

Département d'Automatique, Télécommunication et d'Electronique

## Projet de Fin d'Etudes

Pour l'obtention du diplôme de Master

Filière : Electronique

Spécialité : Instrumentation

### Thème

**Modélisation par la méthode des matrices de transfert des propriétés optiques d'une cellule photovoltaïque multicouches inorganique**

**Préparé par :**

- HADACHE RABHA
- HADJI ROSA

**Dirigé par :**

M. KESSI FARHAT

**Examiné par :**

M.TAFININE

Mme BENDJELLOUL

**Année universitaire : 2023/202**

## Sommaire

Sommaire. ....	1
Listes des figures.....	3
Introduction général .....	5
<b>Chapitre1 : Généralités sur les cellules photovoltaïques</b>	
1.1 Introduction .....	7
1.2 Contexte et enjeux du photovoltaïque.....	7
1.3 Principes de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque.....	8
1.3.1 Structure d'une cellule photovoltaïque.....	8
1.3.2 Absorption des photons et génération des paires électron-trou.....	10
1.3.3 Séparation, transport et collecte des porteurs de charges .....	11
1.3.4 Génération du courant électrique.....	12
1.3.5 Caractéristique I(V) - Rendement de conversion.....	12
1.3.6 Impact de la température.....	13
1.4 Différentes technologies de cellules photovoltaïques inorganique.....	14
1.4.1 Cellules au silicium cristallin.....	14
1.4.2 Cellules en couches minces.....	15
1.4.2.1 Cellules au silicium amorphe (a-Si:H).....	16
1.4.2.2 Cellules à base de CdTe.....	17
1.4.2.3 Cellules CIGS et CIS.....	18
1.4.3 Cellules pérovskites émergentes.....	19
1.4.4 Cellules multi-jonctions à ultra-hauts rendements.....	19
1.5 Importance de l'optimisation optique.....	20
1.6 Méthodes de modélisation optique des cellules solaires en couches minces.....	21
1.6.1 Méthode des matrices de transfert.....	21
1.6.2 Méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD).....	22
1.6.3 Méthode des éléments finis (FEM).....	23
2.conclusion .....	23
<b>Chapitres 2 : Modélisation optique des milieux stratifiés par la méthode des matrices de transfert</b>	
1. Introduction .....	24
2. Rappels d'optique électromagnétique.....	24
3. Formalise des matrices de Transfert Optique.....	27
3.1.Introduction.....	27
3.2.Équations fondamentales de l'optique des milieux stratifiés.....	27
3.3.Matrices de transfert pour une interface.....	30
3.4.Matrices de transfert pour une couche homogène.....	33
3.5.Milieux stratifiés multicouches.....	35
3.6.Coefficient de réflexion, transmission et d'absorption.....	37
3.7.Distribution du champ électromagnétique.....	38

4. Conclusion.....	38
<b>Chapitre 3 : Simulations numériques et optimisation optique de cellules solaires en couches minces de CdTe</b>	
1. Introduction.....	40
2. Algorithme et programme de Calcul.....	40
3. Données d'entrée.....	41
3.1. Indices optiques.....	41
3.2. Épaisseurs des couches.....	42
3.3. Autres données d'entrée.....	44
4. Simulation des propriétés optiques fondamentales.....	44
4.1. Coefficients de réflexion et de transmission.....	44
4.1.1. Spectres de réflexion et de transmission pour les polarisations TE et TM.....	44
4.1.2. Influence de l'épaisseur de la couche active CdTe.....	45
4.1.3. Influence de l'angle d'incidence.....	46
4.2. Coefficient d'absorption.....	48
4.2.1. Spectres d'absorption.....	48
4.2.1.1. Spectres d'absorption pour les polarisations TE et TM.....	48
4.2.1.2. Influence de l'épaisseur de la couche active.....	49
4.2.1.3. Influence de l'angle d'incidence.....	50
4.2.2. Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'angle d'incidence.....	51
4.2.3. Variation du coefficient d'absorption en fonction de l'épaisseur de la couche active....	52
5. Stratégies d'optimisation de l'absorption dans les cellules solaires à base de CdTe.....	53
6. Conclusion.....	53
<b>Conclusion général.....</b>	<b>55</b>
<b>Références .....</b>	<b>57</b>
<b>Résumé.....</b>	<b>60</b>

## Listes des figures

<b>Figure 1.1 :</b> a) Installation de panneaux photovoltaïques b) Module photovoltaïque c) Structure d'une cellule solaire d) Jonction PN e) Schéma de principe de la conversion photovoltaïque par une jonction p-n (exemple du silicium).....	10
<b>Figure 1.2 :</b> De gauche à droite : <i>cellule monocristalline, polycristalline</i> .....	15
<b>Figure 1.3 :</b> Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces au silicium amorphe.....	16
<b>Figure 1.4 :</b> Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces à base de CdTe.....	17
<b>Figure 1.5 :</b> Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces CIGS.....	18
<b>Figure 1.6 :</b> Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à pérovskites.....	19
<b>Figure 1.7 :</b> Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque GaInP/GaAs/Ge et leurs duplications reliées en série par des jonctions tunnel.....	20
<b>Figure 2.1 :</b> Représentation des champs électromagnétiques et vecteurs d'onde dans deux couches successives d'une structure multicouche dans le cas d'une polarisation p.....	30
<b>Figure 2.2 :</b> Champs électriques de part et d'autre d'une interface.....	31
<b>Figure 2.3 :</b> Champs électriques de à l'intérieur d'une couche.....	33
<b>Figure 2.4 :</b> Champs électriques dans une structure multicouche.....	35
<b>Figure 3.1 :</b> Spectres de réflexion et de transmission pour la polarisation TE et TM.....	40
<b>Figure 3.2 :</b> Influence de l'épaisseur de la couche active (Cdte) sur les spectres de réflexion et de transmission pour les polarisation TE et TM.....	41
<b>Figure 3.3 :</b> Influence de l'angle d'incidence sur les spectres de réflexion et de transmission pour les polarisations TM et TE.....	42
<b>Figure 3.4 :</b> Spectres d'absorption pour la polarisation TE et TM.....	43

<b>Figure 3.5 :</b> Influence de l'épaisseur de la couche active (CDTE) sur le spectre d'absorption pour les polarisations TE et TM.....	44
<b>Figure 3.6 :</b> Influence de l'angle d'incidence sur le spectre d'absorption pour les polarisations TE et TM.....	45
<b>Figure 3.7 :</b> la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'angle d'incidence.....	46
<b>Figure 3.8 :</b> la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'épaisseur de la couche active CdTe .....	47

## **Introduction générale**

Depuis les premiers développements du photovoltaïque au milieu du 20ème siècle, la conversion directe de l'énergie solaire en électricité s'impose comme l'une des solutions énergétiques d'avenir les plus prometteuses. Propre, inépuisable et modulaire, cette technologie répond aux enjeux cruciaux de la transition énergétique verte et du développement durable. Malgré les progrès considérables réalisés, avec des rendements record dépassant 26% pour les meilleures cellules au silicium cristallin en laboratoire, l'amélioration continue des performances et de la compétitivité économique reste un objectif primordial.

L'optimisation optique joue un rôle clé dans cette quête d'efficacité accrue du photovoltaïque. En effet, maximiser l'absorption du rayonnement solaire incident tout en minimisant les phénomènes de réflexion et autres pertes optiques est une condition essentielle pour augmenter les rendements de conversion énergétique. Ceci nécessite une conception minutieuse de l'empilement stratifié de couches minces qui constitue la cellule solaire, chaque couche (absorbeur, fenêtres optiques, contacts métalliques, etc.) ayant un rôle bien spécifique à jouer.

C'est dans ce contexte que s'inscrit ce projet de fin d'études, visant à développer un modèle numérique rigoureux basé sur la méthode des matrices de transfert permettant de simuler et optimiser les propriétés optiques fondamentales d'une cellule photovoltaïque multicouches inorganique à base de tellure de cadmium (CdTe). Cette approche mathématique permet de calculer la propagation de la lumière dans les milieux stratifiés en prenant en compte les effets d'interférences aux interfaces.

Le mémoire est articulé autour de trois chapitres principaux :

Le Chapitre 1 pose les bases théoriques et dresse un état de l'art complet. Il présente les principes généraux du photovoltaïque, les différentes filières technologiques de cellules solaires inorganiques, et l'importance cruciale de l'optimisation optique. Sont ensuite détaillées les différentes méthodes de modélisation optique des empilements multicouches, en mettant l'accent sur la théorie et le formalisme mathématique des matrices de transfert.

Le Chapitre 2 est consacré à poser les bases théoriques pour modéliser rigoureusement la propagation de la lumière dans les empilements de couches minces des cellules photovoltaïques. Après des rappels sur l'optique électromagnétique et géométrique, le formalisme des matrices de transfert optique permettant de décrire la propagation à travers des multicouches est introduit. Les équations fondamentales, expressions des matrices et calcul des coefficients optiques sont détaillés. La modélisation de milieux stratifiés multicouches complexes par combinaison de matrices élémentaires est ensuite montrée.

Dans le Chapitre 3, le modèle numérique basé sur les matrices de transfert est appliqué à des simulations d'optimisation pour la technologie de cellules en couches minces de CdTe. Un programme informatique en Python permettant de calculer rapidement les coefficients optiques en fonction des paramètres géométriques est présenté. Les résultats de l'étude paramétrique de

l'influence de l'épaisseur de la couche active, de la polarisation et de l'angle d'incidence sur les coefficients de réflexion, transmission et absorption sont analysés en détail. Des stratégies d'optimisation visant à maximiser l'absorption dans la couche active sont finalement proposées.

La conclusion générale permet de dresser un bilan critique du travail réalisé, en mettant en évidence les principales réalisations, les performances atteintes par le modèle développé, mais aussi ses limitations actuelles. Les perspectives d'améliorations et d'applications futures de cet outil de modélisation optique pour le photovoltaïque sont également discutées.

## Chapitre 1

### Généralités sur les cellules photovoltaïques

#### 1.1.Introduction

Ce premier chapitre pose les bases nécessaires à la compréhension des enjeux liés à l'optimisation optique des cellules photovoltaïques. Nous commencerons par dresser un état des lieux du contexte énergétique mondial et des défis posés par la transition énergétique, mettant en évidence le rôle clé que peut jouer le photovoltaïque. Les principes fondamentaux de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque seront ensuite détaillés, en insistant sur l'importance de maximiser l'absorption de la lumière incidente dans la couche active.

Nous passerons alors en revue les différentes technologies de cellules photovoltaïques inorganiques en soulignant leurs spécificités. Cette diversité de technologies souligne la nécessité d'approches d'optimisation optique adaptées à chaque type de structure.

L'importance cruciale de l'optimisation optique pour améliorer les performances des cellules photovoltaïques sera ensuite mise en évidence, en insistant sur les principaux leviers d'optimisation tels que le choix des matériaux, la conception des empilements multicouches et le contrôle des propriétés optiques aux interfaces.

Enfin, nous présenterons un aperçu détaillé de quelques méthodes de modélisation optique des empilements multicouches, en mettant l'accent sur la théorie des matrices de transfert et son application aux cellules photovoltaïques. D'autres approches, comme les méthodes entièrement numériques ou semi-analytiques, seront également abordées, permettant ainsi de cerner leurs forces et leurs limitations respectives.

#### 1.2.Contexte et enjeux du photovoltaïque

Les défis énergétiques et environnementaux auxquels l'humanité est confrontée au 21ème siècle sont colossaux. La demande mondiale en énergie ne cesse de croître, tirée par l'augmentation de la population et le développement économique. Cependant, les ressources en énergies fossiles (pétrole, gaz, charbon) sont limitées et leur exploitation intensive contribue dangereusement au réchauffement climatique via les émissions massives de gaz à effet de serre.

Le changement climatique représente une menace majeure avec des conséquences potentiellement catastrophiques sur les écosystèmes et la vie humaine.

Face à cette situation préoccupante, la transition vers un bouquet énergétique durable composé principalement d'énergies renouvelables est devenue une priorité urgente à l'échelle planétaire. Parmi celles-ci, l'énergie solaire photovoltaïque est considérée comme l'une des solutions les plus prometteuses pour répondre aux besoins énergétiques croissants tout en préservant l'environnement [1].

Le photovoltaïque convertit directement le rayonnement solaire en électricité grâce à l'effet photovoltaïque dans des matériaux semi-conducteurs. Son potentiel à long terme est pratiquement illimité puisqu'il exploite une source d'énergie inépuisable : l'immense quantité de rayonnement solaire reçue par la Terre suffirait à couvrir largement la consommation énergétique mondiale. De plus, la production d'électricité photovoltaïque est parfaitement propre, sans aucune émission de gaz à effet de serre ni pollution associée.

Ainsi, l'amélioration continue des performances des technologies photovoltaïques tout en réduisant leurs coûts de production représente un enjeu technologique et industriel majeur. C'est un défi complexe qui mobilise d'intenses efforts de recherche à la fois fondamentale et appliquée à travers le monde.

### **1.3.Principes de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque**

Le fonctionnement des cellules photovoltaïques (voir figure 1.1a) repose sur l'effet photovoltaïque (voir Figure 1.1c) dans les matériaux semi-conducteurs, qui permet la conversion directe de l'énergie des photons incidents en énergie électrique exploitable. Nous allons détailler ici les différents mécanismes physiques mis en jeu.

#### **1.3.1. Structure d'une cellule photovoltaïque**

La structure standard d'une cellule photovoltaïque se compose des éléments suivants [2] (voir figure 1a) :

Substrat/Support: C'est la base sur laquelle la cellule est construite. Il peut être fait de différents matériaux comme le silicium, le verre ou un polymère selon le type de cellule. Il assure le support mécanique de la cellule.

Contact électrique arrière: Une fine couche conductrice, généralement en métal (aluminium, argent, etc.), déposée sur le substrat pour collecter les électrons.

Couche absorbante: C'est la couche semi-conductrice principale, généralement en silicium cristallin ou en un autre matériau photovoltaïque (tellure de cadmium, CIGS, etc.). C'est ici que les photons sont absorbés et que les paires électron-trou sont générées.

Jonction p-n: Une interface entre deux régions dopées différemment (p et n) de la couche absorbante, permettant la séparation des charges électriques (voir figure 1.1b).

Contact électrique avant: Une autre couche conductrice déposée sur la face avant, constituée généralement d'un réseau métallique transparent ou grille (oxyde d'étain dopé, etc.) pour collecter les trous.

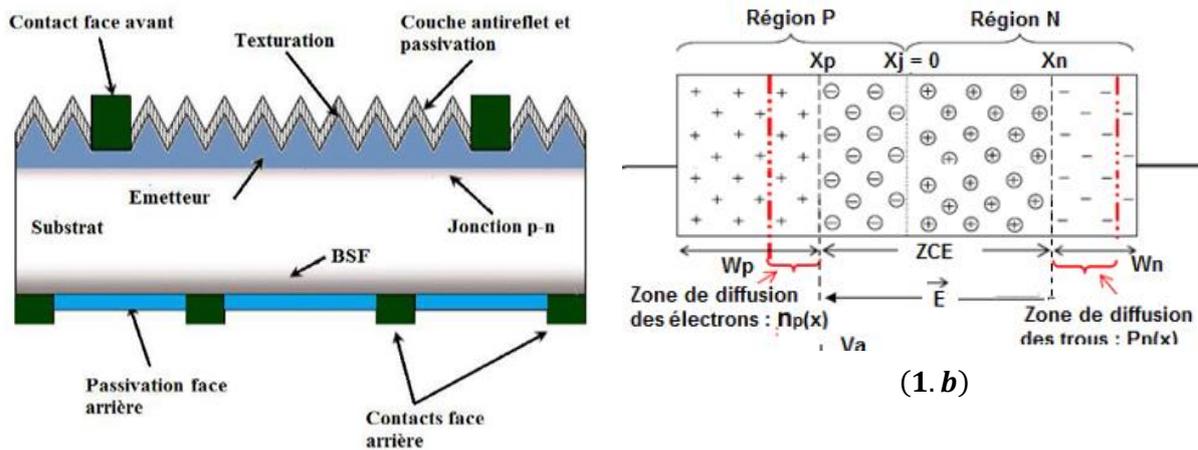
Revêtement antireflet: Une fine couche de nitrure de silicium ou d'oxyde de titane par exemple, pour minimiser les réflexions de lumière à la surface et augmenter l'absorption des photons.

Encapsulation: Des couches de protection (verre, polymères) pour protéger la cellule de l'environnement extérieur.

Cette structure de base peut varier légèrement selon les technologies (silicium cristallin, couches minces, multi-jonctions, etc.) mais les principaux composants restent un absorbant, une jonction p-n et des contacts pour extraire le courant généré.

La brique élémentaire d'une cellule photovoltaïque est la jonction p-n. La jonction p-n est formée par la mise en contact d'une région semi-conductrice dopée p, avec un excès de trous, et d'une région dopée n, avec un excès d'électrons. A l'interface entre ces deux régions, il se produit une diffusion des porteurs majoritaires : les électrons en excès de la région n diffusent vers la région p, tandis que les trous en excès de la région p diffusent vers la région n. Cette diffusion laisse derrière elle, du côté de la région n, les ions dopants donneurs fixes chargés positivement, et du côté de la région p, les ions dopants accepteurs fixes chargés négativement. Cette double couche d'ions dopants fixes de charges opposées crée alors un champ électrique interne très intense, dirigé de la région p vers la région n. Ce champ électrique repousse les quelques porteurs libres restants, créant ainsi une zone déplétée en porteurs mobiles de part et d'autre de la jonction, appelée zone de charge d'espace. C'est au sein de cette région appauvrie en porteurs, où subsiste le champ électrostatique interne, que se produira la séparation efficace des paires électron-trou photogénérées lors de l'absorption de photons.

Le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque repose sur plusieurs processus [2] que nous allons exposer dans les paragraphes suivants.



**Figure 1.1 :** a) Structure d'une cellule solaire b) Jonction PN c) Schéma de principe de la conversion photovoltaïque par une jonction p-n (exemple du silicium) [2]

### 1.3.2. Absorption des photons et génération des paires électron-trou

Lorsqu'un photon du rayonnement solaire incident frappe la surface de la cellule, plusieurs phénomènes peuvent se produire selon l'énergie du photon :

- Si l'énergie du photon  $E = h\nu$  (avec  $h$  la constante de Planck et  $\nu$  la fréquence) est inférieure à la largeur de la bande interdite  $E_g$  du semi-conducteur de la couche active ou absorbante, le photon n'est pas absorbé et traverse le matériau sans interagir.

- Si  $E = h\nu \geq E_g$ , le photon est absorbé et son énergie sert à promouvoir un électron de la bande de valence vers la bande de conduction, créant ainsi une paire électron-trou (charges négatives et charges positives).

L'absorption des photons incidents a principalement lieu dans les régions quasi-neutres dopées n et p autour de la ZCE, où se trouvent les porteurs majoritaires (électrons dans n, trous dans p).

Le coefficient d'absorption  $\alpha(\lambda)$  du semi-conducteur, qui représente l'inverse de la longueur d'absorption à une longueur d'onde  $\lambda$  donnée, détermine la profondeur à laquelle les photons pénètrent avant d'être absorbés. Il suit généralement une loi de puissance [3] :

$$\alpha(\lambda) = \frac{A(h\nu - E_g)^n}{h\nu} \quad (1.1)$$

où  $A$  est une constante et  $n$  un coefficient phénoménologique (souvent  $\sim 0,5$ ). Plus l'énergie des photons est supérieure à celle de la bande interdite, plus le coefficient d'absorption augmente. La détermination expérimentale de  $\alpha(\lambda)$  est cruciale pour le design optique des cellules.

La génération des porteurs de charges par absorption de photons suit alors l'équation [3] :

$$G(x) = \Phi_0(1 - R)\alpha(\lambda)e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (1.2)$$

où  $G(x)$  est le taux de génération à la profondeur  $x$  sous la surface,  $\Phi_0$  le flux incident de photons et  $R$  la réflectivité de la surface.

Ainsi, pour une absorption optimale des photons incidents, il faut à la fois minimiser la réflectivité des surfaces (traitements antireflets) et disposer d'une épaisseur de matériau absorbeur supérieure à la longueur d'absorption  $1/\alpha(\lambda)$  aux longueurs d'ondes désirées.

### 1.3.3. Séparation, transport et collecte des porteurs de charges

Le champ électrique présent dans la région de la jonction p-n permet alors de séparer ces porteurs de charges photogénérés. Les porteurs majoritaires (électrons dans la région n et trous dans la région p) sont rapidement entraînés vers les régions neutres respectives par le champ électrique et la diffusion. Quant aux porteurs minoritaires (trous dans la région n et électrons dans la région p), ils traversent la jonction p-n sous l'effet du champ électrique et de la diffusion. Une fois séparés, ces porteurs de charges, qu'ils soient majoritaires ou minoritaires, sont

transportés de manière efficace vers les contacts métalliques de la cellule grâce au champ électrique et aux gradients de concentration. Les électrons sont collectés par le contact métallique sur la face avant (région n) tandis que les trous sont collectés par le contact à l'arrière (région p). Ce flux de porteurs de charges collectés constitue le courant électrique généré par la cellule photovoltaïque.

Dans les semi-conducteurs cristallins de haute qualité comme le c-Si (silicium cristallin), la longueur de diffusion ( $L_{diff}$ ) peut atteindre plusieurs centaines de  $\mu\text{m}$  si les niveaux de défauts/impuretés sont faibles pour limiter les recombinaisons. Cela permet aux porteurs d'atteindre facilement les contacts. Dans d'autres matériaux comme les couches minces polycristallines, les faibles longueurs de diffusion ( $< 1\mu\text{m}$ ) requièrent une conception particulière des cellules pour collecter efficacement les charges [2].

#### 1.3.4. Génération du courant électrique

Une fois collectées par les contacts métalliques, les charges libres peuvent circuler dans un circuit électrique extérieur relié à la cellule, générant ainsi un courant électrique continu. Le mouvement des électrons du contact avant vers le contact arrière au sein du circuit crée une différence de potentiel, c'est-à-dire une tension électrique.

Chaque photon absorbé d'énergie suffisante produit en théorie une paire électron-trou, et donc potentiellement un électron dans le circuit extérieur. C'est ainsi que l'énergie lumineuse du soleil est convertie en énergie électrique extractible et utilisable.

La puissance électrique générée dépend de nombreux facteurs comme les matériaux, la structure de la cellule, la surface exposée, l'intensité et l'angle du rayonnement solaire incident.

#### 1.3.5. Caractéristique I(V) - Rendement de conversion

La caractéristique fondamentale d'une cellule photovoltaïque est sa courbe courant-tension  $I(V)$  sous éclairage, qui dépend des propriétés géométriques de la cellule (surface, épaisseur des couches) ainsi que des matériaux la constituant, comme le semi-conducteur, les dopages, les contacts métalliques, etc.

On peut démontrer que cette caractéristique est donnée par la relation [2] :

$$I = I_{ph} - I_0 \left( e^{\frac{qV}{nKT}} - 1 \right) - \frac{V}{R_{sh}} \quad (1.3)$$

Où  $I$  est le courant de sortie de la cellule,  $V$  la tension appliquée aux bornes de la cellule,  $I_{ph}$  le courant photogénéré,  $I_0$  le courant de saturation inverse de la jonction p-n,  $q$  la charge élémentaire de l'électron,  $n$  le facteur d'idéalité de la jonction (entre 1 et 2 typiquement),  $k$  la constante de Boltzmann,  $T$  la température absolue et  $R_{sh}$  la résistance shunt (représente les courants de fuite).

Cette équation montre que le courant total est la somme du courant photogénéré  $I_{ph}$  et du courant de diode (terme exponentiel représentant la recombinaison des porteurs), auquel on soustrait les pertes par la résistance shunt  $R_{sh}$ .

Les caractéristiques clés de cette la caractéristique I(V) sont : le courant de court-circuit  $I_{cc} = I_{ph} (V = 0)$ , le tension de circuit ouvert  $V_{CO} (I = 0)$  et le point de puissance maximal ( $V_{max}I_{max}$ ), dit également point de fonctionnement idéal.

Le rendement de conversion énergétique  $\eta$  est défini comme le rapport de la puissance électrique maximale fournie sur la puissance lumineuse incidente  $P_{inc}$  qui correspond à puissance maximale. On a donc [2] :

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{inc}} = \frac{FF \cdot V_{CO} \cdot I_{CC}}{P_{inc}} \quad (1.4)$$

avec :

$$FF = \frac{V_{max} \cdot I_{max}}{V_{OC} \cdot I_{CC}} \quad (1.5)$$

La quantité  $FF$  est le facteur de remplissage ("fill factor"). Il traduit les pertes résistives et de recombinaisons.

L'objectif est de maximiser  $\eta$  en optimisant  $I_{CC}$ ,  $V_{CO}$  et  $FF$  par le design optique, électrique et structural de la cellule.

### 1.3.6. Impact de la température

La température de fonctionnement impacte grandement les performances des cellules photovoltaïques via son influence sur les paramètres fondamentaux du semi-conducteur [4].

Tout d'abord, le gap optique diminue lorsque la température augmente. Cette diminution du gap entraîne un élargissement de la gamme spectrale absorbée, mais aussi une augmentation des recombinaisons et du courant de fuite inverse qui traverse la jonction p-n dans le sens inverse, c'est-à-dire du côté p vers le côté n, dû à la diffusion thermique des quelques électrons de la région p vers la région n, et des trous de la région n vers la région p.

La tension de circuit ouvert  $V_{OC}$  décroît également rapidement avec la température. Le courant de court-circuit  $J_{SC}$  varie quant à lui peu avec la température dans les matériaux à fort gap comme le c-Si où l'absorption gouverne sa valeur. En revanche, l'augmentation des recombinaisons fait décroître  $J_{SC}$  dans les semi-conducteurs à faible gap.

Au final, la combinaison de ces effets implique en général une diminution du rendement de conversion  $\eta$  avec la hausse de température.

#### **1.4. Différentes technologies de cellules photovoltaïques inorganiques**

Il existe aujourd'hui plusieurs grandes familles de technologies de cellules solaires inorganiques, basées sur différents matériaux semi-conducteurs absorbeurs. Chaque filière présente ses avantages, inconvénients et défis en termes de rendements de conversion, stabilité, coûts de production, maturité industrielle, etc. Nous allons passer en revue les principales d'entre elles.

##### **1.4.1. Cellules au silicium cristallin**

Les cellules en silicium cristallin représentent actuellement environ 90% du marché photovoltaïque mondial [5]. On distingue deux types:

###### Cellules en silicium monocristallin (c-Si):

- Fabriquées à partir d'une seule grande maille cristalline de silicium pur
- Rendements relativement élevés, allant jusqu'à 25% pour les meilleures
- Procédé de fabrication coûteux par croissance cristalline lente

###### Cellules en silicium multicristallin (mc-Si):

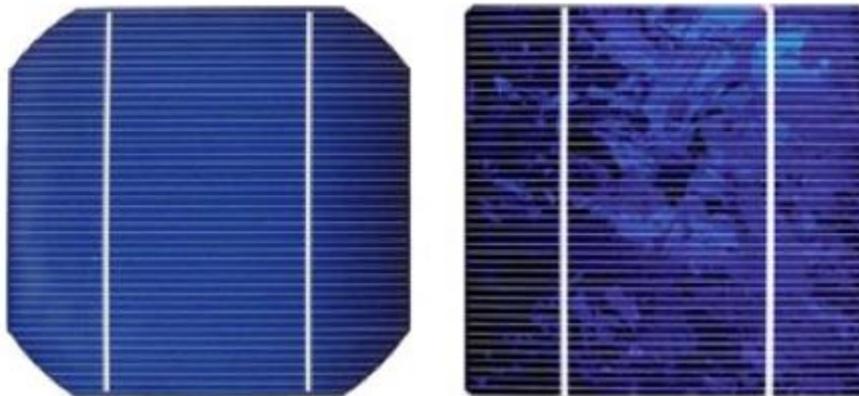
- Fabriquées par solidification contrôlée d'une fonte de silicium
- Rendements typiques de 16 à 22%

- Procédé plus rapide et moins coûteux que le monocristallin
- Présence de joints de grains qui facilitent la recombinaison des porteurs

Ces deux types sont représentés sur la Figure 2.1. La structure typique d'une cellule photovoltaïque en silicium cristallin est :

- Substrat en silicium monocristallin ou multicristallin
- Émetteur (région n+) - Fine couche dopée n en surface (quelques centaines de nm)
- Base (région p) - Corps principal du substrat dopé p (quelques centaines de  $\mu\text{m}$ )
- Région p+ à l'arrière (BSF - Back Surface Field) pour favoriser la collecte des trous

Le symbole « + » fait référence à un dopage très fort, c'est-à-dire, avec une forte concentration de dopants.



**Figure 1.2:** De gauche à droite : cellule monocristalline, polycristalline [5]

Les avantages du silicium cristallin sont sa grande maturité industrielle, sa stabilité à long terme et son abondance. Les inconvénients sont le coût élevé du matériau et des procédés, et l'épaisseur relativement grande nécessaire (quelques centaines de microns).

#### 1.4.2. Cellules en couches minces

Plutôt que d'utiliser d'épaisses tranches de silicium cristallin, les cellules en couches minces emploient des absorbeurs sous forme de films minces (quelques  $\mu\text{m}$  d'épaisseur) de semi-conducteurs à forts coefficients d'absorption comme :

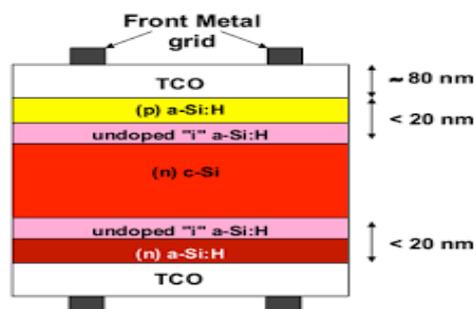
- Le silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H).

- Les alliages en couches minces de silicium amorphe et microcristallin (a-Si : H/ $\mu$ c-Si : H).
- Le tellure de cadmium (CdTe).
- Les composés  $\text{Cu}(\text{InGa})\text{Se}_2$  (CIGS) et  $\text{CuInSe}_2$  (CIS)

Avec de faibles quantités de matériau requises, cette approche permet de réduire considérablement les coûts de production par rapport au c-Si. Cependant, la qualité cristalline généralement moindre de ces absorbeurs en couches minces entraîne inévitablement des rendements plus faibles en raison des nombreux centres de recombinaison présents [6].

#### 1.4.2.1. Cellules au silicium amorphe (a-Si:H)

Les cellules au silicium amorphe (a-Si:H) sont une technologie de cellules photovoltaïques en couches minces basée sur une structure à hétérojonction p-i-n [7]. Leur fabrication peu coûteuse consiste à déposer des couches de quelques centaines de nanomètres d'épaisseur sur un substrat en verre ou plastique: un contact arrière transparent, une couche p en a-Si:H dopé, une fine couche intrinsèque i non dopée où se fait l'absorption des photons, une couche n dopée et un contact avant transparent (voir figure 1.3). Bien que leur rendement maximal en laboratoire puisse atteindre 13%, les modules commerciaux affichent généralement des rendements stabilisés inférieurs à 10% en raison de la dégradation initiale importante des performances. De plus, leur bande interdite élevée limite l'absorption des photons dans le rouge. Leur principal avantage reste leur très faible coût de production par dépôt rapide des couches minces, permettant une possible intégration sur substrats souples. Les cellules a-Si:H sont souvent utilisées en couches minces dans des empilements tandem ou triple-jonctions pour absorber la composante bleue du spectre solaire.



**Figure 1.3** : Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces au silicium amorphe [7]

### 1.4.2. Cellules à base de CdTe

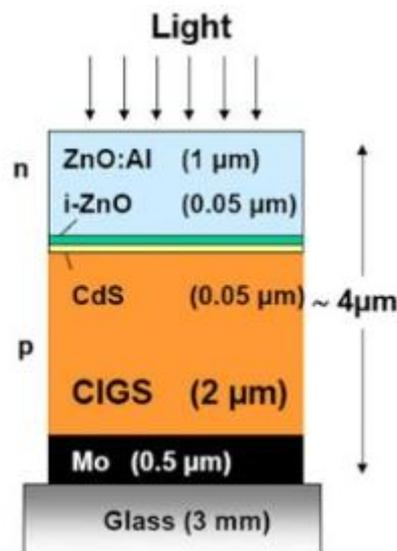
La structure de ces cellules comprend généralement un substrat en verre, une couche mince de TCO ( $\text{SnO}_2:\text{F}$ ) comme contact électrique avant transparent, une fine couche de CdS dopé n, une couche épaisse de 2 à 7  $\mu\text{m}$  de CdTe dopé p assurant l'absorption des photons, une couche de  $\text{SnO}_2$  fortement dopé comme contact arrière et une grille métallique pour la collecte des charges (voir figure 1.4) [8]. C'est une structure simple à hétérojonction CdS/CdTe formant une jonction p-n enterrée. Les cellules CdTe présentent d'excellentes performances avec des rendements records de 22,1% en laboratoire et supérieurs à 17% pour les modules commerciaux. Leurs coefficients d'absorption élevés permettent d'utiliser des couches de CdTe relativement minces. De plus, leur procédé de fabrication par dépôt rapide des couches minces en fait une technologie à bas coût. Cependant, la rareté du tellure, la toxicité du cadmium nécessitant un encapsulage soigné, et la stabilité à long terme sont des inconvénients à prendre en compte pour cette technologie photovoltaïque émergente.



**Figure 1.4** : Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces à base de CdTe [8]

### 1.4.2.3. Cellules CIGS et CIS

Les cellules CIGS ( $\text{Cu(InGa)Se}_2$ ) et CIS ( $\text{CuInSe}_2$ ) appartiennent également à la famille des cellules photovoltaïques en couches minces à hétérojonctions. Leur structure consiste généralement en un substrat verre ou plastique, un contact arrière en molybdène, une couche de CIGS ou CIS d'environ 1 à 3  $\mu\text{m}$  d'épaisseur constituant l'absorbeur de photons, une fine couche tampon en CdS ou  $\text{In}_2\text{S}_3$ , et un contact avant en TCO transparent (voir figure 1.5) [9]. Le matériau CIGS est un alliage quaternaire de cuivre, indium, gallium et sélénium, tandis que le CIS est un alliage ternaire de cuivre, indium et sélénium. Ces matériaux à forte absorption directe permettent d'atteindre d'excellentes performances avec des rendements records de 23,35% pour le CIGS et 22,9% pour le CIS en laboratoire. Leur dépôt à basse température par diverses techniques en fait également des technologies prometteuses pour des modules souples à bas coût. Cependant, la rareté de certains éléments comme l'indium et le gallium, ainsi que la présence potentiellement toxique de cadmium dans la couche tampon peuvent constituer des défis à surmonter.

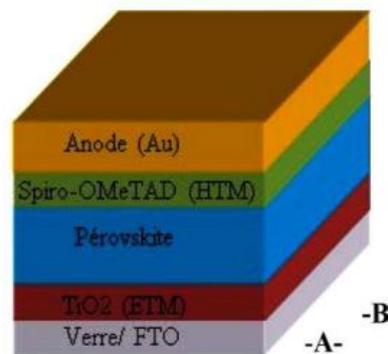


**Figure 1.5** : Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à couches minces CIGS [9]

### 1.4.3. Cellules pérovskites émergentes

Une nouvelle génération de cellules solaires basée sur des matériaux pérovskites hybrides organique-inorganique suscite un grand intérêt dans la recherche photovoltaïque. Leur structure typique consiste en une couche de pérovskite comme absorbeur de photons, généralement du  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ , déposée sur un oxyde métallique mésoporeux comme l'oxyde de titane, lui-même sur un substrat conducteur transparent. Un transport de trous, souvent une amine organique, est déposé par-dessus la pérovskite, suivi d'un contact métallique (voir figure 1.6) [10]. Les pérovskites présentent d'excellentes propriétés optoélectroniques comme de forts coefficients

d'absorption, des longueurs de diffusion élevées et la possibilité d'ajuster facilement leur bande interdite. En seulement quelques années, leur rendement de conversion a bondi de 3,8% en 2009 à 25,5% en 2022, rivalisant avec les meilleures technologies à base de silicium. Leurs atouts sont un processus de fabrication simple et peu coûteux ainsi qu'une possibilité d'intégration sur substrats souples. Néanmoins, des défis majeurs persistent concernant leur stabilité à long terme et l'utilisation de plomb toxique dans leur composition.

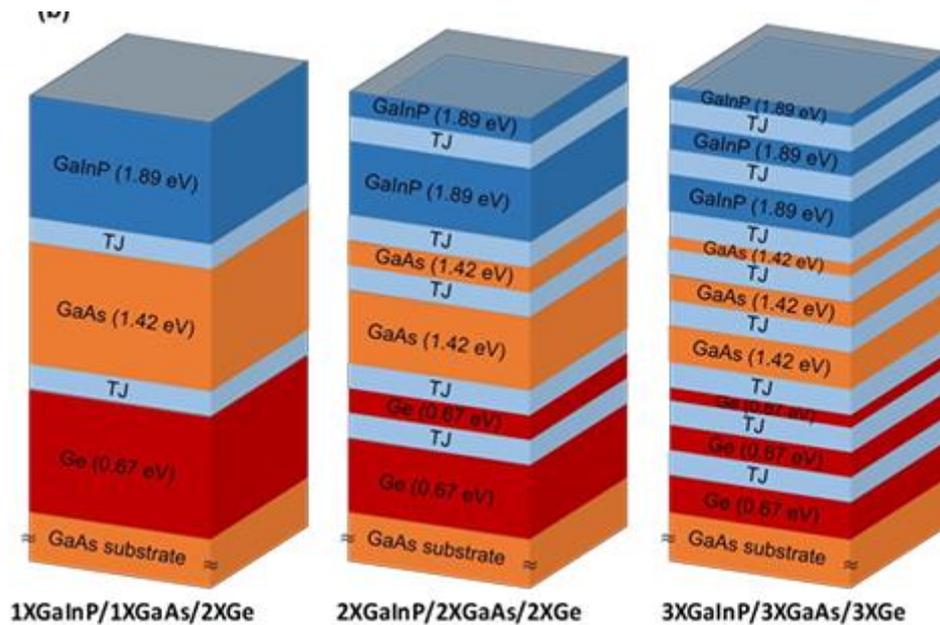


**Figure 1.6 :** Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque à pérovskites [10]

### 1.4.4. Cellules multi-jonctions à ultra-hauts rendements

Les cellules photovoltaïques multi-jonctions à ultra-hauts rendements représentent une avancée significative dans le domaine de l'énergie solaire. Ces cellules sont composées de multiples couches de semi-conducteurs empilées, chacune étant conçue pour absorber une partie spécifique du spectre solaire (voir figure 1.7) [11]. Cette conception innovante permet d'exploiter une gamme plus large de longueurs d'onde de la lumière solaire, augmentant ainsi l'efficacité de conversion de l'énergie solaire en électricité. Les rendements records atteints par ces cellules multi-jonctions dépassent les 45%, ce qui les rend particulièrement attrayantes pour des applications telles que les centrales solaires à concentration, les satellites et les systèmes

spatiaux. Bien que leur coût de fabrication soit élevé, leur efficacité supérieure compense cet inconvénient, en particulier dans les environnements où l'espace disponible est limité. Ces cellules multi-jonctions à ultra-hauts rendements ouvrent la voie à une exploitation plus efficace de l'énergie solaire et contribuent aux efforts visant à promouvoir les énergies renouvelables.



**Figure 1.7** : Schéma simplifié d'une cellule photovoltaïque GaInP/GaAs/Ge et leurs duplications reliées en série par des jonctions tunnel. [11]

### 1.5. Importance de l'optimisation optique

L'optimisation optique est une étape clé dans le développement de cellules solaires performantes. En effet, l'absorption efficace du rayonnement solaire est essentielle pour maximiser la génération des paires électron-trou et donc le photocourant et le rendement de la cellule. Dans cette section, nous allons voir les principaux leviers d'optimisation optique et leur impact sur les performances des dispositifs photovoltaïques.

Un premier paramètre important est l'épaisseur de la couche active [12]. Mathématiquement, la quantité de photons absorbés  $A$  dans un matériau d'épaisseur  $d$  suit la loi de Beer-Lambert :

$$A = 1 - e^{-\alpha d} \quad (1.6)$$

où  $\alpha$  est le coefficient d'absorption du matériau. Plus l'épaisseur  $d$  est grande, plus  $A$  se rapproche de 1, c'est-à-dire de l'absorption totale. Cependant, au-delà d'une certaine épaisseur optimale, les porteurs générés loin des interfaces risquent de se recombiner avant d'être collectés, diminuant le photocourant. Cette épaisseur optimale dépend du matériau et de sa longueur de diffusion des porteurs.

Un autre levier consiste à utiliser des matériaux présentant un coefficient d'absorption élevé sur un large domaine spectral, de façon à absorber un maximum de photons du spectre solaire [13]. Pour les cellules inorganiques traditionnelles comme le silicium cristallin, l'énergie du gap du matériau doit être sélectionnée de manière à couvrir la majeure partie du spectre solaire. Pour les cellules organiques ou à quantum dots, le choix du ou des semi-conducteurs utilisés est crucial afin de couvrir les domaines visibles et proche infrarouge.

## **1.6.Méthodes de modélisation optique des cellules solaires en couches minces**

La modélisation optique des empilements multicouches est cruciale pour comprendre et prédire les propriétés optiques des structures à couches minces telles que les cellules photovoltaïques [14]. Ces méthodes permettent de simuler la propagation des ondes électromagnétiques à travers les différentes couches et interfaces, en tenant compte des indices de réfraction complexes et des épaisseurs des matériaux. Dans cette section, nous allons explorer plusieurs quelques couramment utilisées pour la modélisation optique des cellules.

### **1.6.1. Méthode des matrices de transfert**

La méthode des matrices de transfert est une technique particulièrement adaptée pour modéliser les propriétés optiques des cellules photovoltaïques constitués de couches homogènes et isotropes [15,16,17]. Son principe repose sur une description matricielle de la propagation des ondes électromagnétiques à travers les différentes couches et les réflexions/transmissions aux interfaces.

Dans cette approche, chaque couche individuelle est représentée par une matrice de transfert qui décrit comment les amplitudes des ondes incidente et réfléchi d'un côté de la couche sont liées aux amplitudes des ondes transmise et réfléchi de l'autre côté. Cette matrice tient compte de l'épaisseur de la couche, de son indice de réfraction complexe et de la longueur d'onde de la lumière incidente.

Ensuite, pour modéliser l'empilement multicouche complet, on multiplie les matrices de transfert de toutes les couches dans l'ordre approprié. Cela donne une matrice de transfert globale qui relie les amplitudes des ondes incidente et réfléchie dans le milieu d'incidence aux amplitudes des ondes transmise et réfléchie dans le milieu de sortie.

À partir des éléments de cette matrice de transfert globale, il est alors possible de calculer les coefficients de réflexion et de transmission de l'empilement multicouche. Ces coefficients permettent d'obtenir des grandeurs mesurables expérimentalement telles que la réflectance et la transmittance de la structure.

L'avantage clé de la méthode des matrices de transfert réside dans sa simplicité de mise en œuvre et son efficacité de calcul pour les empilements multicouches simples. Cependant, elle peut devenir plus complexe et souffrir d'instabilités numériques lorsque les couches présentent des propriétés anisotropes, des gradients d'indice ou des épaisseurs très grandes par rapport à la longueur d'onde incidente.

### **1.6.2. Méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD)**

La méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) est une technique numérique puissante pour résoudre les équations de Maxwell dans le domaine temporel. Elle permet de simuler la propagation des ondes électromagnétiques dans des structures complexes, y compris les empilements multicouches, comme les cellules photovoltaïques [18].

Le principe de la FDTD consiste à discrétiser les équations de Maxwell dans l'espace et le temps, en utilisant des différences finies centrées pour approximer les dérivées spatiales et temporelles. Les champs électriques et magnétiques sont calculés alternativement sur des mailles décalées, en propageant les équations de Maxwell dans le temps.

L'avantage de la FDTD est sa capacité à modéliser des structures présentant des géométries complexes, des matériaux anisotropes, non linéaires ou dispersifs. Cependant, cette méthode peut être coûteuse en ressources de calcul, en particulier pour les simulations 3D ou impliquant un grand nombre de périodes d'onde.

### 1.6.3. Méthode des éléments finis (FEM)

La méthode des éléments finis (FEM) est une autre technique numérique couramment utilisée pour modéliser les propriétés optiques des empilements multicouches, comme les cellules photovoltaïques [19]. Contrairement à la FDTD qui résout les équations de Maxwell dans le domaine temporel, la FEM résout ces équations dans le domaine fréquentiel.

Le principe de la FEM consiste à diviser le domaine de calcul en éléments finis (typiquement des triangles ou des tétraèdres pour les simulations 3D), et à approximer les champs électromagnétiques sur ces éléments à l'aide de fonctions de base. Les équations de Maxwell sont ensuite projetées sur ces fonctions de base, conduisant à un système d'équations algébriques à résoudre.

L'avantage de la FEM est sa capacité à modéliser des structures présentant des géométries complexes et des matériaux anisotropes ou non linéaires. De plus, elle offre une bonne précision pour les simulations dans le domaine fréquentiel. Cependant, comme pour la FDTD, la FEM peut être coûteuse en ressources de calcul pour les simulations 3D ou à large bande spectrale.

Notons que d'autres méthodes sont également utilisées comme la méthode la méthode modale de Fourier (FMM) ou communément connue sous le nom de la méthode rigoureuse des ondes planes (RCWA) [20].

Parmi les différentes méthodes de modélisation optique présentées, la technique des matrices de transfert apparaît comme un choix judicieux pour modéliser les empilements multicouches constitués de couches homogènes et isotropes. Cette approche matricielle offre un bon compromis entre simplicité de mise en œuvre et précision des résultats. Nous allons présenter le formalisme mathématique de cette méthode dans le prochain chapitre.

## 2. Conclusion

Ce chapitre là on a établi les fondements théoriques et présente un état de l'art exhaustif. Il expose les bases du photovoltaïque, les diverses branches technologiques des cellules solaires inorganiques, ainsi que l'importance primordiale de l'optimisation optique. Les méthodes de modélisation optique des empilements multicouches sont ensuite exposées en détail, en mettant l'accent sur la théorie et le formalisme mathématique des matrices de transfert.

## **Chapitre 2**

# **Modélisation optique des milieux stratifiés par la méthode des matrices de transfert**

### **1. Introduction**

Ce chapitre pose les bases théoriques nécessaires pour modéliser rigoureusement la propagation de la lumière dans des empilements de couches minces, comme ceux rencontrés dans les cellules photovoltaïques. La compréhension fine du comportement optique de ces milieux stratifiés est en effet cruciale pour optimiser l'absorption de la lumière incidente dans la couche active et améliorer ainsi les performances des dispositifs.

Nous commencerons par quelques rappels fondamentaux sur l'optique électromagnétique dans les milieux diélectriques et conducteurs, et sur les lois de l'optique géométrique régissant les phénomènes de réflexion et de réfraction aux interfaces.

Nous introduirons ensuite le formalisme puissant des matrices de transfert optique, permettant de décrire la propagation de la lumière à travers des empilements multicouches de matériaux d'indices variés. Les équations fondamentales seront détaillées, en établissant les expressions des matrices de transfert caractéristiques d'une interface et d'une couche homogène. Le calcul des coefficients de réflexion, transmission et absorption à partir de ces matrices sera expliqué.

Enfin, nous montrerons comment combiner ces matrices élémentaires pour modéliser des milieux stratifiés multicouches de géométries complexes. Les atouts et limitations de cette approche matricielle seront discutés.

### **2. Rappels d'optique électromagnétique**

L'optique des milieux stratifiés fait intervenir les phénomènes de propagation, réflexion et transmission des ondes électromagnétiques aux interfaces entre différents matériaux. Il est donc essentiel de rappeler les lois fondamentales régissant ces phénomènes électromagnétiques.

Les équations de Maxwell constituent le socle de base de l'électromagnétisme classique. Elles décrivent de façon unifiée les champs électriques et magnétiques ainsi que leurs interactions avec la matière.

Dans un milieu matériel non magnétique, linéaire, isotrope et sans charges ni courants externes, elles prennent la forme :

Equation de Maxwell-Gauss pour l'électricité

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0 \quad (2.1)$$

Avec  $\vec{D}$  le vecteur déplacement électrique lié au champ électrique  $\vec{E}$  par la relation :

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} \quad (2.2)$$

Où  $\varepsilon_0$  est la permittivité du vide et  $\varepsilon_r$  la permittivité relative du milieu.

Equation de Maxwell-Gauss pour le magnétisme

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.3)$$

Avec  $\vec{B}$  l'induction magnétique, égale au champ magnétique  $\vec{H}$  dans les milieux non magnétiques.

Equation de Maxwell-Faraday (loi de Faraday)

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}} \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.4)$$

Exprimant que la variation temporelle du champ magnétique crée un champ électrique rotationnel.

Equation de Maxwell-Ampère

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}} \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.5)$$

Avec  $\vec{J}$  la densité de courant de conduction. Cette équation relie le rotationnel du champ magnétique aux courants et aux variations temporelles du déplacement électrique.

Dans le cadre de l'optique des milieux diélectriques sans charges ni courants ( $\vec{J} = \vec{0}$ ), ces équations se simplifient :

$$\operatorname{div} \vec{D} = 0 \quad (2.6)$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (2.7)$$

$$\overrightarrow{\operatorname{rot}} \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (2.8)$$

$$\overrightarrow{rotH} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (2.9)$$

On peut rechercher des solutions de ces équations sous la forme d'ondes planes harmoniques monochromatiques de pulsation  $\omega$  se propageant selon la direction ( $\vec{u}_z$ ) du référentiel du laboratoire ( $OXYZ$ ). Celles-ci s'écrivent alors sous la forme :

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0 e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.10)$$

$$\vec{B}(\vec{r}, t) = \vec{B}_0 e^{j(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \quad (2.11)$$

Avec  $\vec{k}$  le vecteur d'onde tel que  $k = \omega/c \sqrt{\epsilon_r}$  et  $c$  la célérité de la lumière dans le vide. Les grandeurs  $\vec{E}_0$  et  $\vec{B}_0$  représentent les amplitudes complexes des champs électrique et magnétique respectivement.

En injectant ces solutions dans les équations de Maxwell, on obtient les relations fondamentales liant les champs électriques et magnétiques :

$$\vec{k} \times \vec{E} = \omega \mu_0 \vec{H} \quad (2.12)$$

$$\vec{k} \times \vec{H} = \omega \epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} \quad (2.13)$$

Où  $\mu_0$  représente la perméabilité magnétique du vide.

Ces équations régissent entièrement la propagation des ondes électromagnétiques planes progressives et rétrogrades dans un milieu homogène caractérisé par sa permittivité relative  $\epsilon_r$ .

On peut montrer que les champs électriques et magnétiques sont nécessairement perpendiculaires entre eux et à la direction de propagation  $\vec{k}$ .

La résolution complète fait également apparaître les relations de passage entre les champs électriques et magnétiques et leurs amplitudes, via l'impédance intrinsèque du milieu :

$$\eta = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0 \epsilon_r}} \quad (2.14)$$

### **3. Formalise des matrices de Transfert Optique**

#### **3.1.Introduction**

Le formalisme des matrices de transfert est un outil puissant pour modéliser la propagation de la lumière à travers des milieux stratifiés, composés de plusieurs couches avec des indices de réfraction différents. Cette approche trouve de nombreuses applications dans l'analyse et la conception de dispositifs optiques multicouches tels que les revêtements antireflets, les filtres interférentiels, les miroirs diélectriques et les guides d'ondes.

Comparé aux méthodes rigoureuses de calcul électromagnétique, le formalisme des matrices de transfert offre une approche semi-analytique efficace pour obtenir des résultats précis avec un coût de calcul réduit. Il permet de déterminer les coefficients de réflexion, de transmission, ainsi que le champ électromagnétique à l'intérieur de la structure multicouche, en tenant compte des effets d'interférences et de polarisation.

Dans ce texte, nous explorerons en détail les fondements théoriques et les applications du formalisme des matrices de transfert pour les milieux stratifiés. Nous commencerons par présenter les équations de base de l'optique des milieux stratifiés, puis nous dériverons les expressions des matrices de transfert pour différentes configurations. Nous montrerons comment combiner ces matrices pour modéliser des empilements complexes et comment en déduire les principales grandeurs d'intérêt. Enfin, nous illustrerons l'utilisation de cette méthode à travers divers exemples pratiques.

#### **3.2.Équations fondamentales de l'optique des milieux stratifiés**

Avant d'aborder le formalisme des matrices de transfert, il est essentiel de poser les bases de l'optique des milieux stratifiés. Nous considérerons une structure composée de  $N$  couches séparées par des interfaces. Chaque couche  $i$  est caractérisée par son indice de réfraction  $n_i$  et son épaisseur  $d_i$ .

Dans le cadre de notre travail, nous allons considérer des couches planes, d'épaisseur constante, homogènes (propriétés optiques constantes dans le volume), isotropes (propriétés optiques identiques dans toutes les directions), non magnétiques (perméabilité égale à celle du vide), diélectriques, linéaires, non chargés et sans courants.

Nous allons également considérer des interfaces planes et parallèles entre les couches sans charges, ni courants surfaciques.

Ces conditions permettent d'appliquer simplement les équations de Maxwell pour calculer la propagation, la réflexion et la transmission des ondes d'une couche à l'autre.

Le champ électromagnétique dans chaque couche peut être décrit par deux ondes planes se propageant dans des directions opposées, une onde progressive et une onde rétrograde. Ce fait est essentiel pour prendre en compte les réflexions multiples entre les interfaces. L'onde incidente génère une onde réfléchie rétrograde à chaque interface. Il faut donc considérer les ondes se propageant dans les deux sens. De plus, comme nous allons le voir par la suite, pour pouvoir appliquer le formalisme des matrices de transfert qui relie les amplitudes des ondes de part et d'autre d'une couche, il est nécessaire d'écrire le champ sous la forme d'une combinaison linéaire d'ondes planes progressives et rétrogrades. Pour une onde plane progressive se propageant dans la direction (+z), le champ électrique s'écrit :

$$\vec{E}_i^+(z) = \begin{bmatrix} E_{i,p}^+ \\ E_{i,s}^+ \end{bmatrix} e^{j(k_{z,i}z - \omega t)} \quad (2.15)$$

où les indices  $p$  et  $s$  désignent les polarisations respectives parallèle ( $p$ ) et perpendiculaire ( $s$ ) au plan d'incidence. Les polarisations  $p$  et  $s$  font référence aux composantes du champ électromagnétique par rapport au plan d'incidence, dans le cas d'une onde électromagnétique réfléchie ou transmise à l'interface entre deux milieux :

- La polarisation  $p$  correspond à la composante du champ électrique parallèle au plan d'incidence (mode TM ou transverse magnétique). Par conséquent, le champ magnétique est perpendiculaire à ce plan.
- La polarisation  $s$  correspond à la composante du champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence (mode TE ou transverse électrique). Par conséquent, le champ magnétique est parallèle à ce plan.

La quantité  $k_{z,i}$  est la composante du vecteur d'onde selon  $z$ . Elle est donnée par la relation suivante :

$$k_{z,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \cos \theta_i \quad (2.16)$$

avec  $\theta_i$  l'angle de propagation dans la couche  $i$ , défini par rapport à la normale.

De manière similaire, pour l'onde rétrograde, on a :

$$\vec{E}_i^-(z) = \begin{bmatrix} E_{i,p}^- \\ E_{i,s}^- \end{bmatrix} e^{j(-k_{z,i}z - \omega t)} \quad (2.17)$$

Le champ total dans la couche  $i$  est la superposition de ces deux ondes :

$$\vec{E}_i(z) = \vec{E}_i^+(z) + \vec{E}_i^-(z) \quad (2.18)$$

Les amplitudes des champs  $E_{j,p}^\pm$  et  $E_{j,s}^\pm$  sont reliées par les conditions aux interfaces imposées par les équations de Maxwell. Ces conditions imposent la continuité des composantes tangentielles des champs  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  à chaque interface  $i/i + 1$  :

$$E_{i,t} = E_{i+1,t} \quad (2.19)$$

$$H_{i,t} = H_{i+1,t} \quad (2.20)$$

En écrivant les expressions générales de ces composantes tangentielles de part et d'autre d'une interface en fonction des amplitudes complexes des ondes progressives et rétrogrades, puis en appliquant les conditions de continuité, on obtient un système d'équations linéaires reliant ces amplitudes complexes entre les milieux adjacents.

C'est ce système d'équations linéaires qui peut alors être reformulé sous une forme matricielle compacte, faisant intervenir des matrices d'interface reliant les vecteurs d'amplitudes complexes de part et d'autre de l'interface.

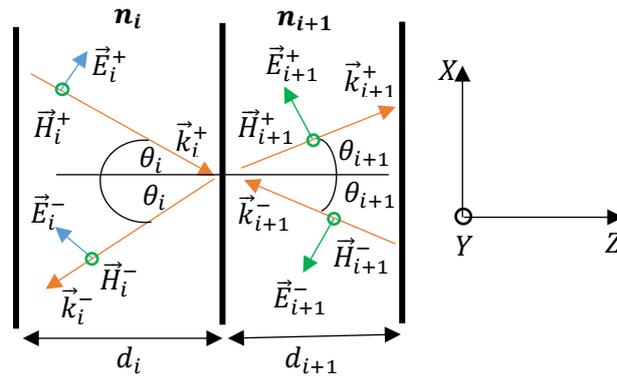
Ce formalisme matriciel sera ensuite généralisé au cas complet d'une structure multicouche en introduisant les matrices de propagation dans chaque couche et en combinant matrices d'interface et de propagation. Mais les conditions de continuité sur les composantes tangentielles de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$  restent à la base de la dérivation de toutes ces matrices.

Avant de développer le formalisme des matrices de transfert optique pour les structures multicouches, nous allons décrire la géométrie de ces structures :

Le plan qui contient les couches est le plan (XY). L'axe Z est la direction de propagation de l'onde, perpendiculaire aux interfaces planes entre les couches. Chaque couche s'étend de manière uniforme dans les directions X et Y. Les interfaces entre les couches successives sont donc des plans parallèles au plan (XY). Le plan (XZ) est appelé le plan d'incidence, car il contient la direction de propagation Z et la composante selon X du vecteur d'onde. Les grandeurs électromagnétiques (champs  $\vec{E}$ ,  $\vec{H}$  et le vecteur d'onde  $\vec{k}$ ) varient en fonction de Z mais sont invariantes le long des directions X et Y à l'intérieur d'une même couche.

Il est également essentiel de prendre en compte des composantes des champs électrique et magnétique qui interviendront dans le formalisme des matrices de transfert optique. Selon la géométrie que nous avons définie :

Pour une polarisation p (TM), on considère  $E_z$  et  $H_y$  comme composantes non nulles de  $\vec{E}$  et  $\vec{H}$ . Pour une polarisation s (TE), on considère  $E_y$  et  $H_z$  comme composantes non nulles. Ce sont les amplitudes complexes de ces 4 composantes ( $E_z, H_y, E_x, H_z$ ) qui sont propagées à travers les matrices de transfert.



**Figure 2.1 :** Représentation des champs électromagnétiques et vecteurs d'onde dans deux couches successives d'une structure multicouche dans le cas d'une polarisation p

La figure 2.1 représente deux couches successives  $i$  et  $i + 1$  d'une structure multicouche optique. La couche  $i$  a un indice de réfraction  $n_i$  et une épaisseur  $d_i$ , tandis que la couche  $i + 1$  a un indice  $n_{i+1}$  et une épaisseur  $d_{i+1}$ . La figure montre également l'orientation relative de ces vecteurs  $\vec{E}$ ,  $\vec{H}$  et  $\vec{k}$  dans les deux couches successives par rapport au repère  $(OXYZ)$ , ainsi que les angles  $\theta_i$  et  $\theta_{i+1}$  que fait la direction de propagation avec la normale aux interfaces dans chaque couche.

Cette représentation schématique permet de bien visualiser la géométrie et les grandeurs électromagnétiques intervenant dans le formalisme des matrices de transfert appliqué à ce type de structures multicouches planes. Dans les prochaines sections, nous allons utiliser l'approche de POCHI Yeh [1] pour le formalisme des matrices de transfert optique.

### 3.3. Matrices de transfert pour une interface

Considérons d'abord une simple interface plane séparant deux milieux semi-infinis d'indices de réfraction  $n_1$  et  $n_2$  (voir figure 2.2).

Pour déterminer les matrices de transfert à une interface plane séparant deux milieux d'indices optiques différents, on écrit tout d'abord les expressions générales des champs électrique  $\vec{E}$  ou magnétique  $\vec{H}$  de part et d'autre de l'interface. Ces expressions font intervenir les amplitudes complexes des ondes progressives (se propageant vers l'avant) et rétrogrades (se propageant vers l'arrière) dans chaque milieu. Ensuite, on applique les conditions de continuité imposées par les équations de Maxwell sur les composantes tangentielles de ces champs à la traversée de l'interface. Cela signifie que les composantes  $E_z$  et  $H_y$  (pour la polarisation p) ainsi que  $E_x$  et  $H_z$  (pour la polarisation s) doivent être continues lors du passage d'un milieu à l'autre. En injectant les expressions générales des champs dans ces conditions de continuité, on obtient alors un système de deux équations linéaires reliant les amplitudes complexes des ondes incidentes, réfléchies et transmises à l'interface pour chaque polarisation. On peut alors réécrire ce système sous une forme matricielle compacte, faisant apparaître une matrice 2x2 qui relie les vecteurs d'amplitudes complexes des ondes de part et d'autre de l'interface. Cette matrice 2x2 est appelée la matrice de transfert à l'interface. Ses éléments dépendent des coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel qui caractérisent le comportement de l'interface optique vis-à-vis de la réflexion et de la transmission.

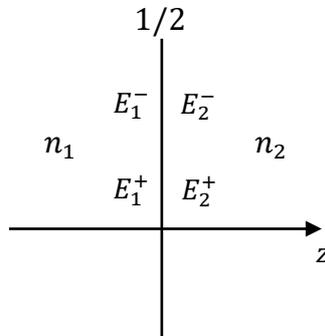


Figure 2.2 : Champs électriques de part et d'autre d'une interface

Les amplitudes des champs électriques de part et d'autre de l'interface 1/2 sont reliées par les relations suivantes :

En polarisation p (parallèle) :

$$\begin{bmatrix} E_{1,p}^+ \\ E_{1,p}^- \end{bmatrix} = \frac{1}{t_{p,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{p,1/2} \\ r_{p,1/2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2,p}^+ \\ E_{2,p}^- \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

Et en polarisation s (perpendiculaire) :

$$\begin{bmatrix} E_{1,s}^+ \\ E_{1,s}^- \end{bmatrix} = \frac{1}{t_{s,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{s,1/2} \\ r_{s,1/2} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{2,s}^+ \\ E_{2,s}^- \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

Où  $r_{p,1/2}$ ,  $r_{s,1/2}$ ,  $t_{p,1/2}$  et  $t_{s,1/2}$  sont les coefficients de Fresnel, qui correspondent aux coefficients de réflexion et de transmission, respectivement. Rappelons que le coefficient de réflexion  $r$  représente le rapport entre l'amplitude de l'onde réfléchie et l'amplitude de l'onde incidente. Il quantifie donc la proportion d'intensité de l'onde incidente qui est réfléchie à l'interface. Par contre, le coefficient de transmission  $t$  représente le rapport entre l'amplitude de l'onde transmise et l'amplitude de l'onde incidente. Il quantifie donc la proportion d'intensité de l'onde incidente qui est transmise dans le second milieu. On montre que les coefficients de Fresnel sont définis par :

$$r_{p,1/2} = \frac{n_2 \cos \theta_1 - n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (2.23)$$

$$r_{s,1/2} = \frac{n_1 \cos \theta_1 - n_2 \cos \theta_2}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (2.24)$$

$$t_{p,1/2} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2} \quad (2.25)$$

$$t_{s,1/2} = \frac{2n_1 \cos \theta_1}{n_1 \cos \theta_1 + n_2 \cos \theta_2} \quad (2.26)$$

où  $\theta_1$  et  $\theta_2$  sont les angles de propagations dans les milieu 1 et 2 par rapport à la normale. Ces angles sont reliés par la loi de Snell-Descartes :

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2 \quad (2.27)$$

On a défini ainsi deux matrices :

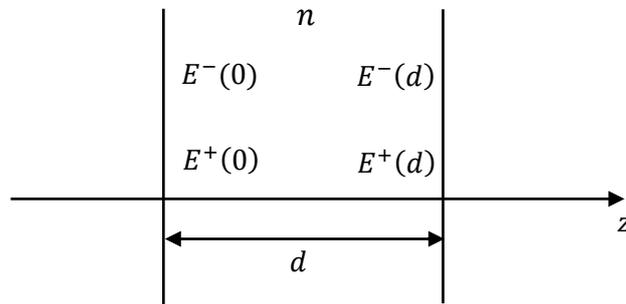
$$M_{p,1/2} = \frac{1}{t_{p,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{p,1/2} \\ r_{p,1/2} & 1 \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

$$M_{s,1/2} = \frac{1}{t_{s,1/2}} \begin{bmatrix} 1 & r_{s,1/2} \\ r_{s,1/2} & 1 \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

Les matrices  $M_{p,1/0}$  et  $M_{s,1/0}$  sont les matrices de transfert de l'interface pour les polarisations p et s respectivement. Elles caractérisent complètement le comportement de l'interface 1/0 vis-à-vis de la propagation des ondes électromagnétiques. Cette matrice permet de relier les amplitudes des champs électromagnétiques de part et d'autre d'une interface diélectrique plane.

### 3.4. Matrices de transfert pour une couche homogène

Pour obtenir les matrices de propagation  $P$  à travers une couche homogène d'indice de réfraction  $n$  et d'épaisseur  $d$ , on commence par écrire les expressions générales du champ électrique  $\vec{E}$  ou du champ magnétique  $\vec{H}$  dans cette couche, en considérant les ondes se propageant dans les deux sens. Ces expressions, données dans le paragraphe (2.1), font intervenir les amplitudes complexes des ondes progressives et rétrogrades, ainsi que le terme de propagation de phase représente la composante selon  $z$  du vecteur d'onde. On évalue ensuite ces expressions des champs à l'entrée ( $z = 0$ ) et à la sortie ( $z = d$ ) de la couche. Cela permet de relier les vecteurs d'amplitudes  $[E^+(d), E^-(d)]$  et  $[E^+(0), E^-(0)]$  à l'entrée et la sortie par une matrice de passage (voir figure 2.3). La forme spécifique de cette matrice est alors obtenue en identifiant terme à terme les coefficients des équations reliant les amplitudes à l'entrée et la sortie. On trouve ainsi les expressions des matrices de propagation, faisant intervenir les termes qui décrivent le déphasage accumulé lors de la propagation sur la distance  $d$  à travers un milieu d'indice  $n$ .



**Figure 2.3 :** Champs électriques de à l'intérieur d'une couche

On montre alors que La relation de transfert s'écrit sous la forme matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix} E^+(0) \\ E^-(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi & j\psi \\ j\psi & \phi^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E^+(d) \\ E^-(d) \end{bmatrix} \quad (2.30)$$

Où nous avons introduit la matrice :

$$P = \begin{bmatrix} \phi & j\psi \\ j\psi & \phi^* \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

dite matrice de propagation, où  $\phi^*$  est le complexe conjugué de  $\phi$ . Cette matrice décrivant la propagation à travers une couche homogène d'épaisseur  $d$ .

Les quantités  $\phi$  et  $\psi$  sont des coefficients dépendant de la polarisation. Ils représentent les déphasages longitudinal  $\phi_i$  et transverse  $\psi$  en polarisation p et s dans la couche :

$$\phi = e^{jk_z d} \cos(k_x d) \quad (2.32)$$

$$\psi = \begin{cases} n^2 \cos \theta \sin(k_x d) & \text{pour une polarisation p} \\ \cos \theta \sin(k_x d) & \text{pour une polarisation s} \end{cases}$$

où  $k_x$  et  $k_z$  sont les composantes transverse et longitudinale du vecteur d'onde dans la couche, en d'autres termes, dans le plan perpendiculaire au plan d'incidence. L'angle  $\theta$  est l'angle de propagation dans la couche par rapport à la normale, déterminé par les lois de Snell-Descartes à l'interface d'entrée. Cet angle  $\theta$  définit les composantes  $k_x$  et  $k_z$  du vecteur d'onde dans la couche. La composante est donnée par la relation (2.32) et la composante est donnée par la relation :

$$k_{x,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \sin \theta_i \quad (2.33)$$

Dans la matrice de propagation, il est utile de préciser que :

- Le terme  $e^{jk_z d}$  dans la matrice représente le déphasage accumulé lors de la propagation sur une épaisseur  $d$  selon  $z$ . Ce terme tient compte de l'indice  $n$  de la couche, qui modifie la phase de l'onde par rapport au vide. Si la couche est absorbante,  $k_z$  est complexe avec une partie imaginaire traduisant l'absorption. Le terme de phase devient alors aussi complexe.
- Le terme  $\psi$  en sinus et cosinus décrit la variation latérale de l'amplitude dans la couche d'épaisseur, liée à  $k_x$ . Si la couche est absorbante,  $\psi$  acquiert aussi une partie imaginaire traduisant l'atténuation latérale.

Le déphasage transverse  $\psi$  pour les polarisation s et p s'annule dans certaines conditions particulières:

- Pour une incidence normale (angle d'incidence  $\theta = 0$ ),  $\psi = 0$  quelle que soit la couche.
- Pour des interfaces planes (pas de changement d'indice latéral  $k_x = 0$ ),  $\psi = 0$  quel que soit l'angle.

Dans ce cas, la matrice de propagation se réduit à la forme suivante :

$$P = \begin{bmatrix} \phi & 0 \\ 0 & \phi^* \end{bmatrix} \quad (2.34)$$

Avec :

$$\phi = e^{jk_z d} \quad (2.35)$$

### 3.5. Milieux stratifiés multicouches

Maintenant que nous avons défini les matrices de transfert pour une interface et une couche homogène, nous pouvons les combiner pour modéliser des structures multicouches arbitraires.

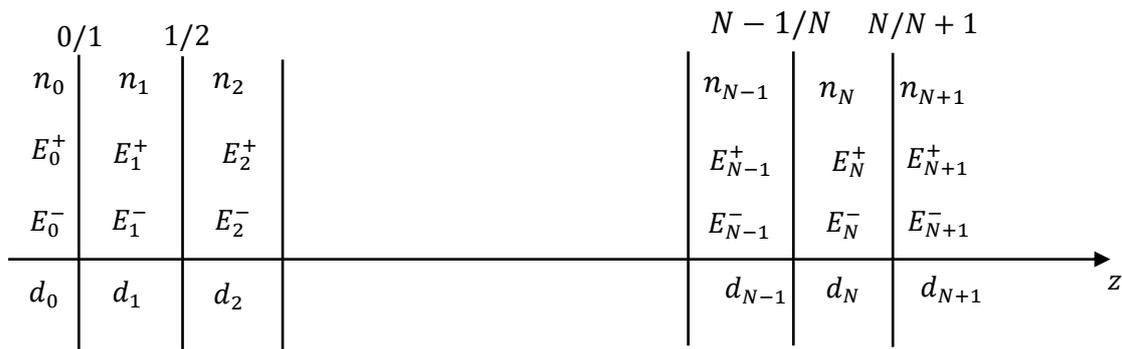
Soit une structure plane constituée de  $N$  couches d'indices  $n_1, n_2, \dots, n_N$  séparées par  $N + 1$  interfaces planes et parallèles. On considère une onde plane arrivant avec un angle d'incidence  $\theta_0$  sur la première interface (voir figure 2.4).

Dans chaque milieu  $i$  d'indice  $n_i$ , l'onde se propage selon deux composantes :

- Une onde plane progressive d'amplitude  $E_i^+$  se propageant dans le sens des  $z$  croissants
- Une onde plane rétrograde d'amplitude  $E_i^-$  se propageant dans le sens des  $z$  décroissants

À chaque interface  $i/i + 1$ , ces deux ondes vont donner naissance à une onde réfléchie dans le milieu  $i$  et une onde transmise dans le milieu  $i + 1$ , selon les coefficients de Fresnel définis précédemment. Donc, la propagation de l'onde de la première à la dernière interface fait intervenir les successions de :

- Transmissions/réflexions aux interfaces (matrices  $M_{i/i+1}$ )
- Propagations dans les couches (matrices  $P_i$ )



**Figure 2.4 :** Champs électriques dans une structure multicouche

Finalement, les amplitudes de l'onde à la première interface et transmise après la dernière interface sont reliées par la relation suivante :

$$\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} E_{N+1}^+ \\ E_{N+1}^- \end{bmatrix} \quad (2.36)$$

La matrice de transfert  $M$  représente le produit de l'ensemble des matrices caractéristiques pour tout l'empilement :

$$M = M_{0/1} P_1 M_{1/2} P_2 \dots \dots M_{N/N+1} = M_{0/1} \prod_{i=1}^N M_{i/i+1} P_i = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

Elle contient l'ensemble des informations sur la structure stratifiée (indices, épaisseurs, angles) et permet de calculer les amplitudes complexes résultantes des ondes réfléchié et transmise. Rappelons que l'ordre de multiplication est primordial, en commençant toujours par la première interface et en remontant vers les autres couches et interfaces dans l'ordre.

Dans la relation (2.37),  $P_i$  est la matrice de transfert de propagation de la  $i^{\text{ème}}$  couche,  $M_i$  la matrice de transfert de la  $i^{\text{ème}}$  interface et  $M_0$  la matrice de transfert pour l'interface d'entrée (air/couche1) pour initialiser la propagation des champs incidents. Ces trois matrices sont données par les expressions suivantes :

$$M_{i/i+1} = \frac{1}{t_{i/i+1}} \begin{bmatrix} 1 & r_{i/i+1} \\ r_{i/i+1} & 1 \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

$$P_i = \begin{bmatrix} \phi_i^* & j\psi_i \\ j\psi_i & \phi_i^* \end{bmatrix} \quad (2.39)$$

$$M_0 = \frac{1}{t_0} \begin{bmatrix} 1 & r_0 \\ r_0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.40)$$

Les coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel en polarisation  $p$  et  $s$  à l'interface  $i/i + 1$  sont donnés par les relations suivantes :

$$r_{i/i+1,p} = \frac{n_{i+1} \cos \theta_i - n_i \cos \theta_{i+1}}{n_{i+1} \cos \theta_i + n_i \cos \theta_{i+1}} \quad (2.41)$$

$$r_{i/i+1,s} = \frac{n_i \cos \theta_i - n_{i+1} \cos \theta_{i+1}}{n_i \cos \theta_i + n_{i+1} \cos \theta_{i+1}} \quad (2.42)$$

$$t_{i/i+1,p} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_{i+1} \cos \theta_i + n_i \cos \theta_{i+1}} \quad (2.43)$$

$$t_{i/i+1,s} = \frac{2n_i \cos \theta_i}{n_i \cos \theta_i + n_{i+1} \cos \theta_{i+1}} \quad (2.44)$$

où  $n_i$  Indice de réfraction du milieu  $i$  et  $\theta_i$  l'angle de propagation dans la couche  $i$  défini par rapport à la normale. Les déphasages longitudinal  $\phi_i$  et transverse  $\psi_i$  en polarisation  $p$  et  $s$  dans la couche  $i$  sont donnés par les équations suivantes :

$$\phi_i = e^{jk_{z,i}d_i} \cos(k_{x,i}d_i) \quad (2.45)$$

$$\psi_i = \begin{cases} n_i^2 \cos \theta_i \sin(k_{x,i}d_i) & \text{pour une polarisation } p \\ \cos \theta_i \sin(k_{x,i}d_i) & \text{pour une polarisation } s \end{cases} \quad (2.46)$$

où  $d_i$  est l'épaisseur de la couche  $i$ ,  $\lambda$  la longueur d'onde de l'onde électromagnétique incidente et  $k_{x,i}$  et  $k_{z,i}$  les composantes transverse et longitudinale du vecteur d'onde dans la couche  $i$ . Le vecteur d'onde  $k_{z,i}$  est donné par la relation (2.45) et le vecteur d'onde  $k_{x,i}$  est défini par la relation :

$$k_{x,i} = \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right) n_i \sin \theta_i \quad (2.47)$$

Le déphasage transverse  $\psi_i$  pour les polarisation  $s$  et  $p$  s'annule dans les cas d'une incidence normale (angle d'incidence  $\theta_i = 0$ ), et pour des interfaces planes (pas de changement d'indice latéral  $k_{x,i} = 0$ ), Dans ces cas, la matrice de propagation se réduit à la forme suivante :

$$P_i = \begin{bmatrix} \phi_i & 0 \\ 0 & \phi_i^* \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

Avec :

$$\phi_i = e^{jk_{z,i}d_i} \quad (2.49)$$

### 3.6.Coefficient de réflexion, transmission et d'absorption

Une fois la matrice  $M$  connue, on peut en déduire les coefficients de réflexion, transmission et absorption de la structure complète, pour chaque polarisation.

Le coefficient de réflexion en amplitude  $r$  se déduit simplement des coefficients de la matrice  $M$  comme suit :

$$r = \left. \frac{E_0^-}{E_0^+} \right|_{E_{N+1}^- = 0} = \frac{M_{21}}{M_{11}} \quad (2.50)$$

La condition  $E_{N+1}^- = 0$  explicite le fait qu'il n'y a pas d'onde réfléchie après la dernière interface. Le coefficient de transmission  $t$  est obtenu en inversant la première ligne de  $M$ :

$$t = \left. \frac{E_{N+1}^+}{E_0^+} \right|_{E_{N+1}^- = 0} = \frac{1}{M_{11}} \quad (2.51)$$

À partir de ces coefficients, on peut déduire la réflectance  $R$ , la transmittance  $T$  de la structure comme suit :

$$R = |r|^2 \quad (2.52)$$

$$T = \frac{n_{N+1} \cos \theta_{N+1}}{n_0 \cos \theta_0} |t|^2 \quad (2.53)$$

Cette expression de  $T$  suppose que les milieux d'entrée et de sortie de la structure sont sans perte.

Concernant l'absorbance, elle découle du principe de conservation de l'énergie et elle est donnée par la relation suivante :

$$A = 1 - R - T \quad (2.54)$$

Rappelons que la réflectance et la transmittance expriment respectivement la fraction de l'intensité lumineuse incidente qui est réfléchiée et transmise la structure multicouche. Ce sont des grandeurs sans dimensions qui varient entre 0 et 1. Ils peuvent être considéré comme des coefficients de réflexion et de transmission en énergie ou puissance.

Les quantités  $R, T$  et  $A$  décrivent le comportement optique de la structure multicouche pour une longueur d'onde et un angle d'incidence donnés.

### 3.7. Distribution du champ électromagnétique

Au-delà des coefficients globaux, le formalisme des matrices de transfert permet également de calculer la distribution détaillée du champ électromagnétique à l'intérieur de la structure.

En partant des conditions aux limites à l'interface d'entrée ( $z = 0$ ) :

$$\begin{bmatrix} E_0^+ \\ E_0^- \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ r \end{bmatrix} \quad (2.55)$$

On peut propager cette condition à travers chaque couche  $i$  successivement :

$$\begin{bmatrix} E_i^+ \\ E_i^- \end{bmatrix} = P \begin{bmatrix} E_{i-1}^+ \\ E_{i-1}^- \end{bmatrix} \quad (2.56)$$

Jusqu'à obtenir l'amplitude des champs aux interfaces désirées. Cela permet par exemple de visualiser la formation d'ondes stationnaires à l'intérieur des couches ou d'étudier les effets de couplage entre couches minces.

Notons enfin que la méthode des matrices de transfert optique peut être étendue pour inclure des milieux absorbants avec des indices complexes. Dans ce cas, ces derniers s'écrivent sous la forme :

$$\tilde{n}_i = n_i - j\kappa_i \quad (2.57)$$

où  $\kappa_i$  est le coefficient d'extinction lié au coefficient d'absorption  $\alpha_i$  par la relation suivante :

$$\kappa_i = \frac{\alpha_i \lambda}{4\pi} \quad (2.58)$$

Ainsi, pour un milieu absorbant, La partie réelle  $n$  représente la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu, tandis que la partie imaginaire  $\kappa$  est liée à l'absorption du milieu.

#### **4. Conclusion**

Le deuxième chapitre se focalise sur la mise en place des fondements théoriques nécessaires pour représenter de manière précise la propagation de la lumière dans les empilements de couches minces des cellules photovoltaïques. Une fois que l'on a rappelé l'optique électromagnétique et géométrique, on introduit le formalisme des matrices de transfert optique qui décrivent la propagation à travers des multicouches. On présente en détail les équations fondamentales, les expressions des matrices et le calcul des coefficients optiques. On présente ensuite la modélisation de milieux stratifiés multicouches complexes en utilisant une combinaison de matrices élémentaires.

## **Chapitre 3**

### **Simulations numériques et optimisation optique de cellules solaires en couches minces de CdTe**

#### **1. Introduction**

Ce dernier chapitre est dédié à la simulation de la réponse optique de nos structures multicouches à base de cellules solaires en couches minces de CdTe. Dans ce cadre, nous avons développé un programme informatique en Python basé sur la méthode de la matrice de transfert, permettant de calculer rapidement l'effet de différents paramètres opto-géométriques tels que l'épaisseur des couches, la polarisation et l'angle d'incidence de la lumière. Nous avons élaboré un algorithme détaillé pour implémenter cette méthode matricielle, en tenant compte des indices de réfraction complexes des différents matériaux constituant la cellule. Cet outil numérique nous a permis de simuler les spectres de réflexion, transmission et absorption de nos structures, et d'étudier l'influence de paramètres clés comme l'épaisseur de la couche active en CdTe, la polarisation et l'angle d'incidence sur ces spectres. Ensuite, nous avons analysé en détail la dépendance et l'impact de ces paramètres opto-géométriques sur le coefficient d'absorption  $A$  de la couche active, grandeur cruciale pour l'efficacité de conversion photovoltaïque. Les résultats des simulations sont présentés et discutés à travers différentes représentations graphiques. Nous abordons également des pistes d'optimisation des structures et donnons quelques exemples d'applications potentielles de ces cellules multicouches à base de CdTe dans le domaine du photovoltaïque.

#### **2. Algorithme et programme de Calcul**

L'implémentation de la méthode des matrices de transfert pour modéliser la réponse optique des structures multicouches nécessite le développement d'un algorithme robuste et efficace et l'utilisation d'un langage de programmation scientifique puissant.

Pour la mise en œuvre numérique de la méthode de la matrice de transfert, nous avons opté pour l'utilisation de Python comme langage de programmation. Ce choix a été motivé par plusieurs facteurs. D'une part, Python dispose de bibliothèques scientifiques puissantes telles que NumPy et SciPy qui offrent un large éventail de fonctionnalités pour le calcul numérique

et le traitement des données. Ces bibliothèques fournissent des outils performants pour manipuler les matrices, résoudre les systèmes d'équations et effectuer des opérations mathématiques avancées, indispensables à notre modèle.

D'autre part, Python bénéficie de la bibliothèque Matplotlib, une référence en matière de visualisation de données scientifiques, qui nous a permis de représenter aisément les spectres. Les différentes étapes de l'algorithme à implémenter dans PYTHON, conformément à la théorie développée dans le chapitre 2 sont les suivantes :

- Initialisation des paramètres d'entrée : indices de réfraction, épaisseurs des couches, longueur d'onde, angle d'incidence, polarisation (TE ou TM).
- Calcul de l'angle d'incidence pour chaque interface en utilisant les lois de Snell-Descartes.
- Pour chaque interface :
  - Calcul des coefficients de Fresnel ( $r_{i,i+1}$ ,  $t_{i,i+1}$ ) pour les polarisations  $s$  et  $p$ .
  - Détermination de la matrice interface  $M_{i,i+1}$  à partir des coefficients de Fresnel.
- Pour chaque couche : détermination de la matrice de propagation  $P_i$  en fonction de l'épaisseur et du vecteur d'onde dans la couche. Cette étape sous-entend le calcul du vecteur d'onde dans chaque couche.
- Calcul de la matrice de transfert globale  $M$  de la structure en effectuant le produit matriciel des matrices interfaces et propagation dans l'ordre.
- Déduction des coefficients de réflexion  $r$  et de transmission  $t$  complexes à partir des éléments de la matrice  $M$  globale.
- Calcul des coefficients de réflexion  $R$ , de transmission  $T$  et d'absorption  $A$  en intensité.
- Répéter les étapes précédentes pour un balayage en longueur d'onde pour les deux polarisations TE et TM.
- Représentation graphique des spectres de  $R$ ,  $T$  et  $A$  en fonction de la longueur d'onde pour les polarisations TE et TM.

Ce schéma général peut être adapté en fonction des besoins spécifiques de la simulation, comme l'ajout de boucles sur d'autres paramètres (angles d'incidence, épaisseurs de couches, etc.) pour réaliser des études paramétriques.

### **3. Données d'entrée**

Dans ce mémoire, nous allons nous intéresser uniquement aux cellules photovoltaïques en couches minces inorganiques. Plus particulièrement, nous étudierons les cellules à base de

CdTe. Nous commencerons par énumérer les données d'entrée cruciales pour les simulations optiques par la méthode des matrices de transfert. Celles-ci incluent les indices de réfraction complexes, avec leurs dépendances spectrales, des différents matériaux semi-conducteurs et autres constituant la structure multicouche. Nous préciserons également les épaisseurs de chaque couche.

### **3.1.Indices optiques**

Les indices optiques  $\tilde{n}_i$  des matériaux dépendent de la longueur d'onde  $\lambda$  de la lumière incidente. Ils sont généralement obtenus à partir de mesures expérimentales par ellipsométrie ou d'autres techniques optiques, ou bien à partir de bases de données de constantes optiques.

Pour les matériaux semiconducteurs absorbants, tels que le silicium cristallin, les composés III-V ou les pérovskites, la partie imaginaire  $\kappa(\lambda)$  de l'indice est directement liée au coefficient d'absorption  $\alpha(\lambda)$ . Cette relation permet de relier les indices optiques aux propriétés d'absorption du matériau.

Les indices optiques sont souvent décrits par des modèles analytiques ou des tables de données numériques, qui peuvent être importées directement dans le code de simulation.

Dans les simulations optiques par matrices de transfert, il est essentiel de prendre en compte avec précision l'indice de réfraction complexe  $\tilde{n}(\lambda) = n(\lambda) + j\kappa(\lambda)$  de la couche active semi-conductrice, avec sa dépendance en longueur d'onde  $\lambda$ . En effet, cette couche absorbante joue un rôle clé dans l'absorption des photons incidents pour générer les paires électron-trou à l'origine du photocourant.

En revanche, pour les autres couches auxiliaires telles que les contacts métalliques, la fenêtre transparente, les antireflets, etc., une approximation d'indices de réfraction réels constants s'avère généralement suffisante. Ces couches sont choisies pour être les plus transparentes possibles afin de minimiser les pertes parasites et acheminer un maximum de photons jusqu'à la couche active. Leur légère dispersion optique ainsi que leur faible absorption résiduelle ont un impact négligeable sur le comportement optique global de la cellule.

Les indices de réfraction à considérer pour chaque couche d'une cellule solaire à base de CdTe sont les suivants :

- Substrat en verre :  $n \approx 1,5$  (indice réel constant)
- Contact arrière en Mo :  $n \approx 4,0$  (indice réel constant pour un métal)

- Couche active CdTe :  $n(\lambda)$  et  $\kappa(\lambda)$  sont modélisés avec leur dépendance spectrale complexe autour du gap par les formules de Sellmeier [1] :

$$n(\lambda) = \sqrt{5.67 + \frac{0.317 \lambda^2}{\lambda^2 - (449 \cdot 10^{-9})^2} + \frac{3.51 \lambda^2}{\lambda^2 - (1444 \cdot 10^{-9})^2}}$$
$$\kappa(\lambda) = \frac{3.79 \cdot 10^{-8} \lambda^2}{\lambda^2 - (449 \cdot 10^{-9})^2} + \frac{2.35 \cdot 10^{-7} \lambda^2}{\lambda^2 - (537 \cdot 10^{-9})^2} + \frac{4.39 \cdot 10^{-5} \lambda^2}{\lambda^2 - (1444 \cdot 10^{-9})^2}$$

La longueur d'onde est exprimée en mètre.

- Couche tampon CdS :  $n \approx 2,5$  (indice réel constant)
- Couche fenêtre TCO (SnO<sub>2</sub>):  $n \approx 2,0$  (indice réel constant)
- Couche antireflet SiO<sub>2</sub>:  $n \approx 1,46$  (indice réel constant)
- Grille métallique supérieure :  $n \approx 1,5$  (indice réel constant pour un métal fins)

### 3.2.Épaisseurs des couches

Les épaisseurs  $d_i$  des différentes couches constituent également des paramètres d'entrée essentiels. Elles déterminent les chemins optiques parcourus par la lumière dans chaque milieu, et influencent donc fortement les phénomènes d'interférences optiques.

Dans les cellules photovoltaïques multicouches, les épaisseurs typiques varient de quelques nanomètres pour les couches ultra-minces (oxydes, contacts métalliques) à plusieurs micromètres pour les couches actives semiconductrices.

Les épaisseurs typiques correspondant à la structure de la cellule solaire à base de CdTe sont les suivantes :

- Substrat en verre : 3 mm
- Contact arrière en Mo : 1  $\mu\text{m}$
- Couche active CdTe : 2-20  $\mu\text{m}$
- Couche tampon CdS : 100 nm
- Couche fenêtre TCO (SnO<sub>2</sub>) : 0,4  $\mu\text{m}$
- Couche antireflet SiO<sub>2</sub> : 75 nm
- Grille métallique supérieure : 200 nm

Nous avons fait varier l'épaisseur de la couche active et fixé les épaisseurs des autres couches. Le but étant d'étudier l'effet de l'épaisseur de cette couche sur l'absorption des photons.

### **3.3. Autres données d'entrée**

En plus des indices optiques et des épaisseurs, d'autres paramètres peuvent être pris en compte dans les simulations, tels que :

- ❖ L'angle d'incidence  $\theta_0$  de la lumière sur la structure : pour étudier l'effet de cet angle nous avons choisi trois valeurs  $30^\circ$ ,  $40^\circ$  et  $60^\circ$ .
- ❖ La gamme de longueurs d'onde  $\lambda$  d'intérêt, typiquement le spectre solaire pour les applications photovoltaïques. Cette gamme s'étend approximativement de 300 nm (UV) à 1200 nm (proche infrarouge).

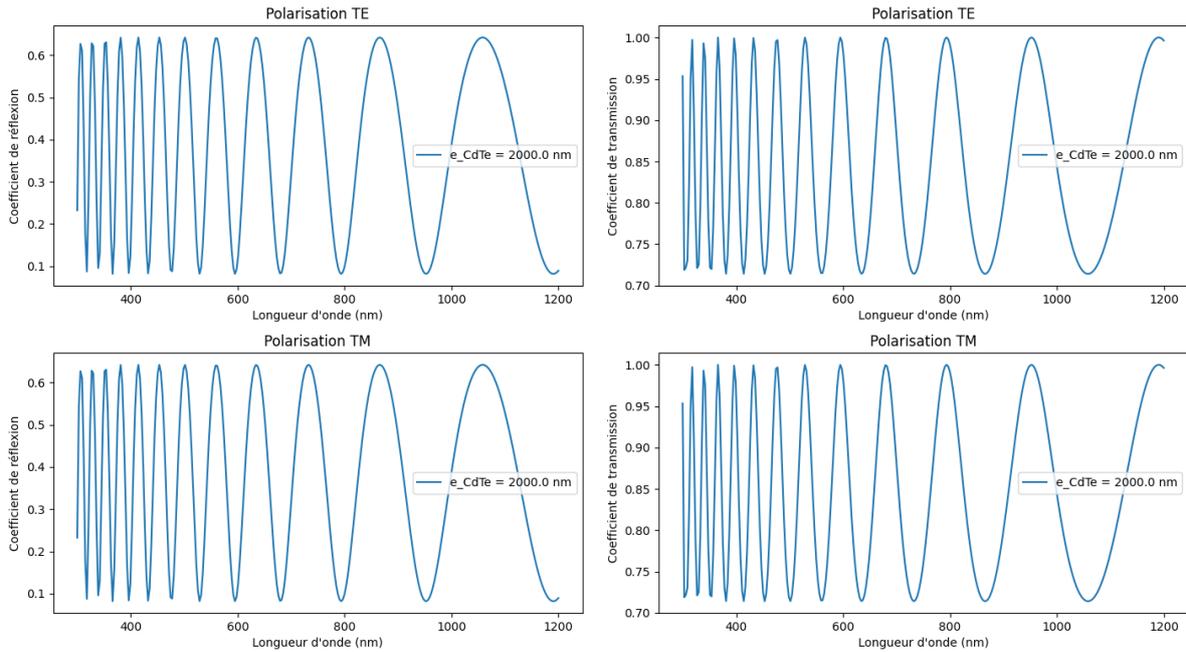
## **4. Simulation des propriétés optiques fondamentales**

Dans cette section, nous allons donner et interpréter les résultats des simulations des propriétés optiques fondamentales de notre cellule solaire à base de CDTE. En particulier, les spectres de transmission, de réflexion et d'absorption.

### **4.1. Coefficients de réflexion et de transmission**

#### **4.1.1. Spectres de réflexion et de transmission pour les polarisations TE et TM**

La figure 3.1 représente les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE. Nous avons choisi une épaisseur de  $2 \mu m$  pour la couche active de CdTe et un angle d'incidence de  $30^\circ$ .

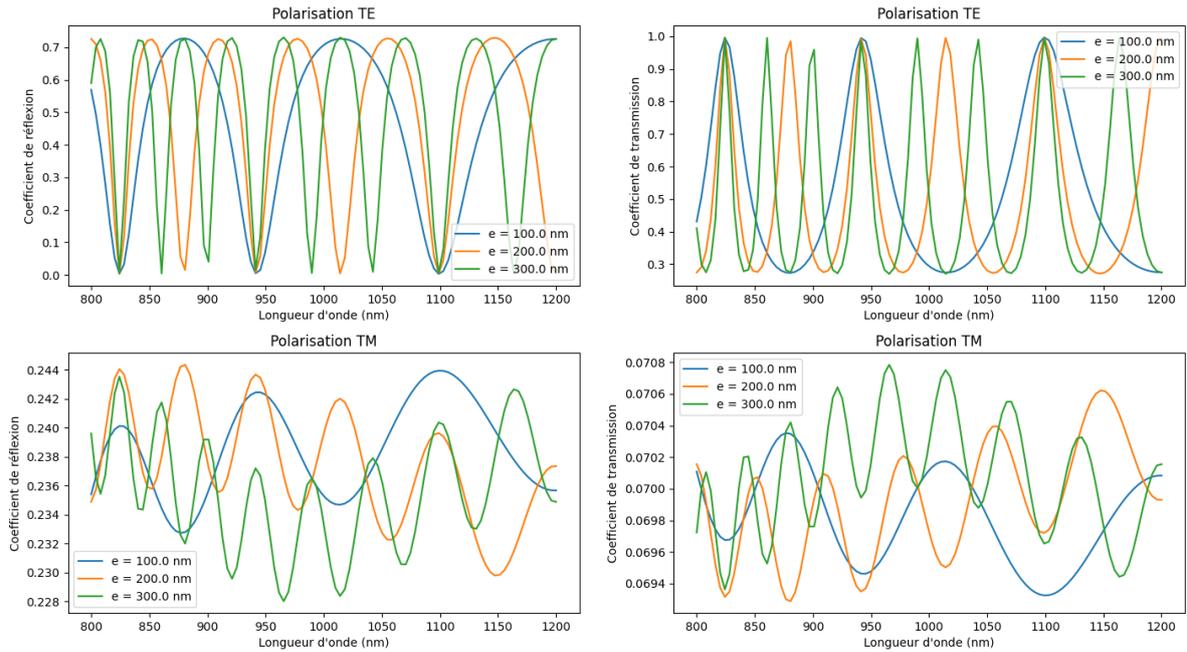


**Figure 3.1 :** Spectres de réflexion et de transmission pour la polarisation TE et TM

Les spectres de transmission et de réflexion présentent des oscillations caractéristiques d'interférences optiques dans les couches minces. Bien que leur amplitude (maxima et minima) reste constante, indiquant une faible absorption du CdTe, la largeur des oscillations augmente avec la longueur d'onde en raison de la dispersion des indices optiques des matériaux. Les spectres de réflexion et de transmission sont identiques pour les polarisations TE et TM, traduisant l'isotropie de la structure dans le plan. Cependant, on observe un décalage entre les maxima (minima) de réflexion et de transmission dû à la conservation de l'énergie : quand la réflexion est maximale, la transmission est minimale et vice-versa. Dans l'ensemble, ces résultats sont cohérents avec un modèle de couches minces isotropes présentant des interférences optiques, modulées par la dispersion des indices optiques, et avec une absorption relativement faible du CdTe dans la gamme spectrale étudiée.

#### 4.1.2. Influence de l'épaisseur de la couche active CdTe

La figure 3.2 représente les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE, pour différentes épaisseurs de la couche active CdTe ( $2 \mu\text{m}$ ,  $4 \mu\text{m}$ ,  $6 \mu\text{m}$ ). Nous avons choisi un angle d'incidence de  $30^\circ$ . Afin de mettre en évidence l'influence de l'épaisseur de la couche active sur la réponse optique de la structure, nous avons exploré une plage de longueurs d'onde s'étendant de 800 nm à 1200 nm.

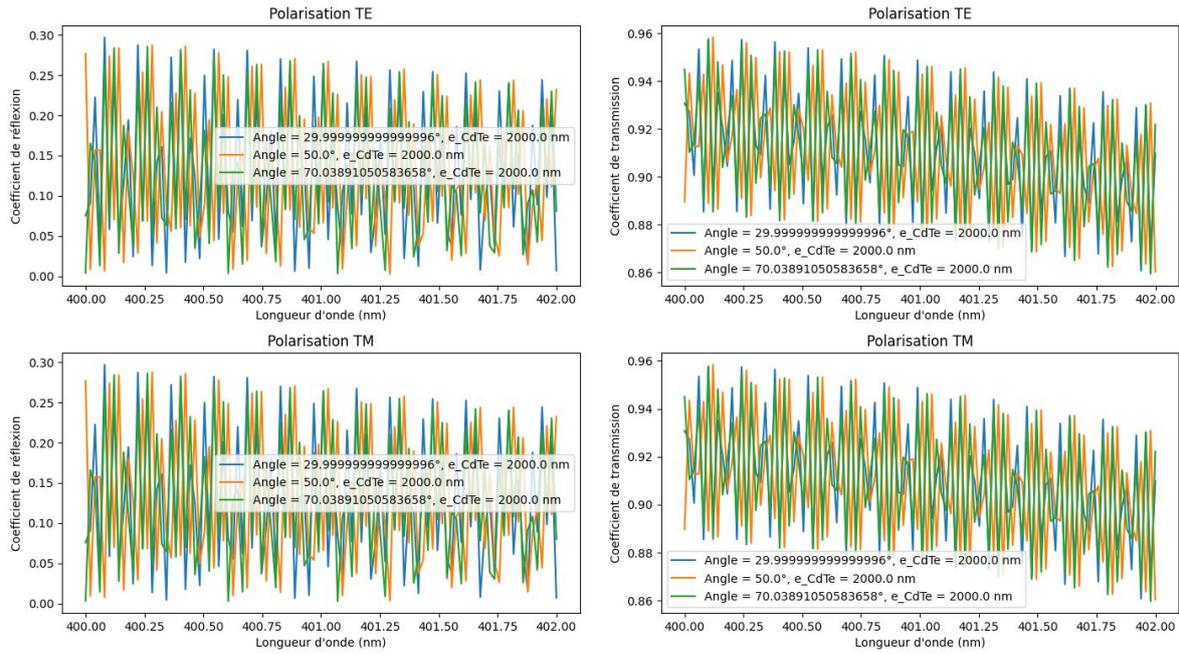


**Figure 3.2 :** Influence de l'épaisseur de la couche active (CdTe)

Bien que les spectres conservent une forme d'oscillations quelle que soit l'épaisseur de la couche de CdTe, en raison des interférences optiques dans la structure multicouche, on observe une nette diminution de la largeur des oscillations lorsque cette épaisseur augmente. Cependant, l'amplitude des oscillations, déterminée par les positions des maxima et minima, reste inchangée en fonction de l'épaisseur et de la longueur d'onde. Ce comportement indique que l'absorption dans la couche active de CdTe est relativement faible et constante sur la gamme spectrale étudiée. La variation de largeur des oscillations est une conséquence directe du principe d'interférences : une augmentation de l'épaisseur accroît la différence de marche optique entre les faisceaux réfléchis aux interfaces, rapprochant ainsi les maxima/minima d'interférences successifs et réduisant la largeur des oscillations observées dans les spectres.

#### 4.1.3. Influence de l'angle d'incidence

La figure 3.3 représente les spectres de réflexion et de transmission obtenus pour les polarisations TM et TE, pour différentes valeurs de l'angle d'incidence ( $30^\circ, 50^\circ, 70^\circ$ ). Nous avons choisi une épaisseur de  $2 \mu m$  pour la couche active de CdTe. Afin de mettre en évidence l'influence de l'épaisseur de la couche active sur la réponse optique de la structure, nous avons exploré une plage de longueurs d'onde s'étendant de 400 nm à 402 nm.



**Figure 3.3 :** Influence de l'angle d'incidence

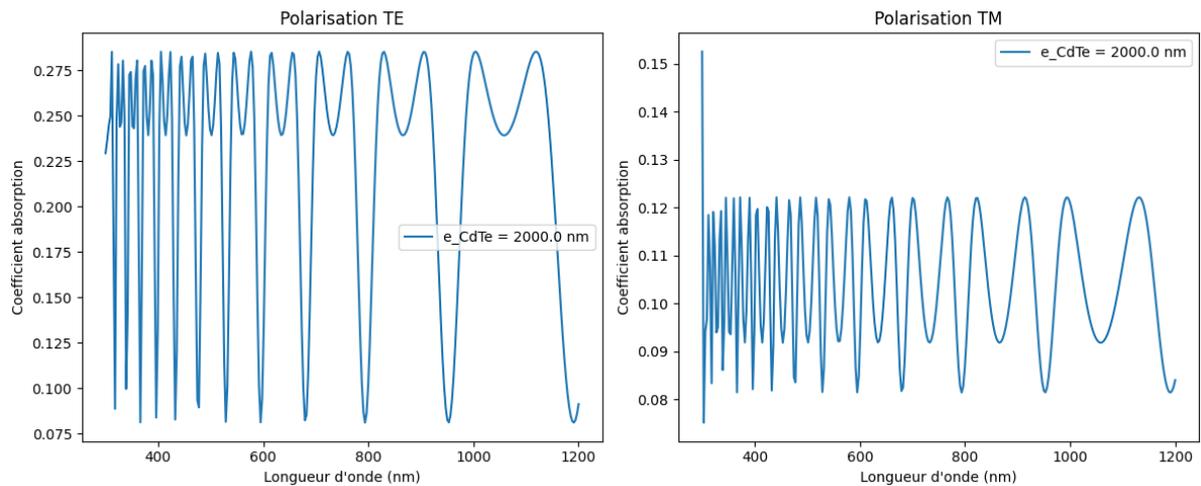
L'amplitude constante des oscillations (positions inchangées des maxima et minima) pour tous les angles d'incidence et longueurs d'onde confirme que l'absorption dans la couche active de CdTe reste faible sur la gamme spectrale étudiée, quelle que soit l'incidence. Cependant, on observe une légère diminution de la largeur des oscillations qui est la même pour tous les angles. Ce rétrécissement est dû à l'augmentation effective de l'épaisseur optique de la couche de CdTe lorsque l'angle d'incidence s'écarte de la normale, en raison de l'allongement du chemin optique dans la couche. Ainsi, comme pour une augmentation de l'épaisseur physique, les maxima/minima d'interférences successifs se rapprochent, réduisant la largeur des oscillations.

Un autre effet remarquable est le décalage systématique des spectres vers les plus faibles longueurs d'onde lorsque l'angle d'incidence augmente. Ce décalage, bien que très faible sur la gamme spectrale considérée (800 nm à 801 nm), provient du changement de la différence de marche optique effective dans la structure multicouche en incidence oblique. Pour visualiser clairement ce petit décalage et la légère diminution de la largeur des oscillations, il a fallu tracer les spectres sur un intervalle spectral restreint autour de 800 nm à 801 nm, mettant ainsi en évidence ces effets subtils de l'angle d'incidence.

## 4.2. Coefficient d'absorption

### 4.2.1. Spectres d'absorption

La figure 3.4 représente les spectres d'absorption obtenus pour les polarisations TE et TM. Nous avons choisi une épaisseur de  $2\ \mu\text{m}$  pour la couche active de CdTe et un angle d'incidence de  $30^\circ$ .

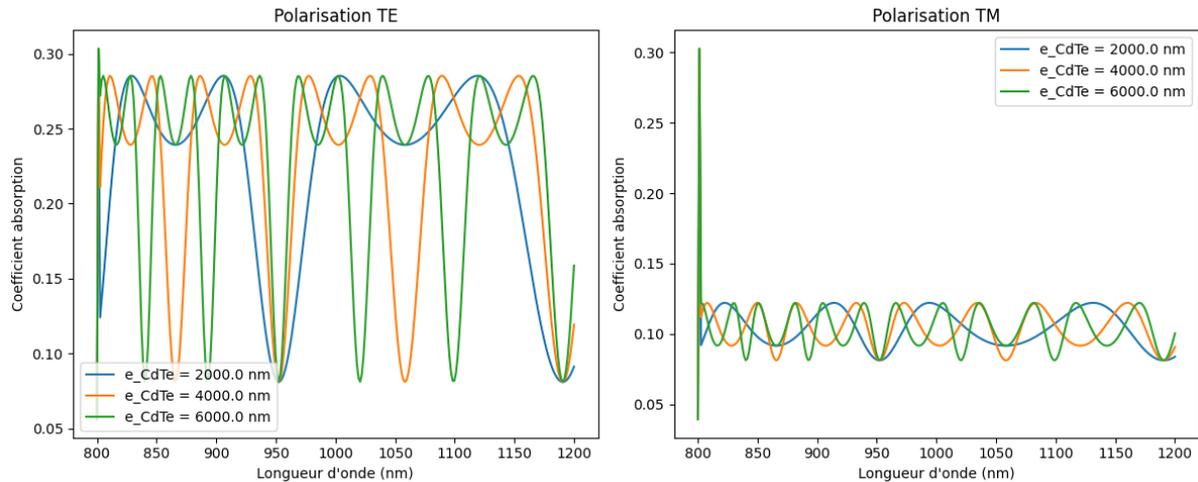


**Figure 3.4 :** Spectres d'absorption pour la polarisation TE et TM

Les spectres de coefficient d'absorption en fonction de la longueur d'onde présentent des oscillations périodiques remarquables. On observe une succession d'une grande oscillation suivie d'une plus petite oscillation. Cette modulation périodique de l'amplitude des oscillations est caractéristique des interférences optiques dans une structure multicouche. L'amplitude globale (maxima et minima) de ces oscillations reste presque constante sur la gamme spectrale, indiquant que l'absorption intrinsèque du CdTe varie peu. Cependant, la largeur des oscillations augmente avec la longueur d'onde, ce qui peut être attribué à la dispersion des indices optiques des matériaux constitutifs de la structure.

Un aspect intéressant est la différence entre les polarisations TE et TM. Pour la polarisation TM, on observe des amplitudes d'oscillation plus faibles ainsi que des largeurs d'oscillation réduites par rapport à la polarisation TE. Cette anisotropie traduit une légère biréfringence et/ou dichroïsme de la structure pour les ondes TM. Cela pourrait provenir d'une légère anisotropie de forme des grains ou d'un léger désaccord des indices optiques ordinaire et extraordinaire dans la couche active de CdTe.

La figure 3.5 représente les spectres d'absorption obtenus pour les polarisations TM et TE, pour différentes épaisseurs de la couche active CdTe ( $2\ \mu\text{m}$ ,  $4\ \mu\text{m}$ ,  $6\ \mu\text{m}$ ). Nous avons choisi un angle d'incidence de  $30^\circ$ . Afin de mettre en évidence l'influence de l'épaisseur de la couche active sur la réponse optique de la structure, nous avons exploré une plage de longueurs d'onde s'étendant de 800 nm à 1200 nm.



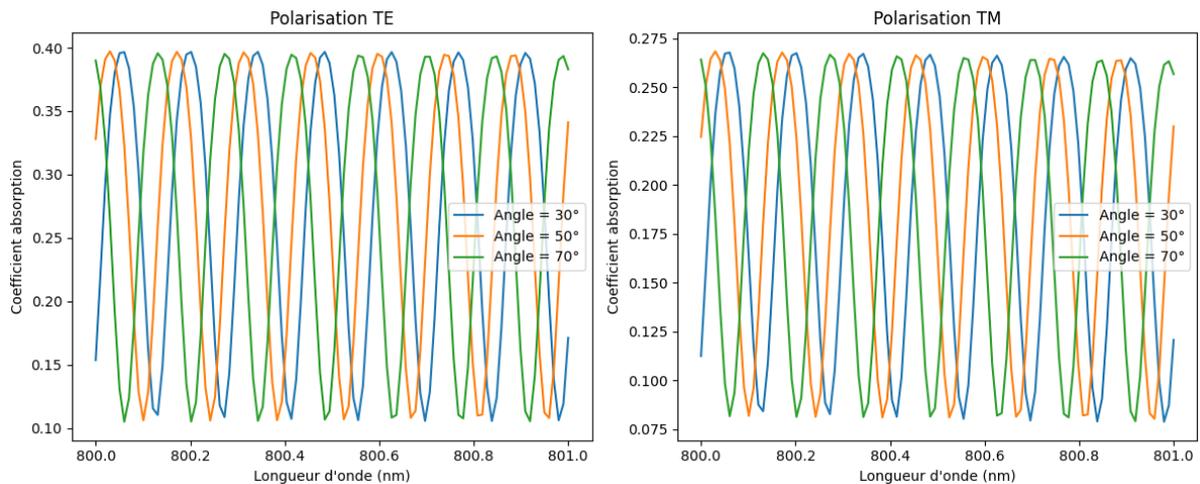
**Figure 3.5 :** Influence de l'épaisseur de la couche active (CDTE)

Les spectres de coefficient d'absorption conservent la même forme d'oscillations périodiques quelle que soit l'épaisseur de la couche active de CdTe. On observe toujours une succession de grandes et petites oscillations, caractéristique des interférences optiques dans une structure multicouche. L'amplitude globale de ces oscillations, déterminée par les maxima et minima, reste quasiment constante, reflétant une absorption intrinsèque du CdTe peu dépendante de la longueur d'onde. De plus, la largeur des oscillations continue d'augmenter avec la longueur d'onde en raison de la dispersion des indices optiques. Enfin, les oscillations en polarisation TM présentent toujours des amplitudes et des largeurs inférieures à celles en polarisation TE, révélant la légère anisotropie/biréfringence de la structure.

On note cependant un effet clair de l'épaisseur de la couche active sur la largeur des oscillations d'absorption : celle-ci diminue lorsque l'épaisseur augmente, en raison de l'accroissement de la différence de marche optique. De plus, bien qu'aucun changement d'amplitude n'ait été mentionné, on s'attend théoriquement à une augmentation du niveau global d'absorption avec l'épaisseur. En effet, le chemin optique parcouru par la lumière dans le CdTe absorbant étant plus long quand l'épaisseur est grande, l'absorption totale doit être supérieure, même si le

coefficient d'absorption intrinsèque ne varie pas. Cependant, cet effet pourrait rester subtil sur la gamme d'épaisseurs étudiée par rapport à la modulation d'amplitude par les interférences.

La figure 3.6 représente les spectres d'absorption obtenus pour les polarisations TM et TE, pour différentes valeurs de l'angle d'incidence ( $30^\circ, 50^\circ, 70^\circ$ ). Nous avons choisi une épaisseur de  $2 \mu\text{m}$  pour la couche active de CdTe. Afin de mettre en évidence l'influence de l'épaisseur de la couche active sur la réponse optique de la structure, nous avons exploré une plage de longueurs d'onde s'étendant de 800 nm à 801 nm.



**Figure 3.6 :** Influence de l'angle d'incidence

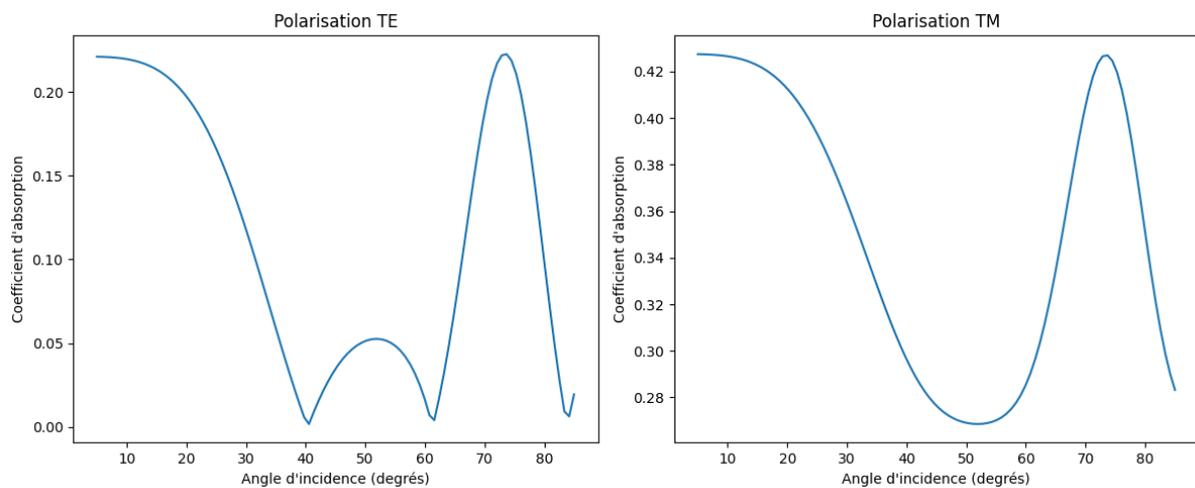
Comme pour les variations d'épaisseur de la couche active, on observe très peu de changements sur la forme générale des oscillations d'absorption lorsqu'on modifie l'angle d'incidence. Les spectres conservent leurs oscillations périodiques caractéristiques des interférences dans une structure multicouche, avec une succession de grandes et petites oscillations. L'amplitude globale, déterminée par les maxima et minima, reste quasiment constante quel que soit l'angle, reflétant une absorption intrinsèque du CdTe peu dépendante de la longueur d'onde. Cependant, on note une nette diminution de la largeur des oscillations quand l'angle d'incidence augmente, en raison de l'accroissement effectif de la différence de marche optique, de manière analogue à l'effet d'une augmentation d'épaisseur.

Un effet supplémentaire lié à l'angle d'incidence est un très léger décalage des oscillations vers les plus faibles longueurs d'onde quand l'angle augmente. Ce décalage, extrêmement faible, résulte des changements de la différence de marche optique effective en incidence oblique. Il a fallu tracer les spectres sur un intervalle spectral très restreint (800-801 nm) pour bien visualiser ce décalage. Bien que non mentionné, on peut s'attendre également à une légère augmentation

du niveau global d'absorption avec l'angle d'incidence, dû à l'allongement du chemin optique dans le CdTe absorbant en incidence oblique. Néanmoins, cet effet devrait rester assez faible par rapport à la forte modulation d'amplitude par les interférences.

#### 4.2.2. Influence de l'angle d'incidence

La figure 3.7 représente la variation du coefficient d'absorption en intensité (absorbance) en fonction de l'angle d'incidence pour les polarisations TM et TE. Nous avons fait varier l'angle d'incidence de  $0^\circ$  à  $90^\circ$ . Nous avons choisi une épaisseur de  $2 \mu m$  pour la couche active de CdTe et une longueur d'onde incidente de  $500 \text{ nm}$ .



**Figure 3.7 :** la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'angle d'incidence

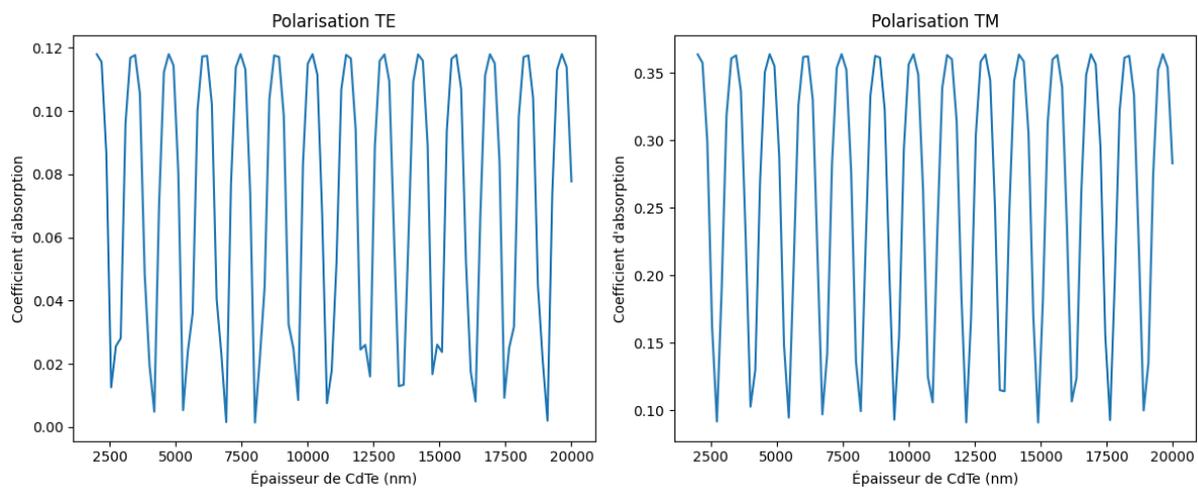
Le coefficient d'absorption présente une dépendance remarquable et non monotone avec l'angle d'incidence. On observe tout d'abord une forte diminution du coefficient lorsque l'angle augmente de  $0^\circ$  à environ  $40^\circ$ . Puis, le coefficient d'absorption croît rapidement pour atteindre un premier maximum autour de  $50^\circ$ , avant de rechuter drastiquement jusqu'à presque s'annuler à  $60^\circ$ . Passé  $60^\circ$ , il ré-augmente brusquement jusqu'à un second maximum, plus élevé que le précédent, vers  $75^\circ$ . Enfin, au-delà de  $75^\circ$ , le coefficient d'absorption décroît à nouveau fortement.

Cette dépendance angulaire complexe suggère des interférences optiques particulièrement marquées dans la structure en incidence oblique. Les fortes diminutions du coefficient aux environs de  $40^\circ$  et  $60^\circ$  pourraient correspondre à des conditions spécifiques annulant partiellement les interférences de façon destructive. À l'inverse, les maxima prononcés autour de  $50^\circ$  et  $75^\circ$  impliqueraient une amplification constructive des interférences optiques. Ces

phénomènes devraient se répercuter sur l'absorption globale dans la couche active. Aux angles où le coefficient d'absorption est maximum, l'absorption totale serait favorisée. Inversement, aux angles de faible coefficient, l'absorption globale serait fortement réduite.

#### 4.2.3. Influence de l'épaisseur de la couche active

La figure 3.8 représente la variation du coefficient d'absorption en intensité (absorbance) en fonction de l'épaisseur de la couche active CdTe pour les polarisations TM et TE. Nous avons fait varier cette épaisseur de  $2 \mu\text{m}$  à  $20 \mu\text{m}$ . Nous avons choisi un angle d'incidence de  $30^\circ$  et une longueur d'onde incidente de  $500 \text{ nm}$ .



**Figure 3.8 :** la variation du coefficient d'absorption en fonction de l'épaisseur de la couche active CdTe

La courbe représentant le coefficient d'absorption en fonction de l'épaisseur de la couche de CdTe présente des oscillations périodiques remarquables. On observe une succession de maxima et de minima dont l'amplitude (valeurs extrêmes) reste pratiquement constante quelle que soit l'épaisseur considérée. Cette modulation périodique de l'absorption est typique des interférences optiques dans une structure multicouche, avec des conditions particulières sur l'épaisseur conduisant à des interférences constructives (maxima) ou destructives (minima).

Cependant, un aspect surprenant est que la largeur des oscillations, c'est-à-dire la période entre deux extrema successifs, ne semble pas varier significativement avec l'augmentation de l'épaisseur. Ce comportement diffère de celui observé sur les spectres en longueur d'onde, où la largeur des oscillations changeait en raison de la dispersion des indices optiques. Il suggère que

la période des interférences n'est pas affectée par la seule variation d'épaisseur de la couche CdTe.

En ce qui concerne l'absorption globale, celle-ci devrait logiquement augmenter avec l'épaisseur de la couche active absorbante, même si le coefficient d'absorption intrinsèque ne change pas. Cependant, cette augmentation serait modulée de façon périodique en raison des interférences, avec une absorption maximale pour les épaisseurs correspondant aux maxima de la courbe, et minimale pour les épaisseurs associées aux minima.

## **5. Stratégies d'optimisation de l'absorption dans les cellules solaires à base de CdTe**

Les résultats de simulation ont mis en évidence l'influence clé de l'épaisseur de la couche active de CdTe et de l'angle d'incidence sur les propriétés d'absorption de la cellule solaire. Un objectif majeur est d'optimiser ces paramètres afin de maximiser l'absorption de la lumière incidente dans le CdTe pour une conversion photovoltaïque optimale.

D'après les courbes d'absorption en fonction de l'épaisseur, on observe une modulation périodique avec des maxima et minima correspondant respectivement aux conditions d'interférences constructives et destructives. Pour maximiser l'absorption, il faudra donc choisir une épaisseur de CdTe correspondant à un maximum d'absorption.

Cependant, augmenter indéfiniment l'épaisseur n'est pas une solution optimale, car au-delà d'une certaine valeur, les problèmes de recombinaison des porteurs de charge dans le matériau deviennent prépondérants et diminuent le rendement de conversion. Il existe donc une épaisseur optimale résultant d'un compromis entre absorption et collection des charges.

Des simulations complémentaires prenant en compte les phénomènes de recombinaison et de transport des charges dans le CdTe seront nécessaires pour déterminer cette épaisseur optimale. Une approche pourrait être de balayer une large gamme d'épaisseurs et d'identifier le maximum de rendement de conversion.

La dépendance angulaire complexe du coefficient d'absorption offre des opportunités d'optimisation intéressantes. En inclinant la cellule à des angles spécifiques comme  $50^\circ$  ou  $75^\circ$  où l'absorption est maximale, on pourrait potentiellement augmenter le rendement de conversion.

Cependant, cette approche soulève d'autres défis comme l'acceptation angulaire réduite et les problèmes d'ombrage mutuel pour un panneau complet. Une solution pourrait être d'utiliser un système de suivi du soleil orientant continuellement les cellules à l'angle d'absorption optimal.

Une autre piste serait de structurer la surface de la cellule (texture, motifs périodiques) pour favoriser le piégeage de la lumière et l'absorption dans des conditions d'incidence variables.

Dans tous les cas, des simulations électromagnétiques et photovoltaïques rigoureuses seront indispensables pour évaluer précisément les gains potentiels d'une telle optimisation angulaire, en tenant compte des compromis avec d'autres facteurs impactant les performances.

En conclusion, bien que l'absorption intrinsèque du CdTe ne soit pas très élevée, un choix judicieux de l'épaisseur de la couche active et potentiellement de l'angle d'incidence pourrait permettre d'optimiser significativement l'absorption globale de la cellule solaire et d'en augmenter le rendement de conversion.

## **6. Conclusion**

Les simulations d'optimisation pour la technologie des cellules en couches minces de CdTe sont réalisées à l'aide du modèle numérique basé sur les matrices de transfert dans ce chapitre. On a présenté un programme informatique en Python qui permet de calculer rapidement les coefficients optiques en fonction des paramètres géométriques. On a examiné en profondeur les résultats de l'analyse paramétrique de l'impact de l'épaisseur de la couche active, de la polarisation et de l'angle d'incidence sur les coefficients de réflexion, de transmission et d'absorption. On a proposé finalement des stratégies d'optimisation pour optimiser l'absorption dans la couche active.

## Conclusion générale

Ce mémoire avait pour objectif de modéliser et d'optimiser les propriétés optiques de cellules photovoltaïques multicouches inorganiques. L'absorption optimale du rayonnement solaire incident dans la couche active semi-conductrice est en effet cruciale pour maximiser l'efficacité de conversion photovoltaïque. La méthode rigoureuse des matrices de transfert, permettant de décrire la propagation de la lumière dans des empilements complexes de couches minces, a été mise en œuvre et appliquée au cas particulier de cellules à base de tellurure de cadmium (CdTe). L'influence de paramètres clés comme l'épaisseur des couches, la polarisation et l'angle d'incidence de la lumière a été étudiée en détail.

Dans le premier chapitre, le contexte énergétique et le rôle clé du photovoltaïque avaient été posés. Les principes de fonctionnement des cellules photovoltaïques, insistant sur la nécessité de maximiser l'absorption lumineuse, avaient été détaillés. Un tour d'horizon des différentes technologies de cellules inorganiques mettait en évidence le besoin d'approches d'optimisation optique adaptées. L'importance de cette optimisation, avec ses leviers principaux, avait été soulignée. Enfin, les différentes méthodes de modélisation optique, notamment la théorie des matrices de transfert appliquée aux cellules photovoltaïques, avaient été présentées.

Dans le second chapitre, les bases théoriques pour modéliser rigoureusement la propagation de la lumière dans les empilements de couches minces, tels que ceux des cellules photovoltaïques, avaient été posées. La compréhension fine du comportement optique de ces milieux stratifiés étant cruciale pour optimiser l'absorption de la lumière incidente. Nous avons commencé par des rappels sur l'optique électromagnétique dans les milieux diélectriques et conducteurs, ainsi que sur les lois de l'optique géométrique régissant la réflexion et la réfraction aux interfaces. Le formalisme puissant des matrices de transfert optique, permettant de décrire la propagation à travers des multicouches, avait ensuite été introduit. Les équations fondamentales, avec les expressions des matrices pour une interface et une couche homogène, ainsi que le calcul des coefficients optiques à partir de ces matrices, avaient été détaillés. Enfin, la combinaison de ces matrices élémentaires pour modéliser des milieux stratifiés multicouches complexes avait été montrée, en discutant les atouts et limites de cette approche matricielle.

Dans le dernier chapitre, un programme de simulation numérique basé sur la méthode des matrices de transfert a été développé en Python pour modéliser la réponse optique de cellules

solaires à couches minces de CdTe. Cet outil a permis de calculer les coefficients de réflexion, transmission et absorption de la structure multicouche, en tenant compte des indices de réfraction complexes des matériaux et de paramètres opto-géométriques comme l'épaisseur des couches, la polarisation et l'angle d'incidence.

Les résultats ont révélé des oscillations périodiques caractéristiques d'interférences optiques dans les spectres d'absorption, avec une modulation d'amplitude typique des multicouches. L'amplitude globale reste quasi-constante, indiquant une absorption intrinsèque peu dépendante de la longueur d'onde dans le CdTe. Cependant, la largeur des oscillations augmente avec la longueur d'onde en raison de la dispersion des indices. Une anisotropie entre les polarisations TE et TM a également été observée, traduisant une légère biréfringence/dichroïsme de la structure. L'épaisseur de la couche de CdTe influe sur la largeur des oscillations tandis que son absorption globale devrait augmenter avec cette épaisseur. L'angle d'incidence réduit également la largeur des oscillations et induit un léger décalage spectral dû aux changements de chemins optiques. Des dépendances angulaires complexes du coefficient d'absorption ont été mises en évidence, avec des maxima et minima liés aux conditions d'interférences constructives/destructives.

## Références bibliographiques

- [1] Daniel Suchet, Erik Johnson, L'énergie solaire photovoltaïque, EDP sciences, 2023
- [2] Juan Bisquert, The physics of solar cells, CRC Press, 2018
- [3] Henry Mathieu et Hervé Fanet, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques,
- [4] Dubey, S., Sarvaiya, J. N., & Seshadri, B. (2013). Temperature Dependent Photovoltaic (PV) Efficiency and Its Effect on PV Production in the World – A Review. *Energy Procedia*, 33, 311-321.
- [5] Green, M. A. (2009). The path to 25 % silicon solar cell efficiency : History of silicon cell evolution. *Progress In Photovoltaics*, 17(3), 183-189.
- [6] Chopra, K. L., Paulson, P. D., & Dutta, V. (2004). Thin-film solar cells : an overview. *Progress In Photovoltaics*, 12(2-3), 69-92.
- [7] Rech, B., & Wagner, H. (1999). Potential of amorphous silicon for solar cells. *Applied Physics. A, Materials Science & Processing*, 69(2), 155-167.
- [8] Romeo, N., Bosio, A., Canevari, V., & Podestà, A. (2004). Recent progress on CdTe/CdS thin film solar cells. *Solar Energy*, 77(6), 795-801.
- [9] Jackson, P., Hariskos, D., Lotter, E., Paetel, S., Wuerz, R., Menner, R., Wischmann, W., & Powalla, M. (2011). New world record efficiency for Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> thin-film solar cells beyond 20 % . *Progress In Photovoltaics*, 19(7), 894-897.
- [10] Correa-Baena, J., Saliba, M., Buonassisi, T., Grätzel, M., Abate, A., Tress, W., & Hagfeldt, A. (2017). Promises and challenges of perovskite solar cells. *Science*, 358(6364), 739-744.
- [11] Dimroth, F., Grave, M., Beutel, P., Fiedeler, U., Karcher, C., Tibbits, T. N. D., Oliva, E., Siefert, G., Schachtner, M., Wekkeli, A., Bett, A. W., Krause, R., Piccin, M., Blanc, N., Drazek, C., Guiot, E., Ghyselen, B., Salvetat, T., Tauzin, A., Schwarzburg, K. (2014). Wafer bonded four-junction GaInP/GaAs//GaInAsP/GaInAs concentrator solar cells with 44.7 % efficiency. *Progress In Photovoltaics*, 22(3), 277-282.

- [12] Apaydın, D. H., Yıldız, D. E., Cirpan, A., & Toppare, L. (2013). Optimizing the organic solar cell efficiency : Role of the active layer thickness. *Solar Energy Materials & Solar Cells/Solar Energy Materials And Solar Cells*, 113, 100-105.
- [13] Polman, A., & Atwater, H. A. (2012). Photonic design principles for ultrahigh-efficiency photovoltaics. *Nature Materials*, 11(3), 174-177.
- [14] Zeman, M., Isabella, O., Solntsev, S., & Jäger, K. (2013). Modelling of thin-film silicon solar cells. *Solar Energy Materials & Solar Cells/Solar Energy Materials And Solar Cells*, 119, 94-111.
- [15] Krc, J., & Topic, M. (2016). *Optical Modeling and Simulation of Thin-Film Photovoltaic Devices*.
- [16] Benatto, L., Mesquita, O., Pacheco, K. R., Roman, L. S., Koehler, M., Capaz, R. B., & Candiotto, G. (2024). TMM-Sim : A Versatile Tool for Optical Simulation of Thin-Film Solar Cells. *Computer Physics Communications*, 109206.
- [17] Mackay, T. G., & Lakhtakia, A. (2020b). The Transfer-Matrix Method in Electromagnetics and Optics. In *Synthesis lectures on electromagnetics*.
- [18] Lacombe, J., Sergeev, O., Chakanga, K., Von Maydell, K., & Agert, C. (2011). Three dimensional optical modeling of amorphous silicon thin film solar cells using the finite-difference time-domain method including real randomly surface topographies. *Journal Of Applied Physics*, 110(2).
- [19] Diethelm, M., Penninck, L., Regnat, M., Offermans, T., Zimmermann, B., Kirsch, C., Hiestand, R., Altazin, S., & Ruhstaller, B. (2020). Finite element modeling for analysis of electroluminescence and infrared images of thin-film solar cells. *Solar Energy*, 209, 186-193.
- [20] Lokar, Z., Lipovsek, B., Topic, M., & Krc, J. (2018). Performance analysis of rigorous coupled-wave analysis and its integration in a coupled modeling approach for optical simulation of complete heterojunction silicon solar cells. *Beilstein Journal Of Nanotechnology*, 9, 2315-2329.
- [21] Pochi Yeh (2004). *Optical Waves in Layered Media*. Wiley Series in Pure and Applied Optics.

[22] Tatian, B. (1984). Fitting refractive-index data with the Sellmeier dispersion formula. *Applied Optics*, 23(24), 4477.

## Résumé

Ce projet de master visait à développer un modèle analytique pour prédire l'indice de réfraction effectif de structures multicouches périodiques composées de CDTE, deux semi-conducteurs III-V couramment utilisés en optoélectronique. Le formalisme matriciel de transfert optique a été utilisé pour modéliser ces empilements et étudier leur réponse optique en fonction de paramètres géométriques tels que l'épaisseur des couches, l'angle d'incidence et le nombre de couches. Les résultats ont permis d'analyser les spectres de réflexion, de transmission et l'indice de réfraction effectif en mettant en évidence l'influence des interférences optiques, du guidage de la lumière et de la structure multicouche. Cela ouvre des perspectives pour optimiser la conception de composants optoélectroniques à base de ces empilements GaAs/AlGaAs.

## ملخص

يهدف مشروع الماجستير هذا إلى تطوير نموذج تحليلي للتنبؤ بمعامل الانكسار الفعال للهياكل الدورية متعددة الطبقات المكونة المستخدمة بشكل شائع في الإلكترونيات الضوئية. تم استخدام شكلية III-V الموصلات CDTE، وهما من أشباه من مصفوفة النقل البصري لنمذجة هذه المداخن ودراسة استجابتها البصرية كدالة للمعلمات الهندسية مثل سمك الطبقة وزاوية السقوط وعدد الطبقات. أتاحت النتائج تحليل الانعكاس وأطياف الإرسال ومعامل الانكسار الفعال من خلال تسليط الضوء على تأثير التداخل البصري وتوجيه الضوء والبنية متعددة الطبقات. وهذا يفتح آفاقاً لتحسين تصميم المكونات الإلكترونية GaAs/AlGaAs الضوئية استناداً إلى مجموعات

## Abstract

This master's project aimed to develop an analytical model to predict the effective refractive index of periodic multilayer structures composed of CDTE, two III-V semiconductors commonly used in optoelectronics. The optical transfer matrix formalism was used to model these stacks and study their optical response as a function of geometric parameters such as layer thickness, angle of incidence and number of layers. The results made it possible to analyze the reflection, transmission spectra and the effective refractive index by highlighting the influence of optical interference, light guiding and multilayer structure. This opens perspectives for optimizing the design of optoelectronic components based on these GaAs/AlGaAs stacks.

## Les Abréviations :

$E$  : l'énergie du photon

$h$ : la constante de Planck

$\nu$  : la fréquence

$\alpha(\lambda)$ : le coefficient d'absorption du semi-conducteur

$\lambda$ : longueur d'onde

$A$ : est une constante

$n$  : un coefficient phénoménologique

$g(x)$ : est le taux de génération à la profondeur  $x$  sous la surface

$\Phi_0$ : le flux incident de photons

$R$ : la réflectivité de la de la surface

$I$ : le courant de sortie de la cellule

$V$ : la tension appliquée aux bornes de la cellule

$I_{ph}$ : le courant photogénéré

$I_0$ : le courant de saturation inverse de la jonction p-n

$q$ : la charge élémentaire de l'électron

$n$ : le facteur d'idéalité de la jonction (entre 1 et 2 typiquement)

$K$ : la constante de Boltzmann

$T$ : la température absolue

$R_{sh}$ : la résistance shunt (représente les courants de fuite)

$\eta$  : Le rendement de conversion énergétique

$P_{inc}$  : la puissance maximale

$F_f$ : est le facteur de remplissage

$\vec{D}$ : le vecteur déplacement électrique

$\vec{E}$ : champ électrique

$\epsilon_0$  :est la permittivité du vide

$\vec{B}$  :l'induction magnétique

$\vec{H}$ : champ magnétique

$J$ : la densité de courant de conduction

$\mu_0$  : la perméabilité magnétique du vide

$n$ : Indice de réfraction du milieu  $i$

$\theta$ : l'angle de propagation dans la couche  $i$

$\varphi_i$  : Les déphasages longitudinal

CdTe : Le tellurure de cadmium

TE : le champ électrique

TM : le champ magnétique