République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique



UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI-BEL-ABBES Faculté de Génie Electrique Département d'Electronique

Thèse présentée par :

Mme. BINIDRA Karima

Pour l'obtention du diplôme de :

Doctorat 3^{ème} Cycle en : Electronique

Spécialité : Matériaux avancés pour applications photovoltaïques

Intitulé de la thèse :

Conception de cristaux photoniques unidimensionnels. Application à la conversion photovoltaïque

Présentée devant le jury composé de :

M. ABID Hamza	Prof.
M. MILOUA Redouane	MCA
M. KHADRAOUI Mohammed	MCA
M. ARBOUCHE Omar	MCA
Mme. TABET-DERRAZ Hind	MCA
M. KEBBAB Zoubir	Prof.

X---XX---X

UDL-SBA U. Tiaret UDL-SBA U. Saida UDL-SBA UDL-SBA Président Encadreur Co encadreur Examinateur Examinatrice Invité Laboratoire d'élaboration et de caractérisation des matériaux (LECM)

<---X<---X<---X<---X

A mon mari, qui son lui,

ma thèse n'aurait pas

vae le jour.

A ma mère et toute la famille BINIDRA A mes beaux parents et toute la famille BENYAHLOU A mes enfants Amine, Chaimae et Fadwa Le présent travail de thèse a été réalisé au sein du Laboratoire d'Elaboration et de Caractérisation des Matériaux (LECM), à l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès.

Ma reconnaissance va en particulier à mon directeur de thèse, Monsieur R. Miloua qui a porté un soutien décisif à la réalisation de cette thèse. Je tiens aussi à lui exprimer ma plus grande reconnaissance et ma sympathie profonde pour l'intérêt avec lequel il a suivi mon travail. Son encadrement scientifique et ses encouragements ont été un apport précieux pour ce travail, tout comme la grande liberté dont j'ai pu bénéficier durant ces années. Je tiens à le remercier pour la qualité de ses explications, pour sa disponibilité et pour sa rigueur. La rédaction du manuscrit lui doit beaucoup. Qu'il trouve ici toute ma reconnaissance et l'expression de ma plus profonde gratitude.

Je tiens également à remercier ceux qui nous ont fait l'honneur d'accepter de participer au jury de soutenance et d'évaluer cette thèse: Monsieur le président Prof. Hamza Abid, et messieurs et madame, les membres de jury: Monsieur Mohammed Khadraoui, Monsieur Omar Arbouche, Madame Hind Tabet-Derraz et Monsieur Zoubir Kebbab.

J'exprime ma reconnaissance et ma sympathie profonde pour Madame Kandouci pour son aide, ses conseils et ces encouragements.

Je remercie tous les membres du laboratoire LECM pour leur sympathie, leur encouragement, j'ai eu du plaisir à travailler avec eux.

Mes remerciements à mes amies et à toutes les personnes qui de prés ou de loin ont participé à l'élaboration de ce mémoire ; qu'elles me pardonnent de ne pouvoir toutes les citer.

A la fin, je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères aux membres de ma famille pour leur infini soutien durant toutes ces années.

Mercí à vous tous qui, de près ou de loin vous avez contribué à rendre ces années aussi agréables qu'intéressantes et productives.

Résumé

Le sujet de cette thèse consiste à faire une étude théorique sur les cristaux photoniques et leurs diverses applications pratiques ; filtres optiques, miroirs omnidirectionnel, etc. une attention particulière sera portée aux structures unidirectionnelle ainsi qu'a leur utilisation dans les cellules photovoltaïques en couches minces. A l'aide de la technique des matrices de transfert, nous pouvons déterminer la réponse optique de ces structures en termes de transmittance et de réflectance. L'étude portera en outre sur la conception optimale de nouvelles structures photonique qui, lorsqu'elles sont intégrées à des cellules photovoltaïques, permettront une amélioration du rendement de conversion. L'optimisation de ces nouvelles structures s'obtient par modulation des épaisseurs et des indices optiques, ainsi que la périodicité des empilements.

Mots clés : cristaux photoniques, cellules solaires, réponses optiques, filtres optiques, PS, conception optimale, matrice de transfert.

Abstract

The subject of this thesis is to make a theoretical study on photonic crystals and their various practical applications; optical filters, omnidirectional mirrors, etc. special attention will be paid to unidirectional structures and their use in thin-film photovoltaic cells. Using the transfer matrix method, we can determine the optical response of these structures in terms of transmittance and reflectance. The study will also focus on the optimal design of new photonic structures that, when integrated with photovoltaic cells, will improve conversion efficiency. The optimization of these new structures is obtained by modulation of the thicknesses and optical indices, as well as the periodicity of the stacks.

Keywords: photonic crystals, solar cells, optical responses, optical filters, PS, optimal design, transfer matrix.

خلاصة

موضوع هذه الرسالة هو إجراء دراسة نظرية على البلورات الفوتونية وتطبيقاتها العملية المختلفة ؛ المرشحات الضوئية والمرايا متعددة الاتجاهات وما إلى ذلك. وسيتم إيلاء اهتمام خاص للهياكل أحادية الاتجاه واستخدامها في الخلايا الكهروضوئية الرقيقة. باستخدام تقنية نقل المصفوفات ، يمكننا تحديد الاستجابة البصرية لهذه الهياكل من حيث النفاذية والانعكاس. وستركز الدراسة أيضًا على التصميم الأمثل للهياكل الضوئية الجديدة التي ، عند دمجها مع الخلايا الضوئية ، ستحسن كفاءة التحويل. يتم الحصول على الاستفادة المثلى من هذه الهياكل الجديدة عن طريق تعديل السماكة والمؤشرات الضوئية ، وكذلك دورية الهياكل.

الكلمات المفتاحية: البلورات الضوئية ، الخلايا الشمسية ، الاستجابات البصرية ، المرشحات الضوئية ، PS ، التصميم الأمثل ، مصفوفة النقل.

Liste des figuresv	V
Liste des tableauxvi	iii
Abréviationi	X
Introduction générale	2
CHAPITRE 1 :	
1. Généralités	3
1.1. Le rayonnement solaire 8	3
1.2. Spectre des ondes électromagnétiques 8	3
1.3. L'énergie solaire	J
1.4. La conversion photovoltaïque 1	11
1.4.1. Les cellules solaires 1	12
1.4.2. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire	12
1.4.3. a. Le facteur de forme FF (Fill Factor)1	16
1.4.3. b. Le rendement de conversion photovoltaïque (η) 1	16
1.4.4. Les photopiles en couches minces 1	17
1.4.4.a. Principe de fonctionnement 1	17
1.4.4.b. Absorption 1	18
1.4.4.c. Collections des charges électriques 1	18
1.5. Les différents types des cellules solaires 1	19
1.6. Les facteurs limitant le rendement	20
1.6.1. Les pertes physiques. 2	20
L'absorption incomplète	20
• L'excès d'énergie	21
• Le facteur de tension	21
• Le facteur de forme	21
1.6.2. Les pertes technologiques	21
1.6.2.a. Les pertes optiques	21
• Les réflexions	21
• Le rendement d'absorption	21
Le taux d'ombrage	21

• Le rendement de collecte	22
1.7. Les procédés d'amélioration des performances d'une cellule solaire	22
1.7.1. Réflecteur arrière (BSR : Back Surface Reflector)	22
1.7.2 Passivation des faces avant et arrière	22
1.7.3 La couche antireflet (CAR)	22
1.7.4 Texturation de la surface	23
1.7.5 Les contacts face avant et arrière	23
1.7.6 Champs électrique dans la zone arrière (BSF)	23
1.8 Conclusion	25
Références	26

CHAPITRE 2 :

1. la conversion thermophotovoltaïque	. 29
1.1. Introduction	29
1.2. Fonctionnement de la diode photovoltaïque	30
1.3. Source thermique	33
1.4. Sélection de la diode photovoltaïque	34
1.5. Contrôle spectral	36
1.5.1. Exigences de filtre pour système basée sur GaSb	37
1.5.2. L'implémentation du filtre	38
1.6. Cristaux photoniques	38
1.6.1. Théorie de la propagation des ondes électromagnétiques à travers les interfaces diélectriques	s 39
En polarisation TE (s)	.41
En polarisation TM (p)	42
Matrice de transfert pour une seule couche	44
Matrice de transfert pour un milieu multicouche	. 47
1.6.2. Fonction de mérite	. 50
1.7. Conclusion	52

Références 53
CHAPITRE 3 :
Introduction
1. les méthodes exactes
 La méthode séparation et évaluation (Branch and Bound)
2. les méthodes approchées
3. les algorithmes méta-heuristiques
3.1. Les méta-heuristiques à solution unique
3.1.1. Algorithmes de recherche locale
3.1.2. L'algorithme de recherche tabou
3.1.3. L'algorithme de recuit simulé
3.1.4. La recherche par motifs généralisée (GPS)60
3.2 Les méta-heuristiques à populations de solutions (algorithmes évolutionnaires) 61
3.2.1. Les algorithmes génétiques
 Le codage des données
3.2.2 . Les algorithmes à essaim de particules
4. conclusion
Références
CHAPITRE 4 :
 ✤ Partie 1
1.1. La conception de filtre

1.2. Choix du matériau diélectrique73
1.a . Configuration 174
1.b. Configuration 275
1.c. Configuration 376
1.d. Configuration 476
1.3. Résultats et discussion de la partie 176
 ✤ Partie 2
2.1. La conception de filtre
2.2. Résultats et discussion de la partie 2
2.2.1. Réponse optique des structures
2.2.2. Analyse de performance TPV
3. Conclusion
Références
Conclusion générale
Publication

Figure 1-1 : spectre électromagnétique	9
Figue 1-2 : Spectre solaire de référence (spectre mesuré selon la norme AM1.5G)	11
Figure 1-3 : Norme de mesures du spectre solaire AM0, AM1 et AM1.5	11

Figure 1-5 : courbes puissance-tension P(V) et courant-tension I(V) d'une cellule PV......15

Chapitre 2 :

Figure 2-1 : Illustration des composants fondamentaux d'un système de conversion
d'énergie thermophotovoltaïque29
Figure 2-2 : Schéma de principe d'un système TPV composé d'un émetteur à large bande et d'une diode PV avec filtre diélectrique intégré
Figure 2-3 : Efficacité du photon pour la production de paires électron-trou dans l'Antimoniure de Gallium GaSb
Figure 2-4 : Le diagremme énergétique d'une diode PV illustrant comment un photon génère une paire électron-trou contribue à un courant photogénéré en raison de la différence de potentiel intégrée entre le matériau P et N
Figure 2-5 : Spectre de puissance émise d'un corps noir à diferrentes températures
Figure 2-6 : Les matériaux III-V communs avec leurs énergies de bandes interdites correspondantes
Figue 2-7 : Une partie d'un spectre de rayonnement d'un corps noir à 1500K qu'une diode PV GaSb peut se convertir en électricité
Figure 2-8 : la transmittance et la réflectance d'un composant de contrôle spectral idéal correspondant à un spectre de corps noir de 1500k pour des applications TPV37
Figure 2-9 : Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D)

Figure 2-10 : une onde incidente se décompose en une onde réfléchie et une onde transmise
Figure 2-11 : champ électromagnétique en polarisation s à la traversée d'une interface41
Figure 2-12 : champ électromagnétique en polarisation p à la traversée d'une interface43
Figure 2-13 : la traversé d'une interface entre deux milieux de permittivités différentes
Figure 2-14 : la propagation du champ dans un milieu homogène45
Figure 2-15 : un champ électrique qui se propage dans une structure multicouche composée de trois matériaux différents
Chapitre 3 :
Figure 3-1 : déroulement de l'optimisation par méthode Pattern Search60
Figure 3-2 : Organigramme correspondant à l'algorithme GPS61
Chapitre 4 :
Figure 4-1 : (a) période de base-haute permittivité d'un empilement quart d'onde. (b) empilement diélectrique à trois périodes71
Figure 4-2 : (a) Caractéristique idéale du filtre passe-bas superposé à un corps noir émettant à
1500k. (b) Illustration du spectre qui serait transmis à une diode PV GaSb par le filtre passe- bas idéal
Figure 4-3 : Illustration de la manière dont une caractéristique de filtre coupe-bande peut
fournir un filtrage passe-bas74
Figure 4-4 (a) : Réflectivité calculée de la configuration 1
Figure 4-4(b) : Réflectivités calculées de la configuration 2
Figure 4-4(b) : Réflectivités calculées de la configuration 2
Figure 4-4(b) : Réflectivités calculées de la configuration 2
Figure 4-4(b) : Réflectivités calculées de la configuration 2

Figure 4-7 : (a) indices de réfraction de Ge et MgF2, (b) coefficient d'extinction de Ge.....84

Figure 4-10: Rendement spectral calculé de filtres périodiques, périodiques-modifiés, optimisés et de source de corps noir sans aucun filtrage spectral......90

Chapitre 4 :

Tableau	4-1 :	Les configu	ratio	ns propos	ées po	ur la	conception des	s 1 D PhC	74
Tableau	4-2 :	Epaisseur	des	couches	(nm)	des	empilements	périodiques,	périodiques
modifiées	s et op	timisées; d _t	ot est	l'épaisseu	r totale	e			85

AM	Air Mass
PV	Photovoltaïque
TPV	Thermophotovoltaïque
СР	cristal photonique
CP1D	cristal photonique unidimensionnel
ТЕ	Transverse Electrique
TM	Transverse Magnétique
R	Réflexion
Т	Transmission
MMT	Méthode Matrice de Transfert
AG	Algorithme Génétique
PS	Pattern Search
spPS	seed preprocessed Pattern Search

L'évolution des activités humaines au cours du vingtième siècle a entraîné une forte augmentation de la consommation d'énergie. Une grande partie de cette énergie est produite en brulant les combustibles fossiles. Cependant, les problèmes inhérents à l'utilisation des combustibles fossiles, tels que leur disponibilité en quantité limitée et leurs effets nuisibles sur le plan environnemental, forcent l'humanité à rechercher de nouvelles sources énergétiques.

Une des solutions les plus prometteuses pour le futur énergétique de l'humanité, est le photovoltaïque. L'énergie photovoltaïque provient de la conversion de la lumière du soleil en électricité. Cette conversion se produit au sein de matériaux semiconducteurs, qui ont comme propriété de libérer leurs porteurs de charge (électrons et trous) sous l'influence d'une excitation extérieure.

L'Algérie est parmi les pays les plus riches en termes de potentiel énergétique renouvelable. Son champ solaire est l'un des plus élevé au monde. La durée d'insolation sur presque tout le territoire national dépasse les 2000 heures par an et peut atteindre les 3900 heures sur les hauts plateaux et le Sahara. L'énergie reçue quotidiennement sur une surface horizontale de 1 m² est de l'ordre de 5 KWh sur la plus grande partie du territoire national, soit environ 1700 KWh/m²/an au Nord et 2263 KWh/m²/an au Sud du pays [1]. En 2014, le marché mondial du photovoltaïque a atteint un volume de fabrication de nouveaux modules de plus de 40 GW de puissance cumulée. Avec la généralisation et la compétitivité de la technologie solaire dans de nombreuses régions du monde, la croissance du marché ne fait que confirmer les prévisions des experts [2].

Au niveau mondial, le marché du photovoltaïque est largement dominé par la technologie du silicium avec une production de panneaux solaires estimée à plus de 90% et un rendement pouvant atteindre 18 à 30 % [3]. Il possède des propriétés photovoltaïques remarquables, dont un taux de conversion de 27.6 % pour le silicium monocristallin [4]. En effet, cette filière reste la plus avancée sur le plan technologique et industriel, car la technologie du silicium est arrivée presque à sa maturité et le silicium est un matériau abondant sur terre, parfaitement stable et non toxique.

Les programmes actuels de recherche et de développement de l'industrie photovoltaïque revêtent une extrême importance aux nouveaux procédés de croissance du silicium cristallin, à la réduction de l'épaisseur des cellules qui représente une réduction du coût final du module photovoltaïque, à l'optimisation du concept des structures photovoltaïques et à la minimisation des étapes technologique de fabrication. Aussi, la réduction de la réflectivité de

la face avant des cellules photovoltaïque au silicium multicristallin est un des points essentiels à résoudre pour améliorer leur rendement de conversion solaire. La réduction de la réflectivité est obtenue en texturisant la surface des cellules pour assurer un confinement optique de la lumière et en recouvrant cette surface d'une couche antireflet.

Un des principaux obstacles pour que le photovoltaïque devienne populaire, est le coût par watt d'électricité produite par le photovoltaïque qui est dans la plupart des cas non concurrentiel à celui produit par les méthodes conventionnelles [5]. L'un des moyens proposés pour réduire le coût par watt, est de réduire le coût de fabrication de la cellule photovoltaïque. En d'autres termes, réduire considérablement la quantité de matériaux semiconducteurs entrants dans la composition de chaque cellule et augmenter sa durée de vie.

Les cellules solaires en couches minces ont une capacité d'absorption élevée et nécessitent environ 100 fois moins de matière (quelques μ m d'épaisseur) que les cellules au silicium (environ 200 μ m d'épaisseur). Elles offrent également de nombreux avantages : elles peuvent être déposées sur des substrats souples, le dépôt se fait par des procédés simples, rapide, en quelques étapes et à température modérée. Ainsi l'énergie utilisée pour la production des modules représente environ une année de leur propre production d'énergie, contre environ 2 ans pour les cellules de silicium. Les technologies couches minces occupent une part croissante du marché du photovoltaïque, déjà estimé à 14 % du marché mondial en 2010. Il existe différentes filières industrielles relatives aux couches minces qui sont :

1- les cellules solaires au diséléniure de cuivre, d'indium et de galium, noté CIGS ; leur rendement atteint 20.3 % en laboratoire et 11 à 13 % en module [6].

2- les cellules solaires à base de silicium amorphe hydrogéné a-Si-H, leur rendement est d'environ 8 % [7].

3- les cellules solaires au tellurure de cadmium CdTe sont les premières cellules dont le coût de production était inférieur à 1 \$/Wc (par watt-crête). Leur rendement est de 11 % en module et atteint 17 % en laboratoire [8].

En parallèle, des concepts d'ingénierie photonique avancés ont été développés en introduisant des structures photoniques afin d'améliorer le rendement des cellules solaires, mais aussi pour assurer un piégeage efficace des photons dans la couche active pour les longueurs d'onde où l'absorption est normalement faible. Dans notre cas, nous avons cherché à tirer profit des propriétés optiques particulières et ajustables des structures photoniques, qui

sont des structures caractérisées par un indice de réfraction variant selon une, deux ou trois directions de l'espace. Les cristaux photoniques peuvent être périodiques, quasi-périodique ou complètement aléatoire. La compréhension des interactions optiques dans les structures photoniques apériodiques offre un potentiel presque inexploré pour la manipulation des champs électromagnétiques et la diffusion de la lumière [9-10]. Les cristaux photoniques ouvrent la voie à diverses applications potentielles: les antennes et circuit micro-ondes (surfaces à haute impédance), les fibres à cristal photonique, les microsources optiques (sources optiques miniatures), les écrans d'ordinateur, absorbeurs d'énergie solaire et systèmes de communication THz [11-12].

Plus précisément, nous avons proposé des structures photoniques déposée sur la cellule solaire GaSb pour former un filtre afin d'y obtenir un contrôle spectral, et ainsi d'augmenter l'absorption sur une large gamme spectrale. L'utilisation d'une structure d'empilement diélectrique pour fournir un contrôle spectral dans un système TPV offre plusieurs avantages en termes de performance.

C'est dans cette optique que nous avons fixé l'objectif de ce travail. Le présent manuscrit consiste à mettre au point des approches théoriques pour la conception et l'étude des cristaux photoniques. Nous avons proposé trois structures photoniques à base de matériaux Ge et MgF₂, et nos objectifs sont : premièrement, proposer des outils numériques destinés à la détermination des épaisseurs et des propriétés optiques des structures photoniques, deuxièmement, mettre au point une approche théorique de conception optimale des structures photoniques.

Cette thèse est divisée en quatre chapitres :

Chapitre 1 : sera consacré à une présentation générale de la conversion photovoltaïque, quelques définitions sur le fonctionnement de la cellule solaire et leurs caractéristiques électriques. Nous donnons les différents facteurs influant sur leurs rendements, ainsi que les technologies utilisées pour la réduction de ces pertes.

Chapitre 2: sera consacré à l'étude des systèmes thermophotovoltaïques et leurs composants fondamentaux, qui sera suivie d'une discussion des cristaux photoniques de manière générale et leur utilisation comme des filtres dans le système TPV. Nous terminerons ce chapitre par la méthode générale de calcul des propriétés radiatives des structures multicouches qui repose sur la technique des matrices de transfert.

Chapitre 3 : nous présenterons les différentes méthodes numériques d'optimisation. Ces méthodes sont utilisées dans une grande variété de problèmes, dans plusieurs domaines tels que : sciences des matériaux, finance, mécanique, biologie, transport, etc. Nous mettrons l'accent sur les techniques méta-heuristiques qui s'inspirent des phénomènes biologiques et sociaux. Nous présenterons l'algorithme principal qui va être utilisé dans les prochains chapitres.

Chapitre 4 : Ce chapitre est organisé en deux parties. Dans chaque partie nous rapporterons des résultats de calcul sur la réponse optique de quart d'onde périodique, des structures photoniques unidimensionnels à base de matériaux Ge et MgF₂. Nous présenterons les bases et les moyens nécessaires à notre étude. Nous appliquerons ces outils pour étudier les trois structures photoniques proposées : l'empilement périodique, l'empilement périodique modifié et la structure optimisée. La première partie de ce chapitre sera concerné aux résultats d'optimisation d'un filtre MgF₂/Ge en supposant que le filtre est transparent en négligeant les pertes d'absorption dans le filtre, la deuxième s'intéressera aux résultats d'optimisation d'un filtre MgF₂/Ge utilisé dans un système TPV (l'absorption partielle de Ge sera pris en considération). Notre but est de pouvoir comparer les performances de ces différentes structures et de concevoir des cristaux photoniques à performance optimale.

Références :

[1] Le ministère de l'Energie et des Mines, www.mem-algéria.org

[2] www.photovoltaique.info/Les-technologies-de-cellules.html

[3] Jäger-Waldau, A., Photovoltaic status report 2010, in JRC Scientific and Technical Report 2011, JRC, Institue of Energy, European Commission.

[4] www.nrel.gov

[5] M. Kemell, Academic Dissertation, Université de Helsinki, Filand, (2003).

[6] Jackson, P., D. Hariskos, E. Lotter, S. Paetel, R. Wuerz, R. Menner, W. Wischmann, and M. Powalla, New world record efficiency for Cu(In,Ga)Se₂ thin-film solar cells beyond 20 %. Progress in Photovoltaics: Research and applications, 2011. 19(3): p. DOI: 10. 1002/pip. 1078.

[7] Green, M.A., K. Energy, Y. Hishikawa, and W. Warta, Solar cells efficiency tables. Progress in Photovoltaics: Research and applications, 2011. 19: p. 84-92.

[8] http://investor.firstsolar.com/releaseddetail.cfm?ReleaseID=593994

[9] Z. V. Vardeny, A. Nahata, Amit Agrawal, Optics of photonic quasicrystals, Nature Photonics 7, 177–187 (2013).

[10] M. Florescu, S. Torquato, P. J. Steinhardt, Designer disordered materials with large, complete photonic band gaps, PNAS, 106(49), 20658-20663 (2009).

[11] R. Miloua, Z. Kebbab, F. Chiker, M. Khadraoui, K. Sahraoui, A. Bouzidi, Peak, multipeak and broadband absorption in graphene-based one-dimensional photonic crystal, Optics Communications 330, 135-139 (2014).

[12] T.J. Coutts, An overview of thermophotovoltaic generation of electricity. Sol. Energy Mater. Sol. Cells 66, 443–452 (2001).

CHAPITRE 1 : LA CONVERSION PHOTOVOLTAIQUE

1. Généralités :

1.1. Le rayonnement solaire :

Le soleil situé à une distance de 150 millions de km de notre planète, il nous offre de l'énergie sans laquelle aucune vie sur terre ne serait possible. L'univers est constitué de milliards d'étoiles l'une de ces étoiles est le soleil (étoile parfaitement standard).

L'émission du rayonnement solaire (rayonnement électromagnétique) est du à la manifestation externe des interactions nucléaires qui se produisent au cœur du soleil et de l'ensemble des interactions secondaires qu'elles génèrent dans son enveloppe et c'est presque la quasi-totalité de l'énergie envoyée par le soleil.

Nous rappelons que la lumière (rayonnement électromagnétique) a un double aspect ondulatoire et corpusculaire. Le corpusculaire est le photon de masse nulle ; son énergie est reliée à la fréquence ou la longueur d'onde associée par la formule :

$$E = h\gamma = \frac{hc}{\lambda}$$
 1-1

où :

h : la constante de Planck ($h=6.62.10^{-34}$)

 γ : la fréquence correspondante à la longueur d'onde λ

c étant la vitesse de propagation de la lumière (c = 3.10^8 m/s).

A chaque longueur d'onde peut être associé un photon d'énergie $E_{ph}=h\gamma$. L'équation 1-1 indique que lorsque la longueur d'onde du photon diminue, l'énergie du photon augmente. La relation qui permette de passer de la longueur d'onde λ (en nm) à l'énergie E_{ph} du photon associé (ev) est :

$$E_{\rm ph} \,({\rm ev}) = \frac{1240}{\lambda} \tag{1-2}$$

Une onde électromagnétique est une oscillation couplée du champ électrique et du champ magnétique. Le champ électrique et magnétique sont liés par les équations de Maxwell.

1.2. Spectre des ondes électromagnétiques :

Le rayonnement solaire couvre une gamme assez large de longueurs d'onde, il s'étale des ondes radio (les plus grandes longueurs d'onde) jusqu'au rayon x (faibles longueurs d'onde).

Le maximum tend vers 410 nm. L'œil humain n'est sensible qu'a une petite partie du spectre solaire : le rayonnement visible est compris entre 400 et 700 nm (du violet au rouge).

La figure 1-1 présente la gamme de rayonnement électromagnétique entourant le spectre visible ainsi que les longueurs d'ondes correspondantes.



Figure 1-1 : Spectre électromagnétique [1]

1.3. L'énergie solaire :

Hors atmosphère, le rayonnement solaire reçu par la terre en incidence normale approche les 1400 W/m². Il n'en est pas de même au niveau du sol car en traversant l'atmosphère, le rayonnement solaire subit une atténuation et une modification de son spectre, en raison de multiples paramètres atmosphériques tels que, par exemple, la couche d'ozone qui absorbe une partie du rayonnement solaire, plus précisément une partie de l'ultraviolet au visible, où l'oxygène possède deux bandes d'absorption entre 0.6 et 0.7 μ m. La vapeur d'eau aussi présente un nombre de bandes d'absorption assez important dans le visible et l'infrarouge. Donc au sol le flux énergétique reçu se réduit à 1000 W/m² (spectre AM1) et cette valeur varie en fonction de l'angle d'incidence des rayons solaires (figure 1-3). Plus l'épaisseur atmosphérique traversé par les rayons solaires est important plus on perd de l'énergie.

Nous verrons par la suite que la cellule photovoltaïque n'est sensible que dans une gamme bien précise de longueurs d'onde. Donc il faut définir un spectre standard, appelé spectre de référence. Le spectre présenté sur la figure 1-2 montre l'irradiance spectrale en fonction de la longueur d'onde, c'est la puissance associée au rayonnement par tranche de longueur d'onde et par unité de surface, elle s'exprime en $Wm^{-2}\mu m^{-1}$.

On utilise la dénomination AM pour Air Mass afin de caractériser le spectre solaire en termes d'énergie émise [2,3]. Pour tenir compte de l'épaisseur d'atmosphère traversée par le rayonnement solaire incident (Figure 1-3), on introduit un coefficient appelé nombre de masse (AM) défini par :

$$AM = \frac{1}{\cos(\theta)}$$
 1-3

 θ est l'angle que le soleil fait avec son zénith.

Selon les conditions de réception de la lumière, la masse d'air est définie comme suit :

- le spectre solaire AM0 correspond au rayonnement à l'extérieur de l'atmosphère (hors atmosphère), ce spectre est utilisé pour les applications spatiales.

-Le spectre solaire AM1 correspond au trajet optique minimal où le soleil est perpendiculaire à la surface de la terre (soleil au zénith).

le spectre solaire AM1.5 est obtenu quand le soleil fait un angle de 48° par rapport au zénith.
L'Air Masse donne la réduction de puissance due à la traversée de l'atmosphère. Il faut savoir que dans la pratique le spectre que l'on enregistre au sol varie constamment et peut s'éloigner remarquablement de ce spectre de référence.

Le spectre de référence est AM1.5G, correspond à un rayonnement d'environ 1kW/m² (G pour rayonnement global car il tient compte à la fois des radiations directes et diffuses). On constate sur la figure 1-2 que le spectre solaire de référence s'étale de 0,3 µm à environ 2 µm, la plus grande partie de l'énergie se situant vers les faibles longueurs d'ondes. La partie la plus importante du spectre solaire à la surface de la terre concerne le domaine du visible (400-700 nm) et de l'infrarouge proche. Chaque fois que l'on désirera comparer les performances des convertisseurs photovoltaïques il sera nécessaire de se ramener à ce spectre de référence [4].



Figue 1-2 : Spectre solaire de référence (spectre mesuré selon la norme AM1.5G) [5].



Figure 1-3 : Norme de mesures du spectre solaire AM0, AM1 et AM1.5 [5].

1.4. La conversion photovoltaïque :

La conversion photovoltaïque est la transformation directe d'une énergie solaire en énergie électrique par l'effet photovoltaïque. C'est en 1839 que le physicien français Edmond Becquerel a découvert que certains matériaux délivraient une quantité d'électricité quand ils étaient exposés à la lumière. La première cellule fut inventée au début des années 1950 et c'était une cellule en silicium qui avait un rendement de 4.5%. Ensuite, vers la fin des années 1950 les cellules photovoltaïques ont connues leurs applications pour l'espace (alimentation électrique des satellites) ainsi que leurs premières utilisations terrestres dans les années 1970.

1.4.1. Les cellules solaires :

Les cellules solaires sont des composants électroniques à semi-conducteur et lorsqu'ils sont exposés à la lumière, ils développent une force électromotrice capable de débiter un courant dans un circuit extérieur.

Les semi-conducteurs sont caractérisés par un écart énergétique entre la bande de valence et la bande de conduction appelée bande interdite ou gap. Plus cet écart est important, plus le matériau est isolant. Ce gap correspond à l'énergie nécessaire au système pour faire passer un électron de la bande de valence à la bande de conduction.

Pour effectuer une transition électronique des électrons de la bande de valence, il faut donc des photons avec une énergie E_{ph} supérieure à E_g .

Après absorption de l'énergie du photon E_{ph} , l'électron aura une énergie située dans la bande de conduction du matériau. Si E_{ph} est supérieure à E_g , l'excès d'énergie est immédiatement perdu. Cela se traduit par un dégagement de chaleur.

Si $E_{ph} < E_g$, le photon n'est pas absorbé et le semi-conducteur est dit transparent pour cette longueur d'onde.

1.4.2. Principe de fonctionnement d'une cellule solaire:

Une cellule photovoltaïque PV est formée de deux parties, une partie a un nombre prépondérant d'électrons libres et l'autre un manque en électron, dites respectivement région dopée n et région dopée p. Lorsqu'on relie les deux régions, les électrons libres du côté n vont diffuser vers la région p et les lacunes du côté p vont diffuser vers la région n. Il en résulte la création d'une charge spatiale positive prés de la jonction dans le cristal type n et une charge spatiale négative prés du côté p. Cette double charge spatiale fait apparaître un champ électrique interne qui tend a repousser les électrons dans la zone n et les trous dans la zone p ce qui forme la jonction p-n.

Pour obtenir une diode on met des contacts métalliques sur les zones n et p. Lorsqu'on éclaire la jonction, les photons d'énergie supérieurs ou égale à la largeur de la bande interdite E_g de la cellule transfère leurs énergies aux atomes ou chacun pourra promouvoir un électron de la bande de valence vers la bande de conduction. Cette transition électronique génère deux types de porteurs, les électrons de conduction et des lacunes dans la bande de valence. Ces paires électrons trous pourront servir à générer un courant avant leur recombinaison.

Si une charge est collectée aux bornes de la cellule, les électrons drainés vers la zone n vont rejoindre les trous de la zone p par un fil donnant naissance a une tension de sortie (une différence de potentiel ne dépasse pas E_g/q). Un déplacement des électrons veut dire un courant électrique circule (figure 1-4).

Ce courant provient du photocourant I_{ph} généré par le rayonnement et qui contribue au courant inverse de la diode formée par la jonction. Le courant inverse d'une jonction p-n est proportionnel au nombre de porteurs drainés par unité de temps, donc l'éclairement augmente le courant inverse par la génération des paires électrons-trous dans la zone de charge d'espace.

Les paires électrons-trous générés dans les zones électriquement neutres (zone p et zone n) vont se diffuser. Lorsque les porteurs minoritaires atteignent la zone de déplétion alors ils sont dissociés par le champ électrique vers la zone dans laquelle ils deviennent majoritaires. Donc ces porteurs contribuent par leur diffusion au courant et il se crée un courant de diffusion. Alors que les paires électrons-trous crées dans la zone de charge d'espace donnent naissance à un photocourant de génération. Le courant de diffusion et le photocourant de génération s'ajoutent pour donner le photocourant I_{ph} qui est proportionnel à l'intensité lumineuse. Et comme on a mentionné précédemment, ce courant s'oppose au courant de la diode I_{obs}.



Figure 1-4 : Illustration du fonctionnement d'une cellule PV classique. Structure d'une cellule photovoltaïque (a), diagramme énergétique de la jonction (b) [4].

Donc le fonctionnement des cellules photovoltaïques est basé sur l'existence du champ électrique interne pour séparer les paire électrons-trous générés par l'absorption de la lumière. Un paramètre peut influencer sur le fonctionnement de la cellule solaire. Sous un éclairement fixe et en absence de tous mécanismes de pertes, l'énergie du gap du semi-conducteur E_g devient un paramètre primordial influant sur les performances d'une cellule solaire. Elle joue un rôle très important dans le développement et la conception des cellules solaires,

notamment elle détermine la plage d'absorption de la cellule solaire et la quantité des photons absorbés (relation 1-2).

On en déduit que la position de la zone de champ va jouer un rôle sur la sensibilité spectrale de la cellule, car ce sont les paires électron-trou générées près de la zone de champ qui ont le plus de chance d'être collectées.

Si la jonction est près de la surface, la cellule sera efficace pour convertir les faibles longueurs d'ondes (qui pénètrent peu profondément dans le matériau).

Enfin, pour les longueurs d'ondes du spectre solaire pouvant interagir avec le semiconducteur, les plus petites longueurs d'ondes sont absorbées près de la surface du matériau, générant donc des paires électron-trou qui, en raison des défauts présents à la surface du matériau, se recombinent rapidement, ne permettant donc pas leur exploitation.

Pour que le rayonnement incident soit absorbé convenablement et pour éviter les effets de réflectivité on utilise des couches antireflets et la texturisation. Au dessus de la texturisation on met un dépôt antireflet pour minimiser les pertes par réflexion et assurer une bonne transmittance (limite à 3 ou 4% le coefficient de réflectivité de la surface pour les longueurs d'ondes du spectre utile).

Puisque la longueur de diffusion des électrons photogénérés L_n est supérieure à celle des trous photogénérés L_p , on dope de préférence la base de type p. Elle est peu dopée pour limiter les recombinaisons. L'émetteur de type n est de faible épaisseur et fortement dopée afin d'obtenir un champ électrique interne suffisant dans la zone d'appauvrissement et d'avoir une faible résistance série au niveau du contact métallique.

Lorsqu'un photon génère une paire électron-trou dans une diode PV, le potentiel présent à travers la zone de charge d'espace de la diode recueille les charges libres [6, 7]. Ceci est illustré sur la figure 1-4, où l'électron libre est balayé vers la région N de la diode et le trou qui entoure la région P. La caractéristique I-V pour une diode fonctionnant de cette manière est donnée en (1.4).

$$I = I_0 \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) - I_{ph}$$
 1-4

où I₀ représente le courant de saturation de la diode PV dérivée dans [8] et I_{ph} est le courant généré par les photons énergétiques. V est la tension aux bornes de la jonction, q la charge élémentaire en valeur absolue, k_B la constante de Boltzmann, T la température. La figure 1-5 montre la caractéristique I-V d'une diode PV pour les cas éclairés.



Figure 1-5 : courbes puissance-tension P(V) et courant-tension I(V) d'une cellule PV [4].

Sous illumination toute cellule photovoltaïque est caractérisée par une courbe couranttension (I-V). Trois grandeurs physiques définissent cette courbe :

Icc : courant de court-circuit, c'est le courant obtenu à V = 0.

Vco : Tension de circuit ouvert qui correspond à un courant nul.

MPP : Point de fonctionnement optimum (puissance maximal): obtenu pour une tension et un courant optimaux (I_{max} , V_{max}).

Ces trois grandeurs permettent de juger les performances d'une cellule solaire et donc la comparaison des cellules photovoltaïques entre elles en calculant la puissance électrique développée et le rendement de conversion de la photopile.

Sur la figure 1-5, deux paramètres importants de la courbe I-V sont représentés. Ils sont I_{sc}, ou le courant de court-circuit et V_{co}, la tension de circuit ouvert. Le rectangle de puissance maximale est représenté sur la figure1-5. Ceci définit la puissance électrique maximale qu'une diode PV peut fournir. La puissance de sortie est donnée par (1-5) :

$$P = IV = I_0 V \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) - I_{PH} V$$
 1-5

MPP correspond au point de fonctionnement optimum d'une cellule solaire, c'est-à-dire à P_{max} où le produit $I \times V$ est maximum (figure 1-5 courbe P = f(V)).

La condition pour qu'une puissance de sortie maximale est obtenue est donnée par dP/dV = 0. Ceci résulte en une équation qui quantifie la puissance de sortie maximale d'une diode PV éclairée.

$$P_{max} = I_{max}V_{max} \approx I_{ph}\left(V_{co} - \frac{k_BT}{q}ln\left(1 + \frac{qV_{max}}{k_BT}\right) - \frac{k_BT}{q}\right)$$
 1-6

 I_{max} : Le courant maximal correspond à la puissance maximale.

 V_{max} : La tension maximale correspond à la puissance maximale.

Sous un spectre AM1.5G et à $T = 25^{\circ}C$; Cette puissance maximale est aussi appelée puissance de crête et sert de référence pour comparer les performances des différentes cellules. L'équation 1-6 quantifie la quantité maximale de puissance électrique qu'une diode PV peut produire, en supposant que I_{ph} est connue. I_{ph} représente le courant photo-généré dans la diode PV, qui est en fin de compte proportionnel à l'intensité lumineuse.

• Le facteur de forme FF (Fill Factor) :

Facteur de forme est défini par la relation suivante :

$$FF = \frac{V_{max} \times I_{max}}{V_{co}I_{cc}}$$
 1-7

Ce facteur FF caractérise la forme de la caractéristique I(V) de la cellule et représente le rapport des aires des rectangles formés par (Imax, Vmax) et (Icc, Vco).

Le rendement de conversion photovoltaïque (η) :

Le rendement η est défini comme étant le rapport entre la puissance maximale délivrée par la cellule et la puissance lumineuse incidente.

$$\eta = \frac{P_{max}}{P_{in}} = \frac{V_{max} \times I_{max}}{P_{in}} = \frac{V_{co}I_{cc}FF}{P_{in}}$$
 1-8

 P_{max} : Puissance maximale fournie par la cellule (W/m²).

 P_{in} : Puissance incidente (W/m²) (puissance d'éclairement reçu par unité de surface), pour le spectre AM1.5 $P_{in} = 100 \text{ mW.cm}^{-2}$.

FF : facteur de forme (%).

On déduit que les paramètres qui caractérisent une cellule photovoltaïque sont donc le courant I_{cc} , la tension V_{co} et le rendement de conversion η . La valeur de I_{cc} est en fonction de la longueur de diffusion des porteurs ainsi que des facteurs optiques tels que l'absorption et la réflexion du rayon lumineux. Le facteur de forme est influencé par les résistances séries et parallèles, les courts-circuits et les parasites.

1.4.3. Les photopiles en couches minces :

Les photopiles en couches minces se composent d'une couche ultrafine d'un semiconducteur de type p (a-Si type p) en surface afin de favoriser le passage d'une maximum de photons dans la couche intrinsèque où il y a photogénération, d'une couche fine de semiconducteur intrinsèque (a-Si intrinsèque) et d'une fine couche de semi-conducteur type n. les couches de semi-conducteur p et n permettent de créer le champ électrique nécessaire pour la collecte des paires électrons-trous. Le contact avant est une couche d'oxyde transparente et conductrice (TCO), tandis que le contact arrière est une couche d'un métal.

Afin d'augmenter l'absorption de la lumière dans ces cellules on utilise des jonctions multiples avec des matériaux à gap décroissant qui vont chacun absorber une partie du spectre solaire.

Les modules photovoltaïques formés en couches minces de silicium sont très économiques :

- Ils sont fabriqués en déposant une ou plusieurs couches semi-conductrices sur un support de verre, de plastique, d'acier (des films métalliques).
- Ils sont beaucoup moins couteux en matière première puisque les cellules ainsi fabriquées ont des faibles épaisseurs (épaisseurs comprises entre 0.5 μm et 2 μm) mais leurs rendement est inférieur à celui des cellules au silicium cristallin.
- Les températures de dépôt sont faibles d'une manière relative.

1.4.3.a. Principe de fonctionnement :

Les étapes successives lors du fonctionnement d'une cellule solaire déposée en couche mince sont les suivantes :

- a) Les photons incidents dont l'énergie est supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite (E_{gap}), sont absorbés dans la couche de silicium. L'énergie des photons permet d'exciter un électron c'est-à-dire de passer d'un état de la bande de valence à un état de la bande de conduction ; une pair électron-trou est créée. Grace au champ électrique crée par les couches dopées dans la couche intrinsèque, la charge négative est attirée vers la couche dopée n et la charge positive est attirée vers la couche dopée p.
- b) Dans le cas où ces charges ont une mobilité (μ) et un durée de vie (τ) assez longue pour atteindre les contacts avant et arrière, elles sont collectées pour générer le courant. Dans le cas contraire, on parle de recombinaison des porteurs libres. Cette grandeur (τ) définit la durée de vie moyenne avant que les porteurs se recombinent et

elle dépend de la longueur de diffusion L_D et au coefficient de diffusion D du matériau (relation 1-9). La longueur de diffusion des porteurs minoritaires (L_p dans matériau de type n et L_n dans un matériau de type p) caractérise la distance que peuvent atteindre les porteurs photogénérés ou injectés avant de se recombiner [9].

$$L_D = \sqrt{D\tau}$$
 1-9

Donc, les photons sont d'abord absorbés et des porteurs libres sont générés. Un certain nombre d'entre eux est collecté et contribue au courant I_{cc} généré par la cellule. Pour augmenter le courant I_{cc} généré par les cellules solaires, il faut augmenter l'absorption des photons et améliorer la collection des porteurs.

1.4.3.b. Absorption :

L'intensité de la lumière absorbée après une distance traversée par les photons dans un matériau est donnée par la relation suivante :

$$I(\lambda, x) = I_0(1 - e^{-\alpha(\lambda) * x})$$
 1-10

Où

- $\alpha(\lambda)$ est le coefficient d'absorption du matériau pour une longueur d'onde λ .
- x est la distance traversée par les photons dans le matériau.
- I est l'intensité de la lumière absorbée à une distance x.
- I₀ est l'intensité de la lumière au moment de son entrée dans le matériau.

D'après la relation (1-10) on constate que plus le produit $\alpha(\lambda) \times x$ est assez important plus l'intensité de la lumière absorbée (I) est importante. Donc pour avoir une bonne absorption il faut qu'on assure une profonde pénétration des photons dans le matériau.

1.4.3.c. Collections des charges électriques :

Lorsqu'on met les couches p, i, et n en contact, les électrons libres de la région n et les lacunes de la région p diffusent vers la zone intrinsèque sous l'effet du gradient de concentration. Suite à cette diffusion, il apparait une charge spatiale fixe négative dans la zone p et positive dans la région n. Cette double charge spatiale fait apparaitre un champ électrique interne qui permet d'annuler les flux des porteurs par sa propulsion des porteurs vers les régions où ils deviennent majoritaires.

1.5. Les différents types des cellules solaires :

Dans le photovoltaïque, les filières les plus abondantes sont présentées en deux groupes : la filière silicium et la filière couches minces.

- La filière silicium : concerne les cellules à base de silicium cristallin où multicristallin, et cette filière est composée des cellules silicium à homojonctions et hétérojonctions. Leurs cout de fabrication est assez faible parce qu'elles sont très épais d'où la tendance vers l'utilisation de substrat moins épais. Ces cellules représentent une partie importante du marché photovoltaïque. Le meilleur rendement atteint 25% en laboratoire [10].
- La filière couches minces : cette filière a connu une poussée très importante ces dernières années. Elle comporte plusieurs catégories :
 - Les cellules en couches minces à base de silicium amorphe. La structure de ces cellules est soit une simple jonction p-i-n où bien une jonction multiple. Les épaisseurs sont de l'ordre de quelques centaines de nanomètres, ou moins. Cette diminution des épaisseurs permet une réduction importante du coût de la cellule mais le rendement de ces cellules est assez faible. Les rendements les plus élevés (15%) ont été obtenus avec des triples jonctions [10].
 - Les cellules multi-jonctions en semi-conducteur III-V (GaAs, AlGaAs, InGaAsP : un empilement de plusieurs cellules photovoltaïques convertissant différentes parties du spectre solaire. Cette technologie permet d'optimiser l'absorption du rayonnement solaire par la cellule et ainsi d'augmenter le rendement de la conversion photovoltaïque. Ces cellules ont un très bon rendement mais leurs couts de fabrication sont très élevés.
 - Les cellules en couches minces de la famille des chalcopyrites Cu(In,Ga)Se₂ (CIGS) ou Cu(In,Ga)(Se,S)₂ (CIGSS). Pour les cellules solaires ces matériaux chalcopyrites servent d'absorbeur et sont les meilleurs par rapport aux autres semi-conducteurs dans les applications solaires grâce à leurs coefficients d'absorption élevé. Les cellules CIGS (cuivre, indium, gallium, sélénium) possèdent un rendement de l'ordre 20%. La rareté de l'indium et de galium peut freiner l'utilisation de ces cellules. Le coût de fabrication est faible mais son rendement est inférieur à celui des cellules au silicium cristallin.

- Les cellules organiques : composées de semi-conducteurs organiques déposés sur un substrat de verre ou de plastique, ces cellules présentent des perspectives intéressantes de réduction des coûts. L'avantage de ces cellules c'est qu'on peut les fabriquées sur des grandes surfaces et sur des substrats flexibles. Leurs rendements sont assez faible (ne dépasse pas 5%).
- Les cellules en tandem : sont des empilements homogènes de deux cellules simples ; ces cellules se forment en combinant deux cellules. Ces cellules ont un très bon rendement, elles ont une sensibilité très élevée sur une large plage de longueur d'onde mais leurs coûts de fabrication sont élevés dû à la superposition de deux cellules.
- Les cellules à concentration : afin de concentrer la lumière sur ces cellules on place ces photopiles au sein d'un foyer optique ; grâce à un effet loupe le flux énergétique dégagé par le rayonnement solaire est concentré ce qui améliore la capacité des cellules. Leur rendement est élevé mais elles doivent nécessairement être placées sur un porteur mobile pour qu'elles soient toujours positionnées en face du soleil.

1.6. Les facteurs limitant le rendement :

Pour avoir un rendement élevé il faut réduire la totalité des pertes. Différentes pertes viennent influencer le rendement d'une cellule. Ceux-ci peuvent être divisés principalement en deux secteurs soit aux restrictions purement physiques liées au matériau, soit aux limitations technologiques induites par le processus de fabrication. Cependant, des choix technologiques appropriés peuvent avoir des conséquences sur les limitations intrinsèques du matériau [11]. Donc un certain nombre de facteurs, physiques et technologiques, sont susceptibles de limiter le rendement des cellules.

1.6.1. Les pertes physiques :

Les pertes physiques limitent le rendement de conversion photovoltaïque à presque 29% (mesuré sous éclairement AM1.5G) [12]. Elles sont liées aux matériaux utilisés (on prend notre matériau ici le silicium) et aussi à la technologie.

-L'absorption incomplète : La première cause des pertes est l'absorption incomplète du spectre solaire par le semi-conducteur (silicium). Certainement, les photons dont l'énergie est inférieure à celle du gap du silicium ne sont pas absorbés et ne permettent pas la génération des paires électrons/trous.

-L'excès d'énergie : Les pertes par thermalisation sont aussi importantes ; les photons possédant une énergie supérieure à celle du gap du matériau sont absorbés par le matériau mais l'excès d'énergie est dissipé sous forme de chaleur. Sous éclairement AM1.5, ces pertes sont évaluées à 33% de la puissance totale dans le cas du silicium [13].

-Le facteur de tension : c'est le rapport de la tension maximale développée par la cellule Vco par la tension de gap E_g/q . Les recombinaisons Auger limitent la valeur de Vco à des valeurs comprises entre 680mV et 720mV pour des cellules photovoltaïques en silicium à haut rendement [14].

-Le facteur de forme : la puissance maximale délivrée par une cellule n'est pas égale au produit du courant de court-circuit Icc et la tension de circuit ouvert Vco ; donc la courbe I(V) ne peut pas avoir la forme rectangulaire ($FF \neq 1$) et d'après l'équation (1-4) le courant varie exponentiellement avec la tension ; se qui fait que le facteur de forme ne dépasse pas 0.89 [15]. Ce terme dépend de la qualité de la jonction p-n et des résistances série et parallèle [16].

1.6.2. Les pertes technologiques :

Les pertes technologiques sont des pertes liées à la technologie de la cellule photovoltaïque et ces dernières peuvent réduire le rendement de la conversion : les pertes optiques, les pertes par recombinaison et les pertes résistives.

1.6.2.a. Les pertes optiques :

Ces pertes empêchent l'absorption totale du rayonnement incident ce qui réduit le courant de court-circuit Icc et lui-même influe sur les performances de la cellule. Les origines possibles de ces pertes sont :

-Les réflexions : La réflexion au niveau de la surface du silicium par exemple influe sur le rendement de la cellule photovoltaïque. Le silicium est un matériau très réfléchissant, son indice de réfraction n = 4 à 650 nm étant diffèrent de l'air dont l'indice est n = 1.5 à 650 nm, à l'interface, il va se produire des réflexions qui réduiront les performances de la cellule.

-Le rendement d'absorption : le rendement d'absorption est réduit par les pertes par transmission. A cause de l'épaisseur limitée de la cellule, une partie des photons traverse l'épaisseur de la cellule sans être absorbés.

-Le taux d'ombrage : La grille métallique en face avant de la cellule réfléchit une partie du rayonnement incident ce qui réduit le photocourant. Le taux d'ombrage est un accord entre les pertes optiques du à la couverture partielle de l'émetteur et les pertes de facteur de forme induites par la résistance série liées à l'épaisseur des métallisations.

-Le rendement de collecte : le rendement de collecte est défini par le rapport entre le nombre de porteurs réellement collectés et le nombre complet des porteurs photogénérés. Certainement, il y a des porteurs se recombinent dans le volume ou à la surface de la cellule avant leur collection. Ce phénomène dépendant directement de la durée de vie τ des porteurs minoritaires. Cette grandeur τ définit la durée de vie moyenne avant que les porteurs ne se recombinent. On verra ultérieurement les traitements utilisés pour réduire ces pertes.

1.7. Les procédés d'amélioration des performances d'une cellule solaire :

Comme nous l'avons vu précédemment les différents facteurs de pertes sont liés d'une part à des limitations propres au matériau (les pertes physiques) et d'autre part à la technologie de fabrication de la cellule (les pertes optiques). L'optimisation des cellules photovoltaïque est basée sur ces facteurs qui viennent influencer le rendement de la cellule. La partie suivante présente les principaux composants utilisés pour améliorer les performances de la cellule. Nous les présenterons sur la cellule photovoltaïque avec contact sur les deux faces.

1.7.1. Réflecteur arrière (BSR : Back Surface Reflector) :

La formation d'un réflecteur en face arrière dans une cellule photovoltaïque permet d'éviter les pertes par transmission et de récupérer tous les rayonnements transmis sans être absorbés et d'avoir une absorption de tout le rayonnement pénétrant dans la cellule solaire pour obtenir le meilleur rendement possible.

1.7.2 Passivation des faces avant et arrière :

Les recombinaisons en surface sont dues aux défauts présent à la surface du matériau (tel que les impuretés, liaisons pendantes) ce qui entrainent des pertes non négligeables. Différents traitements sont utilisés tel que la passivation qui consiste à améliorer les caractères électroniques de la surface et du volume du semi-conducteur en diminuant les effets des défauts existants. L'oxydation et le dépôt de nitrure SiN permettent de passiver efficacement la surface.

1.7.3 La couche antireflet (CAR) :

Le troisième composant utilisé pour améliorer le rendement de la cellule est d'ajouter la couche antireflet (CAR). L'indice de réfraction et l'épaisseur de cette couche (CAR) sont ajustés pour obtenir une lame quart d'onde afin de minimiser les réflexions face avant et d'assurer une bonne transmittance du rayonnement en créant des interférences destructives

(toute la lumière est transmise au semi-conducteur et pas d'onde réfléchie). Si l'épaisseur de la couche diélectrique est égale à :

$$d_{CAR} = \frac{(2N+1).\lambda}{4.n_{CAR}}, \quad N = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 1-11

On n'aura pas des réflexions à l'interface air/CAR et CAR/semi-conducteur. Une double couche antireflet est utilisée pour les cellules photovoltaïques à haut rendement avec deux diélectriques différents. Les différents CAR utilisées en photovoltaïque sont : MgF₂, SiO₂, TiO₂, ZnS, etc... [17].

1.7.4 Texturation de la surface :

La texturation de la surface vise à former en surface du relief de taille micrométrique, généralement de forme pyramidale. Cette opération est utilisée pour diminuer les réflexions sur la face avant et d'augmenter les photons absorbés dans la couche active en augmentant le chemin optique des photons et en les piégeant à l'intérieur de la cellule.

1.7.5 Les contacts face avant et arrière :

Les contacts métalliques présents sur la face avant et arrière servent à collecter le courant de porteurs photogénérés. Pour que la collection soit efficace, les contacts doivent être ohmiques. La résistance des contacts est un paramètre très important. La forte résistance des contacts augmente la résistance série de la cellule et abaisse le facteur de forme et le rendement [18].

1.7.6 Champs électrique dans la zone arrière (BSF back surface field) :

On réalise un champ électrique sur la face arrière de la cellule pour collecter les porteurs photogénérés par les rayonnements de grandes longueurs d'ondes du spectre solaire. La réalisation de ce champ se fait par une transition abrupte de dopage dans la zone même du contact ohmique (face arrière). On appelle ce champ le champ électrique arrière BSF. Cette barrière de potentiel crée par la différence de niveau de dopage entre la base et le champ électrique arrière BSF tend à pousser les porteurs minoritaires dans la base et les éloigner du bord du cristal. Et donc ces porteurs contribuent au photocourant dans le cas où la longueur de
diffusion de ses paire électrons-trous est plus importante que l'épaisseur totale de la couche de base de cellule [19].

1.8 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons rappelé quelques notions sur le rayonnement solaire et son application dans le domaine photovoltaïque. Nous avons ensuite expliqué le principe de fonctionnement d'une cellule photovoltaïque et leurs caractéristiques électriques et les paramètres essentiels permettant de calculer leur rendement. Nous avons abordé aussi les photopiles en couches minces. A la fin nous avons exposé les différents facteurs limitant le rendement de la cellule ainsi que les différentes technologies apportées aux cellules photovoltaïques afin d'améliorer les performances de la conversion.

Références:

- [1] https://fr.khanacademy.org/science/.
- [2] American Society for Testing and Materials (ASTM) Terrestrial Reference Spectra for Photovoltaic Performance Evaluation, ASTM G173-03 Tables: Extraterrestrial Spectrum, Terrestrial Globale 37 deg South Facing Tilt & Direct Normal + Cirmcumsolar, Disponible sur: http://rredc.nrel.gov/solar/spectra/am1.5
- [3] Riodan,C.;Hulstron,R.; «what is an air mass 1.5 spectrum? [Solar cell performance calculations]»; Photonic Specialists Conference, 1990, Conference Record of the Twenty First IEEE; 21-25 May 1990 Page(s): 1085-1088 vol.2, Digital Object Identifier 10.1109/PVSC.1990.111784.
- [4] Fatima ABDO, croissance des couches minces de silicium par épitaxie en phase liquide à basse température pour application photovoltaïques. Institue national des sciences appliques de Lyon, 2007.
- [5] https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00766750/document
- [6] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices. New York: John Wiley & Son, pp. 790-811, 1981.
- [7] J. A. del Alamo, Integrated Microelectronic Devices: Physics and Modeling. New Jersey: Prentice Hall, pp. 338-388, 2002.
- [8] S. M. Sze, Semiconductor Devices : Physics and Technology. New York: John Wiley & Sons, pp. 3-30, 1985.
- [9] Thèse : Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charges minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière-matière. 2009 Par Yassine Sayad.
- [10] http://www.nrel.gov/ncpv/.
- [11] Jean-François LELIEVRE. Elaboration de SiNx :H par PECVD : optimisation des propriétés optiques, passivantes et structurales pour applications photovoltaïques. These de doctorat. INSA de Lyon. 2007] (chapitre IETAT de l'art cellule solaire conv.)
- [12] R. Swanson, "Approaching the 29% limit efficiency of silicon solar cells," in *Photovoltaic Specialists Conference*, 2005. Conference Record of the Thirty-first IEEE,

pp. 889-894, IEEE, 2005.

[13] RICAUD A. Photopiles solaire. Lausanne, Suisse : Presse polytechniques et universitaires romandes, 1997, 332 p.

- [14] J. Szlufcik, S. Sivoththaman, J. Nlis, R. Mertens, and R. Van Overstraeten, "Lowcost industrial technologies of crystalline silicon solar cells," *Proceedings of the IEEE*, vol. 85, no. 5, pp. 711–730, 2002.
- [15] SZLUFCIK J. et al. Low-cost industrial technologies of crystalline silicon solar cells.Proc. of the IEEE. 1997. vol.85, No. 5, pp. 711-729.
- [16] KAMINSKI A. Etude des étapes technologiques critiques dans la production des cellules solaires en silicium multicristallin, Thèse, INSA de Lyon, 1997, 165 p.
- [17] Jianhua, Aihua Wang, Pietro P. Altermatt, Stuart R.Wenham and Martin A. Green. 24% efficient perl silicon solar cell: Recent improvements in high efficiency silicon research. Solar En.Mat.&sol.Cells, 1996, Vol.41/42,pp.78-99.
- [18] M. A. Green, J. Zhao, A. Wang, S. R. Wenham. Very high efficiency silicon solar cells –Science and technology. IEEE Transaction on electron devices, 1999, Vol. 46, N° 10, pp. 1940-1947.
- [19] M. ORGERET, les piles solaires le composant et ses application, Parie : Masson, 1985, pp. 87-143.

CHAPITRE 2 : LA CONVERSION THERMOPHOTOVOLTAIQUE

1. la conversion thermophotovoltaïque :

1.1. Introduction :

Le concept de puissance thermophotovoltaïque (TPV) a été d'abord proposé par le scientifique français, Pierre Aigrain [1] au début des années soixante-dix. Le concept TPV utilise une diode photovoltaïque (PV) pour convertir l'énergie rayonnante d'une source thermique à l'électricité. L'application la plus familiale de ce concept est la conversion de l'énergie thermique. Cependant, le terme TPV est généralement réservé aux applications qui utilisent des sources thermiques non solaires fonctionnant à la température de 1000k à 2000k. Un schéma fonctionnel de la structure de base d'un système de conversion de puissance TPV est représenté sur la Figure 2.1.



Figure 2-1 : Illustration des composants fondamentaux d'un système de conversion d'énergie thermophotovoltaïque.

Les photons incidents interagissent avec des électrons liés ou de valence dans le cristal semi-conducteur et transmettent leur énergie aux électrons sous forme d'énergie cinétique. Cette énergie cinétique peut être assez importante pour briser les liaisons covalentes des électrons, ce qui élève l'électron de la bande de valence à la bande de conduction. Une fois que les électrons sont dans la bande de conduction, ils peuvent être collectés à travers une jonction PN, formant un courant.

Malheureusement, la plupart des sources thermiques utilisées pour les applications TPV sont à large bande, émettant des photons avec des énergies très variées. Une fraction significative des photons émis est à faible énergie, et lorsqu'ils interagissent avec le semiconducteur, leur énergie ne génère aucun porteur de charge. L'énergie de ces photons est dissipée sous forme de chaleur dans la diode PV et représente une perte importante d'efficacité de conversion. L'objectif principal de notre thèse est d'explorer une méthode de réduction de cette perte d'efficacité. Le concept implique l'introduction d'un élément de contrôle spectrale entre l'émetteur et la diode PV dans le système de base représenté sur la figure 2-1. L'utilisation d'une structure d'empilement diélectrique pour fournir un control spectral dans un système TPV offre plusieurs avantages en termes de mise en œuvre. L'avantage le plus important étant le fait que l'empilement peut être déposé directement sur la face avant de la diode PV, comme illustré sur la figure 2-2. Cet élément de control spectral ne transmettrait que les photons assez énergétiques pour générer des porteurs de charges dans la diode PV, tout en réfléchissant les photons de faible énergie à la source thermique où ils sont réabsorbés. Cependant, avant que le développement de ce dispositif de control spectral puisse être discuté en détail, il est nécessaire d'examiner de manière plus détaillée les autres composants du système, à savoir la source thermique et la diode PV.



Figure 2-2 : Schéma d'un système TPV composé d'un émetteur à large bande et d'une diode PV avec filtre diélectrique intégré.

1.2. Fonctionnement de la diode photovoltaïque :

La diode PV joue un rôle essentiel dans un système TPV de conversion en électricité du rayonnement émis par la source thermique. L'efficacité de la conversion TPV dépend à la fois de la forme du spectre thermique émis et de la bande interdite du matériau semi-conducteur. La nature de la source thermique sera discutée dans la section suivante, mais à la fin de la présente discussion on suppose que la source thermique est un corps noir [2]. Un corps noir émet un spectre radiatif à large bande, ce qui signifie que la source thermique émet des

photons avec des énergies variables. L'énergie des photons est donnée par la relation 1-1 dans le chapitre I.

Au niveau atomique, le matériau semi-conducteur à partir duquel la diode PV est fabriquée a une structure cristalline [3, 4]. Les atomes de ce cristal sont liés l'un à l'autre, ce qui signifie que chaque atome partage des électrons avec des atomes voisins afin d'obtenir une couche d'électrons externe stable. Lors de la formation de liaisons, ces électrons partagés s'appellent les électrons de valence. Cependant, l'énergie qui lie un électron de valence à ces atomes n'est pas particulièrement importante et par conséquent, si un photon incident est assez énergétique, il peut donner une énergie cinétique suffisante à un électron de valence pour que cet électron se libère de sa liaison. Lorsque cela se produit, l'électron devient un porteur de charge, qui est libre de se déplacer à l'intérieur du semi-conducteur. Cela se traduit également par la formation d'un trou positif sur le niveau de liaison cassée. Ce trou peut également être considéré comme un porteur de charge, qui est libre de se déplacer dans le cristal semiconducteur.

Du point de vue de la bande d'énergie, les électrons liés occupent la bande de valence d'un semi-conducteur et les électrons libres occupent la bande de conduction. Entre les deux existe un écart de bande d'énergie. Aucun électron ne peut exister dans cet espace de bande et physiquement, cela signifie que pour qu'une liaison soit rompue et qu'un électron passe de la B.V à la B.C, un photon doit transmettre une énergie cinétique électronique de valence supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite. Dans un système TPV idéale, la source thermique n'émettra que des photons dont l'énergie équivaut à l'énergie de la bande interdite. Cependant, aucune source de ce genre n'existe. L'énergie contenue dans un photon émis par un corps noir est fonction de la longueur d'onde du photon. Il en résulte que certains photons promouvant les électrons vers la B.C et d'autres ne le font pas. Certains électrons de la B.C auront reçus une énergie cinétique juste suffisante à partir des photons incident pour combler l'écart d'énergie, tandis que d'autres auront été promus plus haut dans la B.C. La figure 2-3 illustre la capacité d'un photon à produire une paire électron-trou dépend de la longueur d'onde du photon.



Figure 2-3 : Efficacité du photon pour la production de paires électron-trou dans l'Antimoniure de Gallium GaSb.

Lorsqu'un photon génère une paire électron-trou dans une diode PV, le potentiel intégré dans la région de charge d'espace de la diode recueille les charges libres [5, 6]. Ceci est illustré dans la figure 2-4, ou l'électron libre est balayé vers la région N de la diode et le trou vers la région P.



Figure 2-4 : Le diagremme énergétique d'une diode PV illustrant comment un photon génère une paire électron-trou contribue à un courant photogénéré en raison de la différence de potentiel intégrée entre le matériau P et N.

Le courant photogénéré dans la diode PV est fonction du spectre émis par la source thermique dans un système TPV. La prochaine section traitera des détails de ce spectre et de la manière dont ses propriétés affectent le système TPV dans son ensemble.

1.3. Source thermique :

La conversion de puissance TPV est basée sur le concept d'une diode PV qui convertit le rayonnement électromagnétique en électricité. L'efficacité avec laquelle cette conversion a lieu dépend des caractéristiques du rayonnement incident. Dans un système TPV idéal, la source thermique émettrait uniquement des photons avec suffisament d'énergie pour généré une paire électron-trou dans la diode PV. Malheureusement, une telle source idéale n'existe pas et la plupart des systèmes TPV utilisent des sources thermiques qui émettent des photons avec une gamme de niveaux d'énergie.

Dans la majorité des systèmes TPV, la caractéristique émissive de la source thermique peut être approchée par celle d'un corps noir. Un corp noir émet un spectre radiatif à large bande. En 1901 Max Plank a publié un travail dans lequel il dérive une équation pour décrir ce spectre émis [2]. Cette équation en termes de longueur d'onde est donnée par la relation 2-1 :



Figure 2-5 : Spectre de puissance émise d'un corps noir à diferrentes températures [7]

La température d'un corps noir influe sur l'amplitude et le positionnement du spectre émis. Selon la loi de Stefan [8], la densité de puissance émise par la source de corps noir varie selon la température à la quatrième puissance. La figure 2-5 illustre ceci graphiquement pour un corps noir à cinq températures différentes. A mesure que la température augmente, la puissance émise augmente d'une manière non linéaire, tandis que le pic du spectre se déplace vers des longueurs d'ondes les plus courtes.

Typiquement, la source thermique d'un système TPV fonctionne à une température comprise entre 1000°k et 2000°k [9]. A ces températures, une source de corps noir atteindra un pic dans la région de longueur d'onde infrarouge proche entre $\lambda = 2.90 \ \mu\text{m}$ et $\lambda = 1.45 \ \mu\text{m}$. cela contraste avec le cas de la conversion photovoltaïque de l'énergie solaire où le spectre émis atteint un pic dans la gamme de longueur d'onde visible. Pour maximiser la densité de puissance potentielle du système TPV, il est souhaitable de faire fonctionner la source à une température aussi élevée que possible. Cependant, de telles températures élevées créent de graves problèmes d'ingénierie. A la fin de cette thèse, on suppose que la source est un corps noir à température entre 1000 et 1500°k.

Un corps noir est par définition, un milieu idéal qui absorbe et réémet toute l'énergie électromagnétique qu'il reçoit sans réflexion ni transmission. Tous les atomes de ce corps ont en moyenne la même vitesse parce que ce corps est à l'équilibre thermodynamique. Ce qui fait que le rayonnement qu'il émet est exactement égal au rayonnement qu'il absorbe. Ceci implique que ses propriétés radiatives et surtout la distribution spectrale de celui-ci ne dépendent que de la température.

1.4. Sélection de la diode photovoltaïque :

Sur la base de la discussion précédente, il est évident que l'aptitude du système TPV à convertir le rayonnement thermique en électricité dépend à la fois du spectre produit par la source thermique et des caractéristiques de la diode PV utilisée dans le système. Un effort de recherche concerté est en cours pour développer des sources radiatives sélectives [10, 11]. Par conséquent, la sélection correcte du matériau de la diode PV devient critique afin d'optimiser les performances de conversion et l'efficacité d'un système TPV.

La capacité de la diode PV à convertir le rayonnement du spectre émis en électricité est intimement liée à l'amplitude de la bande interdite électronique de la diode, E_{gap} . Selon (1-1), l'énergie d'un photon dépend de la longueur d'onde du photon, ce qui signifie que, pour qu'un photon ait suffisamment d'énergie pour générer une paire électron-trou dans un matériau donné, la longueur d'onde du photon a une limite supérieure λ_g . Seuls les photons avec des longueurs d'ondes inférieures où égal à λ_g peuvent générer des porteurs de charges et de l'énergie électrique. Par conséquent, afin de maximiser la partie du spectre à large bande émis qui peut être converti en électricité, le matériau à partir duquel la diode PV est fabriquée doit avoir une faible bande interdite.

Lorsque la puissance TPV a été étudiée dans les années soixante-dix, le matériau choisis à partir duquel la diode PV a été fabriquée était le Germanium (Ge) [12-14]. Le germanium a été choisi en raison de sa disponibilité à l'époque. Cependant, avec l'avènement des composés semi-conducteurs III-V et plus récemment, des alliages ternaires et quaternaires, il a été possible de développer des diodes PV avec des bandes interdites plus petites. La figure 2-6 montre les matériaux III-V communs avec leurs énergies de bandes interdites correspondantes [15].



Figure 2-6 : Les matériaux III-V communs avec leurs énergies de bandes interdites correspondantes [16].

Des travaux importants ont été réalisés pour évaluer le potentiel fournis par ces matériaux à faible gap pour les applications TPV. En particulier, un effort concerté a été fait pour évaluer le potentiel présenté par les diodes PV Antimoniure de Gallium (GaSb) et les diodes PV à alliages ternaires et quaternaires à base de GaSb (GaInAsSb) [17, 18]. Une diode PV avec un gap aussi faible que 0.39 eV a été développée [19]. L'utilisation de ces matériaux exotiques augmente considérablement la partie du spectre rayonnant émis qui peut être converti en électricité. Malheureusement, ces diodes PV sont complexes et nécessitent des processus de fabrication très couteux. Par conséquent, les technologies à diode PV à faible gap nécessitent encore un développement avant qu'elles puissent être exécutées dans des systèmes TPV pratiques.

Actuellement la diode PV GaSb est choisis dans la majorité des systèmes TPV [20]. Ceci resulte du fait que le matériau a une bande interdite directe relativement faible de 0.72 eV avec le fait que la fabrication des diodes PV GaSb nécessite uniquement l'utilisation de procédés de fabrication de base [21]. Dans cette thèse, on admettera qu'à chaque fois qu'une diode PV est mentionnée, il s'agit d'un dispositif GaSb, sauf indication contraire explicite.

1.5. Contrôle spectral :

L'efficacité d'un système TPV peut être définie comme le rapport de l'énergie électrique générée par la diode PV au flux d'énergie d'entrée. L'efficacité d'un système TPV montré dans la figure 2-1 est limitée, même en supposant que tous les composants sont idéaux [22]. Cette limite fondamentale réside dans le fait que la diode PV ne peut convertir, en électricité, que le rayonnement qui a une énergie supérieur où égale à l'énergie de la bande interdite. Les limites illustrées graphiquement dans la figure 2-7 montrent la partie d'un spectre de corps noir à 1500 °k qui est au-dessus de la bande interdite de GaSb et n'est pas convertie en électricité.



Figue 2-7 : Une partie d'un spectre de rayonnement d'un corps noir à 1500K qu'une diode PV GaSb peut convertir en électricité.

Parce que la partie utilisable du spectre émis est faible, il est clair que tout convertisseur TPV avec la structure de base illustrée dans la figure 2-1 aura une très faible efficacité de conversion. Afin d'améliorer le rendement de conversion, il est nécessaire de réduire la quantité de rayonnement non convertible qui se produit sur la diode PV. Ceci est obtenu grâce

à l'ajout d'un composant de contrôle spectral au système TPV de base. Cet élément de contrôle spectral agit comme un filtre et il est situé entre l'émetteur et la diode PV. Le filtre est conçu pour transmettre tous les photons de faible longueur d'onde à la diode PV où ils peuvent être convertis en électricité, tout en réfléchissant tous les photons de longueurs d'ondes plus longues à la source, où ils sont réabsorbés.

1.5.1. Exigences de filtre pour système basée sur GaSb :

La conception du filtre qui sera discutée dans cette thèse est spécifique à un système TPV avec un émetteur de corps noir à différentes températures et une diode PV GaSb. Pour s'assurer que la diode PV est exposée à tous le rayonnement convertible disponible, le filtre de contrôle spectral doit transmettre tout le rayonnement avec des longueurs d'onde inférieur où égale à la longueur d'onde seuil, λ_{seuil} (égale à λ_g de GaSb). Le filtre doit ensuite refléter tous les photons de longueurs d'ondes plus longues à l'émetteur. Ces photons réfléchis sont réabsorbés par l'émetteur. Ce processus s'appelle le recyclage des photons. L'effet du filtre sur les performances TPV peut être évalué en étudiant le rendement de la conversion. La figure 2-8 illustre la caractéristique spectrale désirée d'un filtre de contrôle spectral pour les applications TPV.



Figure 2-8 : la transmittance et la réflectance d'un composant de contrôle spectral idéal correspondant à un spectre de corps noir de 1500k pour des applications TPV.

La puissance rayonnée nette émise par la source thermique est définie comme l'émission totale moins le rayonnement renvoyé par réflexion à partir du filtre

1.5.2. L'implémentation du filtre :

La caractéristique spectrale idéale souhaitée d'un filtre de contrôle spectral TPV et la figure 2-8 n'est pas réalisable en réalité. Cependant, en utilisant certaines optimisations, il est possible de produire un filtre avec une caractéristique presque idéale sur une plage de longueur d'onde bien définit. Pour le système TPV spécifique considéré dans cette thèse, il a été décidé d'explorer le potentiel de filtrage offert par les structures diélectriques multicouches. Récemment, il a eu de recherches importantes sur les caractéristiques fondamentales de ces structures et en particulier comment ces structures peuvent être utilisées comme cristaux photoniques pour assurer un bon contrôle spectral [23, 24].

1.6. Cristaux photoniques :

Les structures multicouches de matériaux diélectriques ont été largement utilisées pour diverses applications optiques et micro-ondes [25, 26]. En particulier, les structures d'empilement diélectrique sont utilisées pour les applications de filtrage et pour produire des miroirs de très haute qualité. La capacité de produire des structures avec des caractéristiques de filtrage utilisant des empilements diélectriques les rend intéressantes pour les applications TPV. L'une des grandes avancées dans cette recherche du contrôle de l'émission thermique a été obtenue avec des cristaux photoniques (CP). Les CP sont des matériaux dont la constante diélectrique est modulé de façon périodique. La périodicité peut être unidimensionnelle 1D (miroir de Bragg), bidimensionnelle 2D ou tridimensionnelle 3D (figure 2-9). Une bande interdite s'ouvre dans une ou plusieurs directions de l'espace selon les cas. Ces structures périodiques conçues pour modifier la propagation des ondes électromagnétiques de la même manière qu'un potentiel électrique périodique dans un cristal semi-conducteur affecte le déplacement des électrons en créant des bandes d'énergies permises et des bandes d'énergies interdites. La périodicité des matériaux diélectriques permet de créer des structures d'interférences destructives au sein des CP qui inhibent totalement la propagation des photons. E. Yablonovitch et S. John furent les premiers à introduire ce concept de CP et des bandes interdites photoniques (BIPs). Initialement, pour comprendre comment un cristal photonique peut agir en tant que filtre, il est nécessaire d'introduire une théorie fondamentale concernant la propagation du rayonnement à travers les interfaces de matériaux avec différentes permittivités.



Figure 2-9 : Représentation schématique de cristaux photoniques unidimensionnels (1D), bidimensionnels (2D) et tridimensionnels (3D) [27].

1.6.1. Théorie de la propagation des ondes électromagnétiques à travers les interfaces diélectriques :

Le CP est une structure constituée de couches diélectriques de permittivité alternée. Typiquement, seuls deux matériaux diélectriques sont utilisés dans un cristal photonique, un matériau ayant une permittivité élevée et d'autre ayant une faible permittivité Tout au long de cette thèse, on se référera à ces couches de permittivité élevée et faible, et pour la simplicité, la convention suivante sera adoptée : la couche diélectrique de permittivité élevée sera désignée par (H) et la couche de faible permittivité par (L). Puisque ces structures sont constituées de couches de permittivité alternée, toute propagation de rayonnement à travers l'empilement doit se propager à travers les interfaces diélectriques. La propagation du rayonnement électromagnétique par l'espace libre et à travers de telles interfaces est complexe. Beaucoup d'articles ont étudié la théorie des ondes électromagnétiques. Une fois que les principes fondamentaux de la théorie des ondes sont compris, il est possible d'étudier la propagation du rayonnement à travers de telles structures d'empilement diélectrique et de comprendre comment ces structures peuvent être utilisées comme filtres.

Considérons une onde électromagnétique se propageant dans un empilement diélectrique. A chaque interface diélectrique, l'onde de propagation connaîtra une réflexion partielle. Les composantes réfléchies et transmises de l'onde peuvent être obtenues en résolvant la condition de continuité à chaque interface diélectrique. Cette condition indique que les composants tangentiels du champ magnétique et électrique du rayonnement de propagation dans une interface doivent être continus.

Tout d'abord nous ferrons quelques rappels sur la réflexion et la transmission d'une onde plane à l'interface entre deux milieux semi-infinis ayant des indices de réfraction différents. Etudions d'abord la traversée d'une interface plane qui sépare deux milieux diélectriques d'indices complexes n_1 et n_2 . Une onde plane incidente sur une interface séparant deux milieux différents se divise en deux ondes, l'une transmise et l'autre réfléchie (figure 2-10).



Figure 2-10 : une onde incidente se décompose en une onde réfléchie et une onde transmise.

 θ_i , θ_r et θ_t sont respectivement les angles d'incidence, de réflexion et de transmission. Il résulte les expressions suivantes :

$$\theta_i = \theta_r$$
 2-5

$$n_1 \sin \theta_i = n_2 \sin \theta_r \qquad 2-6$$

Ces relations s'appellent les relations de Snell-Descartes.

On utilise les conventions habituelles pour désigner les deux états de polarisation. La polarisation TE transverse électrique (ou s) correspond à un champ électrique perpendiculaire au plan d'incidence (figure 2-11) alors que la polarisation TM transverse magnétique (ou p) correspond à un champ magnétique perpendiculaire au plan d'incidence, par conséquent un champ électrique contenu dans le plan d'incidence figure (2-12).

En polarisation TE (s) :

Pour cette polarisation, le champ électrique est normal au plan d'incidence, par définition on a alors

$$E_s^x = H_s^y = 0$$
 2-7



Figure 2-11 : champ électromagnétique en polarisation s à la traversée d'une interface.

Notant respectivement Eⁱ, E^r et E^t les champs incident, réfléchi et transmis, on obtient les composantes tangentielles des champs électriques et magnétiques.

$$E_{s}^{y,1} = \left(E_{s}^{i} + E_{s}^{r}\right)$$
 2-8

$$H_s^{x,1} = -(E_s^t - E_s^r) n_1 \cos \theta_1$$
 2-9

$$E_s^{y,2} = E_s^t$$
 2-10

$$H_s^{x,2} = -E_s^t \, n_2 \, \cos\theta_1 \tag{2-11}$$

La condition de continuité de ces composantes à l'interface nous permet d'écrir les équations suivantes :

$$E_s^{y,1} = E_s^{y,2}$$
 2-12

$$H_{s}^{x,1} = H_{s}^{x,2} 2-13$$

De façon que, d'après les relations (2-8) à (2-11)

$$\left(E_s^i + E_s^r\right) = E_s^t \tag{2-14}$$

$$\left(E_s^i - E_s^r\right) \mathbf{n}_1 \cos \theta_1 = E_s^t \,\mathbf{n}_2 \cos \theta_2 \qquad 2-15$$

En établissant le rapport entre ces deux relations

$$\frac{\left(E_{s}^{i}+E_{s}^{r}\right)}{\left(E_{s}^{i}-E_{s}^{r}\right)} = \frac{n_{1}\cos\theta_{1}}{n_{2}\cos\theta_{2}}$$
2-16

Ainsi leur produit

$$n_1 \cos \theta_1 \left(\left(E_s^i \right)^2 - (E_s^r)^2 \right) = n_2 \cos \theta_2 (E_s^t)^2$$
 2-17

D'après ces relations on déduit les coefficients de Fresnel en polarisation s :

$$r_{12_{s}} = \frac{E_{s}^{r}}{E_{s}^{l}} = \frac{n_{1} \cos \theta_{1} - n_{2} \cos \theta_{2}}{n_{1} \cos \theta_{1} + n_{2} \cos \theta_{2}}$$
2-18

$$t_{12_s} = \frac{E_s^t}{E_s^t} = (1 + r_{12_s})$$
 2-19

En polarisation TM (p) :

Maintenant on considére une onde incidente en polarisation p (figure 2-12) c'est à dire que le champ magnétique est normal au plan d'incidence, de sorte que

$$E_p^{\mathcal{Y}} = H_p^{\mathcal{X}} = 0 \tag{2-20}$$

Encore une fois, les composantes tangentielles des champs dans chaque milieu sont données par

$$E_p^{x,1} = \left(E_p^i + E_p^r\right)\cos\theta_1 \tag{2-21}$$

$$H_p^{y,1} = \left(E_p^i - E_p^r\right) n_1$$
 2-22

$$E_p^{x,2} = E_p^t \, \cos\theta_2 \tag{2-23}$$

$$H_p^{y,2} = E_p^t \, n_2 \tag{2-24}$$

D'après la condition de continuité de ces composantes à l'interface on peut écrire les équations suivantes :

$$E_p^{x,1} = E_p^{x,2}$$
 2-25

$$H_p^{y,1} = H_p^{y,2} 2-26$$



Figure 2-12 : champ électromagnétique en polarisation p à la traversée d'une interface.

De façon que, d'après les relations (2-21) à (2-24)

$$\left(E_{p}^{i} + E_{p}^{r}\right)\cos\theta_{1} = E_{p}^{t}\cos\theta_{2}$$
 2-27

$$(E_p^i - E_p^r) n_1 = E_p^t n_2$$
 2-28

En établissant le rapport et le produit de ces équations, on aura les relations

$$\frac{\left(E_p^i + E_p^r\right)}{\left(E_p^i - E_p^r\right)} = \frac{n_1 \cos \theta_2}{n_2 \cos \theta_1}$$
 2-29

et

$$n_1 \cos \theta_1 \left(\left(E_p^i \right)^2 - \left(E_p^r \right)^2 \right) = n_2 \cos \theta_2 \left(E_p^t \right)^2$$
 2-30

On obtient alors les coefficients de Fresnel en polarisation p, on calculant le rapport du champ réfléchi sur le champ incident :

$$r_{12p} = \frac{E_p^r}{E_p^i} = \frac{n_1 \cos \theta_2 - n_2 \cos \theta_1}{n_2 \cos \theta_1 + n_1 \cos \theta_2}$$
 2-31

Et le rapport du champ transmis sur le champ incident donne :

$$t_{12_p} = \frac{E_p^t}{E_p^t} = \frac{n_1}{n_2} \left(1 - r_{12_p} \right)$$
 2-32

Jusqu'ici on a considéré une onde incidente sur l'interface à partir du milieu 1. Le cas réciproque correspond à la situation où l'interface est traversée dans le sens inverse et se traite de la même manière. En utilisant les raisonnements précédents, il est facile de monter que pour la réflexion,

$$r_{21} = -r_{12}$$
 2-33

Alors que pour la transmission

$$t_{21}n_1\cos\theta_1 = t_{12}n_2\cos\theta_2 2-34$$

Indépendamment de la polarisation considérée. L'inspection de ces relations montre alors que

De façon que, d'après la relation (2-33) :

Les relations (2-33) et (2-36) sont également appelées relations de réciprocité.

Matrice de transfert pour une seule couche :

Pour relier le champ électrique de chaque côté de l'interface, on décompose les champs en une composante A_i allant dans le sens des z croissants et une composante B_i allant dans le sens des z décroissants (figure2-13).





Ensuite, on écrive la conservation des composantes tangentielles des champs électriques et magnétiques à l'interface, une relation matricielle est obtenue entre les amplitudes des champs de chaque côté de l'interface en fonction des coefficients de Fresnel

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = I_{12} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}$$
 2-37

où I_{12} représente la matrice dite de passage entre les milieux 1 et 2. L'expression de cette matrice est :

$$I_{12} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix}$$
 2-38

valable pour les deux états de polarisations.

Après avoir étudié la traversée d'une interface, on considère maintenant la propagation du champ dans un milieu homogène de permittivité diélectrique ε_2 et d'épaisseur d (figure 2-14).



Figure 2-14 : la propagation du champ dans un milieu homogène.

Le champ électrique à z = 0 est relié au champ à z = d de façon que

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = L_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix}$$
 2-39

où L2 est la matrice de propagation dans le deuxième milieu qui est définie par

$$L_2 = \begin{pmatrix} e^{j\beta_2} & 0\\ 0 & e^{-j\beta_2} \end{pmatrix}$$
 2-40

 β_2 Étant le déphasage (le décalage de phase) subi par le champ lors de sa propagation.

$$\beta_2 = \frac{2\pi dn_2}{\lambda} \cos \theta_2 \tag{2-41}$$

Enfin, le champ en z = d subit une réfraction à travers l'interface 2-3 de façon que

$$\begin{pmatrix} A_2'\\ B_2' \end{pmatrix} = I_{23} \begin{pmatrix} A_3\\ B_3 \end{pmatrix}$$
 2-42

Par composition, le résultat est la relation entre les champs des deux côté du système

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = I_{12}L_2I_{23} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix}$$
2-43

où S = $I_{12}L_2I_{23}$ est la matrice de transfert du système. Dans le cas où le film est exposé à la lumière par une onde plane incidente E_{in} qui se propage dans le sens croissant des z, une onde est transmise dans le deuxième milieu puis se propage vers l'interface milieu 2/milieu 3 pour être transmise dans le milieu 3. En adoptant les notations suivantes pour les champs électriques de chaque côté de la structure,

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out}^- \end{pmatrix}$$
 2-44

$$\begin{pmatrix} A_3\\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{out}^+\\ 0 \end{pmatrix}$$
 2-45

on a alors

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out}^{-} \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} E_{out}^{+} \\ 0 \end{pmatrix}$$
 2-46

et peut être développé par la relation

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out}^{-} \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{12}} \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{j\beta_2} & 0 \\ 0 & e^{-j\beta_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & r_{23} \\ r_{23} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$
 2-47

soit

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out}^{-} \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{12}} \frac{1}{t_{23}} \begin{pmatrix} e^{j\beta_2} + r_{12}r_{23}e^{-i\beta_2} & r_{23}e^{j\beta_2} + r_{12}e^{-i\beta_2} \\ r_{12}e^{j\beta_2} + r_{23}e^{-i\beta_2} & e^{-j\beta_2} + r_{12}r_{23}e^{i\beta_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{out} \\ 0 \end{pmatrix}$$
 2-48

que l'on peut écrire

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_{out} \\ 0 \end{pmatrix}$$
2-49

Les coefficients de réflexion r et de transmission t de la structure complète sont alors exprimés de la forme suivante

$$r = \frac{E_{out}}{E_{in}} = \frac{S_{21}}{S_{11}}$$
 2-50

$$t = \frac{E_{out}^+}{E_{in}} = \frac{1}{S_{11}}$$
 2-51

En explicitant ces expressions, cela devient

$$r = \frac{t_{12}t_{23}e^{-i\beta_2}}{1+r_{12}r_{23}e^{-2i\beta_2}}$$
 2-52

$$t = \frac{r_{12} + r_{23}e^{-2i\beta_2}}{1 + r_{12}r_{23}e^{-2i\beta_2}}$$
 2-53

Finalement, les expressions de réflectivité et de la transmittance sont déduites par les équations

$$R = |r|^{2} = \left| \frac{r_{12} + r_{23}e^{-2j\beta_{2}}}{1 + r_{12}r_{23}e^{-2j\beta_{2}}} \right|^{2}$$
 2-54

$$T = \frac{n_1}{n_3} |t|^2 = \frac{n_1}{n_3} \left| \frac{t_{12} t_{23} e^{-j\beta_2}}{1 + r_{12} r_{23} e^{-2j\beta_2}} \right|^2$$
 2-55

Matrice de transfert pour un milieu multicouche



Figure 2-15 : un champ électrique qui se propage dans une structure multicouche composée de trois matériaux différents [27].

On considère maintenant un empilement quelconque de N couches de matériaux homogènes et isotropes (figure 2-15).

Pour estimer les coefficients de réflexion et de transmission, il faut faire le produit des matrices de transfert des milieux et dioptres formant la structure. Donc les champs entrants et sortants du système sont reliés par

$$\begin{pmatrix} E_{in} \\ E_{out}^- \end{pmatrix} = S_N \begin{pmatrix} E_{out}^+ \\ 0 \end{pmatrix}$$
 2-56

avec

$$S_N = \left(\prod_{m=0}^{N-1} I_{m,m+1} L_{m+1}\right) I_{N,N+1}$$
 2-57

 S_N est la matrice de transfert du système, qui est obtenu en faisant le produit des matrices de passage de l'interface entre les milieux i et j, d'un côté

$$I_{i,j} = \frac{1}{t_{ij}} \begin{pmatrix} 1 & r_{ij} \\ r_{ij} & 1 \end{pmatrix}$$
 2-58

et les matrices de propagation dans les couches j, d'un autre côté

$$L_j = \begin{pmatrix} e^{j\beta_j} & 0\\ 0 & e^{-j\beta_j} \end{pmatrix}$$
 2-59

tout en respectant l'ordre de la traversée. Les coefficients de Fresnel en réflexion $r(\lambda; \theta)$ et en transmission $t(\lambda; \theta)$ en fonction de la longueur d'onde et de l'angle d'incidence sont alors exprimés à partir des amplitudes des champs entrant et sortant ou de manière équivalente, d'après des composantes de la matrice de transfert S_N

$$t (\lambda; \theta) = \frac{E_{out}^+}{E_{in}^+} = \frac{1}{S_{N_{11}}}$$
 2-60

$$r(\lambda;\theta) = \frac{E_{out}}{E_{in}^{+}} = \frac{S_{N_{21}}}{S_{N_{11}}}$$
 2-61

Notez que la transmittance et la réflectivité sont toujours formulées par

$$\mathbf{R} (\lambda; \theta) = |\mathbf{r}(\lambda; \theta)|^2$$
 2-63

$$T (\lambda; \theta) = \frac{\Re(n_0 \cos \theta_0)}{\Re(n_{N+1} \cos \theta_{N+1})} |t (\lambda; \theta)|^2$$
 2-64

 \Re représente la partie réelle d'une grandeur complexe, $R(\lambda; \theta)$ et $T(\lambda; \theta)$ étant forcément des grandeurs réelles.

Cependant dans nos calculs, nous utiliserons une méthode équivalente, la méthode des matrices d'Abélès pour déterminer la réflectivité optique, la transmittance et l'absorption des structures multicouches [23, 24]. Chaque couche (j) du système est représentée par une matrice $M_j(2\times2)$:

$$M_{j} = \begin{bmatrix} \cos \varphi_{j} & (i/\eta_{j}) \sin \varphi_{j} \\ (i\eta_{j}) \sin \varphi_{j} & \cos \varphi_{j} \end{bmatrix}$$
 2-65

où

$$\eta_j = \begin{cases} N_j \cos \theta_j & \text{s polarization} \\ N_j / \cos \theta_j & \text{p polarization} \end{cases}$$
2-66

est le pseudo-index de la couche, $\varphi_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos \theta_j$ est le déphasage de l'onde à l'intérieur de la couche, θ_j est l'angle de propagation dans la couche, et λ est la longueur d'onde de la lumière. N_j est l'indice de réfraction complexe de la couche j. La matrice caractéristique décrivant l'ensemble du système multicouche est

$$M = \prod_{j=1}^{NL} M_j = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{12} & m_{22} \end{bmatrix}$$
 2-67

où NL est le nombre total de couches. Les coefficients de réflexion et de transmission d'amplitude de la multicouche sont

$$\mathbf{r} = \frac{\eta_{in} \, m_{11} - \eta_{out} m_{22} + \eta_{in} \eta_{out} m_{12} - m_{21}}{\eta_{in} m_{11} + \eta_{out} m_{22} + \eta_{in} \eta_{out} m_{12} + m_{21}}$$
 2-68

$$t = \frac{2\eta_{in}}{\eta_{in}m_{11} + \eta_{out}m_{22} + \eta_{in}\eta_{out}m_{12} + m_{21}}$$
 2-69

où η_{in} et η_{out} sont les pseudo indice des milieux d'incidence et de sortie semi-infinis, respectivement. Dans le présent travail, nous avons supposé $\eta_{in} = 1$ (milieu d'incidence = air) et $\eta_{out} = 3.9$ (milieu de sortie = GaSb). θ_j est déterminé pour chaque couche de la loi Snell-Descartes $N_j \sin \theta_j = N_0 \sin \theta_0$. La réflectivité, la transmittance et l'absorption optique sont obtenues par

$$\mathbf{R} = |\mathbf{r}|^2, \qquad 2-70$$

$$T = \frac{\Re(n_{out})}{\Re(n_{in})} |t|^2 ; \quad (\Re : real part)$$
 2-71

$$A = 1 - R - T \tag{2-72}$$

1.6.2. Fonction de mérite :

Une fois la réflectivité R_{cal} et la transmittance T_{cal} sont déterminées par calcul, une comparaison est faite avec la réflectivité et la transmittance cible qui seront noté R_T et T_T . La réflectance et la transmittance cible sont définies comme des propriétés optiques d'un filtre idéal. Cette comparaison est basée sur l'utilisation d'une fonction de mérite (f.o.m), c'est-àdire une expression mathématique qui quantifie l'écart entre R_{cal} (T_{cal}) et R_T (T_T). Notons que le problème d'ajustement est ainsi transformé en un problème d'optimisation qui consiste à minimiser la valeur de la f.o.m, ce qui veut dire minimiser la différence entre les courbes calculées et les courbes d'un filtre idéal. Dans ce sens, différentes relations appelées « indicateurs d'écart » sont fournis par les statistiques mathématiques. Nous citons certains d'entre eux ci-dessous:

 L'erreur absolue moyenne (MAE pour Mean Absolute Error), moyenne arithmétique des valeurs absolues des écarts :

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} |y_i^{cal} - y_i^{exp}|$$
 2-73

Dans notre cas, nous avons opté pour cet indicateur puisqu'il est utilisé pour les problèmes d'ajustage et interprète des écarts exprimés en valeur absolue.

Lerreur-type (RMSE ou Root Mean Squared Error), la racine carré de MSE

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i^{cal} - y_i^{exp})^2}$$
 2-74

 Le carré moyen des erreurs ou erreur quadratique moyenne (MSE pour Mean Squared Error). C'est la moyenne arithmétique des carrés des écarts entre les données calculées et les données mesurées :

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (y_i^{cal} - y_i^{exp})^2$$
 2-75

C'est la valeur à minimiser dans le cadre d'une régression simple ou multiple. La régression est basée sur la nullité de la moyenne des résidus, mais la moyenne de leur carré n'est généralement pas nulle. Cette moyenne n'est rien d'autre que la « variance résiduelle » que l'on cherche à minimiser.

L'erreur absolue moyenne en pourcentage (Mean Absolute Percentage Error, ou MAPE), moyenne des écarts des valeurs mesurées par rapport aux valeurs calculées :

$$MAPE = \frac{100\%}{n} \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{y_i^{cal} - y_i^{exp}}{y_i^{exp}} \right|$$
 2-76

✤ La somme des carrés des résidus (SCR ou Sum of Squared Errors) :

$$SCR = \sum_{i=1}^{n} (y_i^{cal} - y_i^{exp})^2$$
 2-77

1.7. Conclusion

Ce chapitre est consacré à l'étude des systèmes thermophotovoltaïques et leurs composants fondamentaux. Nous avons discuté des cristaux photoniques de manière générale et leur utilisation comme des filtres dans le système TPV. Nous venons de présenter la méthode générale de calcul des propriétés radiatives des structures multicouches. Cette méthode repose sur la technique des matrices de transfert qui nous permet d'obtenir numériquement les coefficients de transmission et de réflexion des structures multicouches. Donc il est possible de produire un filtre avec une caractéristique presque idéale sur une plage de longueur d'onde limitée. Notre objectif dans les prochains chapitres serait de bien expliquer cette problématique ; de bien choisir les matériaux diélectriques afin d'assurer un filtre passe-bas. Ces caractéristiques peuvent être réalisables en utilisant certaines optimisations.

Références:

- P.Aigrain, "The Thermophotovoltaic converter", Unpublished lectures given at MIT, Fall 1960, Spring 1961.
- [2] M. Plank, "Distribution of energy in the spectrum," Annalen der physic, vol. 4, no. 3, pp. 553-563, 1901.
- [3] S. M. Sze, Semiconductor Devices. New York : John Wiley & Sons, pp. 3-30, 1985.
- [4] S. M. Sze, Semiconductor Devices: physic and Technology. New York: John Wiley & Sons, pp. 3-30, 1985.
- [5] S. M. Sze, Physic of semiconductor Devices. New York: John Wiley & Sons, pp. 790-811, 1981.
- [6] J.A. del Alamo, Integrated Microelectronic Devices: Physic and Modeling. New Jersey: Prentice Hall, pp. 338-388, 2002.
- [7] https://fr.wikiversity.org/wiki/Rayonnement_du_corps_noir
- [8] M. F. Modest, Radiative Heat Transfer. New York: Academic Press, pp. 1-59, 2003.
- [9] T. J. Coutts, G. Guazzoni, J. Luther, Proceedings of Fifth Conference on Thermophotovoltaic Generation of Electricity, New York: American Institute of Physics, 2002.
- [10] A. Licciulli et al." the challenge of high-performance selective emitters for thermophotovoltaic applications", Semiconductor Science and technology, vol. 18, pp 174-183, 2003.
- [11] S. Y. Lin, J Moreno, J. G. Fleming, "Three- dimensional photonic- crystal emitter for thermophotovoltaic power generation," Applied Physics Letters, vol. 83, no. 2, July 2003.
- [12] B. D. Wedlock, "Thermophotovoltaic energy conversion," Proc. IEEE, vol. 51, pp. 694-698, May 1963.
- [13] R. Siegel, A Germanium thermophotovoltaic Energy Converter. M.S. Thesis, Department of Electrical Engineering, MIT, September 1966.
- [14] J. G. Kassakian, A Planar Germanium thermophotovoltaic Energy Converter. M.S. Thesis, Department of Electrical Engineering, MIT, September 1967.
- [15] C. G. Fonstad, Compound Semiconductor Device Physics, 6.772 Course material, MIT, spring 2003.
- [16] https://en.wikipedia.org/wiki/Wide-bandgap_semiconductor III-V

- [17] O. V. Sulima, A.W. Bett et al, "GaSb-, InGaAsSb-, InGaSb-, InAsSbP- and Ge-TPV cells for low-temperature TPV applications," Proc. 5th NREL Conference on Thermophotovoltaic Generation of Electricity, Rome, Italy, September 15-19,2002.
- [18] D. M. Wilt et al. "High efficiency indium gallium arsenide photovoltaic devices for thermophotovoltaic power systems," Applied Physics Letters, vol. 64, no. 18, May, 1994.
- [19] Franci's M. O'Sullivan, B. E(Hons.), Fabrication and Testing of an Infrared Spectral Control Component for Thermophotovoltaic Power Conversion Applications. Thesis, Department of Electrical Engineering, May 2004.
- [20] L. M. Frass et al."Development of a small air-colled" midnight sun" thermophotovoltaic electric generator," Proc. 2nd NREL conference on thermophotovoltaic Generation of Electricity, Colorado, July, 1995.
- [21] M. Zenker and A. Heinzel, "Efficency and power density potential of a combustiondriven thermophotovoltaic system using GaSb photovoltaic cells," IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 48, no. 2, February 2001.
- [22] I. Celanovic, F. O'Sullivan et al. "Design and optimisation of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications," Optic Letters, vol. 29, no.8, April, 2004.
- [23] V. Agarwal, J. A. del Rio, "Tailoring the photonic bandgap of a porous silicon dielectric mirror," Applied Physics Letters, vol. 82, no. 10, March 2003.
- [24] K. M. Ho, C. T. Chan, C. M. Soukoulis, "Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures," Physical Review Letters, vol. 65, no. 25, December 1990.
- [25] L. Young, E. G. Cristal, "Low-pass and high-pass filters consisting of multilayer dielectric stacks," IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. MTT-14, no. 2, February 1966.
- [26] H. A. Macleod, Thin-film Optical Filters. London: Institute of Physics Publishing 2001.
- [27] J. D. Joannopoulos, R. D. Maede, and J. N. Winn, Photonic crystals: Molding the flow of light, Princeton Univ. Press, 1995.

CHAPITRE 3 : LES METHODES D'OPTIMISATION

Introduction :

L'optimisation est une branche des mathématiques qui cherche à analyser et résoudre (analytiquement ou numériquement) les problèmes de minimisation ou de maximisation d'une fonction sur un ensemble. L'optimisation, et en particulier l'optimisation numérique a connu un développement assez important ces dernières années avec l'avènement de l'ordinateur. Généralement, elle consiste à aborder des problèmes d'optimisation avec une stratégie consistant en deux points essentiels : Le premier point est de décomposer le problème en une séquence de problèmes. Les différentes techniques d'optimisation s'appliquent aujourd'hui à de nombreux domaines : mécanique (conception de structures et optimiser leurs propriétés mécaniques), sciences des matériaux (déterminer l'état fondamental des matériaux massifs, surface et clusters), biologie (analyse de données, modélisation), finance (minimiser le coût, maximiser le profit), etc.

La solution optimale de certains de ces problèmes, peut être trouvée par des méthodes exactes. Alors que, ces méthodes ne résoudre que problèmes particuliers et sous certaines conditions. En réalité, une grande partie des problèmes nécessiterait une grande recherche exhaustive de toutes les solutions possibles, ce qui n'est pas toujours faisable dans un temps limité. A partir de ça, il y a deux types de méthodes : les méthodes exactes et les méthodes approchées.

1. les méthodes exactes :

Les méthodes exactes incluent tous les algorithmes qui permettent d'obtenir la solution optimale exacte d'un problème dans un temps limité. Ces méthodes sont :

- La méthode séparation et évaluation (Branch and Bound) : Cet algorithme repose sur une méthode de recherche d'une solution optimale par séparation et évaluation et cet algorithme peut être appliqué individuellement ou en association avec d'autres méthodes. Cette méthode permet d'énumérer toutes les solutions. La connaissance des propriétés du problème permet d'énumérer seulement les solutions potentiellement bonnes [1].
- La programmation dynamique : est un paradigme de programmation, c'est-à-dire une façon particulière de comprendre un problème algorithmique donné. C'est une méthode utile pour obtenir une solution exacte à un problème algorithmique. Elle

consiste à placer le problème dans une famille de problème de même nature mais de difficulté différente puis à trouver une relation de récurrence liant les solutions optimales de ces problèmes [2]. Le principe de la programmation dynamique est simple: toute solution optimale est elle-même basée sur des sous-problèmes résolus localement de manière optimale. c'est à dire que l'on va pouvoir déduire la solution optimale d'un problème en combinant des solutions optimales d'un ensemble de sous problème. C'est ce qu'on appelle l'optimisation combinatoire.

les méthodes polyédrales : consistent à jouer progressivement des contraintes supplémentaires afin de ramener le domaine des solutions admissibles à un domaine convexe, sans enlever la ou les solutions optimales évidemment [2].

2. les méthodes approchées :

Les méthodes exactes ont trouvé des solutions optimales pour des problèmes de taille raisonnable et ont généralement des difficultés avec des applications importantes. Pratiquement pour résoudre ce problème on doit recourir à des méthodes approchées. Cellesci se sont avérées très efficaces et très utilisées dans la pratique. Dans ce sens, les méthodes approchées sont privilégiées car elles permettent d'engendrer des solutions de bonne qualité dans un temps de calcul plus réduit. Ces méthodes approchées peuvent être classées en deux types : les algorithmes d'approximation et les heuristiques. Contrairement aux heuristiques, les algorithmes d'approximation garantissent la qualité de la solution trouvée par rapport à l'optimale. Les méthodes heuristiques sont divisées en deux catégories : les heuristiques qui sont spécifiques à un problème donné, et les méta-heuristiques qui peuvent être adaptées pour différents types de problèmes. Malheureusement toutes ces méthodes ne garantissent pas l'optimalité de solutions obtenues. Dans ce qui suit, on ne présentera succinctement que les algorithmes méta-heuristiques.

3. les algorithmes méta-heuristiques :

Contrairement aux méthodes exactes, les méta-heuristiques permettent de résoudre des problèmes de grande taille en fournissant des solutions satisfaisantes dans un temps de calcul raisonnable. Les constituants de ces méthodes sont des éléments génétiques ou invariants, ainsi que des éléments propres au problème considéré, comme la représentation ou l'évolution d'une solution. Les méta-heuristiques ont reçu de plus en plus de popularité au cours des 20 dernières années. Leur utilisation dans de nombreuses applications montre leur efficacité à résoudre des problèmes complexes [4]. Il existe deux types de méta-heuristiques : les méta-

heuristiques à base de solution unique et les méta-heuristiques à base de population. Le premier manipule et transforme une solution unique au cours du processus de recherche, tandis que dans le second, un ensemble de solution appelé population évolue parallèlement. Concernant le premier type, on mentionne les algorithmes de recherche locale [5], les algorithmes de recherche tabou [6], de recuit simulé [7] et de recherche par motifs (pattern search) [8]. Alors que pour le deuxième regroupe les algorithmes génétiques et les algorithmes à essaim de particules présentent les exemples les plus connus des méthodes qui travaillent avec une population, etc.

En termes de conception, deux critères contradictoires doivent être pris en considération lors du développement d'une méta-heuristique : explorer l'espace de recherche (diversification) et exploiter les meilleures solutions trouvées (intensification). Les métaheuristiques à base de solution unique sont plus concentrées sur l'exploitation de l'espace de recherche. Des zones favorables sont explorées localement on espérant de trouver de meilleures solutions. Les méta-heuristiques basées sur la population permettent une meilleure diversification de l'espace de recherche car elles sont exploratoires dans l'ensemble.

3.1. Les méta-heuristiques à solution unique :

3.1.1. Algorithmes de recherche locale :

Le point de départ d'un algorithme de recherche locale peut être une construction d'une solution candidate et la dirigé de manière itérative vers une solution voisine. Cette méthode s'applique uniquement si une notion de voisinage est définie sur l'espace de recherche. Souvent, chaque solution candidate est entourée de plus d'une solution. Le choix de celle vers laquelle l'algorithme se dirige est pris en utilisant uniquement l'information sur les solutions proches de la solution actuelle, d'ici l'expression de recherche locale.

Le critère d'arrêt de la recherche locale indique une limite en durée. On aura une autre possibilité d'arrêt quand la meilleure solution obtenue par l'algorithme reste la même durant un nombre donné d'itérations. Donc on peut dire que les algorithmes de recherche locale sont des algorithmes sous-optimaux puisque la recherche peut s'arrêter avant que l'algorithme atteint la meilleure solution de l'espace de recherche. Si la solution optimale se trouve loin du voisinage des solutions parcourues on aura une impossibilité d'améliorer la solution courante et ceci provoque l'arrêt de la recherche.
3.1.2. L'algorithme de recherche tabou :

La recherche tabou est une méthode de recherche locale combinée à un ensemble de techniques afin d'éviter de tomber dans un minimum local ou le cycle répété. La recherche tabou est introduite par Glover [9], Cette méthode a montré une efficacité importante à la résolution des problèmes d'optimisation compliqués. Le déplacement de la solution locale vers une solution voisine se fait par l'exploitation du voisinage et cela ne donne pas forcement une qualité meilleure que la solution locale. Pour ne pas être piégé dans un optimum local et son meilleur voisin et d'éviter la répétition du cycle, la méthode interdit de passer vers une solution déjà trouvée. Nous formons une liste tabou contenant les dernières solutions trouvées, ce qui ne donne pas la possibilité à une solution récemment visitées d'être acceptée dans la liste tabou. Donc le choix de la prochaine solution courante est effectué sur un ensemble des solutions voisines et qui n'appartient pas aux éléments de la liste tabou. Chaque nouvelle solution choisie substitue la plus ancienne dans la liste, cela veut dire que la première solution entrée est la première solution sorti. Malgré tout, la longueur de cette liste n'est pas facile à régler. De même, cette méthode exige de définir un critère d'arrêt; on peut par exemple fixer un temps limite après lequel la recherche doit s'arrêter.

3.1.3. L'algorithme de recuit simulé :

La méta-heuristique du recuit simulé [10] repose sur une technique utilisée par les métallurgistes, et eux même s'appuient sur les lois de thermodynamiques mentionnées par Boltzmann. La méthode de recuit en métallurgie consiste à alterner les cycles de chauffe et de refroidissement lent. Elle doit marquer des niveaux de température assez longs pour que le matériau arrive à l'équilibre thermodynamique. Ceci nous permet de minimiser l'énergie du système et donc obtenir une structure régulière du matériau à l'état solide comme dans les cristaux. Dans le contexte d'un problème optimal, la fonction objective est améliorée par la variation de l'énergie du système. Le principe de recuit simulé est de parcourir itérativement l'espace des solutions. On part avec un état initialement généré de façon aléatoire correspondant à une température initiale T élevée. A chaque itération, on décroit la température du système afin de simuler le refroidissement. Dans ce processus, on a une diminution continue de T.

La température a un grand intérêt au cours du processus de recuit simulé. Une variation négative de température ($E_2 < E_1$) aide l'algorithme à trouver la solution optimal locale. Pour

adapter la décroissance de la température à l'évolution du processus on utilise une variation logarithmique de température.

L'objectif de recuit simulé est l'existence d'une preuve de la convergence asymptotique. Comme ceci, si certaines conditions sont satisfaites (décroissance de la température) ; nous somme assurés d'obtenir la solution optimale. Par malheur, le paramétrage recommandé par la théorie n'est pas réalisable et il prend beaucoup de temps pour arriver à paramétrer ces méthodes. Cette méthode peut aussi nécessiter un critère d'arrêt, si la recherche du paramètre optimal n'a pas été trouvée.

3.1.4. La recherche par motifs généralisée (GPS) :

Les algorithmes de recherche par motifs généralisée « Generalized Pattern Search methods » (GPS) [11] représentent une généralisation de la méthode qui a été proposé par Hooke et Jeeves en 1961 [12]. Dans ces méthodes les directions de recherche ne varient pas avec les itérations. Les méthodes GPS explore une série de déplacement autour de l'optimum actuel figure (3-1).



Figure 3-1 : déroulement de l'optimisation par méthode Pattern Search [13].

Ces déplacements constituent des motifs de forme invariable (pattern). A chaque itération, il y aura une évaluation de la fonction objective sur les points de motif. Si on trouve une amélioration, la solution associée est acceptée comme une nouvelle solution courante, et la taille du prochain motif est la même ou augmentée comme ça peut être réduite autour de l'ancienne solution courante. Les GPS ont une exploration plus globale, puisqu'ils explorent une surface finie de domaine plutôt que de trouver le premier minimum dans une direction donnée. Ces méthodes sont moins couteuses en temps de calcul. Les GPS disposent de la convergence robuste, puisqu'ils travaillent sur un motif plutôt que sur une solution particulière, et ces méthodes peuvent converger même si elles rencontrent certains points où la fonction ne peut pas être évaluée.



Figure 3-2 : Organigramme correspondant à l'algorithme GPS.

3.2 Les méta-heuristiques à populations de solutions (algorithmes évolutionnaires):

Initialement on va aborder le vocabulaire utilisé dans les algorithmes méta-heuristiques évolutionnaires, inspiré du l'évolution naturelle. On emploie les termes suivants :

- ✓ individus : représentent les points de l'espace de recherche D.
- ✓ Population : c'est un ensemble fini d'individus.

- ✓ Fonction performance (fonction fitness) : c'est la fonction objective à optimiser.
- ✓ Evaluation : c'est le calcul de la performance d'un individu.
- ✓ La génération : correspond à une population en une certaine itération.
- ✓ L'évolution : est un processus itératif de recherche des individus optimaux.
- Les opérateurs de variation : sont utilisé pour créer de nouveaux individus et les deux types d'opérateurs les plus utilisés sont : le croisement qui sert à échanger les parties composantes (gènes) entre deux ou plusieurs individus ; et la mutation qui sert à modifier un ou plusieurs gènes d'un individu.
- ✓ La sélection : c'est le processus de choix des individus selon leur performance.
- Le remplacement : c'est le processus de formation d'une nouvelle population à partir des parents et des enfants.

3.2.1. Les algorithmes génétiques :

Les algorithmes génétiques (AG) sont des algorithmes d'optimisation stochastique (qui se produit par l'effet du hasard) fondés sur les mécanismes de la sélection naturelle et de la génétique. Ces méthodes ont été adaptées à l'optimisation par John Holland en 1975 [14] et popularisées grâce à l'ouvrage de D. E. Goldberg [15]. Les algorithmes génétiques sont basés sur l'analogie avec le mécanisme Darwinien de la sélection naturelle dans les individus les mieux adaptés supposés survivre dans les générations suivantes. Cela veut dire les meilleurs individus d'une population se reproduisent pour une nouvelle génération de plus en plus adaptée, d'autre disparaissent (les moins adaptés).

Les algorithmes génétiques cherchent à déterminer l'évaluation d'une fonction objective $f: X \to R$ où X représente les points de l'espace de recherche. Chaque point de cet espace représente un individu. La fonction objective représente l'évaluation de chaque individu. Son mise en œuvre nécessite :

🖊 Le codage des données :

La première étape pour construire un AG est de définir et coder convenablement le problème. Cette étape associe à chaque point de l'espace de recherche une structure contenant l'information du problème qui caractérisera chaque individu de la population. Le codage de chaque individu en séquence est essentielle dans l'élaboration d'un AG dont dépend notamment l'implémentation des opérateurs de transformations. Donc, cette phase détermine la structure de données qui sera utilisée pour coder le génotype des individus de la population. Le codage doit être adapté au problème traité.

Les différents types de codage sont : le codage binaire, le codage gray, le codage réel, le codage symbolique, etc. Le codage binaire est le codage le plus utilisé pour représenter un individu. Grâce à cette méthode on peut présenter tout type d'information sous forme binaire. Lorsqu'on garde le problème dans sa représentation naturelle on utilise le codage réel. L'efficacité de AG dépend du choix convenable du type de codage.

Génération de la population initiale :

La première étape de l'algorithme est la génération de la population initiale. Chaque population contient plusieurs individus. C'est-à-dire le choix des dispositifs de départ que nous allons faire évoluer, ce choix de la population initiale d'individus conditionne fortement la rapidité de l'algorithme. Malgré tout, une initialisation aléatoire est plus simple à réaliser : les valeurs de gène sont tirées au hasard selon une distribution uniforme. Cependant, il peut être utile d'orienter la génération initiale vers des sous domaines intéressants de l'espace de recherche. La population initiale doit être suffisamment diversifiée et de taille assez importante pour que la recherche puisse parcourir l'espace de recherche dans un temps limité. L'évolution de la population est effectuée par des opérations génétiques tels que le croisement et la mutation.

Fonction d'adaptation (Fitness) :

L'évaluation de la Fitness mesure la performance de chaque individu. Pour pouvoir juger la qualité d'un individu et de le comparer aux autres, il faut établir une mesure commune d'évaluation. Etant donnée la nature de sélection stochastique, la fonction d'adaptation devra déterminer la probabilité de sélection attribuée à chaque solution.

Sélection :

La sélection permet de choisir les meilleurs individus d'une population et d'éliminer les mauvais, lors du passage d'une génération à une autre, ceci est basé sur la performance de l'individu.

Croisement :

L'opérateur de croisement favorise l'exploitation de l'espace de recherche et enrichit la diversité de la population en manipulant la structure des chromosomes, le croisement fait avec deux individus (parents) et génère deux nouveaux individus (enfant(s)), en espérant qu'un des enfants héritera de bons gènes des deux parents et sera mieux adapté qu'eux. Le croisement entre deux individus sélectionnés peut être le croisement en un point, ou en deux points.

Mutation :

L'opérateur de mutation est un processus où un changement mineur du code génétique appliqué à un individu afin d'introduire de la diversité et ainsi d'éviter de tomber dans les optimaux locaux. La mutation est appliquée avec une probabilité P_m inférieur à celle du croisement P_c .

3.2.2. Les algorithmes à essaim de particules :

L'Optimisation par Essaim Particule (OEP) a été proposée en 1995 par Kennedy et Eberhart [16]. Cette méthode est inspirée du comportement social des animaux évoluant en essaim. Au départ, ils cherchaient à simuler la capacité des oiseaux à voler de façon synchrone et leur aptitude à changer brusquement la direction tout en restant en une formation optimale. Les individus se déplacent dans l'espace de travail en se basant sur : premièrement ; chaque individu est doté d'une mémoire qui lui permet de mémoriser le meilleur point par lequel il est déjà passé et il a tendance à retourner vers ce point. Deuxièment ; chaque individu est informé du meilleur point connu au sein de son voisinage et il a tendance d'aller vers ce point. Chaque particule utilise donc, non seulement, sa propre mémoire, mais aussi l'information locale sur ses plus proches voisins pour décider de son propre déplacement. Des règles simples, telles que « aller à la même vitesse que les autres », « se déplace dans la même direction » ou encore « rester proche de ses voisins » sont des exemples de comportements qui suffisent à maintenir la cohésion de l'essaim, et donc ceci permettent la mise en œuvre de comportements collectifs et adaptatifs.

4. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté succinctement quelque principales techniques d'optimisation de la fonction. Nous avons exposés les deux principales familles de méthodes, y compris les méthodes exactes et les méthodes approchées, nous nous sommes intéressés des méta-heuristiques. Nous pouvons conclure que les méta-heuristiques présentent une classe de méthodes approchées adaptables à une grande variété de problèmes d'optimisation combinatoire et mènent à des résultats pertinents. Ces méthodes comprennent à la fois des algorithmes de solutions à population et de solution unique. La qualité des solutions trouvées par les méta-heuristiques dépend de leur paramétrage, et de l'équilibre entre un balayage de tout l'espace des solutions (diversification) et une exploration locale (l'intensification). Nous avons abordé les algorithmes de recherche par motifs qui explore en quelque sorte une grille de points autour de l'optimum actuel et représente une possibilité de raffinement de la grille de recherche après une itération infructueuse (pas de meilleur solution trouvées).

Références:

- [1] E. L. Lawler, D. E Wood, Operations Ressearch, 14,699 (1966).
- [2] S. E. Dreyfus, A. M. Law, "the art and theory of dynamic programming", Academic Press,1977.
- [3] A. Schrijver, « Combinatorial Optimization: Polyhedra and Efficiency », Springer Berlin, 2002.
- [4] E.-G Talbi. « Metaheuristics: from design to implementation». Wiley, 2009.
- [5] C. Papadimitriou, K. Steiglitz. « Combinatorial Optimization : Algorithms and Complexity », Prentice-Hall, 1982.
- [6] F. Glover, M. Laguna, « Tabu search », Kluwer Academic Publishers, Dordecht, 1997.
- [7] S. Kirkptrick, C. D. Gelatt, M. P. Vecchi, Science, 220, 671 (1983).
- [8] R. Hooke, T. A. Jeeves, journal of the Association for Computing Machinery (ACM) 8, 212 (1961).
- [9] F. Glover, ORSA Journal on computing 1, 190(1989).
- [10] P. J. van Laarhoven, E.H. Aarts, « Simulated Annealing: Theory and Applications», Spring, 1987.
- [11] V. Torçzon, SIAM Journal on Optimization 7, 1 (1997).
- [12] R. Hooke, T. A. Jeeves, Journal of the Association for Computing Machinery (ACM) 8, 212 (1961)
- [13] R. Miloua, Z. Kebbab, F. Chiker, K. Sahraoui, M. Khadraoui, N. Benramdane, Determination of layer thickness and optical constants of thin films by using a modified pattern search method, Optics letters 37 (4), 449-451 (2012).
- [14] J. H. Holland. "Adaptation in Natural and Artifical Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artifical Intelligence", Ann Arbor, MI: University of Michigan Press, 1975.
- [15] D. E. Golberg, "Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learing", Addison-Wesley, 1989.

[16] J. Kennedy, R.C. Eberhart, Proceedings of the IEEE International Conference On Neural Networks 1995, 1942 (1995).

CHAPITRE 4 : RESULTATS ET DISCUSSIONS

Dans ce chapitre nous rapportons des résultats de calcul sur la réponse optique des cristaux photoniques unidimensionnels CP1D à base de matériaux Ge et MgF2. Nous utilisons les matériaux Ge et MgF₂ comme bons candidats pour fabriquer un filtre PhCs unidimensionnel car ils présentent l'avantages d'un grand contraste d'indice de réfraction et d'une faible d'absorption optique dans la gamme proche infrarouge [1, 2]. De plus, nous utilisons l'algorithme d'optimisation de pattern search (PS) en combinaison avec la méthode des matrices de transfert (MMT) pour trouver les épaisseurs optimales des structures photoniques. Nos calculs prouvent que l'algorithme de pattern-search est facilement applicable à la conception optimale des cristaux photoniques dans un temps de calcul réduit. Des performances optiques élevées ont été réalisées. Pattern Search (PS) est une méthode d'optimisation sans dérivation adaptée aux problèmes d'optimisation de faible dimension pour lesquels il est difficile ou impossible de calculer des dérivées [3, 4]. Bien que PS a été utilisé dans de nombreux domaines de l'ingénierie, il est relativement nouveau dans le domaine de la conception de filtres optiques et de cristaux photoniques. Ce chapitre contient deux parties : la première partie concerne les résultats d'optimisation d'un filtre MgF₂/Ge en supposant que le filtre est transparent en négligeant les pertes d'absorption dans le filtre ; $\overline{R} = 1 - \overline{T}$ par contre la deuxième s'intéresse aux résultats d'optimisation d'un filtre MgF₂/Ge utilisé dans un système TPV (on a pris en compte l'absorption partielle de Ge en utilisant les constantes optiques réalistes des matériaux [5, 6]). Notre but est de comparer les performances de ces différentes structures et de concevoir des cristaux photoniques à performance optimale.

PARTIE 1

Partie 1 :

1.1. La conception de filtre :

Conception par la règle des quarts d'ondes :

Des empilements diélectriques quarts-d'onde d'une classe très importante de structures diélectriques multicouches. Dans cette thèse, nous concentrons notre attention sur l'amélioration des performances des systèmes TPV grâce à la conception optimale des empilements diélectriques (cristaux photoniques). Ces structures sont construites selon la règle des quarts d'ondes.

Un empilement diélectrique quart d'onde est constitué d'une couche diélectrique à faible permittivité(L) déposée sur une couche diélectrique à permittivité élevée (H) comme la montre figure 4-1 (a). Ici, une certaine quantité du rayonnement d'incidence est réfléchie à chacune interface de l'empilement. dans le cas de la période fondamentale de la structure consistant en une couche à haute permittivité (H) - faible permittivité (L) -air (substrat-HL-air), l'onde incidente subit trois réflexions séparées.



Figure 4-1 : (a) période de base-haute permittivité d'un empilement quart d'onde. (b) empilement diélectrique à trois périodes.

La réflectance de la structure à deux couches peut être augmentée en ajoutant des périodes HL supplémentaires à l'empilement. L'augmentation de la réflectance due à l'augmentation du nombre de couches est illustrée sur la figure 4-1 (b), où l'empilement diélectrique a une structure de substrat-HL-HL-air.

Dans un système TPV, il est nécessaire de mettre en œuvre un contrôle spectral. Spécifiquement, nous souhaitons exposer la diode PV uniquement à des rayonnements de longueurs d'onde plus courtes que λ_g , la longueur d'onde correspondant à l'énergie de la bande interdite de la diode PV. Atteindre cet objectif nécessite l'insertion d'un filtre passe-bas dans le système TPV. Cette section examine comment une structure d'empilement diélectrique, peut être utilisée pour mettre en œuvre un tel filtre passe-bas.

Le système TPV considéré dans cette thèse est constitué d'une source thermique couplée à une diode PV GaSb. La source thermique émet un spectre de corps noir à 1500k, dont un tracé est représenté sur la figure 2-4 (chapitre 2). L'énergie de la bande interdite de la diode PV GaSb est de 0,70 eV, ce qui correspond à une longueur d'onde de 1,78 µm. Par conséquent, la diode PV ne peut convertir que les longueurs d'onde inférieures ou égales à 1,78 µm en électricité. Idéalement, le composant de contrôle spectral dans le système TPV aurait une caractéristique de filtre passe-bas équivalente à celle représentée sur la figure 4-2 (a). Afin d'exposer la diode PV à un maximum de rayonnement convertible, le filtre aurait une transmittance de 1 pour des longueurs d'onde allant jusqu'à 1,78 µm (T = 1 pour $\lambda \leq 1,78$ µm. En variante, la réflectance du filtre doit être égale à 1 (R = 1 pour $\lambda \geq 1,78$ um). Il est également important d'être conscient de la nécessité pour le filtre de fonctionner efficacement lorsqu'il est exposé à un rayonnement à incidence normale.

L'utilisation d'une structure d'empilement diélectrique pour fournir un contrôle spectral dans un système TPV offre plusieurs avantages en termes de performance.



Figure 4-2 : (a) Caractéristique idéale du filtre passe-bas superposé à un corps noir émettant à 1500k. (b) Illustration du spectre qui serait transmis à une diode PV GaSb par le filtre passebas idéal.

1.2. Choix du matériau diélectrique :

L'utilisation d'une caractéristique de bande interdite à structures diélectriques multicouches (figure 4-3) pour fournir un filtrage passe-bas nécessite que la bande interdite soit aussi large que possible pour minimiser la quantité de rayonnement de longueur d'onde plus longue transmise par le filtre. Le rapport de la largeur de la bande interdite du filtre de pile quart d'onde ($\Delta\lambda$) à la longueur d'onde centrale de la bande interdite (λ_c) en ce qui concerne les permittivités des couches de pile est dérivé dans [8,9].

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda_c} = \frac{\pi}{4} \left(\sin^{-1} \left| \frac{n_H - n_L}{n_H + n_L} \right| \right)$$
 4-1

Ici, n_H et n_L sont les indices de réfraction des couches de permittivité haute et basse respectivement. Pour assurer que le filtre quart d'onde a une bande interdite aussi large que possible, la différence entre les valeurs de n_H et n_L doit être maximisée. , nous utilisons les matériaux Ge et MgF2 pour la fabrication d'un filtre CP unidimensionnel. Ces deux diélectriques ont un grand contraste d'indice de réfraction et d'une faible absorption optique dans la gamme infrarouge proche [1, 2].





Nous avons proposé quatre configurations des structures photoniques unidimensionnels à optimiser afin d'extraire la structure optimale. Tableau 4-1 présente ces configurations.

Tableau	4-1	:1	Les configurations	proposées	pour la conce	ption des	1 E	O CP	:
---------	-----	----	--------------------	-----------	---------------	-----------	-----	------	---

Configuration	Variable à optimiser	Nombre de variables
1	λ_c	1
2	d_1, d_2	2
3	di	N
4	n _i , d _i	2N

1.a. Configuration 1:

Ça consiste à des empilements diélectriques quarts-d'onde d'une classe très importante de structures diélectriques multicouches. La première configuration pour la conception des structures photoniques est construite selon la règle des quarts d'onde où les épaisseurs de couche sont calculées à partir de :

$$4d_L n_L = 4d_H n_H = \lambda_c. \tag{4-2}$$

Nous définissons ici les matériaux diélectriques d'indice de réfraction bas (L) et haut (H) correspondant respectivement au MgF₂ et Ge. Puisque dans cette partie nous avons considéré que le filtre Ge/MgF₂ est transparent, les indices de réfraction de MgF₂ et Ge sont considérés constants, $n_L = 1,36$ (MgF2) et $n_H = 4,2$ (Ge). Puisque les indices de réfraction sont fixes, d_L et d_H peuvent être calculés à partir de la longueur d'onde centrale λ_c de la bande interdite à incidence normale. La longueur d'onde centrale est obtenue à partir de la relation [10, 11]

$$\lambda_c = \frac{1}{1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \left(\frac{n_H - n_L}{n_H + n_L} \right)} \lambda_g \tag{4-3}$$

Où $\lambda_g = 1775$ nm correspondant à la bande interdite de la cellule photovoltaïque GaSb (Eg = 0,7 eV). Par conséquent, la substitution des valeurs numériques n_L, n_H et λ_g dans l'équation (4-3) permet de trouver $\lambda_c = 2694,7$ nm. L'épaisseur optique des couches diélectriques quart d'onde est alors égale à $\lambda_c/4 = 673.6$ nm. Les épaisseurs des couches MgF2 et Ge sont calculées en divisant l'épaisseur optique quart d'onde par les indices de réfractions respectifs MgF2 et Ge, l'épaisseur de la couche de MgF2 (L), a été calculée comme d_L = 673.6/1.36 = 495 nm et de même l'épaisseur de la couche de Ge (H), a été calculée comme d_H = 673.6/4.2 = 160 nm.

Puisque la cellule GaSb n'absorbe que les rayons d'énergie $E \ge 0.7eV$ donc on veut réfléchir tous les rayons ayant $\lambda > 1775 nm = \lambda_g$ et transmettre tous les longueurs d'ondes $\lambda < 1775 nm$.

Pour cela dans la configuration 1 on a optimisé la longueur d'onde λ_c pour ajuster le bord de la bande interdite vers 1775 nm. Nous avons varié le nombre de période P de 1 à 4. Pour chaque valeur de P on obtient une valeur de λ_c , par la suite on déduit les épaisseurs d_L et d_H. Les indices de réfractions n_L et n_H restent fixes.

La configuration 1 présente une large bande interdite, mais de grandes oscillations dans la bande passante ($\lambda < \lambda_g$) réduisent significativement la quantité de puissance transmise à la cellule solaire. Pour éliminer ces oscillations et augmenter la transmittance de la bande passante, nous avons proposé la configuration 2.

1.b. Configuration 2 :

La seconde configuration correspond à un empilement diélectrique déposé sur GaSb (n = 3.8), c'est-à-dire (LH)^P/GaSb en variant P de 1 à 4. Nous avons optimisés les épaisseurs de

MgF2 et Ge (d_L et d_H) en les considérant indépendantes de λ_c et qu'elles sont prises d'une manière aléatoire dans un intervalle précis. Les valeurs de d_L et d_H varies dans un intervalle compris entre 1 et 1000 nm. Les indices de réfractions n_L et n_H restent fixes.

1.c. Configuration 3 :

La troisième configuration est développée en permettant une optimisation complète de toutes les épaisseurs de la structure en utilisant l'algorithme PS. Les indices de réfractions n_L et n_H restent fixes.

1.d. Configuration 4 :

Dans la quatrième configuration nous avons optimisé toutes les épaisseurs et tous les indices de réfractions de la structure à la fois en utilisant l'algorithme PS.

Le problème d'optimisation consiste à rechercher une structure diélectrique qui minimise la fonction de coût définie comme

$$\delta = Moyen(|R_T(\lambda) - R_C(\lambda, d_L^1, d_H^1, \dots, d_L^N, d_H^N)|)$$

$$4-4$$

où $R_T(\lambda)$ est la réflectivité cible définies par

$$R_{T}(\lambda) = \begin{cases} 1 & \lambda > \lambda_{g} \\ 0 & autre \ part \end{cases}$$
 4-5

et T_T (λ) = 1-R_T (λ). R_C et T_C sont, respectivement, la réflectivité et la transmittance dépendant de l'épaisseur de la structure multicouche, calculées par la méthode de la matrice de transfert (la méthode matrice de transfert est expliquée dans le chapitre 2).

1.3. Résultats et discussion de la partie 1:

Les spectres de réflectivités à incidence normale de nos configurations sont représentés sur les figure 4-4 (a, b, c, d). Les structures des quatre configurations correspondent à des empilements déposés sur un substrat de GaSb (n = 3,8), c'est-à-dire (LH)^P/GaSb où P la période varie de 1 à 4. D'après les quatre figures, on remarque que, en augmentant le nombre de période dans les structures des quatre configurations, la caractéristique de réflectivité s'améliore de manière significative. D'après la figure 4-4(a) on remarque que les structures présentent des larges bandes interdites ainsi que de grandes oscillations (franges d'interférence) dans la région de la bande passante où les longueurs d'ondes sont inférieures à la longueur d'onde de la bande interdite ($\lambda < 1775nm$). Ceci est du à la différence entre les

structures et le substrat en termes d'indice de réfraction. Ces oscillations conduiront à une mauvaise transmittance dans cette région et limitent la quantité de rayonnement utile transmise à la diode PV (GaSb). On voit que le bord de la bande interdite se trouve très décalé de λ_g . La réflectivité atteint 93% à $\lambda > 1775$ nm pour P = 1 alors que pour P = 4 la réflectivité sera presque 100% dans cet intervalle.



Figure 4-4 (a) : Réflectivité calculée de la configuration 1.

Concernant la configuration 2 (figure 4-4(b)), on remarque que l'amplitude des oscillations est réduite pour $\lambda < 1775$ nm par rapport à la 1^{ère} configuration, ce qui a considérablement

amélioré la transmittance dans cette bande. La bande interdite s'élargit et va jusqu'à 5000 nm. Ici le bord de la bande interdite est plus proche de λ_g . La réflectivité atteint : 45% pour P = 1 ; 44% pour P =2 ; 43% pour p =3 et 41% pour P = 4 à λ = 1775 *nm*. On voit que la structure à quatre périodes offre une performance acceptable du fait que la réflectivité de la bande interdite est extrêmement élevée (100%).



Figure 4-4(b) : Réflectivités calculées de la configuration 2.

En observant la figure 4-4(c), les spectres de réflectivité sont complètement changés par rapport aux deux configurations précédentes ; de manière que le bord de la bande interdite est

beaucoup plus proche de la longueur d'onde 1775 nm. Les amplitudes des oscillations des réflectivités sont réduites pour $\lambda < 1775$ nm, ce qui augmente la transmittance dans cette région. Au-delà de 1775 nm, la réflectivité atteint la valeur maximale de presque 99 % pour P = 4. On remarque que pour P = 3 et 4 la bande interdite contient des pics de transmission ce qui fait que les longueurs d'ondes supérieures à 1775 nm ne sont pas totalement réfléchies.



Figure 4-4(c) : Réflectivités calculées de la configuration 3.

Enfin, la configuration 4 (figure 4-4(d)) présente presque les mêmes performances que celles de la configuration 3. Cette structure présente une réflectance extrêmement élevée (99%) sur une plage de longueur d'one 1775-5000 nm (P = 3, 4) avec une diminution des pics de

transmission. Le bord de la bande d'arrêt est proche de la longueur d'onde de la bande interdite et l'amplitude d'oscillation de réflectivité est réduite significativement dans la région inférieure à 1775 de la manière que dans la configuration 3. Bien que la structure pour P = 4présente une bonne réflèctance dans la bande interdite, l'apparition des oscillations dans la bande passante réduisent la puissance transmise à la cellule GaSb. En comparant à la configuration 3, la réflectivité pour P = 4 a subi une nette diminution au voisinage de 1775 nm.



Figure 4-4(d) : Réflectivités calculées de la configuration 4.

Comme indiqué précédemment, notre problème d'optimisation est de minimiser la fonction coût δ . La figure 4-5 illustre la variation de δ en fonction de la période P de nos quatre

configurations. Tout d'abord, nous observons une tendance décroissante des courbes de la config.3, 4 à mesure que la période augmente, alors que la variation de delta est aléatoire dans les autres courbes. Deuxièmement, nous remarquons qu'en comparant ces configurations la valeur delta atteint la plus faible valeur (0.14 à P = 4) dans la config 3. Tandis que les config1, config 2, config 4 ont minimisés delta à 0.23, 0.21 et à 0.17 pour P = 4 respectivement. La diminution de δ conduit à une réduction des oscillations dans la bande passante. Cela conduit à une augmentation de la quantité d'énergie transmise à la cellule solaire. Alors config.3 présente la meilleur structure puisque la valeur de δ a subi une grande diminution par rapport aux autres configurations. Donc cette configuration a une réflectivité plus faible que les autres à $\lambda \leq 1775$ nm. Cela augmente les performances de cette structure.



Figure 4-5 : Variation de delta δ en fonction de période P.

Donc on peut dire que les configurations 3 et 4 présentent les meilleures performances par rapport aux autres structures, grâce à un meilleur accord d'indice au substrat. D'après ce calcul on déduit que la réflectivité de la structure à deux couches peut être augmentée en augmentant le nombre de périodes dans l'empilement.

Le calcul réalisé dans cette première partie a été fait dans l'objectif de tester la méthode d'optimisation Pattern Search (PS). Les résultats obtenus dans cette partie prouvent que la méthode PS est un très bon outil, capable de retrouver le minimum de la fonction de coût pour différentes configurations et en un temps de calcul raisonable. La deuxième partie est concernée aux résultats d'optimisation d'un filtre MgF2/Ge utilisé dans un système TPV en appliquant ce même algorithme.

PARTIE 2

Partie 2 :

2.1. La conception de filtre :

Dans cette partie les 1D PhC sont conçus en considérant deux structures différentes, c'est-àdire des structures périodiques et apériodiques. Figure 4-6 présente les structures proposées.



Figure 4-6 : Les trois structures proposées : empilement périodique, périodique modifié et optimisé.

La première structure est identique à la configuration 1 de la première partie. Habituellement, la structure présente une large bande interdite, cependant de grandes oscillations dans la bande passante ($\lambda < \lambda_g$) réduisent significativement la quantité de puissance transmise à la cellule solaire. Pour augmenter la transmittance de la bande passante, nous avons modifié les couches avant et arrière en réduisant leur épaisseur à la moitié des épaisseurs d'origine en se référant aux travaux de O'Sullivan [14]. Nous avons pris les épaisseurs de MgF₂ (d_L) et Ge (d_H) varies dans un intervalle compris entre 1 et 1000 nm. Ces modifications conduisent à une structure d'empilement L/2-HL-HL-HL-HL-LH-H/2 à cellule GaSb.

La troisième conception est développée en permettant une optimisation complète de toutes les épaisseurs de la structure en utilisant l'algorithme PS. Nous avons réalisé trois exécutions successives de l'algorithme PS et nous avons pris les meilleurs résultats qui donnent la valeur la plus faible de la fonction coût δ . Ici nous avons pris en compte l'absorption partielle de Ge et utilisé les constantes optiques réalistes des matériaux [12,13]. La figure 4-7(a, b) indique les constantes optiques des matériaux utilisés. Nous n'avons pas représenté le coefficient d'extinction de MgF_2 en raison de sa transparence dans la gamme de longueurs d'onde d'intérêt.



Figure 4-7 : (a) indices de réfraction de Ge et MgF₂, (b) coefficient d'extinction de Ge.

Le problème d'optimisation consiste à rechercher une structure diélectrique qui minimise la fonction de coût définie comme

$$\delta = Moyen(|R_T(\lambda) - R_C(\lambda, d_L^1, d_H^1, \dots, d_L^N, d_H^N)|) + Moyen(|T_T(\lambda) - T_C(\lambda, d_L^1, d_H^1, \dots, d_L^N, d_H^N)|)$$

4-6

où $R_T(\lambda)$ et $T_T(\lambda)$ sont, respectivement, la réflectivité et la transmittance cible définies par

$$R_{T}(\lambda) = \begin{cases} 1 & \lambda > \lambda_{g} \\ 0 & autre \ part \end{cases}$$
 4-7

et $T_T (\lambda) = 1 - R_T(\lambda) - A(\lambda)$. R_C , T_C et $A(\lambda)$ sont, respectivement, la réflectivité, la transmittance et l'absorbance dépendant de l'épaisseur de la structure multicouche, calculées par la méthode de la matrice de transfert.

2.2. Résultats et discussion de la partie 2:

2.2.1. Réponse optique des structures :

Les spectres de réflectivité, de transmittance et d'absorption à incidence normale des empilements périodiques, périodique modifiées et optimisés sont représentés sur la figure 4-8 (a, b, c). L'empilement périodique correspond à une structure de dix couches déposé sur GaSb (n = 3,8), c'est-à-dire (LH)⁵/GaSb. Dans l'empilement périodique modifié, les épaisseurs de la première et la dernière couche sont réduites, c'est-à-dire (L/2)H(LH)³L(H/2)/GaSb. Dans la structure optimisée, nous avons fait varier les épaisseurs de chaque couche par algorithme PS pour minimiser la fonction de coût. Les valeurs d'épaisseur calculées de nos structures sont données dans le tableau 4-2. La comparaison des valeurs d'épaisseur totale montre que les d_{tot} des empilements périodique modifiés et optimisés sont respectivement réduits de 10% et de 35% par rapport à l'épaisseur totale de l'empilement périodique simple.

Tableau 4-2: Epaisseur des couches (nm) des empilements périodiques, périodiques modifiées et optimisées; d_{tot} est l'épaisseur totale.

	L	Н	L	Н	L	Н	L	Н	L	Н	dtot
Empil. P	495	160	495	160	495	160	495	160	495	160	3275
Empil. Pm	247	160	495	160	495	160	495	160	495	80	2947
Empli. Op	217	15	50	143	466	146	456	147	490	1	2131



Figure 4-8: (a) Réflectivités calculées, (b) transmittances et (c) absorptions d'empilements périodiques, périodiques modifiés et optimisés.

La figure 4-8 montre la réponse optique calculée de nos structures photoniques. D'après la figure 4-8 (a), nous remarquons que nos structures présentent de larges bandes interdites de presque 100% de réflexion pour des longueurs d'onde supérieures à la longueur d'onde λ_g . En se concentrant sur l'empilement périodique, nous observons que la réflectivité présente de grandes oscillations dans la région de la bande passante, principalement à cause de la différence entre la structure et le substrat GaSb. Cela conduit à une réduction de la quantité d'énergie transmise à la cellule solaire (voir Figure 4-8 (b)). Pour l'empilement périodique modifié, nous remarquons une nette amélioration de la performance de la bande passante conduisant à une réduction de la réflectivité, une augmentation de la transmittance et une diminution d'absorbance, comme le montre la figure 4-8 (a, b, c). Ici, la réflectivité atteint sa valeur minimale (presque zéro) à 1191 nm, accompagnée d'une multitude d'oscillations décroissantes. En effet, réduire les épaisseurs des couches avant et arrière à la moitié de leurs valeurs d'origine peut être considéré comme des couches antireflets. Enfin, l'empilement optimisé présente de meilleures performances par rapport aux autres structures, grâce à une meilleure adaptation au substrat. Le bord de la bande interdite est proche de la longueur d'onde de la bande interdite et l'amplitude des oscillations de réflectivité est significativement réduite dans la région de la bande passante. Pour la gamme de longueur d'onde de 950-2000 nm, la transmittance augmente pour atteindre une valeur maximale de $\sim 100\%$ à 1712 nm.

Dans la figure 4-8 (c), les absorptions optiques de nos structures sont représentées. D'abord, nous observons que pour des longueurs d'onde supérieures à 1650 nm, les structures entières restent transparentes. Ensuite, l'absorption augmente vers les faibles longueurs d'ondes. Puisque les couches de MgF₂ sont transparentes dans toute la gamme de longueurs d'onde étudiées, l'absorption est simplement due aux couches de Ge et les courbes d'absorption sont directement corrélées au coefficient d'extinction de Ge (Figure 4-7 (b)). Dans la plage de 1045-1650 nm, l'empilement optimisé présente une absorbance relativement plus faible par rapport aux autres structures. Ce comportement est inversé pour les valeurs de longueur d'onde inférieures en raison de l'amélioration de la réflexion des empilements périodiques et périodiques modifiées. La figure 4-9 illustre les réflectivités calculées en fonction de la longueur d'onde des structures périodiques (a), périodiques modifiées (b) et optimisées (c) à différentes valeurs d'angle d'incidence et modes de polarisation. On peut voir que lorsque l'angle d'incidence augmente, la bande interdite est élargie (rétrécie) dans le mode de polarisation TE (TM), respectivement. En outre, la bande interdite se déplace un peu vers les courtes longueurs d'onde avec un angle d'incidence croissant. Les largeurs à mi-hauteur de la

bande de réflexion sont respectivement de 1050 nm, 900 nm et 940 nm pour les trois structures (1) (2) et 3. Dans la région de bande passante, la structure optimisée a une réflectivité omnidirectionnelle inférieure à celle des autres structures, ce qui suggère une meilleure transmittance en fonction de l'angle d'incidence.



Figure 4-9: Réflectivité en fonction de la longueur d'onde et d'angle d'incidence pour (a) la structure périodique, (b) structure périodique modifiée et (c) structure optimisée.

2.2.2. Analyse de performance TPV :

Pour analyser la performance TPV des structures photoniques conçues, nous considérons un système TPV composé de trois dispositifs à savoir, l'émetteur thermique, le filtre optique et la cellule photovoltaïque. Nous supposons que l'émetteur de chaleur est un corps noir idéal (BB) séparé du filtre par une fine couche d'air. Habituellement, la performance d'un filtre optique est caractérisée par son (rendement spectral) $\eta_{sp}(T_{em})$ selon la relation

$$\eta_{sp}(T) = \frac{\int_0^{\lambda_g} F_{BB}(\lambda, T_{em})\bar{T}(\lambda)d\lambda}{\int_0^{\infty} F_{BB}(\lambda, T_{em})(1-\bar{R}(\lambda))d\lambda}$$

$$4-8$$

$$F_{BB}(\lambda, T_{em}) = \frac{2\pi\hbar c_0^2}{n^2 \lambda^5 \left[e^{\frac{\hbar c_0}{\lambda k T_{em}}} - 1 \right]}$$

$$4-9$$

où $F_{BB}(\lambda, T_{em})$ est la fonction de rayonnement spectral du corps noir à la température de l'émetteur T_{em} . $\overline{T}(\lambda)$ et $\overline{R}(\lambda)$ sont, respectivement, la transmittance angulaire moyenne et la réflectance angulaire moyenne du filtre vers la cellule. Donc

$$\bar{T}(\lambda) = \int_0^{\pi/2} \left(T_{TE}(\lambda,\theta) + T_{TM}(\lambda,\theta) \right) \cos\theta \sin\theta \,d\theta \qquad 4-10$$

$$\bar{R}(\lambda) = \int_0^{\pi/2} \left(R_{TE}(\lambda,\theta) + R_{TM}(\lambda,\theta) \right) \cos\theta \sin\theta \,d\theta \qquad 4-11$$

où T_{TE} et R_{TE} (resp., T_{TM} et R_{TM}) sont la transmittance et la réflectivité calculées pour la polarisation TE (respectivement pour la polarisation TM), et θ est l'angle d'incidence. L'efficacité spectrale exprime le rapport de la puissance transmise en dessous de la longueur d'onde de la bande interdite à la puissance totale émise qui atteint le système de cellules photovoltaïques-filtres.

Pour un filtre idéal, tous les photons émis de longueur d'onde inférieure à λ_g sont transmis à la cellule $(\overline{T}(\lambda \leq \lambda_g) = 1)$ tandis que les autres photons sont parfaitement réfléchis $(\overline{R}(\lambda > \lambda_g) = 1)$ à l'émetteur, résultant en $\eta_{sp} = 1$. Atteindre un tel contrôle spectral idéal n'est pas possible; Cependant, nous montrerons que nos structures peuvent atteindre des performances acceptables. Dans la figure 4-10, nous avons représenté les efficacités spectrales en fonction de la température des filtres périodiques, périodiques- modifiés et optimisés, ainsi que pour une source de corps noir sans aucun filtrage spectral.



Figure 4-10: Rendement spectral calculé de filtres périodiques, périodiques-modifiés, optimisés et de source de corps noir sans aucun filtrage spectral.

Tout d'abord, nous observons une tendance croissante de toutes les courbes à mesure que la température de l'émetteur augmente. Deuxièmement, nous remarquons qu'en comparant au cas sans filtre, nos structures photoniques atteignent des efficacités spectrales élevées, allant de 45% à 75% dans la gamme de température d'intérêt. Il convient ici de mentionner que des performances similaires ont été atteintes pour les cristaux photoniques de SiO2/Si selon les travaux de Francis M. O'Sullivan [14-15]. Enfin, en prenant comme référence la température de 1500K, le filtre optimisé présente une amélioration de 4,4% (resp. 3%) par rapport au filtre périodique (ou périodique modifié). Cette amélioration est une fonction croissante de la température.

Un autre indicateur de performance important est la transmission effective à incidence normale exprimée par

$$\tau_{\perp} = \frac{\int_{0}^{\lambda_{g}} F_{BB}(\lambda, T_{em}) T(\lambda) d\lambda}{\int_{0}^{\lambda_{g}} F_{BB}(\lambda, T_{em}) d\lambda}$$

$$4-12$$

C'est-à-dire le rapport de la puissance inférieure à λ_g transmise à travers le filtre, et la puissance transmise à travers un filtre idéal. Sur la figure 4-11, les transmissions effectives de nos structures en fonction de la température sont affichées. Il est montré qu'avec l'augmentation de la température, les transmissions effectives diminuent. . Enfin, parmi les filtres considérés, le filtre optimisé offre la meilleure transmission effective grâce à ses

performances optiques supérieures. Ceci est en accord avec les travaux de Francis M. O'Sullivan.



Figure 4-11 : Transmission effective au-dessous de la bande interdite à une incidence normale pour des filtres périodiques, périodiques- modifiés et optimisés.

3. Conclusion :

En conclusion, nous avons conçu et analysé trois différents cristaux photoniques 1D, à savoir. Empilements quart d'onde, périodiques modifiés et optimisés, à utiliser dans les systèmes thermophotovoltaïques. L'optimisation a été effectuée en combinant la méthode de matrice de transfert et l'algorithme de Pattern Search (recherche de motif). La structure optimisée proposée présente une amélioration significative des performances optiques et de l'efficacité spectrale.
Références:

- [1] D. E. Aspnes, A. A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, Phys. Rev. B 27, 985 (1983).
- [2] H. H. Li. Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives, J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 161-289 (1980).
- [3] G. E. P. Box, Appl. Stat. 6, 81 (1957).
- [4] R. Hooke, T. A. Jeeves, J. ACM 8 212 (1961).
- [5] D. E. Aspnes, A. A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, Phys. Rev. B 27, 985 (1983).
- [6] H. H. Li. Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives, J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 161-289 (1980).
- [7] M.F. Modest, radiative Heat Transfer. New York: Academic Press, pp. 1-59, 2003.
- [8] L. Young, E. G. Cristal, "Low-pass and high-pass filters consisting of multilayer dielectric stacks," IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques, vol. MTT-14, no. 2, February 1966.
- [9] H. A. Macleod, Thin-film Optical Filters. London: Intitue of Physics Publishing 2001.
- [10] Y. Fink, J. Winn, S. Fan, C. Chen, J. Michael, J. Joannopoulos, E. Thomas, A dielectric omnidirectional reflector, Science 282, 1679 (1998).
- [11] W.H. Southwell, Omnidirectional mirror design with quarter-wave dielectric stacks, Appl. Opt. 38(25), 5464–5467 (1999).
- [12] D. E. Aspnes, A. A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, Phys. Rev. B 27, 985 (1983).
- [13] H. H. Li. Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives, J. Phys. Chem. Ref. Data 9, 161-289 (1980).
- [14] F. O'Sullivan, I. Celanovic, N. Jovanovic, J. Kassakian, Optical characteristic of one dimensional Si/SiO2 photonic crystals for thermophotovoltaic applications, J. Appl. Phys. 97, 033529 (2005).
- [15] I. Celanovic, F. O'Sullivan, N. Jovanovic, M. Qi, J. Kassakian, 1D and 2D photonic crystals for thermophotovoltaic applications, Proc. SPIE, 5450, 416–422 (2004).

CONCLUSION GENERALE ET PERSPECTIVES

L'ensemble du travail présenté dans cette thèse constitue une contribution à l'étude des cristaux photoniques unidimensionnels CP1D. Notre objectif était d'extraire la conception du composant de contrôle spectral optimale pour l'amélioration des performances d'un système TPV.

Le premier chapitre, nous avons donné des généralités sur la conversion photovoltaïque. Nous nous sommes intéressés aux cellules solaires en mettrant l'accent sur les cellules en couches minces. Nous avons expliqué les différents facteurs limitant le rendement de la cellule ainsi que les procédés d'amélioration des performances d'une cellule solaire.

Le seconde chapitre était consacré pour la conversion thermophtovoltaique et leurs composants fondamentaux. Nous avons expliqué le rôle de chaque élément du système TPV en traitant les propriétés de ces composants qui affectent le système dans l'ensemble. La sélection de chaque élément été critique afin d'améliorer les performances de conversion et l'efficacité d'un système TPV. Nous avons montré comment les cristaux photoniques pourraient assurer un contrôle spectral. Ce chapitre a permis d'introduire la théorie fondamentale de la propagation des ondes électromagnétiques à travers les interfaces de matériaux avec différentes permittivités. Nous avons présenté la méthode générale de calcul des propriétés radiatives des structures multicouches. Cette méthode repose sur la technique des matrices de transfert qui nous a permis d'obtenir numériquement les coefficients de transmission et de réflexion des structures multicouches.

Le troisième chapitre a permis d'introduire toutes les notions et méthodes algorithmiques nécessaires à la réalisation de notre étude. Nous y avons présenté les différents familles de techniques d'optimisation et montré leurs applications respectives. Une attention particulière fut accordée aux algorithmes méta-heuristiques dont les algorithmes génétiques et les algorithmes de recherche par motifs.

Dans la première partie du chapitre 4, il a été question de proposer une approche de conception optimale de structures photoniques. Ce chapitre est divisé en deux parties ; la première partie fut consacré aux résultats d'optimisation d'un filtre MgF₂/Ge en supposant que le filtre est transparent en négligeant les pertes d'absorption dans le filtre; $\bar{R} = 1 - \bar{T}$. La phase de conception de notre thèse a mis en évidence la nécessité d'utiliser des diélectriques présentant un contraste de permittivité aussi élevé que possible, car cela maximise la largeur de la bande interdite du filtre et contribue ainsi à optimiser le rendement de conversion du système TPV. Cette partie a été fut pour pour tester la méthode d'optimisation Pattern Search

(PS). les résultats obtenus dans cette partie ont prouvé que la méthode PS est capable de trouver le minimum de la fonction de coût pour différentes configurations. Dans la 2^{ème} partie, nous avons proposé quatre configurations de structures photoniques unidimensionnelles à optimiser afin de trouver la structure optimale. Nous avons utilisé l'algorithme d'optimisation de pattern search (PS) en combinaison avec la méthode des matrices de transfert (MMT) pour trouver les épaisseurs optimales des structures photoniques. La méthode MMT a été utilisée pour déterminer la réponse optique des structures multicouches. Après avoir calculé la réflectance et trouver le minimum de la fonction coût pour chaque configuration, il nous été possible de comparer les performances des quatre configurations en interprétant les spectres obtenus.

La seconde partie, fut consacrée aux résultats d'optimisation d'un filtre Ge/MgF_2 utilisé dans un système TPV en appliquant ce même algorithme. Nous avons proposé trois structures : empilement périodique, empilement périodique modifié et l'empilement optimisé. L'empilement périodique été une structure de dix couches déposée sur cellule GaSb. L'incorporation d'une couche antireflet dans le filtre à empilement diélectrique a nécessité de modifier légèrement le processus de conception. En effet, les épaisseurs des couches avant et arrière de la seconde structure ont été réduites à la moitié de leurs valeurs d'origine, ceci a permis de réduire légèrement la réflectivité et donc d'agir comme des couches antireflets. Dans cette partie, Nous avons utilisé la méthode de la matrice de transfert pour déterminer la réflectivité optique, la transmittance et l'absorption des structures multicouches. Après avoir calculé la réponse optique des trois structures proposées, il nous été possible de déduire que l'empilement optimisé donne les meilleures performances par rapport aux autres structures. Pour comparer la largeur de la bande interdite des structures proposées, nous avons calculé les réflectivités en fonction de la longueur d'onde des structures périodiques, périodiques modifiées et optimisées à différentes valeurs d'angle d'incidence et modes de polarisation. Le rendement spectral de nos structures photoniques a été calculé pour analyser la performance TPV de ces structures. Pour comparer les transmissions de nos structures à des longueurs d'ondes inférieure à λ_g et à incidence normale nous avons calculé les transmissions effectives de ces structures à des différentes températures. Parmi les filtres considérés, le filtre optimisé a présenté la meilleure efficacité de transmission grâce à ses performances optiques supérieures. Nous avons déduit que la structure optimisée proposée présente une amélioration significative des performances optiques et de l'efficacité spectrale.

Ces résultats laissent entrevoir de nombreuses perspectives de développement et d'applications notamment dans les nouvelles technologies de conversion d'énergie comme la conversion thermophotovoltaïque de champ proche mais également dans celui de la nanolithographie. Il sera possible d'améliorer le contrôle directionnel des sources thermiques multicouches en champ lointain et d'amplifier la densité d'énergie en champ proche. Nous pouvons aussi envisager de transposer les principes développés dans cette thèse à d'autres domaines comme la conversion thermoélectrique qui représente un enjeu majeur en énergétique.

ARTICLE

Contents lists available at ScienceDirect

Optik

journal homepage: www.elsevier.de/ijleo

Original research article

Spectral control in thermophotovoltaic systems by optimized one-dimensional photonic crystals

K. Binidra^a, R. Miloua^{a,b,*}, M. Khadraoui^a, Z. Kebbab^a, A. Bouzidi^a, N. Benramdane^a

 ^a Laboratoire d'Elaboration et de Caractérisation des Matériaux, Département d'Electronique, Université Djillali Liabès, BP89, Sidi Bel Abbès 22000, Algeria
 ^b Faculté des Sciences de la Nature et de la Vie, Université Ibn Khaldoun, Tiaret 14000, Algeria

ARTICLE INFO

Article history: Received 20 April 2017 Accepted 14 December 2017

Keywords: 1D Photonic crystals Quarter-wave filters Pattern search optimization TPV systems

ABSTRACT

We report computational results on the optical response of quarter-wave periodic, modified periodic and optimized photonic crystals based on Ge and MgF₂ materials. Transfer matrix method and pattern-search optimization algorithm have been combined to achieve high performance structures destined to spectral control in thermophotovoltaic systems. Our computations demonstrate that the pattern-search algorithm is readily applicable to optimal design of photonic crystals within reduced computing time. High optical performance and spectral efficiency have been achieved.

© 2017 Elsevier GmbH. All rights reserved.

1. Introduction

In the last years, photonic crystals (PhCs) have received considerable attention from researchers in both fundamental and industrial fields. Today, they are a key component in different optoelectronic devices such as optical filters, computer displays, digital projectors, solar energy absorbers and THz communication systems [1–6]. PhCs can be prepared in a one-, two-, or three-dimensional form and can be periodic, quasi-periodic, or completely random. Understanding optical interactions in aperiodic photonic structures offers an almost unexplored potential for the manipulation of electromagnetic fields and light scattering [3–5].

Thermophotovoltaic (TPV) generators are promising systems that convert thermal radiation emitted from a hightemperature source (typically in 1100–1500 K) into electricity by means of a photovoltaic solar cell [6]. It consists of a heat source, an emitter, an optical filter and an array of photovoltaic cells fabricated from low band gap materials, e.g., GaSb, InGaAs, and InGaAsSb. The optical filters transmit photons whose wavelengths are below the band gap wavelength λ_g of the photovoltaic cell and reflect the other photons back to the emitter (i.e. thermal radiation recycling). The need of developing suitable optical filters motivated many research groups and several filter structures have been proposed [7–16].

In this paper, we focus our attention on improving the performance of TPV systems through the optimal design of photonic crystals. For this purpose, we use Ge and MgF₂ materials as good candidates for fabricating one-dimensional PhC filter since they have advantages of a large dielectric index contrast and a low optical absorption in the near infrared range [17,18]. In addition, we employ, for the first time, the pattern search (PS) optimization algorithm in combination with the transfer

E-mail address: mr_lecm@yahoo.fr (R. Miloua).

https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2017.12.070 0030-4026/© 2017 Elsevier GmbH. All rights reserved.







^{*} Corresponding author at: Laboratoire d'Elaboration et de Caractérisation des Matériaux, Département d'Electronique, Université Djillali Liabès, BP89, Sidi Bel Abbès 22000, Algeria.



Fig. 1. (a) Refractive indices of Ge and MgF₂, (b) Extinction coefficient of Ge. (c) Graphical illustration of the exploratory mesh in two dimensions.

matrix method (TMM) to find the optimal thicknesses of photonic structures. The PS algorithm has proven to be efficient in many engineering problems such as thin film optical-constants extraction and solar-cell parameters determination [19,20].

2. Theoretical approach

2.1. The design problem

The 1D PhCs are designed by considering two different structures i.e. periodic and aperiodic stacks. In the first type the photonic structures are constructed according to the well known quarter-wave rule where layer thicknesses are calculated from $4d_Ln_L = 4d_Hn_H = \lambda_c$. Here we set the low (L) and high (H) dielectric materials to be MgF₂ and Ge, respectively. For the sake of simplicity, the refractive indices of MgF₂ and Ge are taken as constants, $n_L = 1.36 (MgF_2)$ and $n_H = 4.2$ (Ge). Since the refractive indices are fixed, d_L and d_H can be calculated from the central wavelength λ_c of the normal-incidence stop-band. The central wavelength is obtained from the relation [21,22]

$$\lambda_c = \frac{1}{1 - \frac{2}{\pi} \sin^{-1} \left(\frac{n_H - n_L}{n_H + n_L}\right)} \lambda_g \tag{1}$$

where $\lambda_g = 1775 \, nm$ corresponding to bandgap of GaSb photovoltaic cell (Eg = 0.7 eV). Therefore, by substitution of values we find $\lambda_c = 2694.7 \, nm$, $d_L = 495 \, nm$ and $d_H = 160 \, nm$. Usually, the structure exhibits wide stop-band, however, large oscillations in the pass-band ($\lambda < \lambda_g$) significantly reduce the amount of power transmitted to the solar cell. To increase the pass-band transmittance we modified front and back layers by reducing their thicknesses to half the original thicknesses.

The second design is developed by allowing full optimization of the whole thicknesses of the stack using the PS algorithm. Here we took into account of the partial absorption of Ge and used the realistic optical constants of the materials [17,18]. Fig. 1-(a,b) indicates the optical constants of the used materials. We did not depict the extinction coefficient of MgF₂ due to its transparency in the wavelength range of interest. The optimization problem consists to search for a dielectric stack structure that minimizes the cost function defined as

$$\delta = Mean\left(\left|R_T(\lambda) - R_C(\lambda, d_L^1, d_H^1, \dots, d_L^N, d_H^N)\right|\right) + Mean\left(\left|T_T(\lambda) - T_C(\lambda, d_L^1, d_H^1, \dots, d_L^N, d_H^N)\right|\right)$$
(2)

where $R_T(\lambda)$ and $T_T(\lambda)$ are, respectively the target reflectivity and transmittance defined by

$$R_T(\lambda) = \begin{cases} 1 & \lambda > \lambda_g \\ 0 & elsewere \end{cases}$$
(3)

and $T_T(\lambda) = 1 - R_T(\lambda)$. R_C and T_C are, respectively the thickness-dependent reflectivity and transmittance of the multilayer structure, calculated by the transfer matrix method.

2.2. The transfer matrix method (TMM)

We employed the transfer matrix method to determine the optical reflectivity, transmittance and absorption of the multilayer structures [23,24]. Each single layer (*j*) of the system is represented by a (2×2) matrix M_i :

$$M_{j} = \begin{bmatrix} \cos\varphi_{j} & (i/\eta_{j})\sin\varphi_{j} \\ (i\eta_{j})\sin\varphi_{j} & \cos\varphi_{j} \end{bmatrix}$$
(4)

where

$$\eta_{j} = \begin{cases} N_{j} \cos\theta_{j} \text{ s polarization} \\ N_{j} / \cos\theta_{j} \text{ p polarization} \end{cases}$$
(5)



Fig. 2. Calculated reflectivities (a), transmittances (b) and absorptances (c) of periodic, modified periodic and optimized stacks.

is the pseudoindex of the layer, $\varphi_j = \frac{2\pi}{\lambda} N_j d_j \cos \theta_j$ is the phase shift of the wave inside the layer, θ_j is the angle of propagation in the layer, and λ is the wavelength of light. N_j is the complex refractive index of the layer *j*. The characteristic matrix describing the whole multilayer system is

$$M = \prod_{j=1}^{NL} M_j = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{12} & m_{22} \end{bmatrix}$$
(6)

where NL is the total number of layers. The amplitude reflection and transmission coefficients of the multilayer are

$$r = \frac{\eta_{in}m_{11} - \eta_{out}m_{22} + \eta_{in}\eta_{out}m_{12} - m_{21}}{\eta_{in}m_{11} + \eta_{out}m_{22} + \eta_{in}\eta_{out}m_{12} + m_{21}}$$
(7)
$$t = \frac{2\eta_{in}}{\eta_{in}m_{11} + \eta_{out}m_{22} + \eta_{in}\eta_{out}m_{12} + m_{21}}$$
(8)

$$=\frac{1}{\eta_{in}m_{11}+\eta_{out}m_{22}+\eta_{in}\eta_{out}m_{12}+m_{21}}$$
(8)

where η_{in} and η_{out} are the pseudo-indices of semi-infinite incidence and exit media, respectively. In the present work we assumed $\eta_{in} = 1$ (incidence medium = air) and $\eta_{out} = 3.9$ (output medium = GaSb). θ_j is determined for each layer from the Snell-Descartes law $N_i \sin \theta_i = N_0 \sin \theta_0$. The reflectivity, transmittance and optical absorptance are obtained by

$$R = |r|^2 \tag{9}$$

$$T = \frac{\Re(\eta_{0ll})}{\Re(\eta_{in})} |t|^2; \, (\Re : \text{real part})$$
(10)

$$A = 1 - R - T \tag{11}$$

2.3. Pattern search optimization algorithm

Pattern search (PS) is a derivative-free optimization method suitable for low-dimensional optimization problems for which it is difficult or impossible to calculate derivatives [25,26]. Although PS has been used in many engineering fields, it is relatively new to the field of optical filters design and photonic crystals.

The PS algorithm consists of a series of exploratory moves that evaluate the objective function at a pattern of points, all of which lie on a rational lattice. Let consider an unconstrained minimization problem expressed as minimize $F(x), x \in \mathbb{R}$, where $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ is a continuous and differentiable function and x is an n-dimensional real vector of design variables. First, the algorithm starts at step k with a point x_k and a corresponding step-length parameter $\Delta_k > 0$. If b_i , i = 1, ..., n denote standard n-dimensional unit basis vectors, points $x_+ = x_k \pm \Delta_k b_i$ are successively examined to determine if $F(x_+) < F(x_k)$. A set of such points among which x_+ is searched for is called a pattern, as represented in Fig. 1-(c) for the case n = 2. s, if there is no point such that $F(x_+) < F(x_k)$, Δ_k is reduced; otherwise, the step-length parameter is left unchanged or increased if a longer step is justified. Next, by setting $\Delta_{k+1} = \Delta_k$ and $x_{k+1} = x_+$, the iteration in the second step is repeated until the condition $\Delta_k \leq \varepsilon$ is attained, where ε a real convergence criterion defined by the user. The final value of x_+ constitutes the solution.

3. Results and discussion

3.1. Optical response of the structures

The normal-incidence reflectivity, transmittance and absorptance spectra of periodic, modified-periodic and PSoptimized stacks are shown in Fig. 2(a–c). The periodic stack correspond to a ten-layer deposited on GaSb (n=3.8) substrate i.e. $(LH)^5/GaSb$. In the modified periodic stack the thicknesses of the first and last layers are reduced i.e. $(L/2)H(LH)^3L(H/2)/GaSb$. In the optimized structure we allowed the whole thicknesses to be varied by PS algorithm to minimize the cost function, as described in Section 2.

Layer thicknesses (nm) of periodic, modified periodic and optimized stacks; d _{tot} is the total thickness.										
	L	Н	L	Н	L	Н	L	Н		

	L	Н	L	Н	L	Н	L	Н	L	Н	d _{tot}
P. stack	495	160	495	160	495	160	495	160	495	160	3275
Mp. stack	247	160	495	160	495	160	495	160	495	80	2947
Op. stack	217	15	50	143	466	146	456	147	490	1	2131



Fig. 3. Reflectivity as a function of wavelength and incidence angle for (a) periodic stack, (b) modified periodic stack and (c) optimized stack.

The calculated thickness values of our structures are given in Table 1. Comparing the total thickness values shows that d_{tot} of modified-periodic and optimized stacks are reduced by 10% and 35%, respectively, to the total thickness of the simple periodic stack.

Fig. 2 shows the calculated optical response of our photonic structures. From Fig. 2-(a) we notice that our structures exhibit wide stop-bands of almost 100%-reflectivity for wavelengths greater than the bandgap wavelength λ_g . Focusing on the periodic stack, we observe that the reflectivity exhibit large oscillations in the pass-band region, mainly due to the mismatch between the structure and the substrate i.e. GaSb solar cell. This leads a reduction in the amount of power transmitted to the solar cell (see Fig. 2(b)). For the modified periodic stack we notice a clear improvement of the pass-band performance leading to reflectivity reduction, transmittance enhancement and absorptance decrease, as shown in Fig. 2(a-c). Here, the reflectivity reaches its minimum value of almost zero at 1191 nm, accompanied with an oscillation-amplitude decreasing. Indeed, reducing front and back layer thicknesses to the half of their original values can be thought to an anti reflection coating. Finally, the optimized stack exhibits far better performance in comparison to the other structures, due to a better matching with the substrate. The stop-band edge is close to the bandgap wavelength and the amplitude of reflectivity-oscillations is significantly reduced in the pass-band region. For wavelength range of 950–2000 nm, the transmittance increases to reach a maximum value of ~100% at 1712 nm.

In Fig. 2-(c) the optical absoptances of our structures are depicted. We observe that for wavelength greater than 1650 nm the whole structures remain transparent. Then, increasing absorption appears for decreasing wavelength. Since MgF_2 layers are transparent in the whole wavelength range of interest, absorption is merely due to Ge layers and the absorptance curves are directly correlated to the extinction coefficient of Ge (Fig. 1-(b)). In the range of 1045–1650 nm, the optimized stack exhibits a relatively lower absorptance in comparison to the other structures. This behavior is reversed for lower wavelength values due to the reflection enhancement of both periodic and modified-periodic stacks.

Fig. 3 illustrates the calculated wavelength-dependent reflectivities of periodic (a), modified-periodic (b) and optimized (c) structures at different angle-of-incidence values and polarization modes. It can be seen that when the incidence angle increases, the stop-band is broadened (narrowed) in the TE (TM) polarization mode, respectively. In addition, the strop-band shifts a little toward short wavelength with increasing angle-of-incidence. The omni-directional reflection bandwidths at half-maximum are, respectively, 1050 nm, 900 nm, and 940 nm for the three structures. In the pass-band region, the optimized structure has lower omni-directional reflectivity than the other structures which suggest a better angle-dependent transmittance.

3.2. TPV performance analysis

To analyze the TPV performance of the designed photonic structures, we consider a TPV system consisting of three devices, namely the thermal emitter, the optical filter and the photovoltaic cell. We assume the thermal emitter to be an



Fig. 4. Calculated spectral efficiency of periodic, modified periodic, optimized filters and blackbody source without any spectral filtering.

ideal blackbody (BB) separated from the filter by a thin air gap. Usually, the performance of an optical filter is characterized by its spectral efficiency $\eta_{sp}(T_{em})$ according to the relation

$$\eta_{sp}(T) = \frac{\int_{0}^{\lambda_{g}} F_{BB}(\lambda, T_{em}) - T(\lambda) d\lambda}{\int_{0}^{\infty} F_{BB}(\lambda, T_{em})(1 - -R(\lambda)) d\lambda}$$
(12)

where $F_{BB}(\lambda, T_{em})$ is the blackbody spectral radiation function at the emitter temperature T_{em} . $-T(\lambda)$ and $-R(\lambda)$ are, respectively the average angular transmittance and reflectance of the filter from the radiator towards the cell. Therefore

$$-T(\lambda) = \int_{0}^{\pi/2} \left(T_{TE}(\lambda, \theta) + T_{TM}(\lambda, \theta) \right) \cos\theta \sin\theta d\theta$$
(13)

$$-R(\lambda) = \int_{0}^{\pi/2} \left(R_{TE}(\lambda,\theta) + R_{TM}(\lambda,\theta) \right) \cos\theta \sin\theta d\theta$$
(14)

where T_{TE} and R_{TE} (resp., T_{TM} and R_{TM}) are the calculated transmittance and reflectivity for TE polarization (resp. for TM polarization), and θ is the angle of incidence. The spectral efficiency expresses the ratio of the transmitted power below the bandgap wavelength to the total emitted power that reaches the filter-photovoltaic-cell system.

For an ideal filter, all the emitted photons of wavelength below λ_g are transmitted to the cell $(-T(\lambda \le \lambda_g) = 1)$ while the other photons are perfectly reflected $(-R(\lambda > \lambda_g) = 1)$ to the emitter, resulting in $\eta_{sp} = 1$. Achieving such an ideal spectral control is not possible; however we will show that our structures can reach acceptable performance. In Fig. 4 we depicted the spectral efficiencies versus temperature of the periodic, modified-periodic and optimized filters, and also for a blackbody source without any spectral filtering. First, we observe an increasing trend of all the curves as the emittertemperature increases. Second, we notice that by comparing to the no-filter case, our photonic structures achieve high spectral efficiencies, ranging from 45% to 75% in the temperature-range of interest. Here we should mention that similar performance has been reached for SiO₂/Si photonic crystals, while neglecting the absorption losses in the filter (-R = 1 - -T) [12–14]. Finally, taking the temperature of 1500K as reference, the optimized filter exhibits an enhancement of 4.4% (resp. 3%) in comparison to periodic (resp. modified-periodic) filter. This enhancement is an increasing function of temperature.



Fig. 5. Effective above-bandgap transmission at normal incidence for of periodic, modified periodic, optimized filters.

Another relevant figure-of-merit is the effective transmission at normal incidence which is expressed by

$$\tau_{\perp} = \frac{\int\limits_{0}^{\lambda_{g}} F_{BB}(\lambda, T_{em}) T(\lambda) d\lambda}{\int\limits_{0}^{\lambda_{g}} F_{BB}(\lambda, T_{em}) d\lambda}$$
(15)

i.e the ratio of the below- λ_g power transmitted through the filter, and the power transmitted through an ideal filter. In Fig. 5 the effective transmissions of our structures versus temperature are displayed. It is shown that with increasing temperature, the effective transmissions decrease. Finally, among the whole filters, the optimized filter gives the highest effective transmission due to its superior optical performance.

4. Conclusion

In conclusion, we have designed and analyzed three different 1D photonic crystals, i.e. quarter-wave-periodic, modifiedperiodic and optimized stacks, to be used in thermophotovoltaic systems. The optimization has been done by combining the transfer matrix method and the pattern search algorithm. The proposed optimized structure exhibits significant improvement of optical performance and spectral efficiency.

References

- [1] R. Miloua, Z. Kebbab, F. Chiker, M. Khadraoui, K. Sahraoui, A. Bouzidi, Peak, multi-peak and broadband absorption in graphene-based one-dimensional photonic crystal, Opt. Commun. 330 (2014) 135–139.
- [2] R. Kakimi, M. Fujita, M. Nagai, M. Ashida, T. Nagatsuma, Capture of a terahertz wave in a photonic-crystal slab, Nat. Photonics 8 (2014) 657–663.
- [3] Z.V. Vardeny, A. Nahata, Amit Agrawal, Optics of photonic quasicrystals, Nat. Photonics 7 (2013) 177–187.
- [4] L. Dal Negro, S.V. Boriskina, Deterministic aperiodic nanostructures for photonics and plasmonics applications, Laser Photonics Rev. 6 (2) (2012) 178–218.
- [5] M. Florescu, S. Torquato, P.J. Steinhardt, Designer disordered materials with large, complete photonic band gaps, PNAS 106 (49) (2009) 20658–20663.
- [6] T.J. Coutts, An overview of thermophotovoltaic generation of electricity, Sol. Energy Mater. Sol. Cells 66 (2001) 443–452.
- [7] H.Y. Lee, T. Yao, Design and evaluation of omnidirectional one-dimensional photonic crystals, J. Appl. Phys. 93 (2) (2003) 819-830.
- [8] G. Kiziltas, L.J. Volakis, N. Kikuchi, Design of a frequency selective structure with inhomogeneous substrates as a thermophotovoltaic filter, IEEE Trans. Antennas Propag. 53 (7) (2005) 2282–2289.
- [9] L. Mao, H. Ye, New development of one-dimensional Si/SiO2 photonic crystals filter for thermophotovoltaic applications, Renew. Energy 35 (2010) 249–256.
- [10] S.I. Mostafa, N.H. Rafat, S.A. El-Naggar, One-dimensional metallic-dielectric (Ag/SiO2) photonic crystals filter for thermophotovoltaic applications, Renew. Energy 45 (2012) 245–250.
- [11] L.M. Fraas, J.E. Avery, H.X. Huang, R.U. Martinelli, Thermophotovoltaic system configurations and spectral control, Semicond. Sci. Technol. 18 (2003) 165–173.
- [12] F. O'Sullivan, I. Celanovic, N. Jovanovic, J. Kassakian, Optical characteristic of one dimensional Si/SiO2 photonic crystals for thermophotovoltaic applications, J. Appl. Phys. 97 (2005) 033529.
- [13] I. Celanovic, F. O'Sullivan, M. Ilak, J. Kassakian, D. Perreault, Design and optimization of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications, Opt. Lett. 29 (2004) 863–865.
- [14] I. Čelanovic, F. O'Sullivan, N. Jovanovic, M. Qi, J. Kassakian, 1D and 2D photonic crystals for thermophotovoltaic applications, Proc. SPIE 5450 (2004) 416–422.

- [15] P.L. Guang, X.Y. Min, G.H. Yu, L. Qian, Investigation of one-dimensional Si/SiO2 photonic crystals for thermophotovoltaic filter, Sci. China Ser. E Technol. Sci. 51 (11) (2008) 2031–2039.
- [16] F.K. Mbakop, N. Djongyang, D. Ra?dandi, One-dimensional TiO2/SiO2 photonic crystal filter for thermophotovoltaic applications, J. Eur. Opt. Soc.-Rapid Publ. 12 (23) (2016), http://dx.doi.org/10.1186/s41476-016-0026-4.
- [17] D.E. Aspnes, A.A. Studna, Dielectric functions and optical parameters of Si, Ge, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, and InSb from 1.5 to 6.0 eV, Phys. Rev. B 27 (1983) 985.
- [18] H.H. Li, Refractive index of alkaline earth halides and its wavelength and temperature derivatives, J. Phys. Chem. Ref. Data 9 (1980) 161–289.
- [19] R. Miloua, Z. Kebbab, F. Chiker, K. Sahraoui, M. Khadraoui, N. Benramdane, Determination of layer thickness and optical constants of thin films by using a modified pattern search method, Opt. Lett. 37 (4) (2012) 449-451.
- [20] M.F. AlHajri, K.M. El-Naggar, M.R. AlRashidi, A.K. Al-Othman, Optimal extraction of solar cell parameters using pattern search, Renew. Energy 44 (2012) 238-245.
- [21] Y. Fink, J. Winn, S. Fan, C. Chen, J. Michael, J. Joannopoulos, E. Thomas, A dielectric omnidirectional reflector, Science 282 (1998) 1679.
- [22] W.H. Southwell, Omnidirectional mirror design with quarter-wave dielectric stacks, Appl. Opt. 38 (25) (1999) 5464–5467.
- [23] C.C. Katsidis, D.I. Siapkas, General transfer-matrix method for optical multilayer systems with coherent, partially coherent, and incoherent interference, Appl. Opt. 41 (2002) 3978–3987.
- [24] M. Born, E. Wolf, Principles of Optics, Cambridge U. Press, Cambridge, 1999.
- [25] G.E.P. Box, Appl. Stat. 6 (1957) 81.
- [26] R. Hooke, T.A. Jeeves, J. ACM 8 (1961) 212.