

République Algérienne Démocratique Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou
Faculté de génie électrique et d'informatique
Département d'électronique



MEMOIRE DE MASTER 2

Spécialité : Electronique
Option : Matériaux et dispositifs électronique et photovoltaïque
Présenté par :
Mme TALEB Karima

Thème

***Etude de la propagation d'une onde électro
magnétique dans une structure multicouche
ZnO/Al/ZnO***

Devant le jury composé de :
ZIRMI RACHID
HATEM DJEDJIGA
SIDI SAIDE AMEL
ATTAF YUCEF

PRESIDENT
PROMOTEUR
EXAMINATEUR
EXAMINATEUR

Remerciements

A l'issu de ce modeste travail, je tien a exprimer mais
remercîments a ma promotrice M^{me} HATEM de m'avoir donne
l'honneur de m'encadrer.

Mais remerciement les plus sincères et les plus profondes sont
adresse aux enseignants de département d'électronique

Mais remerciement les plu respectueux vont aux
membres de jury qui nous forons l'honneur de juger notre travail.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail a

- A mon mari
- Mes enfants.
- Mes très chers parents.
- Mes frères et sœurs.
- Mes bous frères et belles sœur.
- Mes neveux et nièces.
- A tout ma famille

Sommaire

Introduction générale.....	1
 Chapitre I théorique	
I.1 Introduction.....	2
I.2 Les Oxydes de l'électrode transparente.....	3
I.2.1 Définition d'un TCO.....	4
I.2.2 Les propriétés des TCOs.....	4
I.2.2.1 Les propriétés électriques.....	4
a) La résistivité (ρ).....	4
b) La résistance surfacique R_s	5
c) La mobilité μ	5
d) la résistance carrée (R_{sq}).....	6
I.2.2.2 Mesure de la résistivité électrique et de la résistance carrée.....	6
I.2.3 Domene d'utilisation.....	8
I.2.4 Le choix d'un TCO.....	9
I.2.4.1 Facteur de mérite.....	10
I.3 L'électrode tri-couche.....	10
I.3.1 Résistance carrée dans une électrode multicouche.....	10
I.3.2 l'utilisation du ZnO dans la réalisation d'une électrode tri-couche.....	11
I.3.3 Propriétés de l'Oxyde de Zinc (ZnO).....	11
I.3.3.1 Structure cristalline de ZnO.....	12
I.3.3.2 Propriétés électriques du ZnO.....	13
I.3.3.3 Propriétés optiques.....	13
I.4 Notion sur l'électromagnétisme.....	15
I.5 Les propriétés électromagnétiques du milieu.....	15
I.5.1 Permittivité électrique (ϵ en F/m).....	16
I.5.2 Perméabilité magnétique (μ en H/m).....	16
I.5.3 Conductivité (σ en S/m).....	17
I.6 La dispersion et l'atténuation d'une onde électromagnétique dans le matériau.....	17
I.7 La résolution des équations de propagation électromagnétique.....	18
I.8 Propagation d'ondes planes.....	19

I.9 Ondes de Floquet.....	19
---------------------------	----

Chapitre II présentation du logiciel et simulation

II Introduction.....	20
II.1 Description.....	20
II.2 Sélectionne le physique.....	20
II.3 Procédure de simulation.....	21
II.3.1. Chargement du logiciel.....	21
II.3.2 Choix du mode d'application.....	22
II.3.3 Sélectionne le physique.....	22
II.3.4 Définition de la géométrie.....	23
II.3.5 Matériaux.....	25
II.3.5 .1 Propriété des matériaux.....	25
II.3.6 Maillage.....	26
II.4 Modélisation numérique.....	28
II.5 Variation de épaisseur de la couche d'aluminium	30
II.6 Variation de l'épaisseur de la couche ZnO pour une valeur d'aluminium constante(6nm).....	35
II.7 L'effet de l'asymétrie de la structure.....	38
II.7.1 La variation de la deuxième couche ZnO(Ib).....	38
II.7.2 La variation de la couche d'incidence ZnO (Ia).....	40
II.8 L'effet de la variation de la longueur d'onde.....	43
Conclusion.....	47
Bibliographie.....	49

Introduction générale

La demande croissante des besoins énergétiques et les problèmes liés au prix et à l'épuisement prévisible des énergies fossiles impliquent un regain d'intérêt pour les énergies propres et renouvelables pour obtenir une source d'énergie alternative vu l'impact écologique négatif induit par les énergies conventionnelles. Parmi les énergies renouvelables, l'énergie solaire occupe une place prépondérante dans ce domaine où la seule condition à cette alternative est l'orientation et la canalisation de ce flux d'énergie considéré comme inépuisable.

L'énergie solaire photovoltaïque permet la conversion directe du rayonnement solaire en électricité, ceci à l'aide d'un dispositif appelé cellule solaire ou photopile. Ces cellules sont principalement fabriquées à partir du silicium ; mais l'exploitation intensif du silicium présente des contraintes matérielles et économiques; d'où des efforts intenses pour la recherche de nouveaux matériaux et structures pour réaliser d'autres types de cellules avec des techniques de mise en œuvre faciles et permettant des rendements acceptables. C'est dans ce cadre que nous avons opté et orienté notre travail sur la cellule solaire organique particulièrement sur l'électrode constituant cette dernière qui représente un organe indispensable pour la transmission de la lumière et la collection des charges au même temps.

Une grande partie de ce travail est consacré à l'étude d'une électrode tri-couche pour une cellule solaire organique. Cette électrode est à la base d'un empilement de trois couches d'où deux couches périphériques à base de TCO jointées par une fine couche métallique qui est dans notre cas d'étude à base d'argent, considéré comme un bon conducteur.

C'est une électrode dont le rôle est important et essentiel pour le drainage du flux lumineux d'une manière optimale de la source lumineuse vers la cellule. Cette optimisation nous a amené à faire un choix adéquat des TCO utilisés pour l'élaboration de ces électrodes tels que le ZnO . Ce TCO ayant un large gap direct de 3,5 – 4 eV, des propriétés électriques et optiques intéressantes leur permettant d'apporter des améliorations aussi bien au niveau du fonctionnement que du rendement des cellules à base de matériaux organiques.

Dans le but d'améliorer les performances de l'électrode, nous avons disposés des TCO en couches minces et pris soin d'introduire un film d'aluminium afin de représenter un système parallèle. La résistivité équivalente de ce système est égale à la plus petite des trois. Cela tout en optimisant les épaisseurs dont cette résistivité est fonction, à travers une simulation afin de trouver un compromis entre épaisseur, résistivité et perméabilité.

Notre travail est réparti en deux grandes parties:

- Partie théoriques
- Partie présentation du logicielle et simulation.
- Nous terminons notre travail par un conclusion générale

I.1 Introduction

Le soleil est l'étoile la plus proche étoile de la terre, à une distance de 150.000.000 km, d'un diamètre de 1.392.000 km (109 fois le diamètre de terre [1].

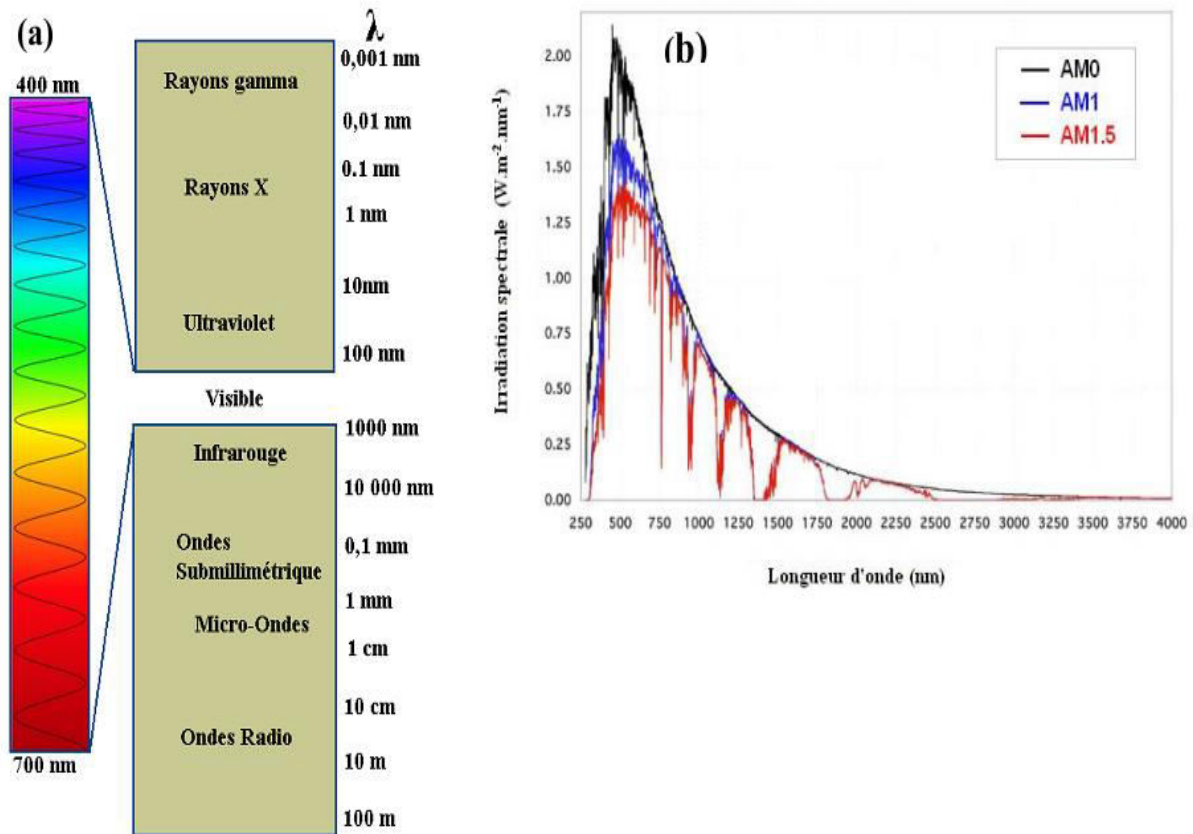


Figure I.1: (a) Spectre solaire, (b) Rayonnements AM0, AM1 et AM1.5 [2].

On appelle constante solaire la puissance reçue du soleil, hors atmosphère, par une surface de 1 m², placée perpendiculairement au rayonnement du soleil. Cette constante est approximativement d'une valeur de 1,4 kW/m² au-dessus de la couche atmosphérique.

Lorsque le rayonnement solaire traverse l'atmosphère, il est affaibli par l'absorption et la diffusion par les molécules gazeuses et les particules atmosphériques. Ce rayonnement est réduit à la surface de la Terre à 1kW/m². Pour caractériser cet affaiblissement dans le domaine de l'énergie solaire, l'acronyme **AMx** est utilisé (AM pour Air masse ou masse d'air optique), x étant défini par : $x = 1/\sin\theta$, θ étant l'angle entre l'incidence des rayons lumineux et l'horizontale à la terre (figure I-2)

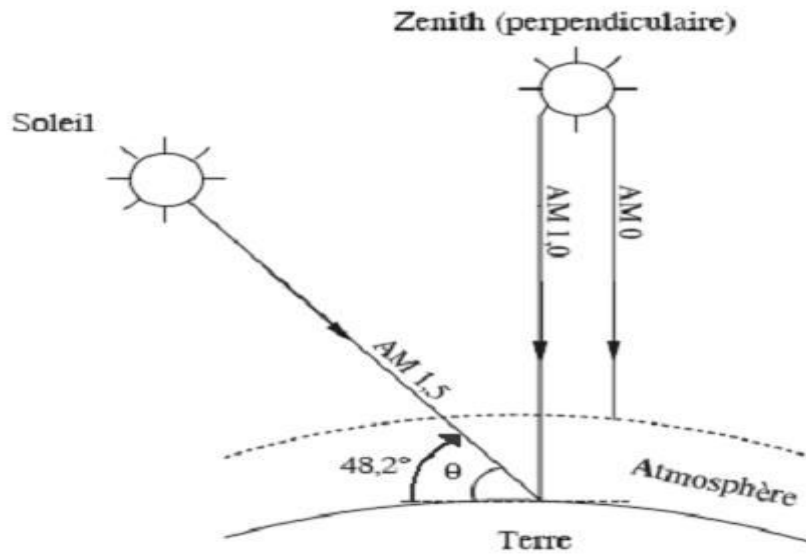


Figure I-2: Description du nombre de masse d'air[2]

La désignation AM0 correspond à une masse d'air nulle pour la lumière arrivant au-dessus de la couche atmosphérique à incidence normale, AM1 lorsque cette lumière arrive à la surface de la terre. Le terme AM1.5 désigne la masse d'airs rencontrés par la lumière arrivant obliquement ($48,2^\circ$) sur la surface de la terre, soit une lumière plus faible du fait que l'épaisseur de la couche atmosphérique traversée est plus grande. Les modules photovoltaïques sont caractérisés sous une irradiation 1000 W.M^{-2} , avec un spectre solaire AM1.5

I.2 Les Oxydes Transparents Conducteurs (TCOs)

La découverte des TCOs remonte au début du vingtième siècle, quand Bädiker a constaté que les couches minces d'oxyde de cadmium ($\text{Cd}\tau$) déposées à l'intérieur d'une chambre à décharge lumineuse étaient à la fois conductrices et transparentes. Cette première observation a donné naissance à un thème de recherche nouveau qui demeure après un siècle un sujet d'actualité. De nombreux matériaux TCO sont apparus ensuite, citons en Particulier In_2O_3 , SnO_2 , ZnO , Cd_2SnO_4 , CdSnO_2 , $\text{In}_2\text{O}_3:\text{Sn}$ (ITO), $\text{ZnO}:\text{Al}$, $\text{SnO}_2:\text{Sb}$, $\text{SnO}_2:\text{Cd}$, $\text{SnO}_2:\text{F}$, CdInO_x , $\text{In}_2\text{O}_3\mu\text{F}$...etc. L'obtention de tels matériaux, présentant un bon compromis entre transparence à la lumière visible et bonne conductivité électrique, constitue un enjeu industriel important[4].

Nous remarquons que l'oxyde de zinc est le plus étudié ces derniers temps. L'explication peut venir du fait que l'oxyde de zinc est aussi utilisé dans de nombreuses applications

optoélectroniques telles que les diodes électroluminescentes (LED) émettant dans les UV. Les deux autres oxydes sont principalement étudiés comme électrodes transparentes. Néanmoins, de nombreux autres oxydes métalliques existent avec des propriétés plus ou moins similaires.

I.2.1 Définition d'un TCO

Selon la théorie des bandes d'énergie, trois états électriques sont possibles : métal, isolant et semi-conducteur. Dans le métal, la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV) se recouvrent, permettant ainsi la libre circulation des électrons. Le semi-conducteur, quant à lui, a une bande interdite qui sépare BV et BC communément appelée gap et notée E_g . Les électrons ne peuvent pas prendre les énergies situées dans cette bande. Il faut qu'ils acquièrent de l'énergie pour passer dans la BC. Pour un gap supérieur, on parle d'isolant car même à température ambiante, BC est vide. Leur gap est supérieur à 4 eV[5].

I.2.2 Les propriétés des TCOs

En général, un TCO doit présenter trois qualités importantes: haute transparence optique, une bonne conductivité électrique et la durabilité mécanique, y compris la flexibilité. Les propriétés d'un coût total de possession ne dépendent pas seulement de sa composition chimique, mais aussi sur la méthode utilisée pour sa préparation. Certaines des propriétés les plus pertinentes d'un coût total de possession sont les suivants:

I.2.2.1 Les propriétés électriques

La physique des semi-conducteurs à grand gap décrit les propriétés électriques des TCOs comme : La conductivité σ s'exprimant en $\Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$ qui est le produit de la densité de porteurs de charges n en cm^{-3} et la mobilité μ qui de la charge en $\text{cm}^2 \text{v}^{-1} \text{cm}^{-1}$ qui et la charge électrique élémentaire q de l'électron.

a) /La résistivité ρ

Définie comme l'inverse de la conductivité, s'exprime en $\Omega \cdot \text{cm}$.

$$\sigma = qn\mu\vartheta = \frac{1}{\rho}$$

Cette grandeur est une caractéristique intrinsèque au matériau (le TCO). C'est-à-dire que pour un matériau ayant une structure isotrope (ce qui n'est pas le cas de quelques TCO), ρ est indépendante de l'épaisseur de la couche de l'échantillon. ρ se déduit de R_s par l'équation

$$\rho = R_s \cdot d$$

La concentration (N) et la mobilité (μ) des porteurs de charge, (les électrons dans notre cas, car les TCOs sont de type n), exprimées respectivement en cm^{-3} et cm^2/Vs : ces deux grandeurs sont les composants de ρ , avec laquelle ils sont liés par

l'équation
$$\rho = \frac{1}{Nq\mu}$$

q : charge de l'électron $1.6022 \times 10^{-19} \text{C}$.

b) La résistance surfacique R_s

Une propriété électrique de surface importante dans le domaine des TCO cette propriété est la résistance surfacique R_s s'exprimant Ω est définie comme le rapport de la résistivité par l'épaisseur de la couche suivant la relation

$$R_s = \frac{\rho}{e}$$

c) La mobilité μ

La mobilité des porteurs μ .

. charge est un paramètre qui influe sur la conductivité électrique, et l'augmentation de cette grandeur améliorera les propriétés électriques du TCO. La mobilité dépend essentiellement de la diffusion des porteurs de charge dans le réseau du matériau. En effet, plus la concentration des porteurs sont élevée, plus la diffusion devient importante la mobilité diminue.

Pour qu'un matériau soit conducteur, il a besoin d'une certaine densité de porteurs appelée concentration critique, notée « n_c ». En dessous de « n_c », le matériau est considéré comme isolant et au-dessus comme conducteur. Le critère pour définir n_c , est appelé critère de Mott [6] défini selon la relation suivante :

$$n_c^{\frac{1}{3}} \cdot a_0 \approx 0.2$$

Où a_0^* : Rayon de Bohr effectif du matériau.

La mobilité est essentielle pour une bonne conductivité des TCOs. La mobilité peut également être définie selon la formule :

$$\mu = \frac{q \cdot \tau}{m^*} = \frac{q \cdot l}{m^* \cdot V_f}$$

Où :

τ : le temps de relaxation entre deux collisions ;

l : le libre parcours moyen ;

V_f : la vitesse de l'électron ;

d) la résistance carrée (Rsq)

Exprimée en Ω / sq cette grandeur est définie comme la résistance d'une surface conductrice carrée d'épaisseur d , Plus (d) est grand, plus Rsq est faible.

I.2.2.2 Mesure de la résistivité électrique et de la résistance carrée d'un TCO

Les résultats des mesures électriques effectuées sont principalement des caractéristiques courant-tension ($I = f(V)$). En variant la tension de polarisation de 0 – 20 V le courant qui circule dans l'échantillon est mesuré à l'aide d'un ampèremètre. La mesure de la pente de la caractéristique courant - tension conduit à la valeur de résistance, à partir de la loi d'ohm : $V = R \cdot I$. Cette loi représente une variation linéaire entre le courant et la tension (contact ohmique). Tenant compte de la géométrie (distance inter-électrodes L , l'épaisseur d et les sections de la couche conductrice S), La résistivité ρ est reliée à ces paramètres par la relation.

$$\rho = R \frac{S}{L} = R \frac{wd}{L}$$

Avec :

ρ : la résistivité électrique du film ;

R : la résistance ;

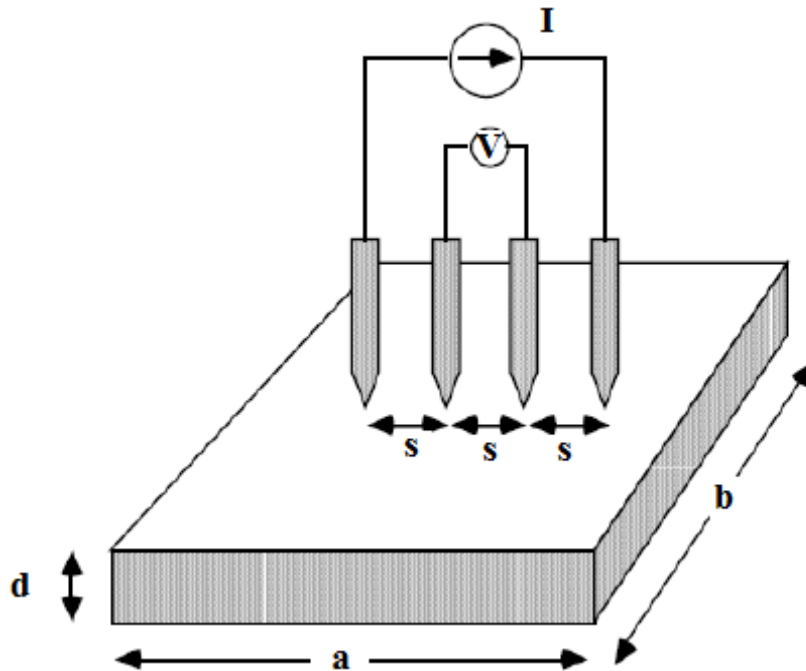
w : la largeur de l'électrode ;

d : épaisseur du film à caractériser ;

L : distance entre les deux électrodes ;

S : la section de la couche conductrice.

Une technique de caractérisation fonctionnelle électrique très courante est la mesure de résistivité ρ d'un échantillon semi-conducteur. Cette mesure s'effectue habituellement à l'aide d'un dispositif 4 pointes telles que celui décrit sur la figure.



Figure(I.3): Géométrie d'un montage de mesure de résistivité 4 pointes[10] .

Quatre pointes en tungstène séparées par une distance « s » sont placées à la surface de l'échantillon dont on veut déterminer la résistivité. Les deux pointes externes. Permettent de faire circuler un courant « I » alors que l'on mesure entre les deux pointes centrales la différence de potentiel « V ». Si l'échantillon a une épaisseur « d » telle que ($d \ll s$), la résistivité de l'échantillon est telle que ($\rho = R_{sq} \cdot d$) où R_{sq} est la résistance carrée (sheet resistance en anglais) dont l'unité est (Ω/\square). Dans les conditions géométriques décrites, la résistance carrée s'exprime par la relation :

$$R_{sq} = \frac{\pi V}{\ln 2 I}$$

La résistivité ρ peut être abaissée en augmentant μ ou N . Mais augmenter N signifie également augmenter l'absorption optique des porteurs de charge qui se situe dans le proche infrarouge (IR) et donc, comme on le verra tout au long de ce travail de thèse, diminuer la transparence des couches du TCO dans cette zone spectrale. C'est pourquoi on cherchera

plutôt à augmenter μ , afin de ne pas dégrader les propriétés optiques des couches du TCO en cherchant à améliorer leurs propriétés électriques.

Une série en épaisseur a été déposée, en prenant comme exemple le ZnO, appliquant les conditions “standard” de dépôt, et en augmentant progressivement le temps de dépôt. Le tableau récapitule les temps de dépôt (t) utilisés pour les échantillons de cette série, ainsi que les épaisseurs (d) et les résistances carrées (Rs_q) mesurées de ces échantillons.

D (nm)	37	85	123	182	232	299	440	930	1370	1910	2440	2990
Rs _q (Ω/sq)	6 ^{E5}	3 ^{E3}	900	320	195	113	70	18	11	7.5	5.1	4.1

Tableau(I.1): Résistance carrée du ZnO en fonction de l'épaisseur de l'échantillon[10]

I.2.3 Domaine d'utilisation

Ces TCO sont des matériaux très utilisés, car beaucoup d'applications recherchent cette combinaison de la transparence optique avec la conductivité électrique. Quelques-unes de ces applications sont listées ci-dessous:

- Ecrans plats ;
- Fenêtres antigel ;
- Fenêtres réfléchissant la chaleur (bâtiments, fours, ...) ;
- Miroirs et fenêtres électro chromiques ;
- Ecrans de contrôle tactile ;
- Protection électromagnétique ;
- Dissipation des charges électrostatiques ;
- *Cellules solaires : comme contact avant à travers lequel la lumière doit passer afin d'entrer dans la cellule solaire.*

I.2.4 Choix d'un TCO

Pour chaque application, le TCO le plus approprié est celui qui montre une bonne conductivité électrique avec une bonne transparence optique, cependant une limite supérieure de conductivité σ et de transmission α déterminée par la théorie de transport des électrons dans un métal selon l'équation [7].

$$\frac{\sigma}{\lambda} = 4 \pi^2 \varepsilon_0 C^3 n (m^* \mu)^2 \lambda^{-2} e^{-2}$$

ε_0 : la permittivité du vide ;

c : la vitesse de la lumière ;

n : l'indice de réfraction de film ;

m^* : la masse effective des électrons de conduction ;

μ : la mobilité ;

λ : la longueur d'onde ;

e : la charge électronique.

Puisque les (TCOs) ont des indices proches de 2 dans le visible, le meilleur TCO présentera le plus grand produit de mobilité et de masse effective. Par ailleurs dans de nombreuses applications et en particulier dans les systèmes d'affichage, il est souhaitable et nécessaire que le film ait une épaisseur minimale afin de conserver une surface aussi lisse que possible. Le paramètre important devient alors la conductivité c'est à dire le produit de la mobilité par la concentration de porteurs.

Paramètre	Mâtereaux conducteur transparent
Gap	>3.1 ev (380) nm
Transparence(550)nm	>90% type (n).>85% type (p)
Résistivité	>1 ^E -4Ω-cm type (n),>1 ^E -3Ω-Cm type(p)
Concentration de porteurs	>1 ^E -20Ω-Cm ² type(n),>1 ^E 20Ω- Cm ² type(p)
Mobilité	>40 Cm ² (Vs) ⁻¹ type(n),>20 Cm ² (Vs) ⁻¹
Resistance carrée	<10KΩ/carrée(pour 20nm d'épaisseur)

Tableau(I.3) : caractéristique minimale pour un TCO[8].

I.2.4.1 Facteur de mérite

En plus de bonnes propriétés optiques et électriques, d'autres critères influencent les choix des matériaux et des méthodes de dépôt. La gravure des couches, le coût de production ou encore la toxicité sont importants. La fréquence de plasma, la dureté des couches et l'adhérence, la tenue thermique et chimique des couches sont également des paramètres essentiels[9]

Matériaux	Resistance carrée Ω	Absorbance dans le visible	Facteur de qualité
ZnO :F	5	0.03	7
Cd ₂ SnO ₄	7.5	0.02	7
ZnO :Al	3.8	0.05	4
In ₂ O ₃ :Sn	6	0.04	5
SnO ₂ :F	8	0.04	3
ZnO :Ga	3	0.12	3
ZnO :B	8	0.06	2
SnO ₂ :sb	20	0.12	0.4
ZnO :In ₂	20	0.2	0.2

Tableau(I.2) :les facteurs de qualité pour des TCOs dopés obtenus par CVD.

I.3 L'électrode tri-couche

I.3.1 Resistance carrée dans une électrode multicouche

De façon récente, de nombreux travaux rapportent l'intérêt des anodes tri-couches (TCO/métal/TCO) dans les composants optoélectroniques. L'insertion d'une couche fine métallique (Ag, Au, Cu, Al ...) entre deux couches d'oxyde (SnO₂, ZnO ...) a pour but de diminuer la résistance carrée de l'électrode ainsi constituée tout en élargissant la fenêtre de transmission optique dans le visible pour des épaisseurs du TCO et de métal optimal, un modèle parallèle peut être modélisé comme le montre la figure

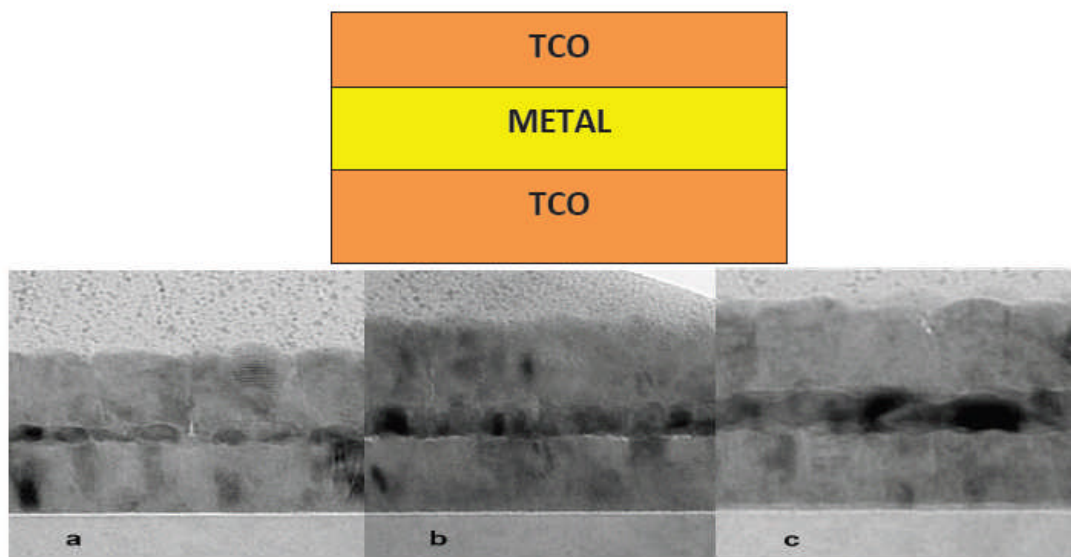


Figure (I.4) : Coupe vertical par TEM d'une structure multicouche ZnO/Cu/ZnO Épaisseur du Cu, (a) 3 nm, (b) 6 nm, et (c) 8 nm [11].

$$\frac{1}{R_s} = \frac{1}{R_{TCO}} + \frac{1}{R_{metal}} + \frac{1}{R_{TCO}}$$

La résistance carrée équivalente elle est égale à la résistance la plus faible dans le dispositif, d'une certaine manière le métal possède une résistance moins élevée par rapport aux (TCOs) [12].

I.3.2 l'utilisation du ZnO dans la réalisation d'une électrode tri-couche

L'oxyde de zinc, ZnO, fait partie des TCO (transparent conducting oxide) qui sont des matériaux semi-conducteur à grand gap, transparent dans le visible et le proche infrarouge, pouvant présenter un bon candidat dans la réalisation des électrodes tri-couches vu ses propriétés structurales et optiques

Le ZnO stœchiométrique est un semi-conducteur intrinsèque ayant un gap minimal de 3,35 eV. Mais en général, on obtient par les techniques usuelles de fabrication du ZnO ayant une conductivité de type n. Cette conductivité de type n est produite par un excès de zinc dans les couches de ZnO. Afin d'améliorer encore la conductivité des couches de ZnO, il est possible de doper ces couches. Les mécanismes de dopage sont soit substitutionnels ou interstitiels. Le type de dopant utilisé peut appartenir aux groupes III ou IV du tableau périodique des éléments (B, Al, Ga, In, Ge, ...). Les atomes dopants vont, dans le cas du

dopage substitutionnel, remplacer les atomes de zinc du réseau atomique du ZnO, Deux électrons de leur orbitale externe vont être utilisés pour la liaison ionique avec les atomes d'oxygène, et le reste des électrons de cette orbitale externe va être cédé dans la bande de conduction. On peut également utiliser des dopants appartenant au groupe VII du tableau périodique des éléments, tel que le fluor. Dans ce cas, les atomes dopants vont remplacer les atomes d'oxygène du réseau atomique de ZnO, Il est important de noter que sous sa forme pigmentaire, il diffuse et absorbe fortement les rayonnements ultraviolets.

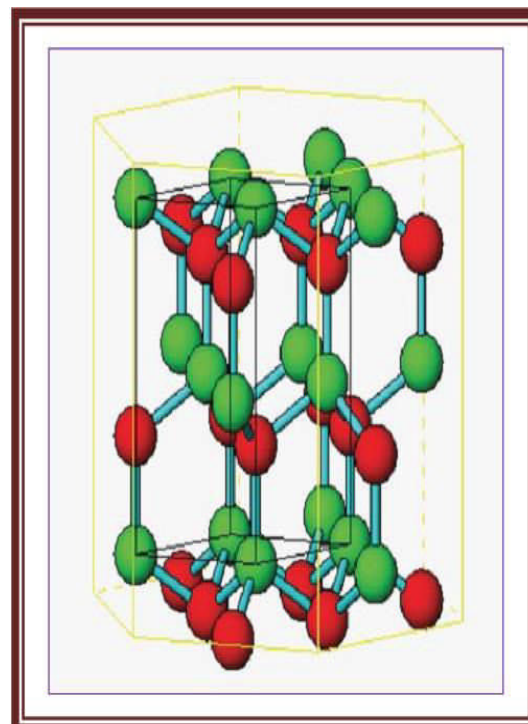
I.3.3.1 Structure cristalline de ZnO

L'oxyde de zinc est un oxyde transparent conducteur du groupe II -VI. Il cristallise sous différentes structures comme le sel gemme, le zinc blende et la Wurtzite (figure II.12). Les films d'oxyde de zinc sont principalement connus sous la structure Wurtzite. Cette structure peut se définir comme un empilement hexagonal d'oxygène ($a=3.250\text{\AA}$, $c=5.205\text{\AA}$). Les tétraèdres sont liés entre eux par les atomes d'oxygènes et leurs centres sont occupés par un cation Zn^{2+} , les atomes d'oxygène et de zinc se trouvent respectivement dans les positions :

$$\text{O}^{2-} (1/3, 2/3, z),$$

$$(1/3, 2/3, 0) \text{ avec } z=0,38.$$

- Structure hexagonale:
Wurtzite
 - Groupe d'espace: $P6_3mc$
 - Paramètres:
 $a=3.25 \text{\AA}$ $c=5.12 \text{\AA}$
- Zn^{2+}  O^{2-} 



Figure(I.4): Structure cristalline du ZnO (Wurtzite)[13].

I.3.3.2 Propriétés électriques du ZnO

D'oxydes purs est due à la forte concentration en porteurs libres (électrons), étant C'est un semi-conducteur dégénéré de type n , La grande conductivité des couches donné que la mobilité dans ces couches est considérablement plus faible que celle en volume du matériau correspondant. La forte concentration en électrons est attribuée à la déviation par rapport à la stœchiométrie (ou défauts dans la structure),

Il y a une certaine anomalie dans la littérature concernant l'énergie du gap. Srikant et Clarke annoncent que le gap d'énergie du ZnO à la température ambiante est de $3,3eV$, tandis qu'une bande de valence à la transition de niveau de donneur à $3,15 eV$ explique le fait qu'une plus petite valeur (typiquement $3,2 eV$) est souvent rapportée. Ainsi, le gap à température ambiante du ZnO est compris entre $3,2$ et $3,3eV$.

I.3.3.3 Propriétés optiques

L'interaction de la lumière (onde électromagnétique) avec la matière (électrons du matériau) peut expliquer clairement les propriétés optiques d'un matériau Lors de l'application de la théorie de dispersion sur un matériau, il convient de séparer l'absorption fondamentale de l'absorption des porteurs libres. Si seule la première contribution est présente, le matériau a la qualité d'un diélectrique. le cas échéant, le matériau est un métal. Pour les semi-conducteurs, les deux contributions sont importantes. La première correspond au seuil d'absorption inter bandes et sépare la zone d'absorption dans l'ultraviolet de la zone à forte transparence dans le visible. La seconde repère le front de la montée de la réflectivité dans l'infrarouge correspondant aux oscillations de plasma des électrons de conduction.

Une onde électromagnétique interagissant avec le semi -conducteur sera complètement absorbée par celui-ci si l'énergie associée à l'onde électromagnétique est capable de transférer des électrons de la bande de valence à la bande de conduction, c'est-à-dire, si cette énergie est au moins égale à celle de la largeur de la bande interdite et le schéma ci -dessous montre la variation de transmission optique en fonction des longueurs d'ondes .

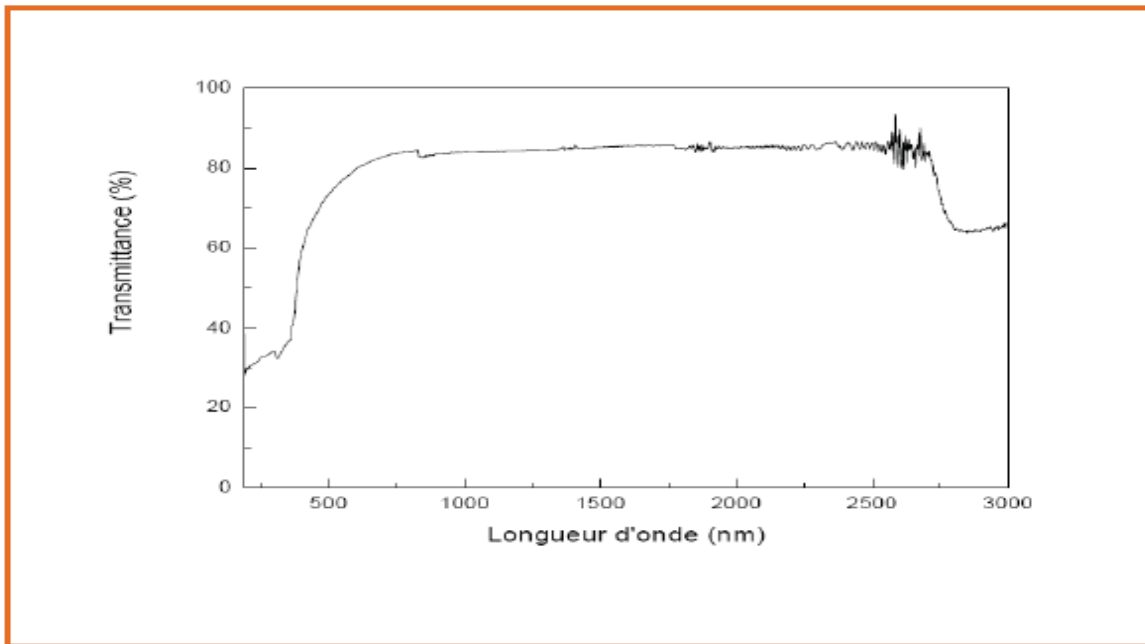


Figure (I.5) : Spectre de transmission en fonction de la longueur d'onde du ZnO[14]

L'indice de réfraction de l'oxyde de zinc sous la forme massive est égal à 2,0. En couches minces, son indice de réfraction et son coefficient d'absorption varient en fonction des conditions d'élaboration des couches. L'indice de réfraction a une valeur variant entre 1,7 et 2,2 suivant la longueur de l'onde incidente. L'amélioration de la stoechiométrie du ZnO conduit à une diminution du coefficient d'absorption et à une augmentation de l'énergie de la bande interdite, la figure nous renseigne l'indice de réfraction en fonction des longueurs d'ondes incidente.

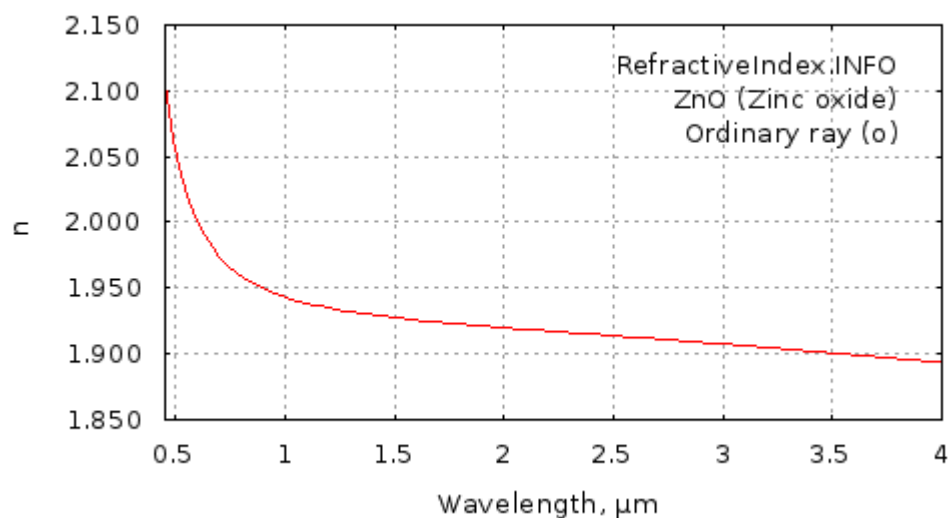


Figure (I.5) : Variation de l'indice de réfraction du ZnO en fonction de la longueur d'ondes.

I.4 Notion sur l'électromagnétisme

La notion de champ, quelque peu abstraite, est déduite du principe d'équilibre donc des lois de conservation. Le champ électromagnétique est aux charges et aux courants, ce que le champ gravitationnel est aux masses : de même que la présence d'une masse induit un champ gravitationnel, la présence d'une charge induit un champ électromagnétique. Bien sûr on ne mesure que de manière indirecte la valeur d'un champ ; cela se fait par l'intermédiaire de son seul effet palpable, que ce soit la force ou un courant induit par ce même champ. Le champ électromagnétique et les forces qui lui sont associées ont été mis en évidence dans le cadre d'observations il y a un peu moins de deux cents ans. On se contentera malheureusement pour les inconditionnels de l'histoire de la physique, de dire que c'est grâce aux formulations de Faraday, Ampère et Gauss entrent autres, que Maxwell énonce les équations qui régissent la propagation du champ électromagnétique, en fonction des sources et des propriétés du milieu. Les équations de propagation dans la matière s'écrivent de la manière suivante :

$$\nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{t}} \mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{0} \quad (\text{I.2})$$

$$\nabla \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{t}} \mathbf{D}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \mathbf{0} \quad (\text{I.3})$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \boldsymbol{\mu}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) * \mathbf{B}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \quad (\text{I.4})$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) = \boldsymbol{\epsilon}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) * \mathbf{E}(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \quad (\text{I.5})$$

Avec * l'opérateur de convolution temporelle

Le champ électrique E (Volt/m)

Le champ magnétique H (Ampère/m)

La densité de flux électrique D (Coulomb/m²)

La densité de flux magnétique B (Webber/m²)

I.5 Les propriétés électromagnétiques d'un milieu

Une onde électromagnétique et un milieu interagissent par l'intermédiaire de trois paramètres la conductivité σ , la permittivité électrique ϵ et la perméabilité magnétique μ . Ces trois paramètres apparaissent clairement dans les équations de Maxwell et peuvent :

- prendre la forme de tenseur afin de modéliser l'anisotropie du milieu,

- disposer d'une partie complexe afin de participer à l'atténuation globale de l'onde électromagnétique,
- dépendre de la fréquence (caractère dispersif du milieu).

I.5.1 Permittivité électrique (ϵ en F/m)

Lorsqu'un champ variable est appliqué, les particules constituant le matériau tendent à changer de position d'équilibre afin de compenser l'effet du champ. Ce phénomène de polarisation se fait pendant un temps minimum, dit de relaxation ; si le champ varie trop rapidement les particules n'ont pas le temps de se mouvoir. On distingue 4 principaux types de polarisation :

- La polarisation électronique : déformation du nuage électronique sous l'action d'un champ,
- La polarisation dipolaire ou d'orientation : les molécules dipolaires soumises à un champ voient l'axe de leur dipôle tenter de s'aligner avec ce dernier,
- La polarisation ionique : l'existence d'ions de signes contraires dans certains solides (NaCl) provoque des accumulations distinctes sous l'action d'un champ,
- La polarisation inter faciale ou polarisation de charges : une accumulation d'ions au niveau des interfaces dans un matériau hétérogène soumis à l'action d'un champ électrique.

I.5.2 Perméabilité magnétique (μ en H/m)

Elle correspond à l'énergie stockée ou perdue dans le matériau suite aux phénomènes d'induction magnétique, à l'instar de ce qu'était la permittivité vis à vis du déplacement de charge. La superposition des moments magnétiques orbitaux (dues à la rotation des électrons autour du noyau), et des spins (dues à la rotation des électrons sur eux mêmes) caractérise le diamagnétisme si la résultante est nulle et la paramagnétisme sinon.

En présence d'un champ magnétique extérieur, le matériau diamagnétique développe un moment induit dans le sens opposé au champ appliqué, alors que dans un matériau paramagnétique les moments existants tendent à s'aligner suivant le champ d'excitation. Il arrive dans certains matériaux que les spins soient naturellement orientés dans la même direction : ils sont dit ferromagnétiques. Les amplitudes de champs résultants sont dans ce cas bien plus importants que pour le diamagnétisme et le paramagnétisme. La perméabilité magnétique traduit l'appartenance d'un matériau à l'une (ou plusieurs) de ces classes de comportement. Dans les matériaux naturels, on constate de plus une dépendance fréquentielle

de la perméabilité magnétique donc une aptitude à perdre de l'énergie magnétique lors de l'application du champ d'excitation. Ces pertes se développent pendant les périodes transitoires d'alignement des moments aux niveaux des particules élémentaires : ce phénomène peut être modélisé par une partie imaginaire de la perméabilité magnétique, comme il l'avait été pour la permittivité diélectrique pour les phénomènes de polarisation électrique.

Force est de constater que la grande majorité des matériaux géologiques rencontrés dans la pratique ne réagissent que très faiblement à une excitation magnétique. Ainsi la perméabilité relative μ_r sera souvent prise égale à 1 pour la plupart des matériaux géologiques.

I.5.3 Conductivité (σ en S/m)

La conductivité est définie comme étant la quantité d'énergie mise en œuvre lors du transport de charges libres. Lors de l'application d'un champ variable, le transport se fait pendant un demi cycle, et il devient impossible de distinguer concrètement la part de la permittivité et de la conductivité dans le stockage d'énergie d'une part et dans les pertes d'autre part.

I.6 La dispersion et l'atténuation d'une onde électromagnétique dans le matériau

La matière est le lieu de phénomènes dispersifs et atténuants, ces phénomènes intimement liés, sont le résultat des interactions entre l'onde et la matière sous la forme de polarisations (électriques et magnétiques) et de conduction de particules. Si la source correspond à une impulsion d'une largeur de bande plus ou moins bien définie. La dépendance fréquentielle des paramètres va induire des vitesses de phases différentes pour l'ensemble des composantes fréquentielles de l'impulsion. En conséquence, la forme de l'impulsion se modifie pendant la propagation. Ce phénomène de dispersion physique (qu'il ne faudra pas confondre avec la dispersion numérique due à la discrétisation du milieu).

Résumons le problème : les paramètres électromagnétiques dépendent de la fréquence, les vitesses de phase pour chaque fréquence du spectre de l'impulsion sont différentes (puisqu'elles sont déduites des paramètres électromagnétiques). Par conséquent la forme initiale de la source se déforme lors de sa propagation. Sachant que les dépendances

fréquentielles des phénomènes sont liées aux différents temps de relaxation donc à la polarisation électrique, magnétique et à la conductivité.

I.7 La résolution des équations de propagation électromagnétique

Les équations de propagation électromagnétiques, peuvent être formulées de différentes manières suivant les hypothèses auxquelles elles sont soumises, et ne sont par conséquent pas strictement équivalentes en termes d'approximation. On distingue en générale les formulations intégrale et différentielle des équations de Maxwell exprimées dans le domaine temporel ou spectral ; à chacune de ces représentations correspond une technique particulière de résolution. On retiendra malgré tout, que plus qu'un problème de terminologie auquel tout cela peut se ramener, l'idée directrice est de résoudre les valeurs de champs électromagnétiques en temps et espace, en discrétisant les opérateurs et le milieu inhérents à chaque formulation.

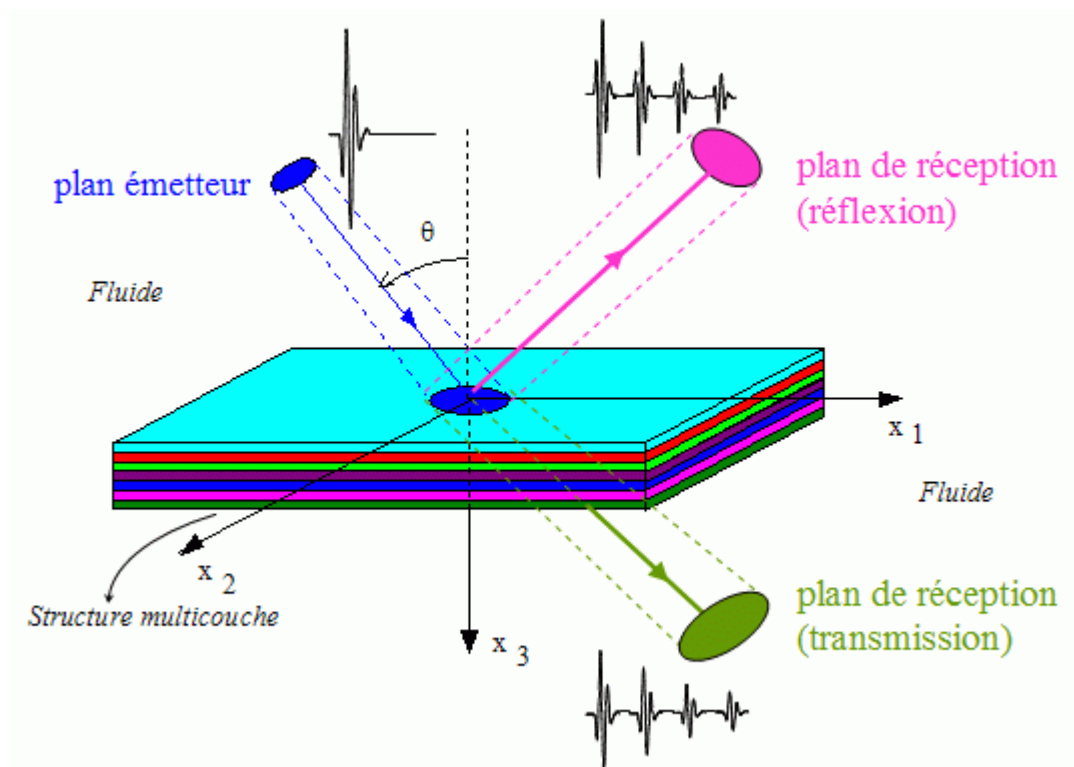


Figure (I.5) : Propagation des ondes dans les milieux multicouches

I.8 Propagation de l'onde plane

L'écriture des conditions aux limites à l'interface séparant deux couches successives (égalité des déplacements et des contraintes) conduit à l'obtention de la matrice de transfert d'une super couche, qui permet d'exprimer les déplacements et contraintes à l'interface séparant deux super couches en fonction de ceux à l'interface entre les deux précédentes. La matrice de transfert de tout le milieu est alors la puissance P -ième de la matrice de transfert d'une super couche.

En utilisant les ondes de Floquet et en écrivant les conditions aux limites aux interfaces séparant le milieu multicouche des deux milieux l'environnant, on obtient alors les coefficients de réflexion, de transmission et le champ de déplacement à l'intérieur du multicouche

I.9 .Ondes de Floquet

Les ondes de Floquet sont des modes de propagation particuliers du multicouche périodique infini. Ce sont les solutions qui permettent de passer d'une interface à une autre par l'intermédiaire d'une matrice diagonale. Ces ondes obtiennent à partir des valeurs propres de la matrice de transfert d'une super couche.

Les ondes planes classiques peuvent alors se décomposer sur la base des ondes de Floquet. Tout se passe comme si ces ondes se propageaient dans un milieu équivalent au milieu stratifié, par analogie avec la propagation en milieu homogène

II Introduction

De nombreuses problématiques industrielles exigent des techniques de simulation innovantes. Depuis les années 70, la simulation numérique est un des moteurs de l'innovation scientifique et industrielle. Une meilleure compréhension des phénomènes physiques et leur prise en compte en amont du processus de définition des produits ont abouti à l'amélioration des performances, de la durée de vie et des coûts de possession. Depuis 1998, COMSOL répond à ces attentes en apportant une solution innovante et pluridisciplinaire. Elle combine puissance et souplesse pour simuler des applications impliquant une ou plusieurs phénomènes physiques. Avec des possibilités de couplage illimitées dans l'optique d'aider les organismes industriels et de recherche innovants.

II.1 Description

COMSOL Multi Physique (ex FEMLAB) est un logiciel d'analyse et solveur par éléments finis, qui a diverses applications en physique et en ingénierie en particulier les phénomènes couplés, ou multiphasiques. COMSOL Multi Physique offre aussi une vaste et bonne gestion d'interface MATLAB et ses boîtes à outils pour une grande variété de programmation et de post procédures possible. Une interface similaire est offerte par COMSOL Script. Les paquets sont multi plate formes (Windows, Mac, Linux, Unix.) En plus de la physique classique à base d'interfaces utilisateur, COMSOL Multi Physique permet également d'entrer dans des systèmes couplés d'équations aux dérivées partielles (EDP) ; elles peuvent être saisies directement ou en utilisant la soi-disant forme faible. COMSOL a été lancé par les étudiants diplômés à Germund Dahlquist reposant sur des codes mis au point pour un cours universitaire à l'Institut royal de technologie (KTH), à Stockholm, en suède

II.2 Sélectionne le physique

Plusieurs modules spécifiques à l'application sont disponibles pour COMSOL Multi Physique:

- rayonnement en milieu participation (rpm)
- onde électromagnétique, analyse fréquentielle (ewfd)
- AC/DC Module ;
- Acoustiques Module ;
- Transport d'espèces chimiques ;
- Electrochimie;

- Ecoulement fluide ;
- Transfer de chaleur;
- Optique ;
- Plasma;
- Radio fréquence;
- Mécanique des structures ;
- Semi-conducteur ;
- mathématique ;

II.3 Procédure de simulation

Les étapes essentielles de conception d'un modèle en utilisant COMSOL Multi Physiques sont :

- Utilisation d'une physique prédéfinie ;
- Implémentation et résolution d'un modèle Multi Physiques ;
- Définition de propriétés physiques dépendant de la solution recherchée ;
- Analyse temporelle.

Les étapes de construction d'un modèle comprennent notamment :

- Définition de la géométrie ;
- Définition de la physique et des conditions aux limites ;
- Maillage ;
- Résolution ;
- Post-traitement et analyse des résultats.

Sauf dans quelques cas spécifiques, il est particulièrement difficile de mettre en œuvre des modélisations analytiques lorsque des phénomènes d'interaction doivent être pris en compte, tels que les interactions entre une source lumineuse et un matériau qui présente des propriétés optiques. Il faut alors avoir recours à des modélisations numériques. Par la suite nous présentons l'utilisation du logiciel COMSOL Multi Physique.

II.3.1. Chargement du logiciel

Double-cliquer sur l'icône de COMSOL Multi Physiques pour lancer le logiciel. La fenêtre du model navigateur s'ouvre.

II.3.2 Choix du mode d'application

Ce modèle commence par le choix de la dimension géométrique et d'un (ou plusieurs) mode d'application dans la fenêtre Model Navigator qui s'ouvre lorsqu'on lance le logiciel COMSOL Multi Physique. Pour traiter le problème de la propagation d'une lumière incident sur un matériau, nous avons choisi de travailler en deux dimensions.

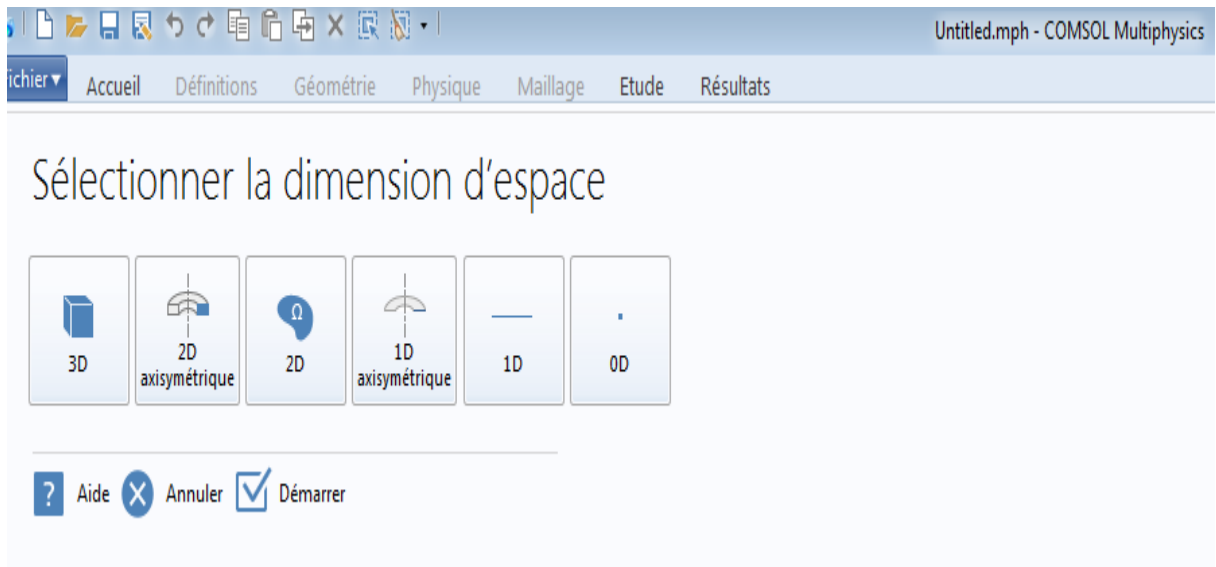


Figure II-1 : sélectionner de dimension d'espace

II.3.3 Sélectionne la physique

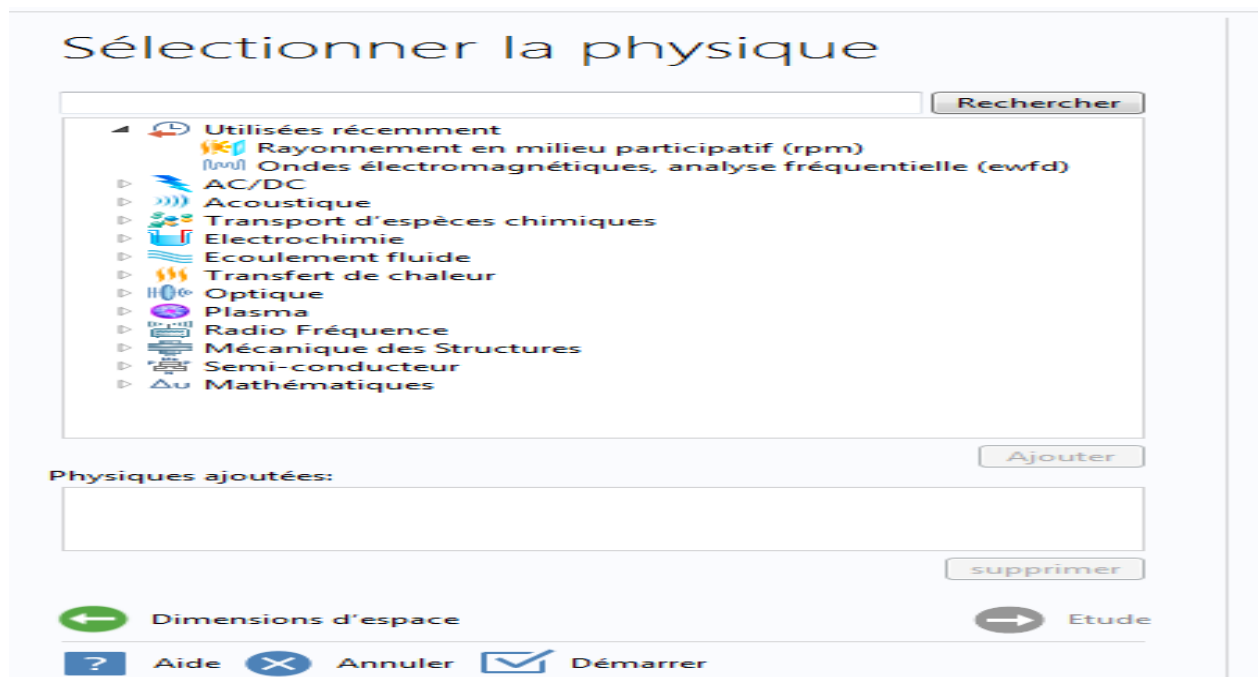


Figure II-2 : sélectionner la physique

II.3.4 Définition de la géométrie

Une fois le mode choisi, l'interface graphique s'ouvre. En doit d'abord commencer par déterminer la géométrie du problème qui définit concrètement l'espace ou l'on doit résoudre notre problème, la figure ci –contre montre l'interface de travail qui nous permet d'obtenir la géométrie voulue et les équations.

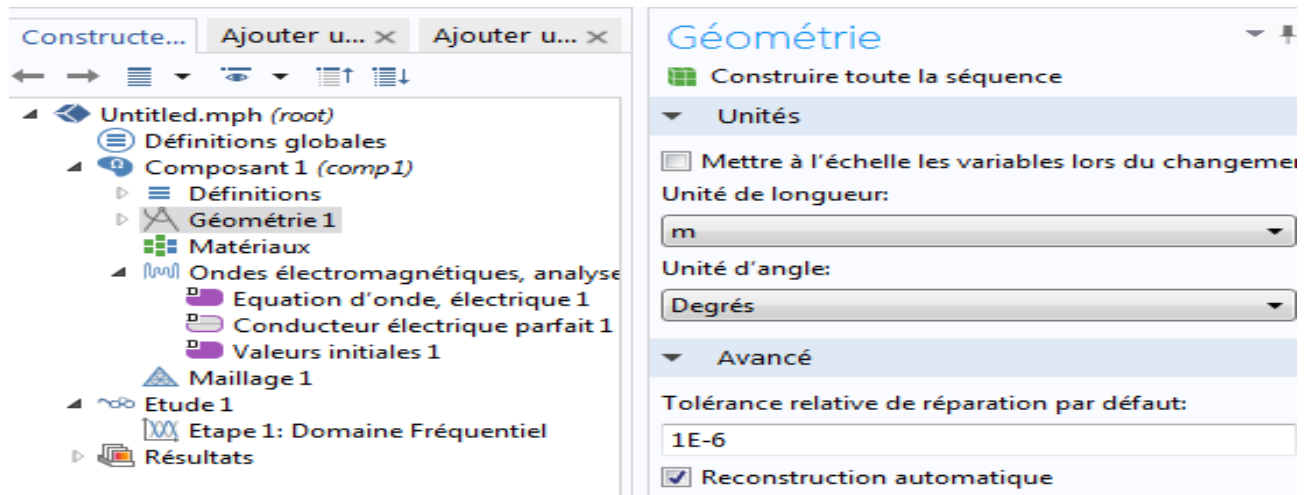


Figure II-3 :la Géométrie

Pour l'exemple traité, on a pris une géométrie cubique pour représenté la forme de l'électrode multicouche avec les différentes couches qui la compose, TCO, Métal, TCO.

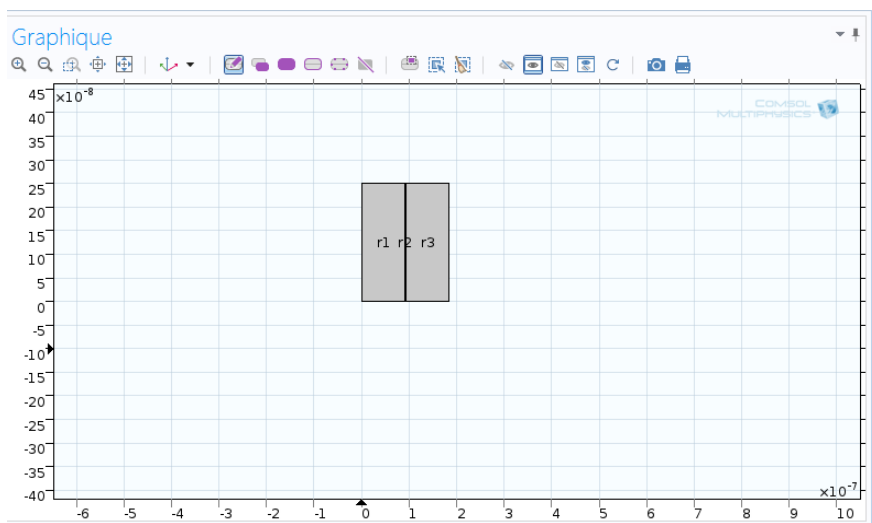


Figure II-4 : la Géométrie de TCO

Une fois la géométrie créée, il existe pour le logiciel des sous domaines qui correspondent à des portions de l'espace initial. Dans l'exemple traité, l'espace initial est de dimension trois et les sous domaines définis par la géométrie sont l'espace compris à l'intérieur du milieu. Les équations et les conditions initiales sont définies sur les sous domaines de la géométrie, de même pour les conditions aux limites.

Afin de faciliter d'éventuelles modifications du modèle existant, il est préférable de regrouper tous les paramètres constants dans le tableau Constants accessible à partir du menu Options. Lorsque l'on remplit les différents champs par exemple le coefficient d'absorption d'un matériau on utilise alors les noms des paramètres au lieu de leurs valeurs. Cela permet, lorsque l'on souhaite changer la valeur d'un paramètre, de faire une seule fois la modification dans le tableau Constants au lieu de modifier la valeur dans chaque fenêtre où le paramètre apparaît, au risque d'en oublier.

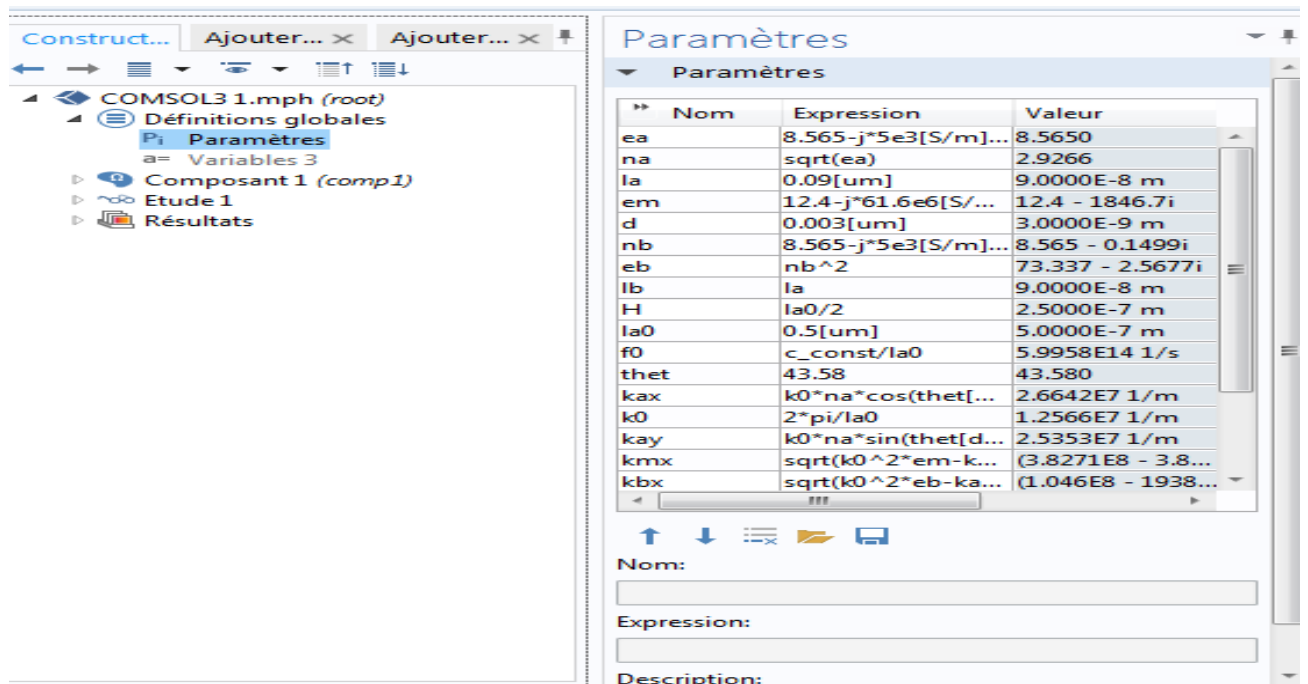


Figure III-5 : Domaine de paramétrage des constantes

II.3.5 Matériaux

Une large gamme de matériaux sont disponible sur COMSOL, aussi le logiciel offre la possibilité de créer un matériau en lui associant toutes les caractéristiques et les propriétés nécessaires disponible dans la littérature

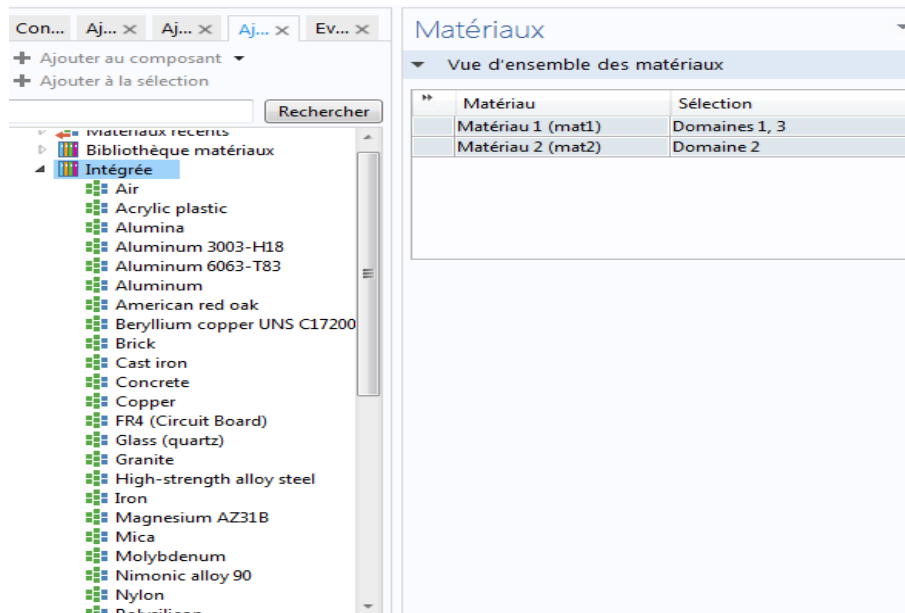


Figure II-6 : Domaine choix et création des matériaux.

II.3.5.1 Propriété des matériaux

Le logiciel COMSOL permet de visualiser les propriétés standard, optiques, électriques, et mécaniques du matériau, aussi on pourra ajouter d'autres propriétés qui ne figurent pas dans le logiciel.

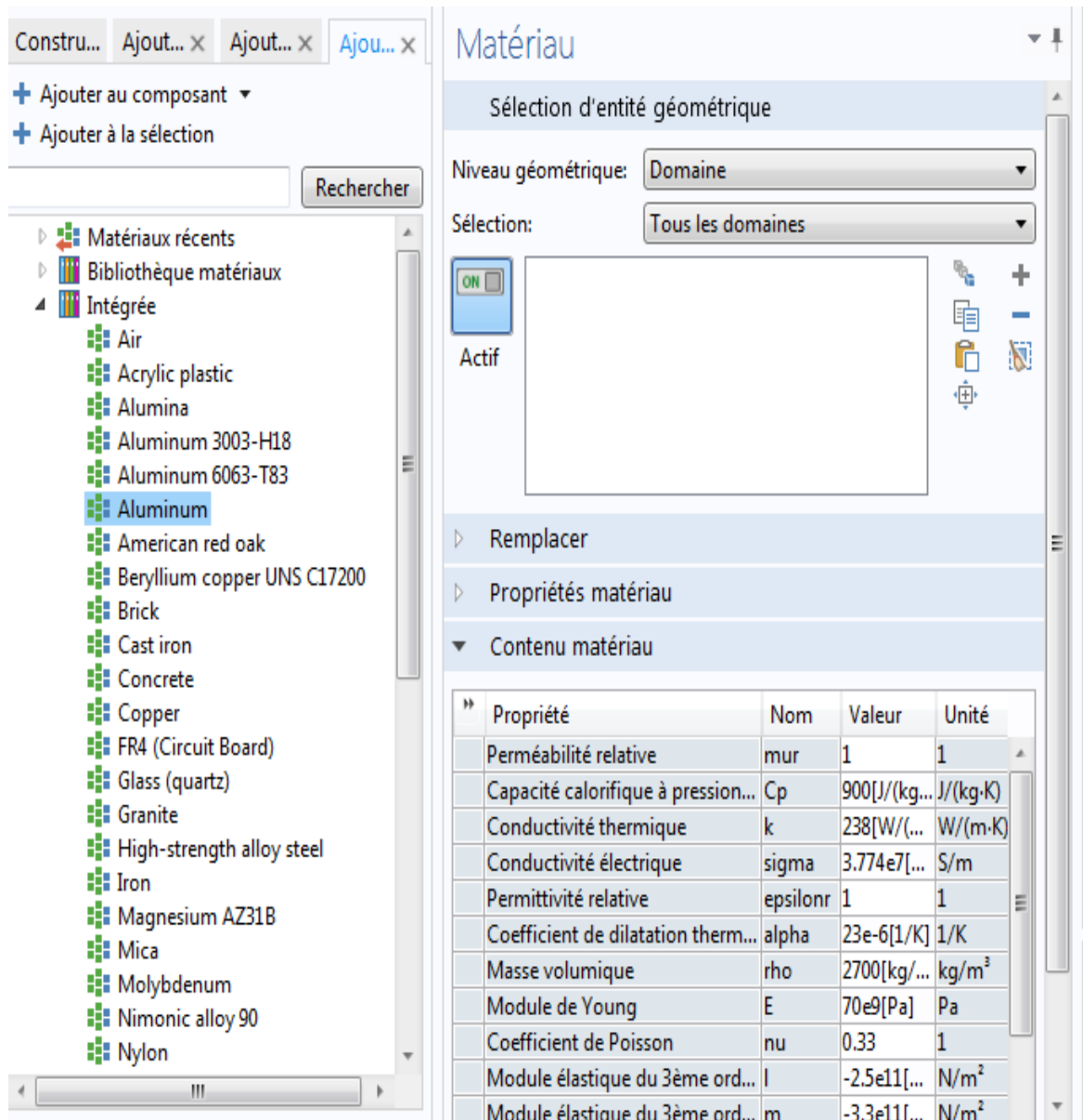


Figure III-7 : domaine de configuration des propriétés du matériau .

II.3.6 Maillage

Le maillage correspond à la discrétisation spatiale de la géométrie en volumes élémentaires (appelés mailles) définis par des points (appelés nœuds). Ces nœuds constituent les connexions entre les mailles. Le maillage est réalisé automatiquement par le logiciel. L'algorithme prend pour point de départ les éléments de la géométrie et crée des nœuds supplémentaires jusqu'à satisfaire des critères prédéfinis comme le nombre de mailles ou la taille maximale des mailles. On peut utiliser les tailles prédéfinies (extra grossier, grossier, normal, fine, extra fine...) par le logiciel ou agir sur les paramètres de génération du maillage, soit au niveau global, soit sur chaque élément de

la géométrie, dans la fenêtre paramètre de ma quadratique du menu maillage. Dans notre cas on a choisi le maillage quadratique (extrêmement fin) sur tout le domaine a fin d'obtenir des amplitude considérablement élevé

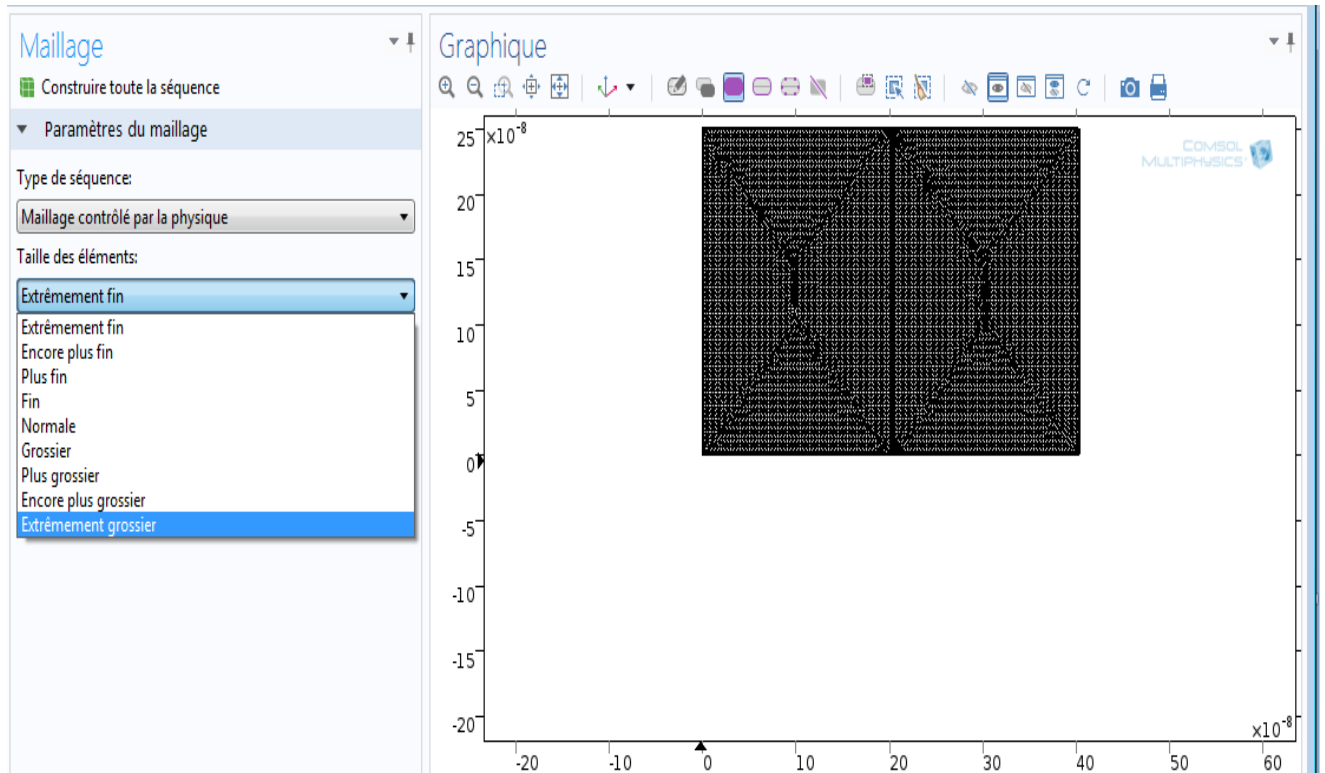


Figure II-8 : Exemple d'une représentation du maillage d'une électrode.

Différents paramètres doivent être introduits qui sont nécessaire afin de réaliser notre simulation , ainsi les constantes physique et diélectrique pour les matériaux , comme la perméabilité relative et la permittivité relative des différents éléments qui constituent les électrodes, comme le montre le tableau, pour la couche métallique nous avons opté pour l'aluminium (Al) qui est un diamagnétique dont la valeur de sa permittivité relative est composée d'une partie réelle, d'une partie imaginaire , $\epsilon = \epsilon' + j\epsilon''$, et varie en fonction des longueurs d'onde incidentes .

Λ	n	k
450	0.62	5.48
500	0.789	6.15
600	1.22	7.31
700	1.91	8.39
800	2.74	8.31

Tableau(II.1): Constante diélectrique de l'aluminium (permittivité).

Λ	n
450	2.10
500	2.03
600	1.99
700	1.97
800	1.95

Tableau(II.2): Constante diélectrique ZnO (permittivité).

II.4 Modélisation numérique

Nous avons lancé une simulation sous COMSOL des électrodes multicouches à base de, ZnO/Al/ZnO afin d'optimiser les épaisseurs des couches de TCOs et de la couche métallique qui constitue chaque électrode transparente. Nous avons utilisé la version 4.4 de COMSOL à la résolution des équations de Maxwell.

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \vec{E} \quad \nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad (\text{II-1})$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = -\nabla \vec{H} - \vec{j} \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad (\text{II-2})$$

Les équations qui caractérisent le matériau sont données par la relation

$$\vec{D} = \epsilon \vec{E}, \quad \vec{B} = \mu \vec{H}, \quad \vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (\text{II-3})$$

La combinaison de ces résultats dans les équations nous donne ce résultat des équations

$$\mu \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\nabla \vec{E} \quad \partial \frac{\epsilon \vec{E}}{\partial t} = \nabla \vec{H} - \sigma \vec{E} \quad (\text{II-4})$$

Nous exprimons le champ électrique et magnétique par le vecteur potentiel

$$\mu_0 \vec{H} = \nabla \vec{A} \quad \vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \quad (\text{II-5})$$

Ainsi l'insertion de (III-4) dans (III-5) nous donne l'équation (III-6)

$$\mu_0 \sigma \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} + \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} \nabla \cdot \left(\frac{1}{\mu_0} \nabla \cdot \vec{A} \right) = 0 \quad (\text{II-6})$$

L'excitation est purement harmonique (onde plane) , donc la réponse c.à-d. La transmission et la réflexion doivent aussi être harmonique , par conséquent. nous devons factoriser l'équation (III-4) dont l'amplitude doit être un facteur dépendant du temps.

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}(\vec{r}) \exp(j\omega t) \quad (\text{II-7})$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}(\vec{r}) \exp(j\omega t) \quad (\text{II-8})$$

Nous arrivons ainsi à formuler l'équation harmonique (III-9) de la propagation d'une onde électromagnétique.

$$\nabla \cdot (\mu^{-1} \nabla \cdot \vec{E}) - \omega^2 \epsilon_c \vec{E} = 0 \quad (\text{II-9})$$

$$\nabla \cdot \left(\nabla \frac{1}{\epsilon_c} \cdot \vec{E} \right) - \omega^2 \mu \vec{E} = 0 \quad (\text{II-10})$$

Où ϵ_c et la permittivité complexe du matériau.

$$\epsilon_c = \epsilon - j \frac{\sigma}{\omega} \quad (\text{II-11})$$

II.5 Variation de l'épaisseur de la couche d'aluminium

La variation de couche d'aluminium de [1nm,10nm] est donne par les figures suivant :

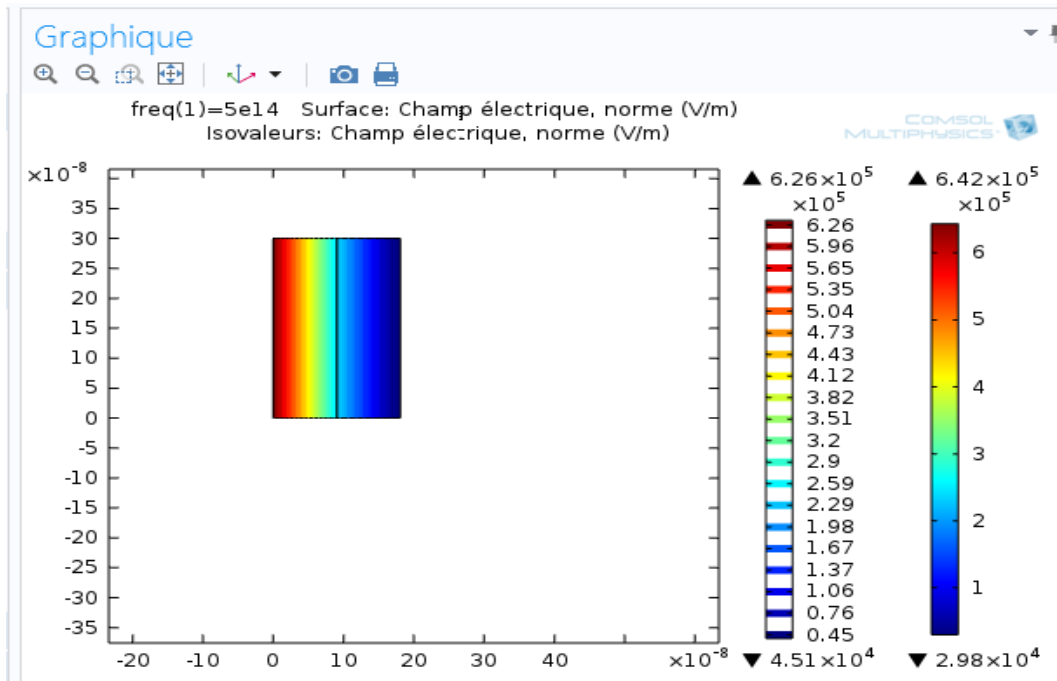


Figure II-9 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e14}$ Hz dans une électrode de 90nm/1nm/90nm

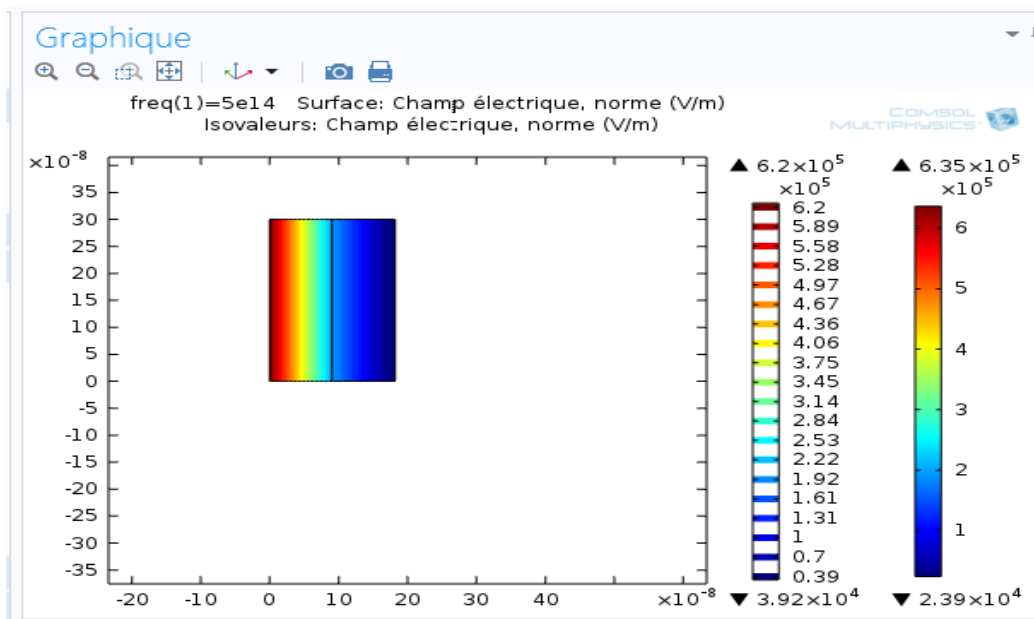


Figure II-10 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e14}$ Hz dans une électrode de 90nm/2nm/90nm

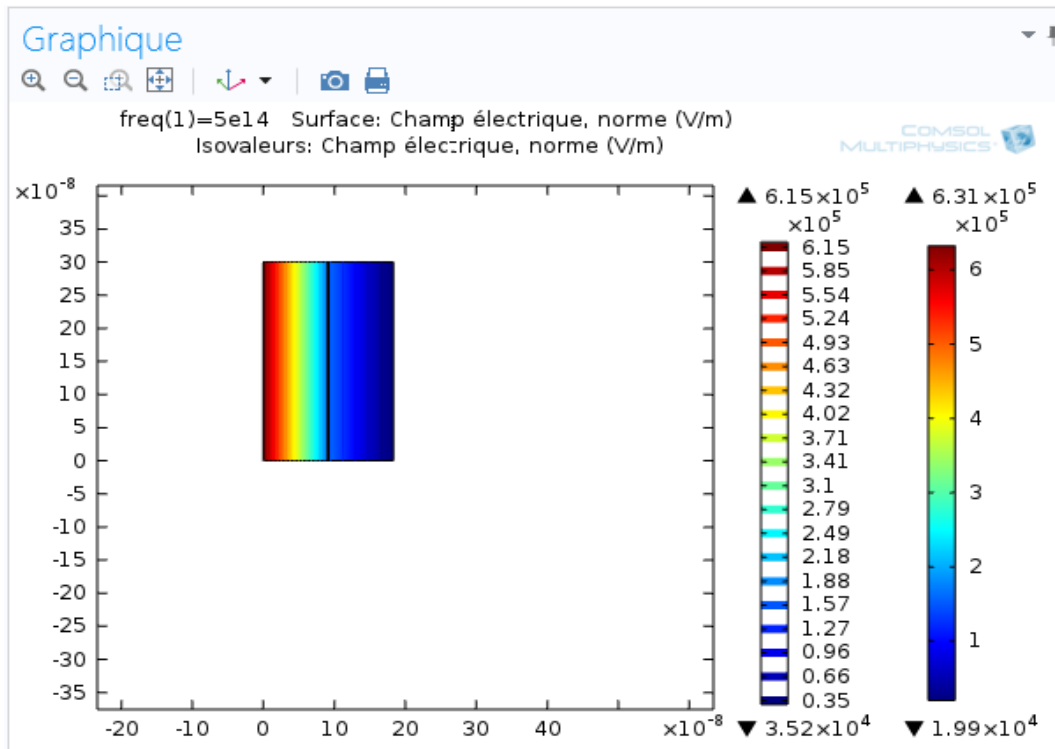


Figure II-11 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{\text{req}}=5^{e}14\text{Hz}$ dans une électrode de 90nm/3nm/90nm

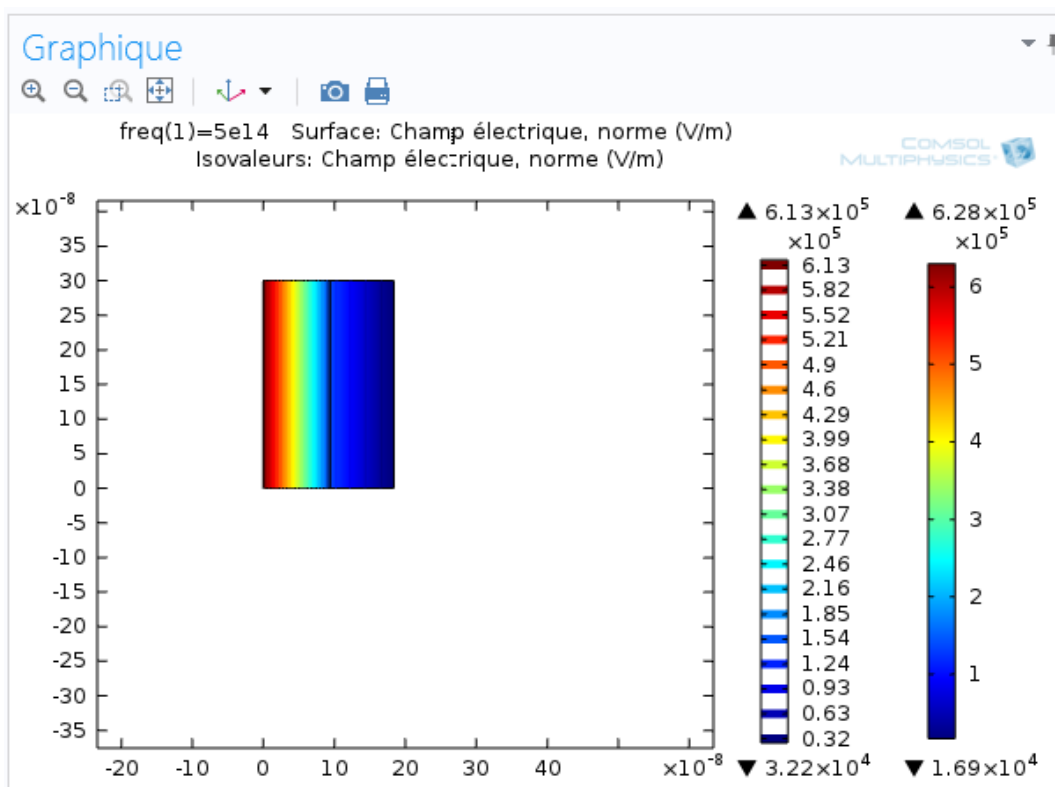


Figure II-12 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{\text{req}}=5^{e}14\text{Hz}$ dans une électrode de 90nm/4nm/90nm

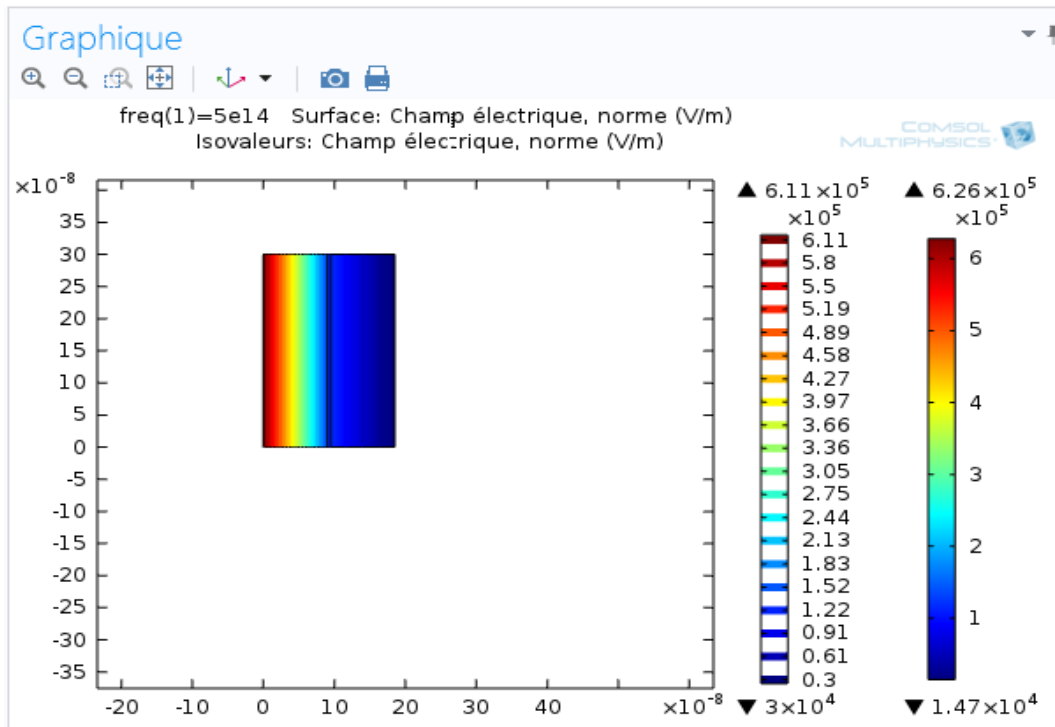


Figure II-13 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e14}$ Hz dans une électrode de 90nm/5nm/90nm.

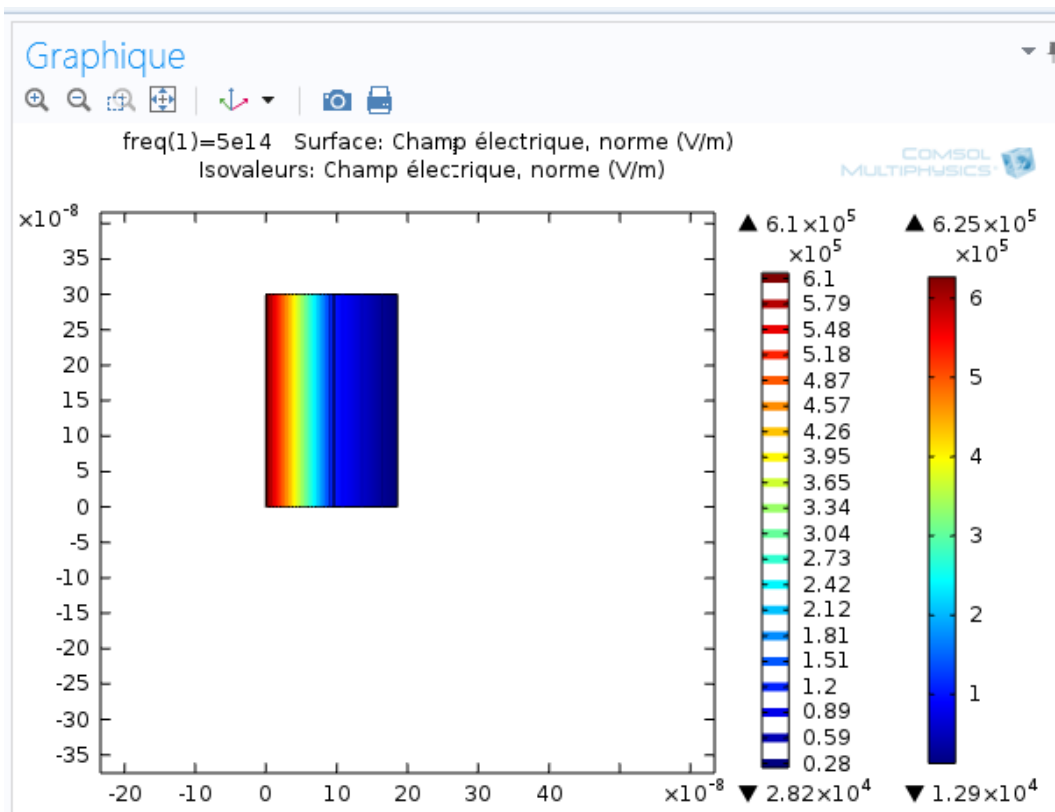


Figure II-14 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e14}$ Hz dans une électrode de 90nm/6nm/90nm

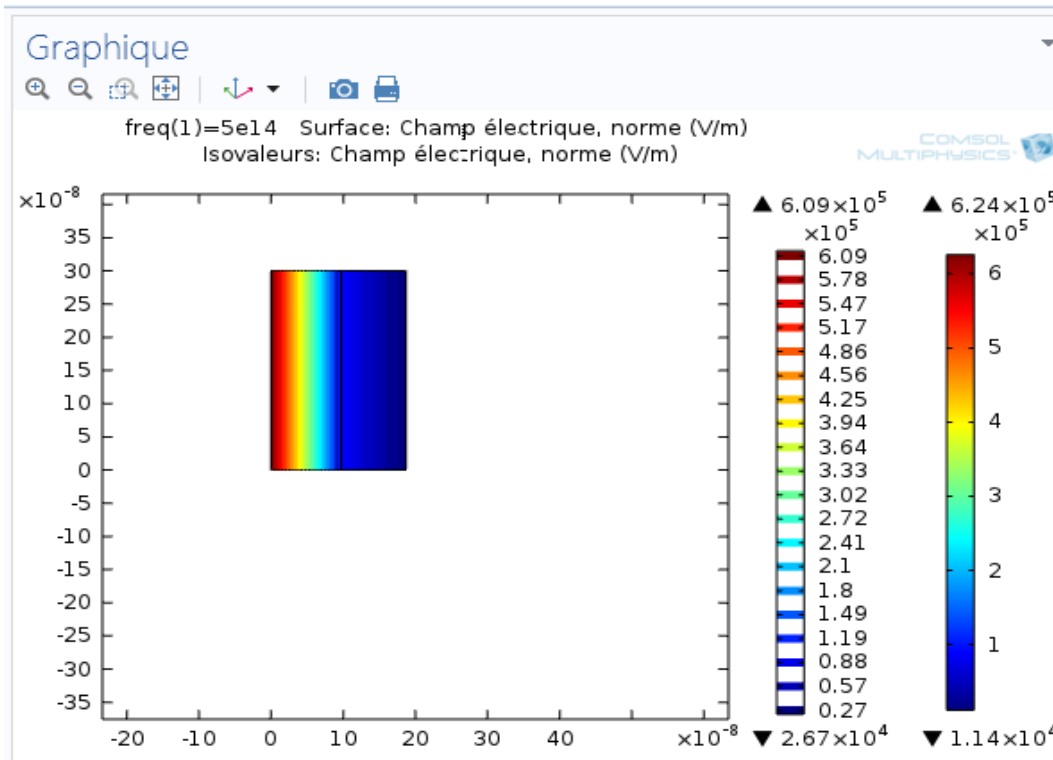


Figure II-15: Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/7nm/90nm

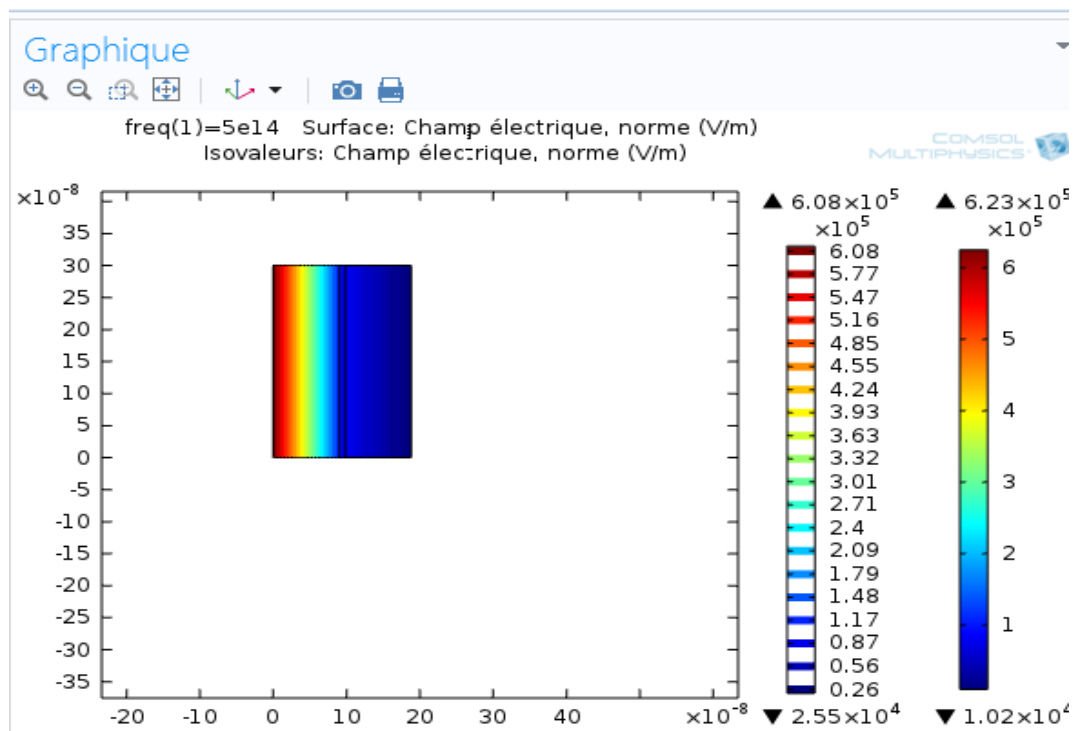


Figure II-16 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/8nm/90nm

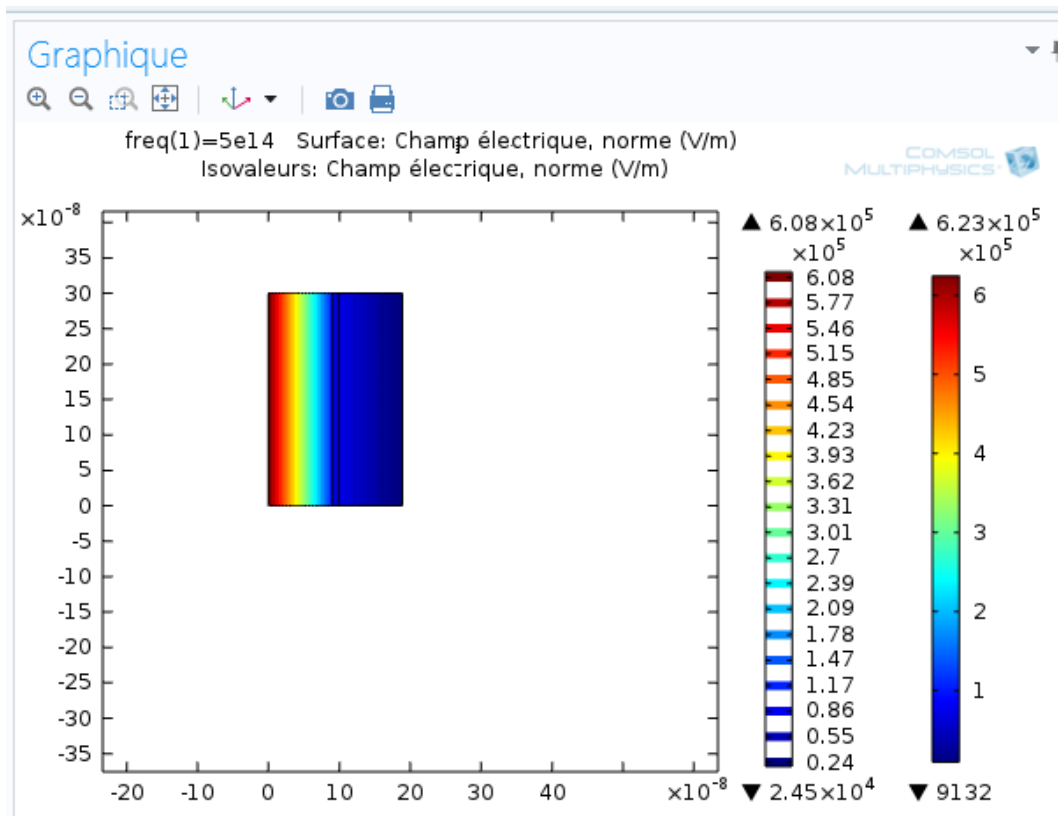


Figure II-17 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 90nm/9nm/90nm

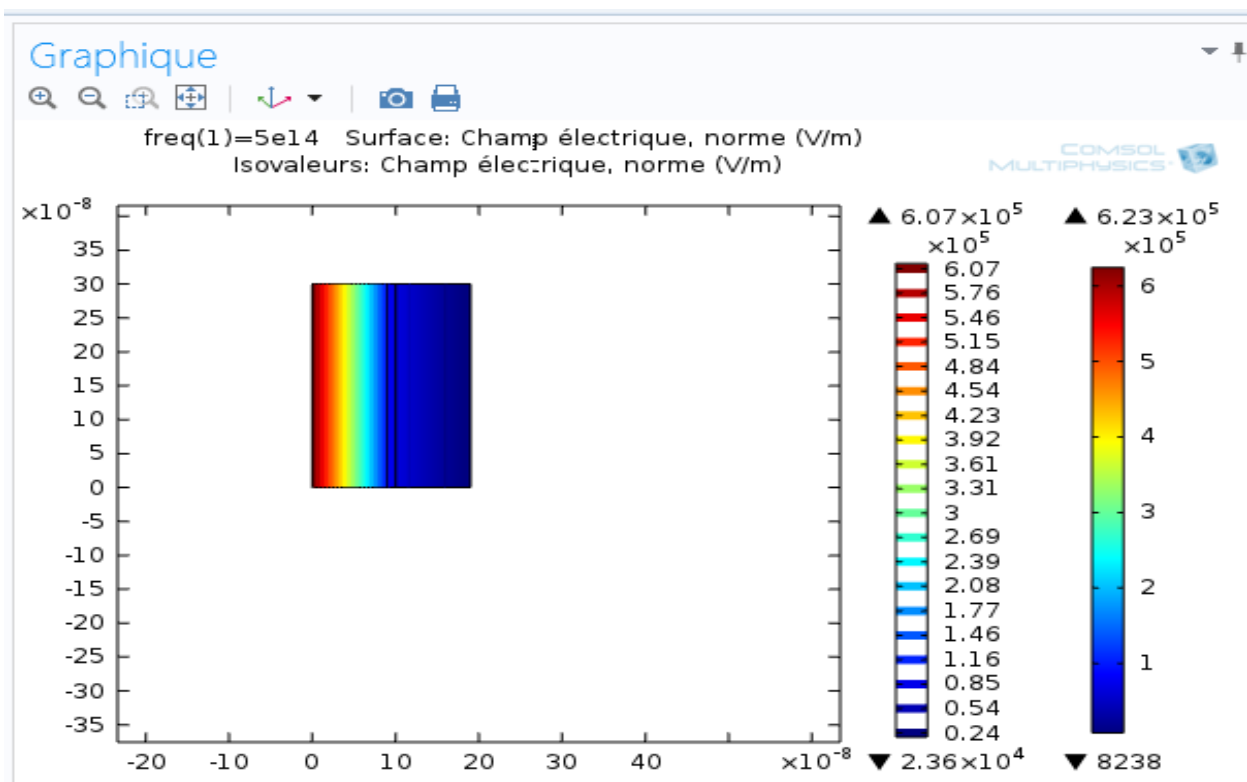


Figure II-18: Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 90nm/10nm/90nm

d(um)	0.001	0.002	0.003	0.004	0.005	0.006	0.007	0.008	0.009	0.01
E _{elec} (v/m)	0.42	0.39	0.35	0.32	0.3	0.28	0.27	0.26	0.24	2.24

Tableau(II.3): des valeurs obtenues pour le champ électrique en variant la valeur de d On faisant avec al=Ib=0.09 um(cst)

Nous avons remarque en faisant varier l'épaisseur de la couche Al (d) que :

Lorsque d augmente le champ diminue. Nous savons très bien que pour des épaisseur allant de 1nm a 5nm la réalisation d'un couche d'Al ne donne pas des couche uniforme et la résistivité des couche plus élevée. Nous avons pris la moyenne qui est 6nm et nous avons opte la variation des épaisseurs des couche de ZnO(les de cote simultanément et symétrie)

II.6 variation de l'épaisseur de la couche ZnO pour une valeur d'aluminium constante (6nm)

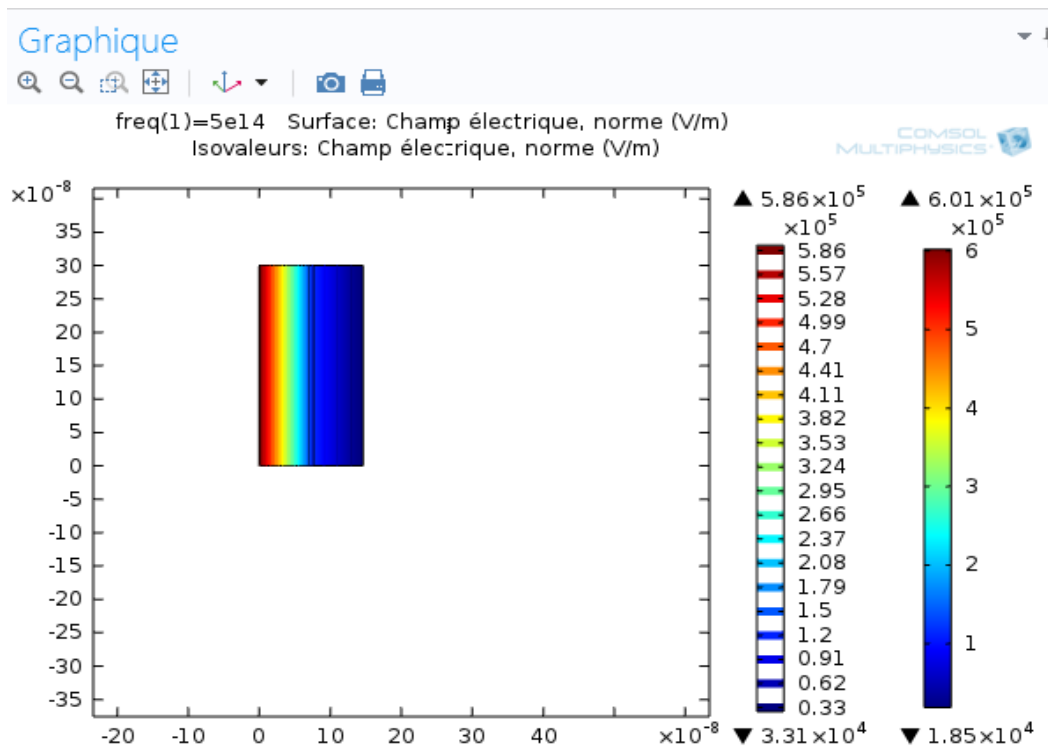


Figure II-19 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{c}14Hz$ dans une électrode de 70nm/5nm/70nm

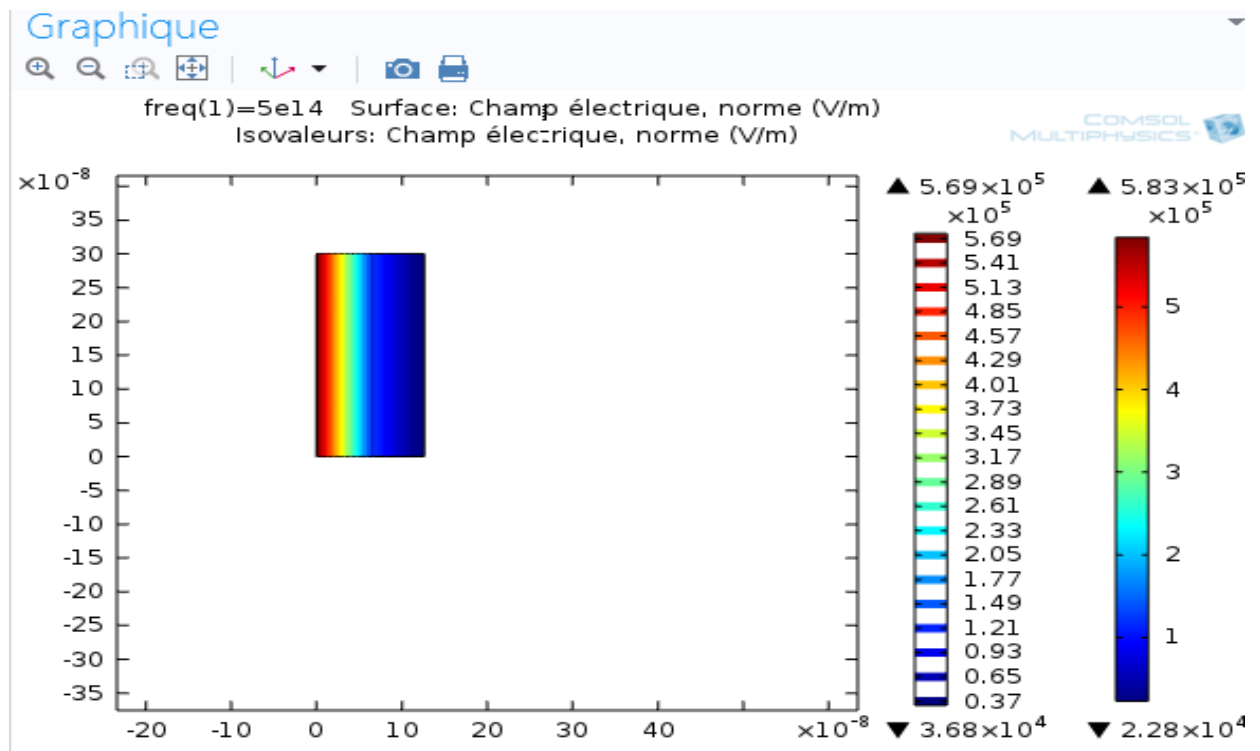


Figure II-20 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 50nm/6nm/50nm

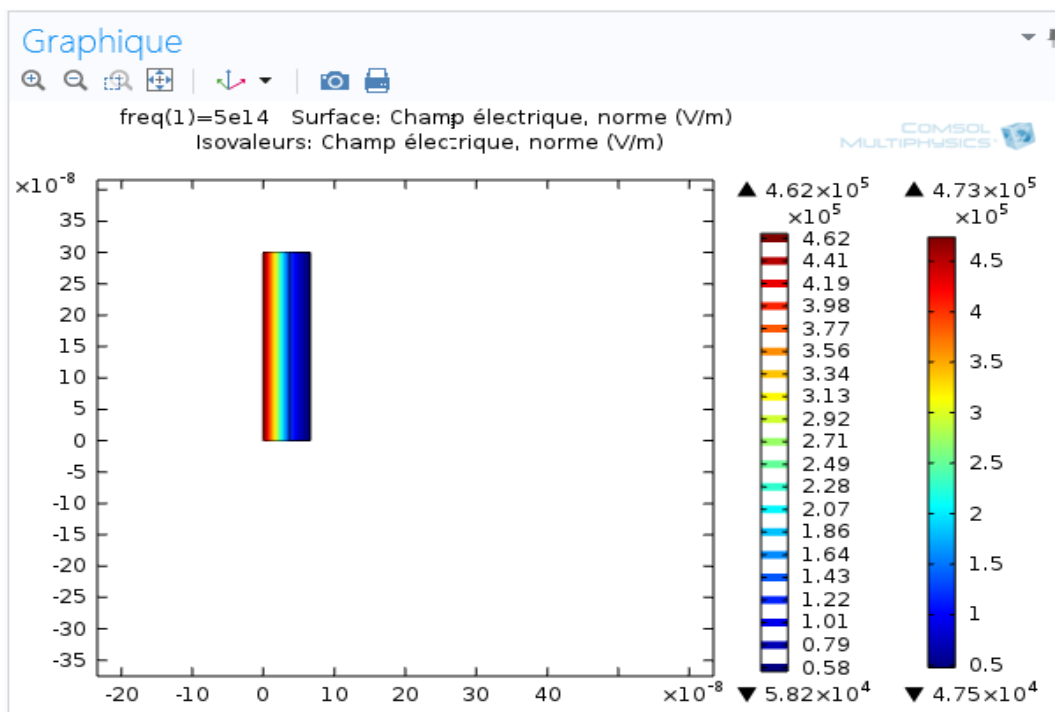


Figure II-21 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 30nm/6nm/30nm

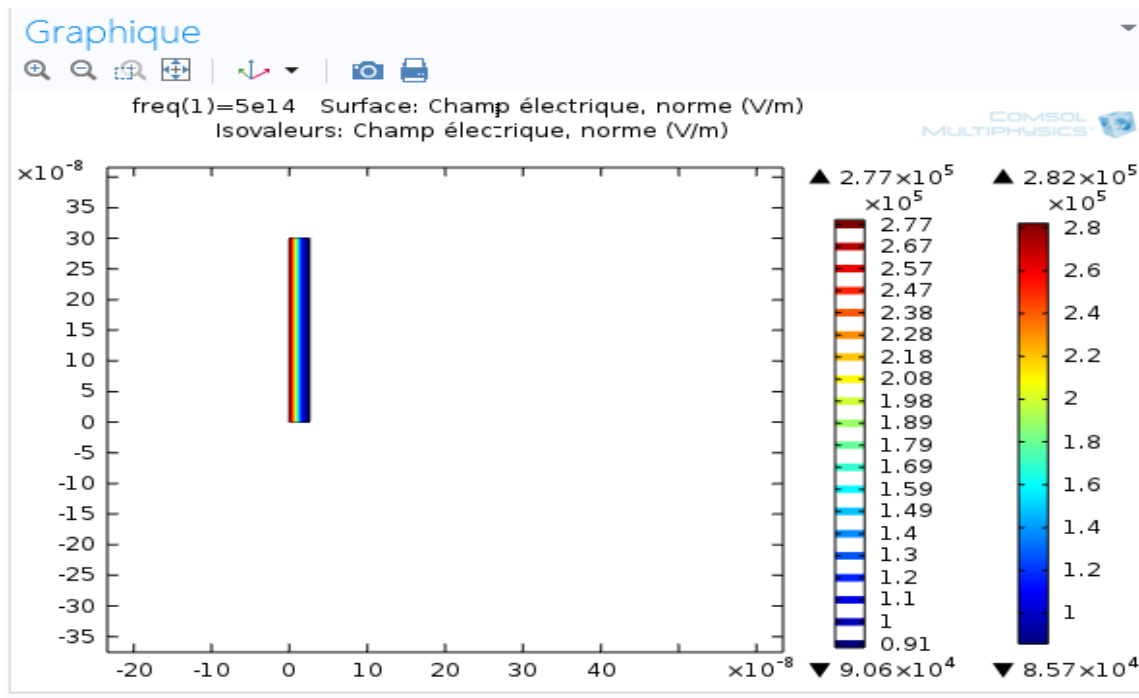


Figure II-22 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5 \times 10^{14} \text{ Hz}$ dans une électrode de 10nm/6nm/10nm

Les valeur de champ électrique obtenu on fonction de la variation de ZnO

La=Ib (um)	Cham électrique (v/m)
0.07	0.33
0.05	0.37
0.03	0.58
0.01	0.91

Tableau(II.4): des valeurs obtenues pour le champ électrique en gardant la dimension de l'aluminium (d=6nm) est on varient la dimension de ZnO

Nous avons remarque que lorsqu'on diminue l'épaisseur de ZnO des deux cotés l'intensité de chans augment d'un manière remarquable le meilleur résultats est obtenu pour 10nm/6nm/10nm mais le seul obstacle revient a la réalisabilité de cette structura.

II.7 L 'effet de la variation l'asymétrie de la structure

II.7.1 La variation de la deuxième couche ZnO(Ib)

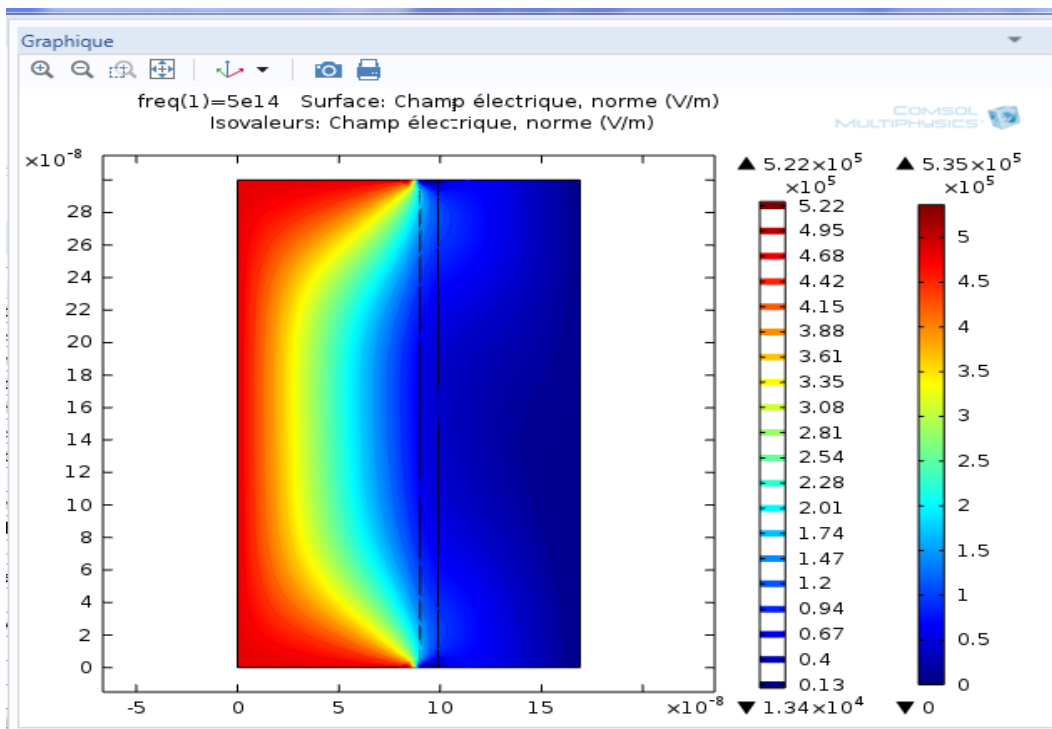


Figure II-23 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/6nm/70nm

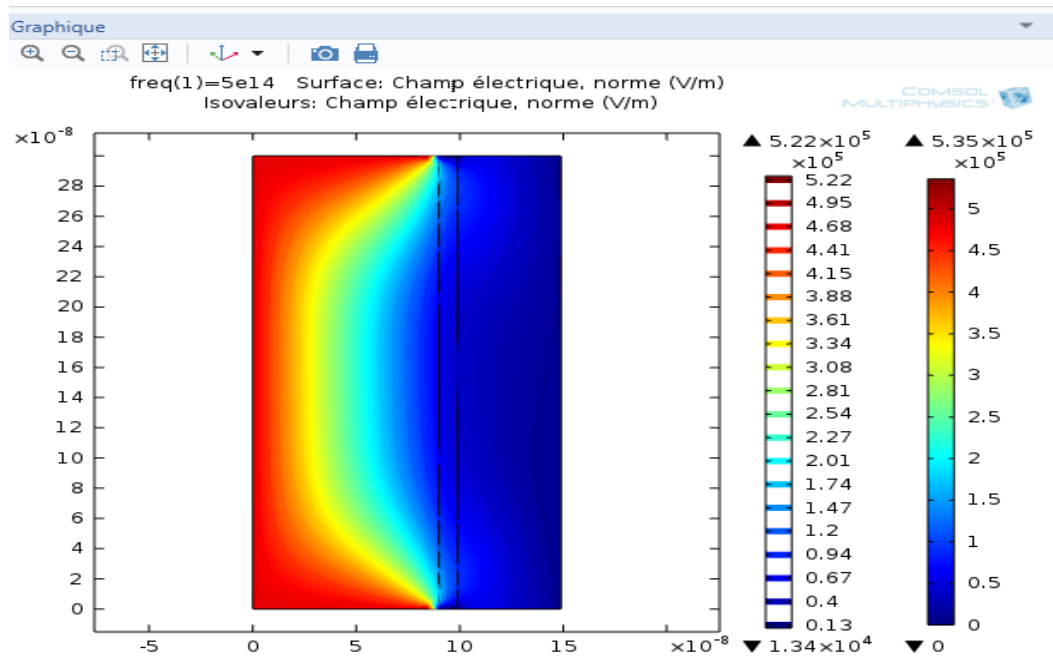


Figure II-25 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/6nm/50nm

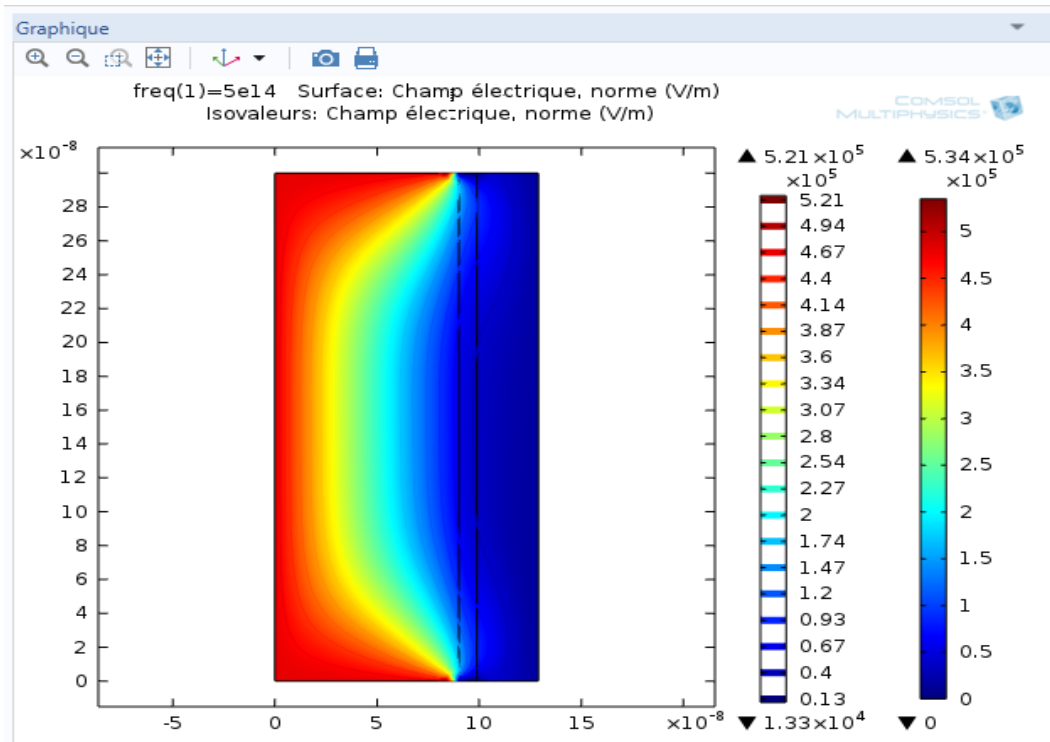


Figure II-26 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/6nm/30nm

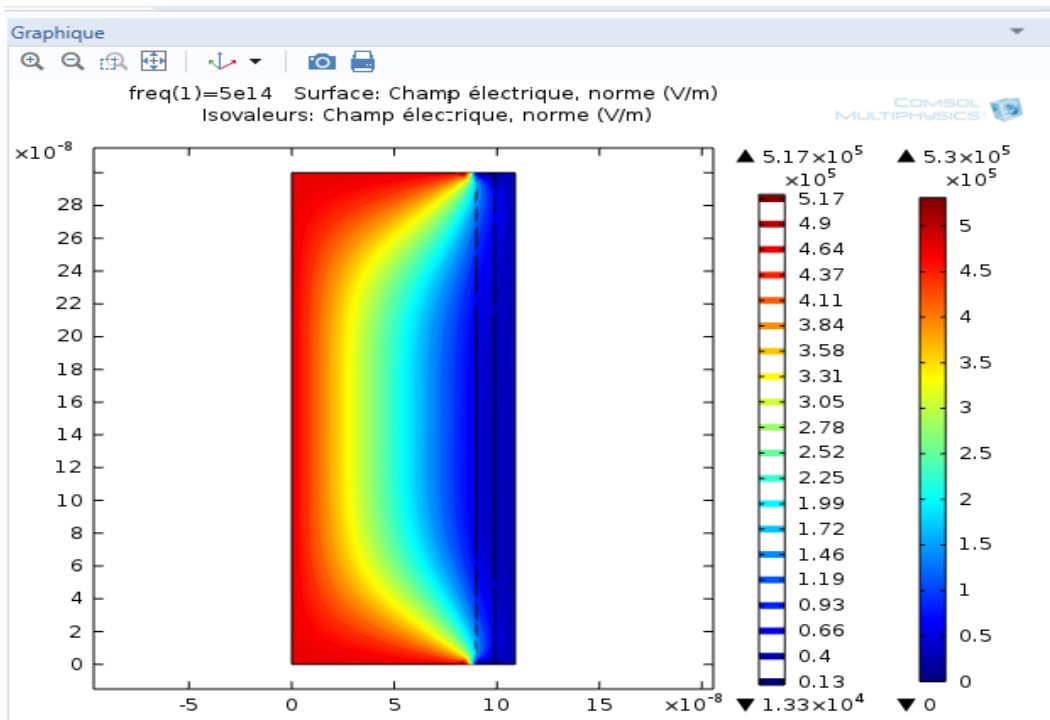


Figure II-27 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 90nm/6nm/10nm

Ib	Cham électrique (v/m)
0.07	0.13
0.05	0.13
0.03	0.13
0.01	0.13

Tableau(II.5): des valeurs obtenues pour le champ électrique en fics la dimension de l'aluminium (d=6nm) est on varie la dimension de la deuxième couche de ZnO

En faisant diminuent l'épaisseur de 2^{ieme} couche ZnO(Lb) tous en gardant la valeur de la couche d'incidence (Ia) cst et égal(90nm). Nous avons observe que l'intensité du champ devient faible de plus et cst pour tous les valeur de Lb

II.7.2 La variation de la couche d'incidence ZnO(Ia)

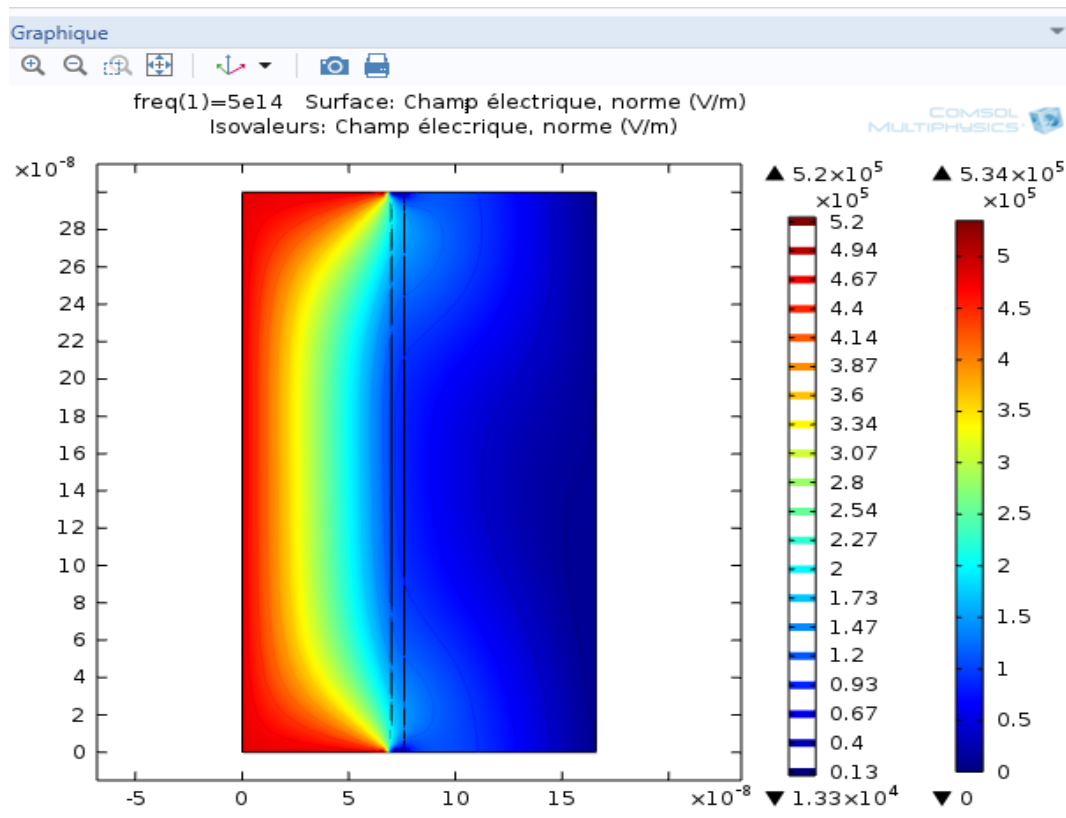


Figure II-27 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 70nm/6nm/90nm

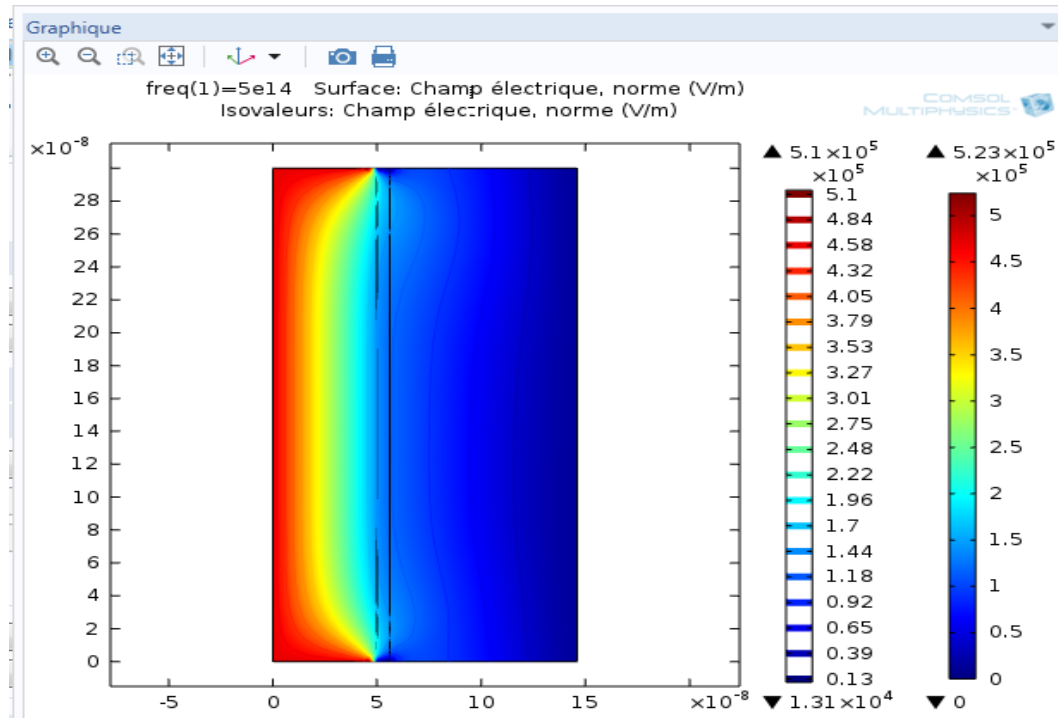


Figure II-28 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^c14Hz$ dans une électrode de 50nm/6nm/90nm

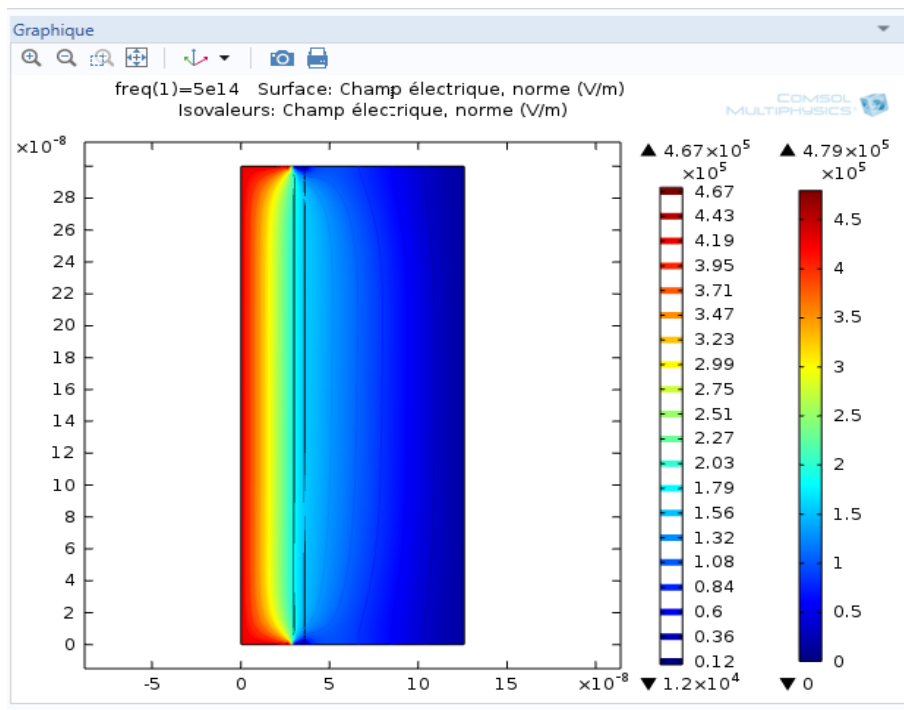


Figure II-29 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^c14Hz$ dans une électrode de 30nm/6nm/90nm

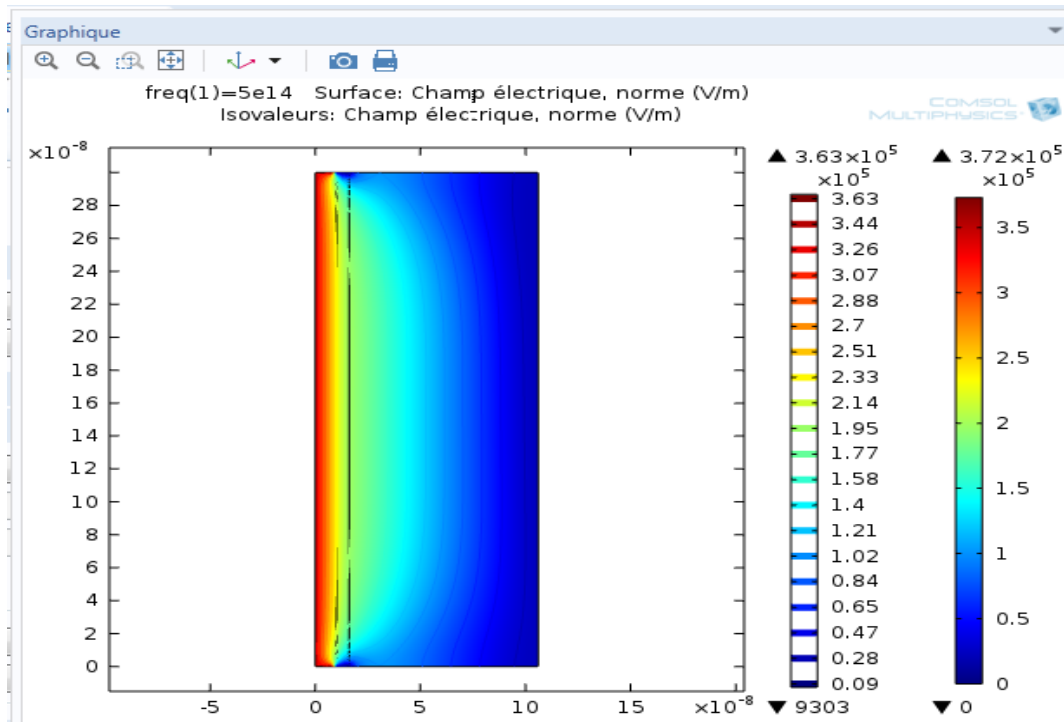


Figure II-30 : Image 2D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=5^{e}14Hz$ dans une électrode de 10nm/6nm/90nm

la	Cham électrique (v/m)
0.07	0.13
0.05	0.13
0.03	0.12
0.01	0.09

Tableau(II.6): des valeurs obtenues pour le champ électrique en fics la dimension de l'aluminium (d=6nm) est on varient la dimension de la premier couche de ZnO

En réduisant l'épaisseur de la couche incidence (la) du ZnO (90nm) tous en gardant la valeur de la 2^{ieme} couche. Nous avons observe que l'intensité du champ devient faible de pus en pus jusqu'à avoir la valeur de 0.09

Conclusion :

- La symétrie de la structure est un facteur important pour avoir une bonne propagation de l'onde électromagnétique.
- La diminution de l'épaisseur de ZnO et de Al symétrique nous donne une bonne propagation de l'onde électromagnétique
- La diminution de l'épaisseur de 2^{ieme} couche ZnO(Lb) nous donne une valeur de propagation de l'onde électromagnétique cst et faible (0.13v/m)

- La diminution de l'épaisseur de 1^{ème} couche ZnO(la) nous donne une valeur de propagation de l'onde électromagnétique trais faible allons jusqu'a (0.09v/m)

II.8 Leffe de la variation de la longueur d'onde

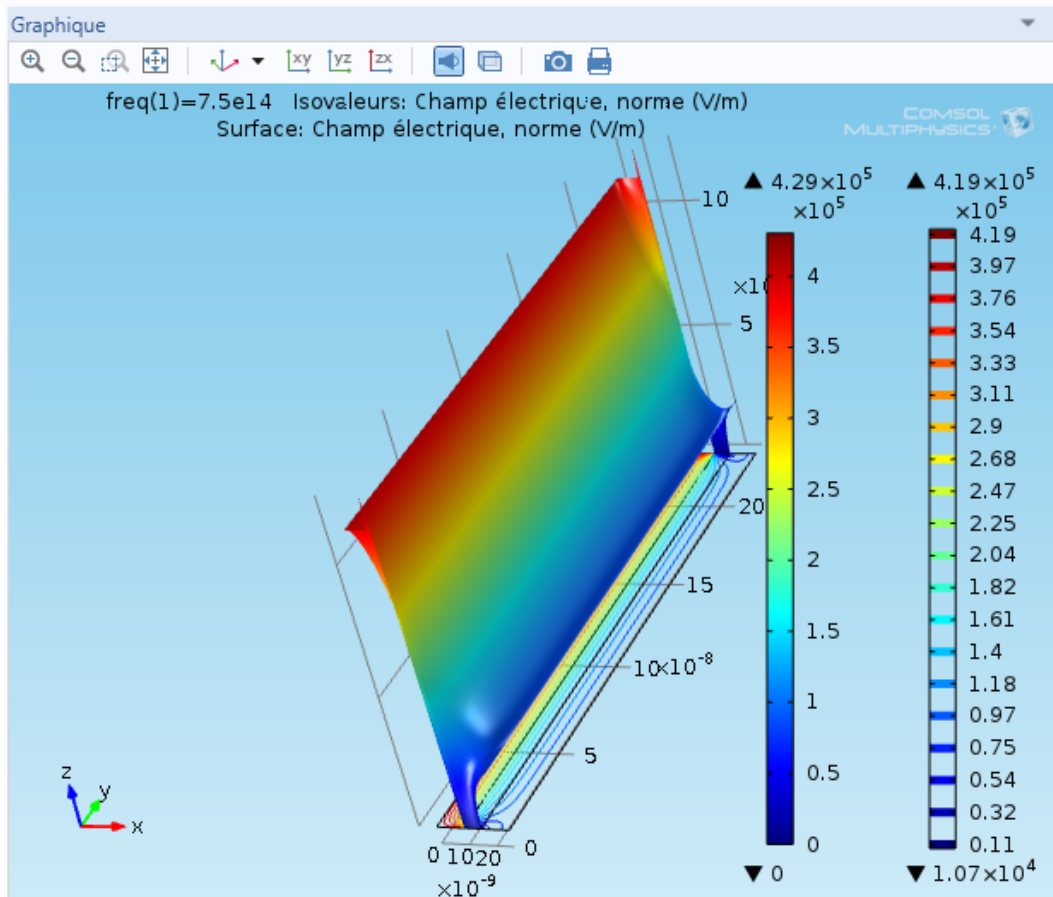


Figure II-31 : Image 3D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req}=75^{e}13Hz$ dans une électrode de 10nm/6nm/10nm

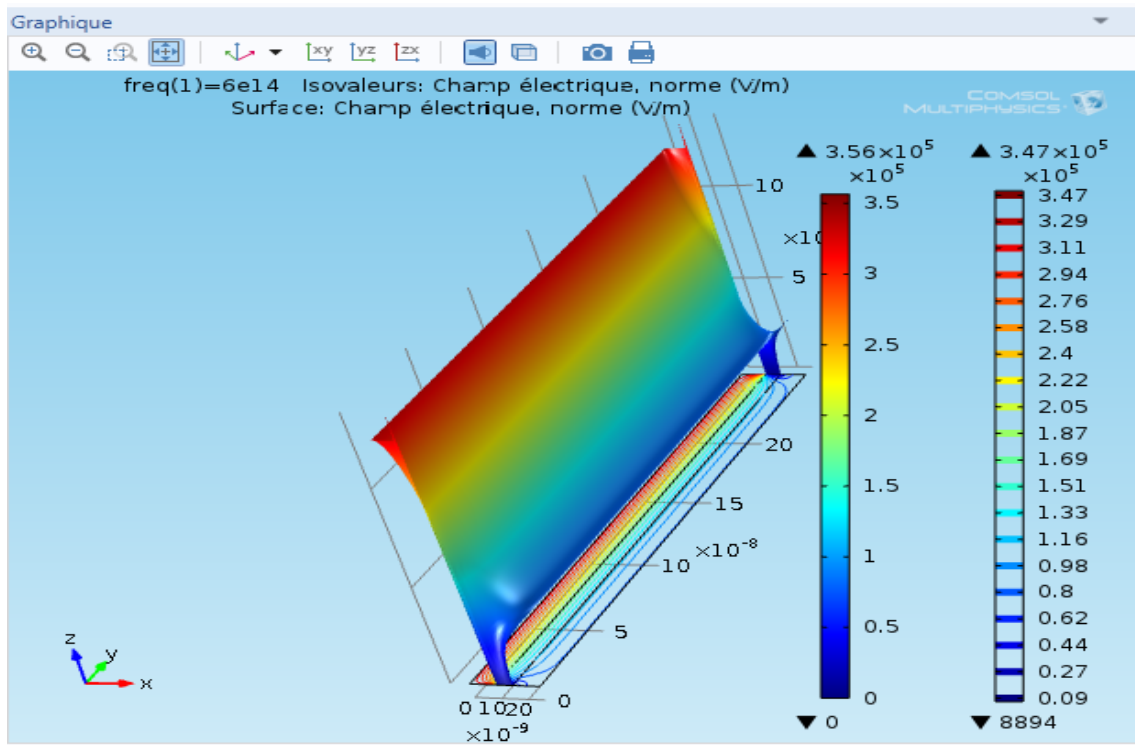


Figure II-32 : Image 3D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req} = 60 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 10nm/6nm/10nm

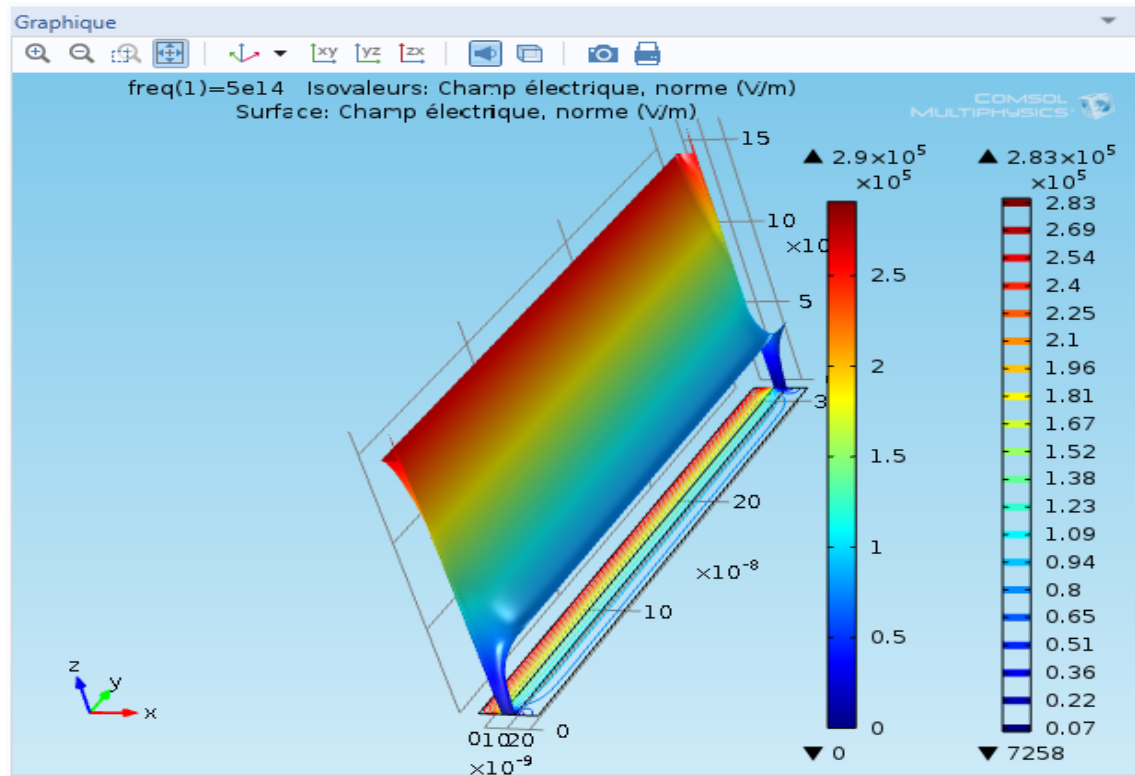


Figure II-32 : Image 3D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req} = 50 \times 10^{14}$ Hz dans une électrode de 10nm/6nm/10nm

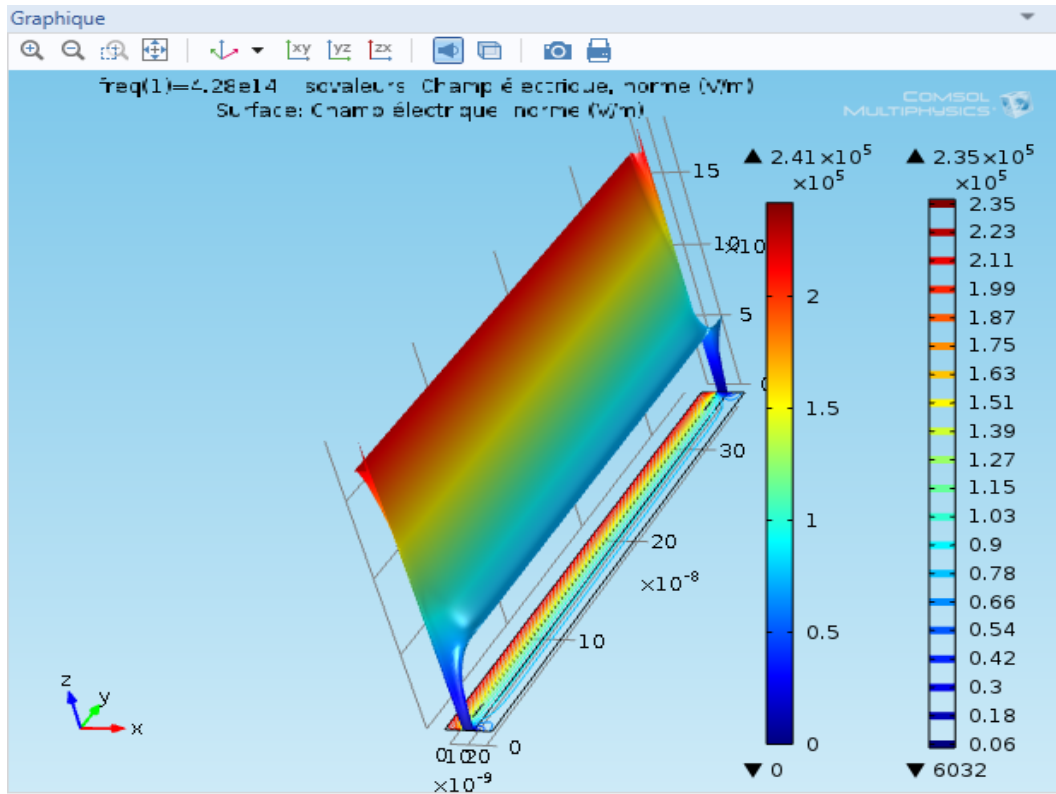


Figure II-33 : Image 3D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req} = 42.8 \cdot 10^{13}$ Hz dans une électrode de 0nm/6nm/10nm

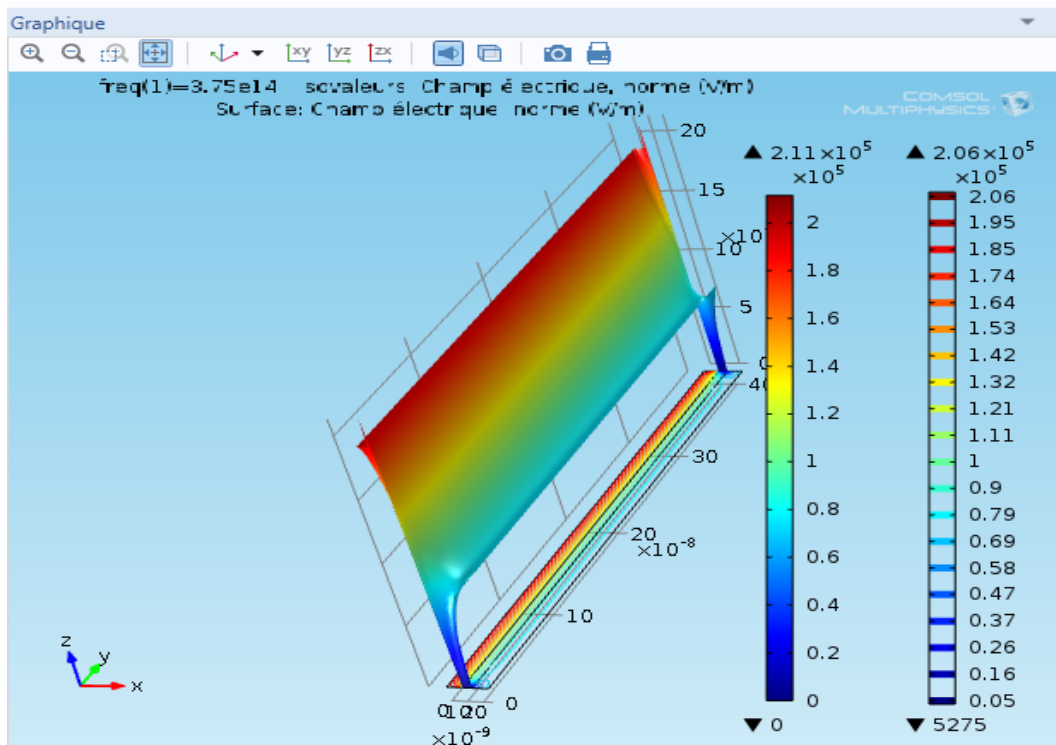


Figure II-34 : Image 3D de la propagation d'une onde électromagnétique de $f_{req} = 37.5 \cdot 10^{13}$ Hz dans une électrode de 90nm/6nm/90nm

(Hz)	Cham électrique (v/m)
$f=75 \cdot 10^{13}$	1.18
$f=66.6 \cdot 10^{13}$	0.98
$f_{\text{req}}=50 \cdot 10^{13}$	0.94
$f_{\text{req}}=24.85 \cdot 10^{13}$	0.78
$f_{\text{req}}=37.5 \cdot 10^{13}$	0.69

Tableau(II.7): les valeurs obtenues pour le champ électrique en fonction de la dimension de l'aluminium ($d=6\text{nm}$) est la ZnO ($l_a=l_b=10\text{nm}$) et on varie la longueur d'onde électromagnétique.

On constate que la propagation est bonne pour toutes les longueurs d'onde mais elle est meilleure pour la longueur d'onde électromagnétique $\lambda = 450\mu\text{m}$

Conclusion :

La recherche sur les cellules solaires organiques présente un engouement important car elle présente des propriétés très intéressantes notamment dans leur flexibilité et la possibilité d'être réalisées avec de grandes surfaces. Cependant leur stabilité et leur rendement doivent être considérablement améliorés par rapport à leur état actuel. Un rendement nominal voisin de 10% sera l'objectif à atteindre pour les années qui viennent.

L'utilisation des différents types de TCO comme électrode au sein de la structure de la cellule solaire organique constitue un moyen de contribution à l'amélioration du rendement physique et aussi une solution qui limite la puissance dissipée par l'électrode. Pour cela nous avons proposé l'utilisation d'une nouvelle structure électronique empilée utilisant un matériau qui est le ZnO .

Dans ce présent travail nous avons simulé à l'aide de COMSOL, un type d'électrodes multicouches TCO/Métal/TCO utilisant comme couche métallique l'aluminium (Al), une couche qui a pour rôle de réduire la résistance de la structure , une simulation qui nous a permis d'analyser et d'optimiser la propagation d'une onde électromagnétique d'une longueur de 600 nm a travers divers combinaison d'épaisseurs de chaque structure ZnO/Al/ZnO , où le ZnO ayant pour résistivité une valeur de $5.10^{-3} \Omega/\text{cm}$, avec des épaisseurs de 10 nm /6 nm / 10nm , semble la plus approprié en terme de rendement comme électrode .

Aussi notre étude nous a permis une optimisation de la couche métallique à base d'aluminium à une épaisseur de 6nm , réduction de l'épaisseur de la couche intermédiaire à une valeur de 1 nm à montré un résultat meilleur , mais les contraintes technologiques à la réalisation de cette fine couche nous a contraint à opter pour une valeur de 6 nm , aussi nous avons procéder à un choix de l'onde électromagnétique , une valeur de 400nm nous a fourni le meilleur résultat dans cette simulation.

La propagation d'une onde électromagnétique dans les matériaux est frottement liés aux indices de réfractions de ces derniers, un choix judicieux des matériaux à utilise est primordial pour un meilleur rendement dans la structure multicouche , à savoir , un TCO avec un métal dont les indices de réfraction sont proche , aussi éventuellement l'élaboration

d'un matériau à base d'un TCO et d'un métal que l'on insérera genre d'un joint à chaque interface .

Référence bibliographiques

- [1] Jcboulay.free.fr/astro/sommaire/astronomie/univers/galaxie/etoile/systeme_solaire/soleil/page_soleil.htm
- [2] M .CHAKAROUN, thèse de doctorat, université de Limoge, (2010).
- [3] O. BOUSSOUM, thèse de magister, université MOULOUD MAMMERY Tizi-Ouzou, (2011).
- [4] www.nanomarkets.net.
- [5] S.GUITOUNI, thèse de magister, université MENTOURI Constantine, (201).
- [6] B.S. JEONG , Solid-State Electronics 47, pp. 2275–2278, (2003).
- [7] M.MADANI, Thèse Magister en physique, université ABOU-BAKR BELKAID, Tlemcen, (2006).
- [8] A.TAABOUCHE, thèse de magister, université MENTOURI Constantine, (2010).
- [9] A.KHAN, thèse de doctorat , université de GRENOBLE, (2006).
- [10] K. BADEKER, , Electrical Conductivity and Thermo-Electromotive Force of Some Metallic Compounds», Ann. Phys, p22, 749, (1997).
- [11] S.FAÏ, thèse de doctorat , école polytechnique de LAUSANNE, (2003).
- [12] K. SIVARAMAKRISHNAN, Zinc Oxide Transparent Thin Films For Optoelectronics, P 57 , (2011) .
- [13] D.R. SAHU , J.L HUAN, Thin Solid Films 515 p 876–879, (2006).
- [14] H. BENELAMDJET, thèse de doctorat, université, MENTOURI, Constantine (2011).
- [15] N. BOUHSSIRA, thèse de magister, université MONTOURI, Constantine (2005).

Résume :

L'utilisation des différents types de TCO comme électrode au sein de la structure de la cellule solaire organique constitue un moyen de contribution à l'amélioration du rendement physique et aussi une solution qui limite la puissance dissipée par l'électrode. Pour cela nous avons proposé l'utilisation d'une nouvelle structure électronique empilée utilisant un matériau qui est le ZnO .

Dans ce présent travail nous avons simulé à l'aide de COMSOL, un type d'électrodes multicouches TCO/Métal/TCO utilisant comme couche métallique l'aluminium (Al), une couche qui a pour rôle de réduire la résistance de la structure , une simulation qui nous a permis d'analyser et d'optimiser la propagation d'une onde électromagnétique d'une longueur de 600 nm à travers divers combinaison d'épaisseurs de chaque structure ZnO/Al/ZnO , où le ZnO ayant pour résistivité une valeur de $5.10^{-3} \Omega/ Cm$, avec des épaisseurs de 10 nm /6 nm / 10nm , semble la plus approprié en terme de rendement comme électrode .

Aussi notre étude nous a permis une optimisation de la couche métallique à base d'aluminium à une épaisseur de 6nm , réduction de l' épaisseur de la couche intermédiaire à une valeur de 1 nm à montré un résultat meilleur , mais les contraintes technologiques à la réalisation de cette fine couche nous a contraint à opter pour une valeur de 6 nm , aussi nous avons procéder à un choix de l'onde électromagnétique , une valeur de 400nm nous a fourni le meilleur résultat dans cette simulation.

Les Mots clé :

COMSOL, TCO/Métal/TCO , propagation électromagnétique, l'onde plane, l'électromagnétisme.