souhaitons caractériser les propriétés optiques de la couche antireflet en fonction des conditions d’éclairement (angle d’incidence de la lumière), pour évaluer les performances de la cellule en fonction de son exposition au soleil au cours de la journée. A cet effet, nous avons réalisé une simulation dans laquelle on varie d’angle d’incidence de la lumière sur la structure. Cet angle est repéré par rapport à la normale à surface du substrat. Les résultats de cette étude sont résumés dans la figure ???. Ces simulations sont réalisées pour une structure correspondante à ( $a=0.5 \mu\text{m}$ ,  $b=0.1 \mu\text{m}$ ,  $h=0.5 \mu\text{m}$  et  $P=0.5 \mu\text{m}$ ). Nous constatons sur ces figures que la réponse de la structure varie sensiblement avec l’augmentation de l’angle d’incidence. En moyenne, le taux de réflexion ne dépasse pas les 10 %. En effet, lorsque l’angle d’incidence augmente, l’angle d’attaque sur la surface latérale de la nano pyramide diminue. A la première réflexion sur la nanostructure l’angle d’injection s’approche de l’incidence normale. Ceci se répercute directement sur le taux de réflexion et on a alors un meilleur confinement de la lumière dans la nano-pyramide. La figure 3.11 montre la distribution de l’intensité dans le plan (XOZ) de la nanostructure pour une longueur d’onde égale à 545 nm en fonction de l’angle d’incidence. Nous remarquons clairement que la lumière en incidence oblique est mieux injectée dans la structure, ce qui aura pour conséquence l’amélioration des performances du système ainsi formé.

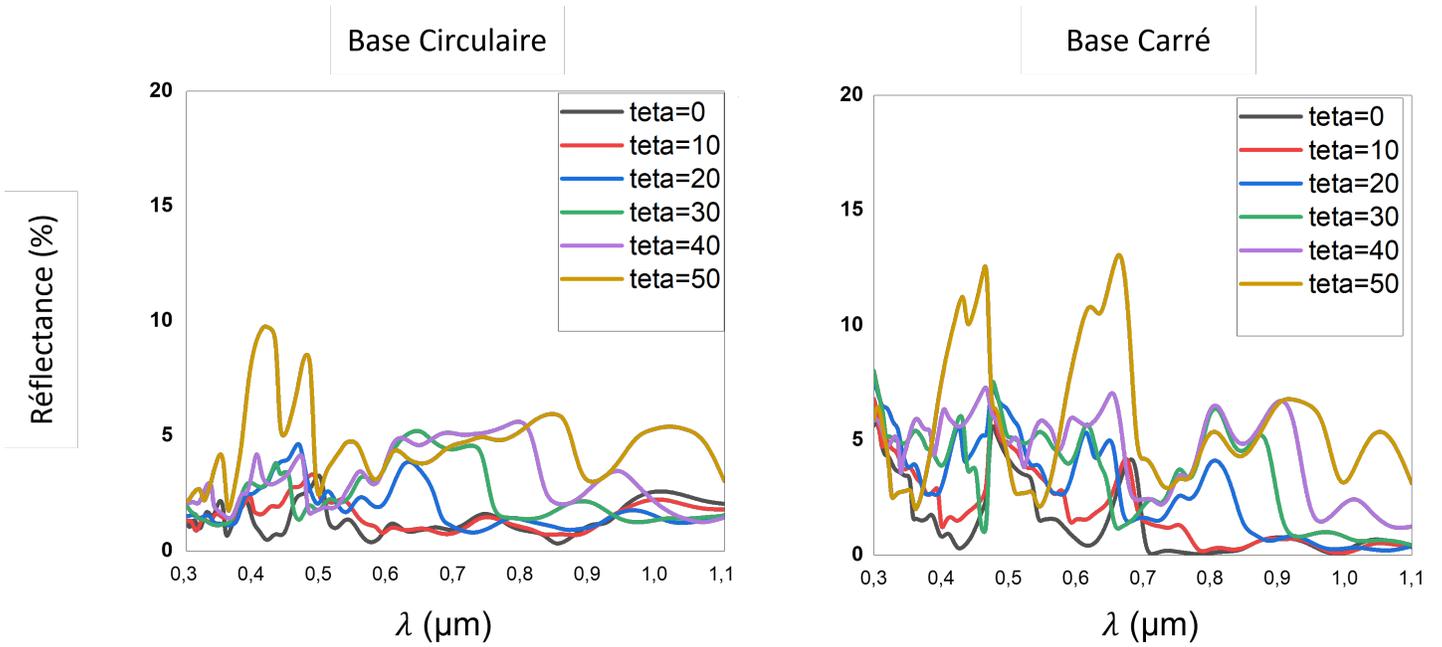


FIGURE 3.10 – Variation du spectre de la réflectance en fonction de l'angle d'incidence pour les deux structures (pyramides à base circulaire et base carrée).

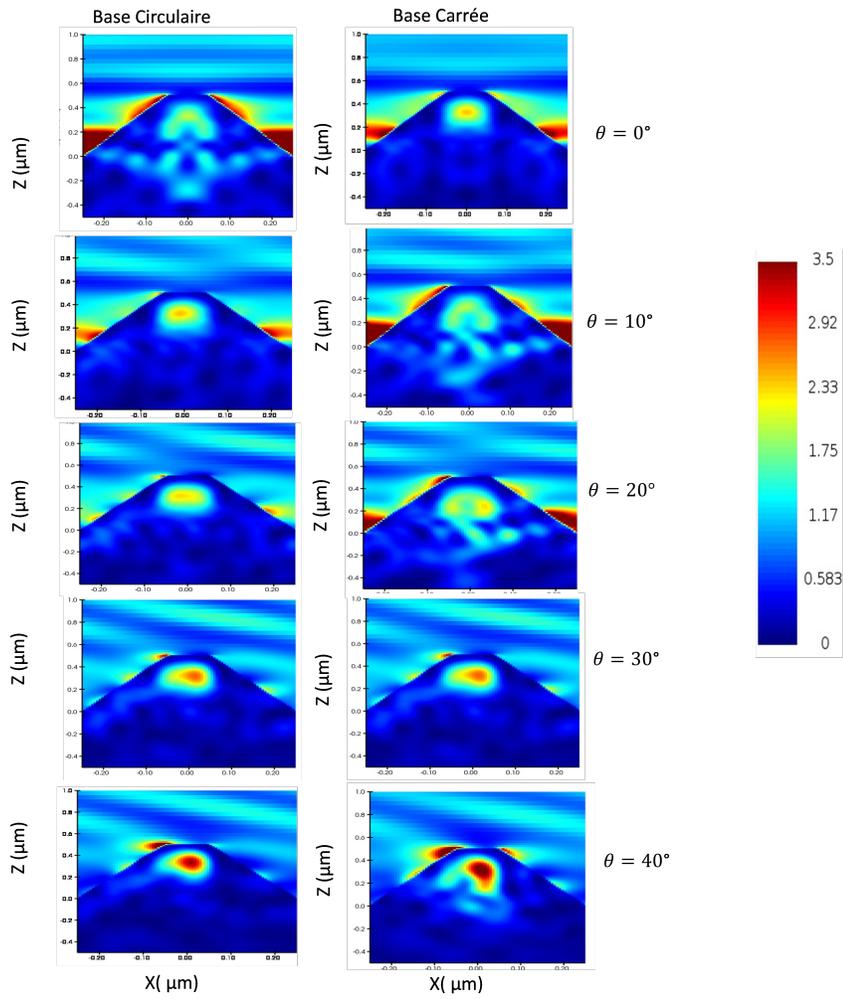


FIGURE 3.11 – Variation du spectre de la réflectance en fonction de l'angle d'incidence pour les deux structures (pyramides à base circulaire et base carrée).

## 3.3 Conclusion

En conclusion, nous venons de montrer qu'une couche antireflet formée par un assemblage périodique de nano-pyramide permet d'améliorer les propriétés optiques du système ainsi formé. En effet, ce système permet la réduction du taux de réflexion et l'augmentation du taux d'absorption. Le confinement ou le piégeage de la lumière dans la nanostructure est responsable de l'amélioration des performances. La capture de la lumière dans la nanostructure permet d'augmenter les propriétés d'absorption du silicium car la lumière reste confinée et n'est pas perdue par transmission à travers le substrat. Le confinement de la lumière dans la nanostructure est attribué au profil de phase généré par cette dernière. Les conditions de réflexion et de transmission à cette échelle ne sont plus régies par les lois de l'optique classique. Les réflexions multiples sur les faces des nano-pyramides permettent une réinjection du rayon réfléchi dans la nanostructure et par conséquent un meilleur confinement. Nous avons également démontré que ces couches antireflets fonctionnent également en incidence oblique de la lumière. Cette propriété permet d'exploiter les systèmes proposés dans toutes conditions d'éclairage, tel est le cas d'une cellule photovoltaïque pour un éclairage dans les différentes tranches de la journée.

# Conclusion générale

Dans ce mémoire nous nous sommes intéressés aux propriétés optiques de méta-surfaces agissant comme couches antireflet. A cet effet, nous avons modélisé le spectre de réflexion de structures formés par un substrat en silicium sur lequel sont déposé des nano-objets du même matériau. Nous nous sommes intéressés à deux formes de nano-objets ; nano-pyramide à base circulaire et nano- pyramide à base carrée. Dans cette étude nous avons modélisé les propriétés optiques de ces couches en fonction de la taille et la périodicité de ces objets. Nous avons montré que la réflectance de ces systèmes est fortement diminué en présence des nanostructures. Pour l'application de ces dispositifs dans des cellules photovoltaïques, nous avons calculé le taux d'absorption de ces structures. Nous n'avons constaté que ces structures présentent une de forte absorption pour les courtes longueurs d'onde qui diminue pour les grandes longueurs d'onde. Ceci est corroboré par les propriétés d'absorption du silicium. Afin de mettre en évidence les mécanismes responsables de ce phénomène, nous avons calculé la distribution de l'intensité du champ et la puissance absorbée dans le plan (XOZ) pour différentes longueurs d'ondes. Cette distribution a montré un confinement de la lumière dans la nanostructure accompagné d'une forte absorption. Le confinement de la lumière est attribué au profil de phase généré par les ondes diffusé par les nano-objets. A cette échelle les lois de l'optique classique ne sont plus valables. Les rayons réfléchis et transmis sont dans des directions différentes que celles prédites par l'optique géométrique. Les réflexions multiples sur les parois des nano-pyramides augmentent le taux de transmission dans les structures et par conséquent le taux d'absorption. Afin de tirer profit de l'éclairement solaire à tout moment de la journée, nous avons également réalisé une étude en fonction de l'angle d'incidence de la lumière sur les structures. Cette étude a montré que le taux de réflexion est fortement diminué. Le confinement de la lumière en incidence oblique est amélioré.

En perspectives à ce travail, nous souhaitons développer d'avantage cette étude en modélisant les propriétés physique de la cellule solaire (taux de génération, rendement quantique, courant court-circuit...). Nous envisageons également de simuler les caractéristiques électriques de la cellule solaire (caractéristiques courant-tension) en utilisant le module «CHARGE» proposé par LUMERICAL [43]. D'autres stratégies peuvent faire également objet d'études futures et ce en proposant des structures permettant d'améliorer l'absorption des cellules i.e : utiliser des couches anti-reflet absorbante en moyennant des nanostructures de types métallique. On peut également tirer profit des longueurs d'onde non absorbée par le silicium tel que les infrarouges ; doper les structures avec des molécules pouvant absorber ces longueurs d'ondes et ré-émettre dans le domaine visible par un processus d'up-conversion[44]

# Bibliographie

1. EBBESEN, T. W., LEZEC, H. J., GHAEMI, H., THIO, T. & WOLFF, P. A. Extraordinary optical transmission through sub-wavelength hole arrays. *nature* **391**, 667-669 (1998).
2. SMITH, D. R., PADILLA, W. J., VIER, D., NEMAT-NASSER, S. C. & SCHULTZ, S. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Physical review letters* **84**, 4184 (2000).
3. SILVEIRINHA, M. & ENGHETA, N. Design of matched zero-index metamaterials using nonmagnetic inclusions in epsilon-near-zero media. *Physical Review B* **75**, 075119 (2007).
4. KURTER, C., LAN, T., SARYTCHEV, L. & ANLAGE, S. M. Tunable negative permeability in a three-dimensional superconducting metamaterial. *Physical Review Applied* **3**, 054010 (2015).
5. CHOI, M. *et al.* A terahertz metamaterial with unnaturally high refractive index. *Nature* **470**, 369-373 (2011).
6. ENGELBERG Jacob et Levy, U. Les avantages des lentilles métalliques par rapport aux lentilles diffractives. *Nature communications* **11**.
7. ZAIBA, S. *et al.* Metallic nanowires can lead to wavelength-scale microlenses and microlens arrays. *Optics Express* **20**, 15516-15521 (2012).
8. TELLAL, A., ZIANE, O., JRADI, S., STEPHAN, O. & BALDECK, P. L. Quadratic phase modulation and diffraction-limited microfocusing generated by pairs of subwavelength dielectric scatterers. *Nanophotonics* **8**, 1051-1061 (2019).
9. TELLAL, A., ZIANE, O. & BALDECK, P. L. Diffraction-limited microfocusing generated by polymer microlines separated by 1.12  $\mu\text{m}$ . *Chinese Optics Letters* **17**, 082201 (2019).
10. KESHAVARZ HEDAYATI, M. & ELBAHRI, M. Antireflective coatings : Conventional stacking layers and ultrathin plasmonic metasurfaces, a mini-review. *Materials* **9**, 497 (2016).
11. FOSTER, S. & JOHN, S. Light-trapping design for thin-film silicon-perovskite tandem solar cells. *Journal of Applied Physics* **120** (2016).
12. POWELL, D. M. *et al.* Crystalline silicon photovoltaics : a cost analysis framework for determining technology pathways to reach baseload electricity costs. *Energy & Environmental Science* **5**, 5874-5883 (2012).
13. EL DAIF, O. *et al.* Absorbing one-dimensional planar photonic crystal for amorphous silicon solar cell. *Optics Express* **18**, A293-A299 (2010).
14. GRANDIDIER, J., CALLAHAN, D. M., MUNDAY, J. N. & ATWATER, H. A. Gallium arsenide solar cell absorption enhancement using whispering gallery modes of dielectric nanospheres. *IEEE Journal of Photovoltaics* **2**, 123-128 (2012).

## Bibliographie

---

15. LI, B. *et al.* Development of pulsed laser deposition for CdS/CdTe thin film solar cells. *Applied Physics Letters* **101** (2012).
16. CAO, J. *et al.* Optical modeling of organic solar cells based on rubrene and C70. *Appl. Opt.* **51**, 5718-5723. <https://opg.optica.org/ao/abstract.cfm?URI=ao-51-23-5718> (août 2012).
17. SHAHRJERDI, D. *et al.* High-efficiency thin-film InGaP/InGaAs/Ge tandem solar cells enabled by controlled spalling technology. *Applied physics letters* **100** (2012).
18. VUKAJLOVIC-PLESTINA, J. *et al.* Fundamental aspects to localize self-catalyzed III-V nanowires on silicon. *Nature Communications* **10**, 869 (2019).
19. HSU, C.-M., CONNOR, S. T., TANG, M. X. & CUI, Y. Wafer-scale silicon nanopillars and nanocones by Langmuir–Blodgett assembly and etching. *Applied Physics Letters* **93** (2008).
20. KHALED, A. *et al.* Characteristics of silicon nanowire solar cells with a crescent nanohole. *Optics Express* **28**, 31020-31033 (2020).
21. MAHMOUD, A. H. K. *et al.* Optoelectronic performance of a modified nanopyramid solar cell. *JOSA B* **36**, 357-365 (2019).
22. KORANY, F. M. *et al.* Conical structures for highly efficient solar cell applications. *Journal of Nanophotonics* **12**, 016019-016019 (2018).
23. ABDEL-LATIF, G. Y., HAMEED, M. F. O., HUSSEIN, M., ABDEL RAZZAK, M. & OBAYYA, S. S. Characteristics of highly efficient star-shaped nanowires solar cell. *Journal of Photonics for Energy* **8**, 047001-047001 (2018).
24. RAMAN, A., YU, Z. & FAN, S. Dielectric nanostructures for broadband light trapping in organic solar cells. *Optics express* **19**, 19015-19026 (2011).
25. YANG, Z., GAO, P., ZHANG, C., LI, X. & YE, J. Scattering effect of the high-index dielectric nanospheres for high performance hydrogenated amorphous silicon thin-film solar cells. *Scientific reports* **6**, 30503 (2016).
26. ELRABIAEY, M. A., HUSSEIN, M., HAMEED, M. F. O. & OBAYYA, S. S. Light absorption enhancement in ultrathin film solar cell with embedded dielectric nanowires. *Scientific Reports* **10**, 17534 (2020).
27. MOHSEN, A. A., ZAHRAN, M., HABIB, S. & ALLAM, N. K. Refractory plasmonics enabling 20% efficient lead-free perovskite solar cells. *Scientific Reports* **10**, 6732 (2020).
28. KUMAR, K., KUMAWAT, U. K., MITAL, R. & DHAWAN, A. Light trapping plasmonic butterfly-wing-shaped nanostructures for enhanced absorption and efficiency in organic solar cells. *JOSA B* **36**, 978-990 (2019).
29. SZE, S. *Physics of semiconductor devices*. New york : John wi-ley & sons 1981.
30. RAUT, H. K., GANESH, V. A., NAIR, A. S. & RAMAKRISHNA, S. Anti-reflective coatings : A critical, in-depth review. *Energy & Environmental Science* **4**, 3779-3804 (2011).
31. KHAN, S. B., WU, H., PAN, C. & ZHANG, Z. A mini review : Antireflective coatings processing techniques, applications and future perspective. *Res. Rev. J. Mater. Sci* **5**, 1-19 (2017).
32. STRONG, J. On a method of decreasing the reflection from nonmetallic substances. *JOSA* **26**, 73-74 (1936).
33. YU, N. *et al.* Light propagation with phase discontinuities : generalized laws of reflection and refraction. *science* **334**, 333-337 (2011).

34. GENEVET, P., CHAVEL, P. & BONOD, N. Les métasurfaces, des composants optiques fonctionnels ultra-minces. *Photoniques*, 25-30 (2017).
35. YEE, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on antennas and propagation* **14**, 302-307 (1966).
36. YU, N. *et al.* Light propagation with phase discontinuities : generalized laws of reflection and refraction. *science* **334**, 333-337 (2011).
37. ZHANG, B., HENDRICKSON, J., NADER, N., CHEN, H.-T. & GUO, J. Metasurface optical anti-reflection coating. *Applied Physics Letters* **105** (2014).
38. TELLAL, A. *Application d'un microlaser à néodyme pour l'élaboration de nano objets photoniques et leurs caractérisations spectroscopiques* thèse de doct. (2019).
39. UMASHANKAR, K. & TAFLOVE, A. A novel method to analyze electromagnetic scattering of complex objects. *IEEE transactions on electromagnetic compatibility*, 397-405 (1982).
40. LUMERICAL, F. Lumerical solutions. *Inc.* <http://www.lumerical.com>.
41. PALIK, D. Handbook of optical constants of solids. Edward. Academic press, Inc (1985).
42. KUNDU, A., DAS, S., HOSSAIN, S., DATTA, S. K. & SAHA, H. Tapered silicon nanopillars for enhanced performance thin film solar cells. *Energy Procedia* **54**, 389-399 (2014).
43. ANSYS. *Ansys Lumerical CHARGE / 3D Charge Transport Solver* juill. 2023. <https://www.ansys.com/products/photonics/charge>.
44. KUMAR, V., NTWAEABORWA, O., SOGA, T., DUTTA, V. & SWART, H. Rare earth doped zinc oxide nanophosphor powder : a future material for solid state lighting and solar cells. *Acs Photonics* **4**, 2613-2637 (2017).