



HAL
open science

Conception et optimisation de sources thermiques cohérentes pour applications thermo-photovoltaïques

E. Nefzaoui

► **To cite this version:**

E. Nefzaoui. Conception et optimisation de sources thermiques cohérentes pour applications thermo-photovoltaïques. Thermique [physics.class-ph]. Université de Poitiers, 2013. Français. NNT: . tel-00827557

HAL Id: tel-00827557

<https://theses.hal.science/tel-00827557v1>

Submitted on 29 May 2013

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



THÈSE

pour l'obtention du grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE POITIERS

ÉCOLE NATIONALE SUPÉRIEURE D'INGÉNIEURS DE POITIERS

(Diplôme National - Arrêté du 7 août 2006)

École doctorale : Sciences et Ingénierie en Matériaux, Mécanique, Énergétique et Aéronautique
Secteur de recherche : Énergétique, Thermique et Combustion

Présentée par

Elyes Nefzaoui

Conception et optimisation de sources thermiques cohérentes pour applications thermo-photovoltaïques

Directeur de thèse : **Pr. Karl Joulain**

Co-encadrant de thèse : **Dr. Jérémie Drevillon**

Soutenue le 8 mars 2013
devant la Commission d'Examen

JURY

Jean-Jacques GREFFET (rapporteur)	Professeur, Institut d'optique graduate School
Jean-François GUILLEMOLES (rapporteur)	Directeur de Recherche, IRDEP
Philippe BEN-ABDALLAH (examinateur)	Directeur de Recherche, Lab. Charles Fabry
Alain DOLLET (examinateur)	Directeur de Recherche, Lab. PROMES
Jérémie DREVILLON (examinateur)	Maître de Conférences, Université de Poitiers
Karl JOULAIN (examinateur)	Professeur, Université de Poitiers
Jean-Bernard SAULNIER (examinateur)	Professeur émérite, ENSMA

Remerciements

Je remercie tout d'abord ma famille et au premier chef mes parents, pour leur éducation et leurs efforts de tous les moments, sans lesquels, je ne serais très probablement pas entrain d'écrire ces lignes.

J'exprime toute ma gratitude à mon pays, la Tunisie, et tous mes concitoyens Tunisiens et Français qui, par leurs communs efforts, m'assurant d'abord une éducation publique et gratuite de qualité en Tunisie et finançant mes études en France par la suite, m'ont permis d'arriver à ce niveau de qualification et de compétence. J'espère avoir un jour l'occasion de m'acquitter de cette dette.

Plus récemment, je remercie M. Jean-Bernard Saulnier, mon premier enseignant de transferts de chaleur à l'École Nationale Supérieure de Mécanique et d'Aérotechnique (ENSMA) de Poitiers qui, par ses cours passionnants, sa rigueur et son enthousiasme, a été déterminant dans mon choix de la voie de la recherche, d'abord, et de mon domaine de spécialisation ensuite. Je le remercie également pour avoir accepté de présider mon jury de thèse. Je remercie MM. Alain Dollet et Philippe Ben Abdallah d'avoir accepté d'en faire partie. Je remercie finalement MM. Jean-François Guillemoles et Jean-Jacques Greffet d'avoir accepté la lourde tâche de rapporter mon mémoire.

Mes remerciements les plus affectueux vont ensuite à Dr. Olivier Skurtys qui m'a accompagné pour mes premiers pas dans le monde de la recherche.

Je remercie ensuite, Karl JOULAIN d'avoir accepté d'encadrer cette thèse. Ce fut un honneur de travailler avec et sous la direction d'un homme et d'un chercheur de sa qualité. Je le remercie pour sa disponibilité, sa générosité et son sens du partage et de la solidarité ainsi que son soutien à des moments particulièrement difficiles que j'ai pu traverser durant les trois dernières années.

Je remercie également Jérémie Dréviillon d'avoir accepté de co-encadrer cette thèse. Je le remercie pour sa disponibilité, son écoute et son respect d'un jeune chercheur qui se cherche, de son accompagnement bienveillant et ses conseils fort utiles tout au long de ces trois années.

Je remercie mes collègues de l'Institut Pprime, du département D2 et plus particulièrement de l'axe Transferts aux nano-échelles et rayonnement : Vital, Younès, Myriam, Hamou et Hélène. Je remercie mes collègues doctorants pour leur soutien ainsi que mes collègues de l'ENSIP, enseignants, enseignants chercheurs et administratifs.

Je remercie les amis que j'ai eu la chance de rencontrer à Poitiers. Sans être exhaustif : Ahmed, Antoine, Catherine, Claudine, Clémence, Hajer, Houcem, Kuba, Louis, Marco, Paola et les autres. Je remercie également les copains des différentes associations et structures auxquelles j'ai pris part durant mes années à Poitiers, et qui m'ont donné l'occasion de donner du sens

à ce que je fais. Par ordre chronologique : Méli-Mélo, l'AFEVE, le Toit du Monde, Réseau Éducation Sans Frontières, le cinéma Le Dietrich, les Rencontres Internationales Henri Langlois et le Snesup.

Je remercie bien évidemment les amis de toujours pour leur soutien et leur constance : Abdou, Adel, Amani, Amine, Arwa, Emna, Insaf, Jacem, Leila, MS et Raed.

Finalement, je tiens à remercier Pascale pour son indéfectible soutien, son accompagnement, sa générosité et son affection tout au long de ce chemin parcouru depuis plusieurs années.

Poitiers, le 22 mai 2013

Elyes NEFZAOUI.

Résumé

Le thermo-photovoltaïque (TPV), conversion du rayonnement thermique par des cellules photovoltaïques (PV), est un dispositif qui a suscité un intérêt croissant depuis deux décennies, notamment pour son efficacité supérieure à celle de la conversion photovoltaïque classique. Ceci est essentiellement dû à l'accord entre le spectre du rayonnement de la source thermique et le spectre de conversion de la cellule PV. Les rendements maximaux sont obtenus pour des sources thermiques cohérentes, émettant dans une gamme spectrale étroite, énergétiquement au-dessus de l'énergie de la bande interdite de la cellule PV. On propose dans ce travail d'appliquer une méthode d'optimisation stochastique, en l'occurrence l'optimisation par essaims de particules, pour concevoir et optimiser de telles sources. On aboutit alors à des structures unidimensionnelles simples, à base de films minces de diélectriques, de métaux et de semi-conducteurs. Les propriétés radiatives de ces sources, stables pour des températures allant jusqu'à 1000 K, sont aisément contrôlables à l'aide de paramètres simples comme les épaisseurs des films ou la concentration de dopage. Finalement, on propose une étude d'optimisation paramétrique des propriétés optiques des matériaux susceptibles de maximiser l'échange radiatif en champ proche entre deux milieux plans semi-infinis. Cette étude aboutit à un outil pratique, sous forme d'abaques, permettant de guider le choix des matériaux pertinents afin de maximiser les puissances au même temps que l'efficacité des systèmes TPV nanométriques.

Mots clés : thermo-photovoltaïque, conversion, énergie, rayonnement, optimisation, source thermique, émetteur sélectif, nanotechnologie.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Introduction aux transferts de chaleur	5
2.1	Introduction	6
2.2	Équation de la chaleur	7
2.3	Conduction	7
2.4	Convection	8
2.5	Rayonnement	9
2.5.1	Rayonnement du corps noir	10
2.5.2	Corps réels	13
2.5.3	Échange entre deux corps	14
2.5.4	Ondes électromagnétiques	16
2.5.5	Lumière et matière	22
2.5.6	Calcul en champ lointain	30
2.5.7	Calcul en champ proche	36
2.6	Conclusion	41
3	La conversion d'énergie radiative	47
3.1	Introduction	48
3.2	Le thermo-photovoltaïque	48
3.2.1	Le photovoltaïque	48
3.2.2	Le thermo-photovoltaïque	51
3.3	Modèle	54
3.3.1	Modèle électrique	54
3.3.2	Modèle thermique	56
3.4	Quelques dispositifs d'optimisation	58
3.4.1	Le convertisseur	59
3.4.2	Le medium	62
3.4.3	La source	63
3.4.4	Limites théoriques de rendement d'un système TPV	64
3.5	Conclusion	69

4	Méthodes d'optimisation pour problèmes difficiles	77
4.1	Introduction	77
4.2	Problèmes difficiles	78
4.3	Quelques méta-heuristiques	81
4.3.1	Algorithmes génétiques	81
4.3.2	Essaims de particules	86
4.4	Conclusion	93
5	Émetteurs sélectifs en champ lointain	99
5.1	Introduction	100
5.2	État de l'art	100
5.2.1	Surfaces nanostructurées : les réseaux de surface	101
5.2.2	Structures multi-couches	101
5.2.3	Structures hybrides	105
5.3	Conception et optimisation	106
5.3.1	Problème à résoudre	106
5.3.2	Résultats	107
5.3.3	Stabilité des solutions	117
5.4	Conclusion	128
6	Vers des puissances ultimes de systèmes TPV : transfert en champ proche	133
6.1	Introduction	133
6.2	Formalismes	135
6.2.1	Formulation exacte : flux total	135
6.2.2	Formulation approchée	136
6.3	Optimisation	139
6.3.1	État de l'art	139
6.3.2	Résultats	141
6.4	Conclusion	152
7	Conclusions	159
A.	Coefficients de Fresnel pour la polarisation s	163
B.	Propriétés optiques des matériaux à haute température	165
.1	Modèle de Drude : exemple du silicium dopé	165
.2	Modèle de Lorentz : exemple du SiC	169
.3	Modèles empiriques	171
.3.1	Germanium	171
.3.2	Silicium	172

C. Cacul numérique du dilogarithme (Li_2)	179
.1 Définition	180
.2 Algorithme	180

Nomenclature

Abréviations

CN	Corps noir
cond	Conductif
conv	Convectif
CP	Champ proche
CP	Cristal photonique
ES	Émetteur sélectif
evan	Contribution évanescente
LMH	Largeur à mi-hauteur
prop	Contribution propagative
PV	photovoltaïque
rad	Radiatif
TPV	Thermo-photovoltaïque

Lettres grecques

α	Coefficient d'absorption	m^{-1}
α	Coefficient volumique d'expansion thermique	K^{-1}
α	Polarisabilité	$\text{C.m}^2.\text{V}^{-1}$
β	Différence de marche à la traversée d'un film mince	–
ϵ	Emissivité	–
ϵ	Permittivité diélectrique relative	–
ϵ_∞	Limite haute fréquence de la permittivité diélectrique	–
η	Rendement	–
Γ	Coefficient d'amortissement	rad.s^{-1}
γ	Composante normale (à l'interface) du vecteur d'onde	m^{-1}

κ	Coefficient d'extinction	–
λ	Conductivité thermique	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ	Longueur d'onde	m
μ	Perméabilité magnétique relative	–
ν	Fréquence	s^{-1}
Ω	Angle solide	Sr
ω	Pulsation	rad.s^{-1}
ω_0	Pulsation des phonons optiques transverses	rad.s^{-1}
ω_i	Facteur de pondération d'une composante de la vitesse d'une particule, $i \in \{1, 2, 3\}$	–
ω_p	Pulsation plasma	rad.s^{-1}
ω_{LO}	Pulsation des phonons optiques longitudinaux	rad.s^{-1}
ω_{TO}	Pulsation des phonons optiques transverses	rad.s^{-1}
Φ	Densité volumique (ou surfacique) de flux	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-3}$
ϕ	Angle azimutal	rad
Π	Vecteur de Poynting	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-2}$
ρ	Densité volumique de charges électriques	C.m^{-3}
ρ	Masse volumique	kg.m^{-3}
ρ	Réflexivité	–
σ	Conductivité électrique	S.m^{-1}
σ	Constante de Stefan	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{K}^{-4}$
$\tau(\omega, q)$	Coefficient de transmission d'un mode (ω, q)	–
Θ	Énergie moyenne d'un oscillateur harmonique	J
θ	Angle d'émission ou angle zénithal	rad

Lettres latines

B	Induction magnétique	V.s.m^{-2}
D	Déplacement électrique	A.m^{-1}
E	Champ électrique	V.m^{-1}
G	Tenseur de Green	–
H	Champ magnétique	A.m^{-1}
J	Densité de courant électrique	A.m^{-2}

j	Densité de courant fluctuant	A.m^{-2}
k	Vecteur d'onde	m^{-1}
P	Moment dipolaire	C.m
r	Vecteur position dans l'espace réel	m
v	Vecteur vitesse dans un espace de recherche	–
x	Vecteur position dans un espace de recherche	–
A	Aire	m^2
\mathcal{E}	Espace de recherche	–
J	Matrice de transfert à travers une structure à plusieurs films	–
\mathcal{V}	Volume	m^3
\tilde{r}	Coefficient de réflexion en amplitude d'une structure à deux interfaces et plus	–
\tilde{t}	Coefficient de transmission en amplitude d'une structure à deux interfaces et plus	–
A	Coefficient d'absorption en intensité	–
c	Célérité de la lumière	m.s^{-1}
C_p	Chaleur spécifique	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
D	Dimension de l'espace de recherche	–
d	Distance	m
E_i	Énergie d'un niveau i	eV
F	Facteur de forme	–
f	Fonction objectif	–
g_0	Quantum de conduction	$\text{J.s}^{-1}.\text{K}^{-1}$
h	Coefficient d'échange thermique	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{K}^{-1}$
h	Constante de Planck	$\text{m}^2.\text{kg.s}^{-1}$
h^0	Dérivée par rapport à la température de la fonction de Planck	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{K}^{-1}$
i	Angle d'incidence	–
k_b	Constante de Boltzmann	$\text{m}^2.\text{kg.s}^{-2}.\text{K}^{-1}$
L_λ	Luminance énergétique monochromatique (également L_ν et L_ω d'unité différente)	$\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-3}.\text{Sr}^{-1}$
M	Emittance	$\text{J.s}^{-1}.\text{s}^{-3}$
N	Nombre d'unités d'un système (particules d'un niveau d'énergie, porteurs libres dans un matériau dopé, films d'une structure multi-couche, particules d'un essaim, itérations d'un algorithme, etc.)	–

n, \tilde{n}	Indice de réfraction réel et complexe	–
P	Puissance	J.s^{-1}
P_{jk}	Matrice de passage du champ EM du milieu j vers le milieu k	–
P_j	Matrice de propagation du champ EM dans le milieu j	–
Q	Densité de flux d'électrons	$\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
Q	Facteur de qualité	–
Q	Quantité de chaleur par unité de volume	J.m^{-3}
q	Charge électrique élémentaire	C
q	Composante tangentielle du vecteur d'onde	m^{-1}
R	Coefficient de réflexion en intensité	–
r_i	Facteur de pondération aléatoire d'une composante de la vitesse d'une particule, $i \in \{1, 2\}$	–
r_{jk}	Coefficient de Fresnel pour la réflexion sur l'interface des milieux $j - k$	–
T	Coefficient de transmission en intensité	–
T	Température	K
t	Angle de réfraction	–
t	Temps	s
t_{jk}	Coefficient de Fresnel pour la transmission à l'interface des milieux $j - k$	–
u	Densité d'énergie électromagnétique	J.m^{-3}
u	Pulsation réduite	–
V	Différence de potentiel	V
W	Densité spectrale de puissance	J
x	Paramètre quelconque dans un problème d'optimisation	–
FF	Facteur de forme d'une cellule photovoltaïque	–
R	Résistance thermique	$\text{K.J}^{-1}.\text{s.m}^2$

Indices

1, 2	Numéro du milieu dans un système hétérogène (plusieurs films, plans, etc.)
∞	Limite pour les grandes distances (pour v et T), pour les haute fréquences (pour ϵ)
e	Électrique
c	Cellule
g	gap, pour band-gap : bande interdite

Exposants

- i* Incident
- i* La polarisation, auquel cas $i \in \{p, s\}$
- p* Polarisation *p*, ou encore TM (Transverse Magnétique)
- s* Polarisation *s*, ou encore TE (Transverse Électrique)
- t* Transmis

Chapitre 1

Introduction

Les dernières décennies ont vu émerger des problématiques énergétiques inédites dues, d'une part, à des contraintes environnementales, et d'autre part, à une croissance de la demande telle, qu'elle rend la contrainte de la rareté des ressources sensiblement plus pressante. Ces problématiques ne trouvent pour l'instant pas de réponse consensuelle, sur le plan technique du moins. Dans l'attente d'un nouveau paradigme qui révolutionnerait notre utilisation de la ressource énergétique (Kuhn [1962])¹, deux paradigmes « classiques » gouvernent pour l'instant les travaux de recherche et développement (OCDE [1999]) :

- L'amélioration des technologies existantes à la recherche d'efficacités énergétiques croissantes,
- L'exploitation croissante de « nouvelles » sources d'énergie.

Les travaux sur la conversion photovoltaïque du rayonnement, qu'il soit solaire ou thermique, cristallisent remarquablement ces deux tendances. D'une part, la conversion photovoltaïque a connu depuis la mise au point de la jonction $p-n$, élément principal des convertisseurs actuels, des progrès continus qui ont fait passer les rendements des cellules mono-jonction en silicium sous rayonnement solaire direct de 5% en 1954 (Chapin et al. [1954]) à plus de 25% en 2012 (Green et al. [2012]). D'autre part, une déclinaison de la conversion photovoltaïque activement développée depuis une vingtaine d'années (Nelson [2003]), le thermo-photovoltaïque en l'occurrence, permet d'exploiter des gisements énergétiques inédits. En effet, la conversion du rayonnement thermique de sources quelconques, nombreuses dans les applications industrielles et domestiques, ouvre la voie à l'exploitation de ressources abondantes² et largement ignorées jusqu'à présent. C'est dans ce cadre que s'inscrit notre travail visant à concevoir des émetteurs sélectifs qui permettraient d'optimiser les performances d'applications thermo-photovoltaïques. L'utilisation de ces émetteurs n'aurait pas été imaginable sans les évolutions récentes dans dif-

1. Des changements capitaux dans la demande et la production (notamment la technologie de cette production) énergétiques à moyen terme (jusqu'en 2050) semblent toutefois exclus par les décideurs politiques et économiques (OCDE [1999]).

2. Pour avoir un ordre de grandeur, considérons les rendements moyens usuels des centrales électriques, qu'elles soient nucléaires ou thermiques : ces rendements dépassent de très peu les 30% (EIA [2012]). Plus de 60% de l'énergie primaire utilisée est ainsi « perdue » sous forme de chaleur. On peut voir dans celle-ci un gisement énergétique très important qui est parfois, quoique très peu, exploité, en cogénération par exemple.

férents domaines de la physique appliquée. D'une part, les récents progrès de la photonique grâce au développement des techniques de nano-fabrication (Baxter et al. [2009]) permettent désormais de façonner des objets de dimensions de l'ordre de la longueur d'onde du rayonnement thermique, voire de dimensions inférieures. Ceci permet d'imaginer et de fabriquer divers dispositifs de contrôle du rayonnement intéressant pour la conversion photovoltaïque, *i.e.* du rayonnement visible et dans le proche infrarouge. C'est le cas par exemple des émetteurs sélectifs en champ lointain qui feront l'objet du chapitre 5. D'autre part, la récente vérification expérimentale de l'exaltation du transfert thermique en champ proche (Kittel [2005]; Narayanaswamy et al. [2008]; Rousseau et al. [2009]), qui a suivi sa moins récente prédiction théorique de quelques décennies (Cravalho et al. [1967]; Polder and Van Hove [1971]), permet désormais d'envisager des puissances thermiques convertibles supérieures de plusieurs ordres de grandeurs aux puissances usuelles en champ lointain. Ceci fera l'objet du sixième et dernier chapitre. On présentera toutefois au préalable les outils nécessaires à l'obtention et à la compréhension des principaux résultats de ce rapport. Ces outils se déclinent en trois grandes catégories :

- Les concepts et outils physiques qui permettent de calculer les grandeurs pertinentes, notamment les propriétés optiques des émetteurs sélectifs et les flux radiatifs en champ proche et lointain. Cela fera l'objet du chapitre 2.
- Les outils et modèles nécessaires pour l'évaluation des puissances et des rendements des systèmes thermo-photovoltaïques utilisés avec les émetteurs sélectifs proposés, ainsi que les effets thermiques. Ce sera l'objet du chapitre 3.
- Finalement, le chapitre 4 portera sur les outils numériques, en l'occurrence sur les méthodes d'optimisation qui ont été utilisées pour la conception et l'optimisation des émetteurs sélectifs présentés : les algorithmes génétiques et la méthode d'optimisation par essaims de particules.

Bibliographie

- J. Baxter, Z. Bian, G. Chen, D. Danielson, M. S. Dresselhaus, A. G. Fedorov, T. Fisher, C. W. Jones, E. Maginn, U. Kortshagen, A. Manthiram, A. Nozik, D. Sholl, and Y. Wu. Nanoscale design to enable the revolution in renewable energy. *Energy Environ. Sci.*, 2 :559–588, 2009. [2](#)
- D. M. Chapin, C. S. Fuller, and G. L. Pearson. A New Silicon p–n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power. *J. Appl. Phys.*, (25) :676, 1954. [1](#)
- E. G. Cravalho, C. L. Tien, and R. P. Caren. Effect of small spacings on radiative transfer between two dielectrics. *J. Heat Transfer*, 89(4) :351–358, 1967. [2](#)
- U.S. EIA. *Annual Energy Review 2011*. Energy Information Administration, October 2 2012. [1](#)
- M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop. Solar cell efficiency tables (version 39). *Prog. Photovolt. : Res. Appl.*, 20(1) :12–20, 2012. [1](#)
- C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2005. [2](#)
- T.S. Kuhn. *The Structure of Scientific Revolutions*. University of Chicago Press, 1962. [1](#)
- A. Narayanaswamy, S. Shen, and G. Chen. Near-field radiative heat transfer between a sphere and a substrate. *Phys. Rev. B*, 78 :115303, 2008. [2](#)
- R. E. Nelson. A brief history of thermophotovoltaic development. *Semicond. Sci. Tech.*, 18(5) : S141, 2003. [1](#)
- OCDE. *Énergie : les cinquante prochaines années*. OECD Publishing, 1999. [1](#)
- D. Polder and M. Van Hove. Theory of radiative heat transfer between closely spaced bodies. *Phys. Rev. B*, 4 :3303–3314, 1971. [2](#)
- E. Rousseau, A. Siria, G. Jourdan, S. Voltz, F. Comin, J. Chevrier, and J-J. Greffet. Radiative heat transfer at the nanoscale. *Nat. Photon.*, 3 :514, 2009. [2](#)

Chapitre 2

Introduction aux transferts de chaleur

Sommaire

2.1	Introduction	6
2.2	Équation de la chaleur	7
2.3	Conduction	7
2.4	Convection	8
2.5	Rayonnement	9
2.5.1	Rayonnement du corps noir	10
2.5.1.1	Le corps noir	10
2.5.1.2	Grandeurs monochromatiques	10
2.5.1.3	Loi de déplacement de Wien	12
2.5.1.4	Grandeurs totales	12
2.5.1.5	Fractions d'émittance	13
2.5.2	Corps réels	13
2.5.2.1	Émissivité	13
2.5.2.2	Loi de Kirchhoff	14
2.5.3	Échange entre deux corps	14
2.5.3.1	Facteur de forme	14
2.5.3.2	Flux échangé	14
2.5.4	Ondes électromagnétiques	16
2.5.4.1	Spectre électromagnétique	16
2.5.4.2	Équations de Maxwell	17
2.5.4.3	Onde plane	17
2.5.4.4	Polarisation	18
2.5.4.5	Transport d'énergie, transport de chaleur	19
2.5.4.6	Cohérence	19
2.5.5	Lumière et matière	22
2.5.5.1	Quantification de l'énergie radiative	22

2.5.5.2	Approche corpusculaire	22
2.5.5.3	Absorption et émission : coefficients d'Einstein	23
2.5.5.4	Permittivité diélectrique et propriétés optiques	25
2.5.5.5	Interfaces et coefficients de Fresnel	26
2.5.5.6	Conservation d'énergie	29
2.5.6	Calcul en champ lointain	30
2.5.6.1	Réflexion et transmission sur / à travers un film mince	30
2.5.6.2	Structure multi-couche	32
2.5.7	Calcul en champ proche	36
2.5.7.1	Émission thermique : description statistique	36
2.5.7.2	Grandeurs énergétiques	36
2.5.7.3	Fonctions de Green	37
2.5.7.4	Théorème de fluctuation-dissipation	38
2.5.7.5	Émission d'une surface plane	39
2.5.7.6	Transfert entre deux plans	39
2.6	Conclusion	41

2.1 Introduction

On introduit dans ce chapitre les différents concepts physiques dont on aura besoin par la suite. On commencera par une présentation générale des différents modes de transfert de chaleur (Pour une présentation plus détaillée, cf. [Incropera et al. \[2001\]](#)) puisqu'en s'intéressant au thermo-photovoltaïque, il s'agit de convertir de la chaleur en électricité. Il convient alors, si on fait abstraction de l'origine de la chaleur en question, de bien décrire son transport entre la source et le convertisseur. Par ailleurs, la chaleur peut-être entendue comme « la manifestation d'un flux d'échange énergétique entre des éléments matériels contigus » ([Glansdorff \[2012\]](#)). La notion de chaleur est donc indissociable de celle d'échange. On accordera une importance particulière aux échanges radiatifs (Pour des ouvrages de références exhaustifs sur le sujet, cf. [Modest \[1993\]](#); [Siegel \[2001\]](#)) puisque, en photovoltaïque, à la différence d'autres techniques de conversion de chaleur en électricité, la thermoélectricité notamment, c'est de conversion du rayonnement qu'il s'agit.

L'objectif final de ce travail est de concevoir des structures permettant de contrôler l'émission d'un rayonnement convertible avec un rendement optimal. Pour cela, on introduira différentes notions d'électromagnétisme, nécessaires pour procéder aux calculs des propriétés radiatives des sources de rayonnement thermique et des quantités à optimiser par la suite. On veillera à présenter séparément les formalismes permettant de décrire le transfert en champ lointain et en champ proche afin de marquer la différence fondamentale entre ces deux échelles.

2.2 Équation de la chaleur

L'équation de la chaleur la plus générale donne la variation temporelle de la température d'un système en prenant en compte les différents flux échangés avec son environnement et les éventuelles sources de chaleur internes (effet joule dans un circuit électrique, réaction chimique de combustion, etc.). Elle s'écrit :

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot \Phi + Q \quad (2.1)$$

où ρ figure la masse volumique du système, C_p sa chaleur spécifique, T sa température, t le temps, Q la quantité de chaleur par unité de volume générée par d'éventuelles sources internes et Φ l'ensemble des densités surfaciques de flux thermiques échangés avec l'extérieur. Les échanges thermiques du système avec l'extérieur peuvent être de trois types : conductif, convectif ou radiatif.

2.3 Conduction

La conduction est un mode de transfert de chaleur qui intervient dans tout milieu matériel, qu'il soit solide ou fluide. Au niveau microscopique, la conduction peut être vue comme la transmission d'énergie de proche en proche, par chocs successifs, entre des « particules » voisines. Les particules qui assurent les échanges par conduction varient selon le type de matériau : atomes et molécules dominant dans les gaz, les électrons dominant dans les métaux alors que les phonons (quanta d'énergie de vibration du réseau cristallin) assurent la plus grande part des échanges dans les diélectriques. La modélisation de la conduction thermique nécessite donc d'évaluer les énergies des particules et des ensembles de particules en jeu et leurs différentes interactions. Macroscopiquement, il est possible d'exprimer le flux de chaleur conductif par une relation simple faisant intervenir une grandeur phénoménologique, la conductivité thermique¹ λ ($\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$) et le gradient de température entre les deux corps qui subissent l'échange ∇T . La densité de flux conductif est alors donnée par :

$$\Phi_{cond} = -\lambda \nabla T \quad (2.2)$$

Le signe négatif assure que le transfert de chaleur se fasse dans le sens inverse à celui du gradient de température, *i.e.* du corps « chaud » au « froid ». C'est la loi de Fourier de la conduction thermique, d'après le chercheur éponyme ([Fourier \[1822\]](#)). La conductivité thermique dépend généralement de la température. Le tableau 2.1 rapporte la conductivité thermique de quelques matériaux à température ambiante.

1. La conductivité thermique d'un matériau est une grandeur intrinsèque qui exprime le flux de chaleur traversant une portion de ce matériau longue de 1 mètre sous une différence de température de 1 kelvin entre ses deux extrémités.

Matériau	T (K)	λ (W.m ⁻¹ .K ⁻¹)
Air	300	0,0262
Eau	293,15	0,598
Cuivre	300	401
Argent	300	427
Or	300	314
Diamant (IIa)	300	2300

TABLE 2.1: Quelques ordres de grandeur de conductivité thermique de fluides, métaux et de diélectrique très conducteur. (Source : [Lide \[2007\]](#))

2.4 Convection

La convection est un mode de transfert de chaleur exclusif aux fluides en mouvement et à leurs interactions avec d'autres corps. On a précédemment présenté la conduction comme étant le résultat du mouvement microscopique des particules et de leurs interactions. Dans un fluide en mouvement macroscopique, en plus du transfert de chaleur par conduction, le déplacement d'ensemble de portions du fluide implique un transport macroscopique d'une quantité d'énergie associée à ces portions : c'est l'advection¹. La convection est la superposition des deux phénomènes de conduction et d'advection.

La densité de flux convectif peut être exprimée par une relation phénoménologique très similaire à celle donnant la densité de flux conductif (2.2). Cette relation fait intervenir une différence de température et un coefficient d'échange homogène à une conductivité thermique par unité de distance :

$$\Phi_{conv} = h\Delta T \quad (2.3)$$

h (W.m⁻².K⁻¹) figure le coefficient d'échange convectif et ΔT la différence de température entre les deux corps qui subissent l'échange. On doit cette formulation phénoménologique à Newton (1701) ([Ruffner \[1963\]](#)). Un cas d'école est l'écoulement sur une plaque plane (Figure 2.1). Loin de la paroi de la plaque, la température de l'écoulement est T_∞ . La température à la surface de la plaque est T_p . Entre ces deux températures, on observe une variation de la température sur une épaisseur du fluide (la couche limite thermique) de la même façon que la vitesse varie d'une valeur nulle à la paroi jusqu'à la vitesse moyenne de l'écoulement v_∞ assez loin de la paroi. Le coefficient d'échange est généralement déterminé par des corrélations établies expérimentalement et qui prennent en compte divers paramètres dont le type de fluide (eau, air, huiles, etc.), l'origine de la convection (forcée ou naturelle), la géométrie de l'écoulement, son régime (laminaire ou turbulent), etc. Les corrélations relient en général plusieurs nombres adimensionnés. En convection forcée par exemple, il s'agit du nombre de Nusselt $Nu = \frac{hL}{\lambda}$ (L

1. L'advection est le transport d'une quantité scalaire ou vectorielle, la chaleur en l'occurrence, par un champ vectoriel. C'est le cas de différentes propriétés de particules / ensemble de particules d'un fluide, notamment la chaleur, la quantité de mouvement, la concentration d'espèces, etc.

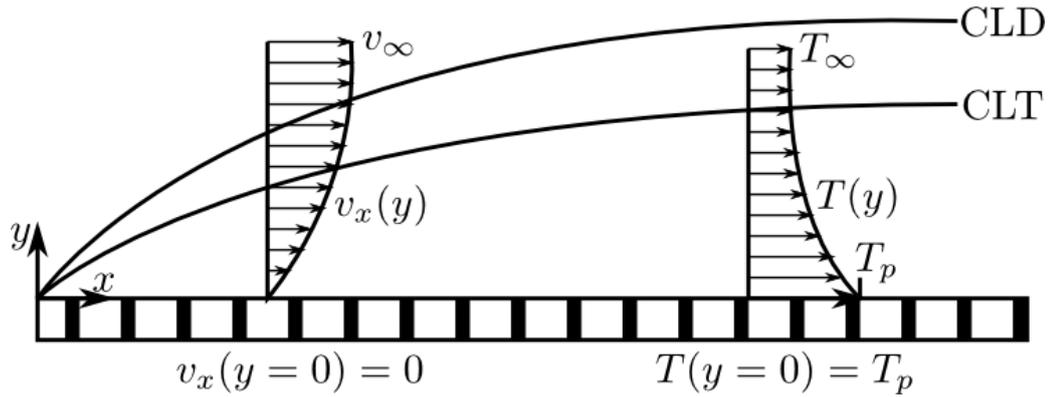


FIGURE 2.1: Couches limite dynamique (CLD) et thermique (CLT) dans un écoulement de plaque plane.

figure une grandeur caractéristique), du nombre de Prandtl $Pr = \frac{\nu}{\alpha}$ (où ν figure la viscosité cinématique et α la diffusivité thermique) et le nombre de Reynolds $Re = \frac{vL}{\nu}$ (v figure la vitesse de l'écoulement et L une grandeur caractéristique). Connaissant différentes propriétés thermo-physiques du fluide (sa conductivité thermique, sa viscosité cinématique, etc.), sa géométrie (L) et sa vitesse (v), on peut alors déterminer le coefficient d'échange (h) en calculant Nu . Des ordres de grandeur typiques de coefficients d'échange sont rapportés dans le tableau 2.2.

Mode	h (W.m ⁻² .K ⁻¹)	Réf.
naturelle	$\simeq 10$	Martinelli and Stefancich [2007]
forcée (air, $v = 4$ m.s ⁻¹)	$\simeq 140$	Martinelli and Stefancich [2007]
forcée avec chgt. de phase	$\simeq 1000$	Royne et al. [2005]

TABLE 2.2: Quelques ordres de grandeur de coefficient d'échange convectif.

2.5 Rayonnement

Le rayonnement est le seul mode de transfert de chaleur qui n'ait pas besoin de support matériel pour exister, *i.e.* qui peut opérer dans le vide. Par conséquent, ce mode est prépondérant dans des conditions de vide poussé (un satellite dans l'espace par exemple). Par ailleurs, à la différence des deux autres modes de transfert de chaleur, on verra par la suite que, dans le cas le plus général, le flux radiatif n'est pas proportionnel une différence de température. On montre qu'en raison de cette dépendance non linéaire à la température, le transfert radiatif devient prépondérant par rapport aux autres modes de transfert lorsque des températures élevées sont en jeu.

2.5.1 Rayonnement du corps noir

2.5.1.1 Le corps noir

En rayonnement thermique, un corps noir (CN) est un corps hypothétique idéal défini comme étant le corps qui absorbe tout rayonnement incident. Comme on verra par la suite que les propriétés d'émission, d'absorption, de réflexion et de transmission sont liées, le CN est également le corps qui, à une température T , émet plus de rayonnement que tout autre corps à la même température. Il est opaque, ne transmet pas de rayonnement et n'en réfléchit pas.

2.5.1.2 Grandeurs monochromatiques

Loi de Planck

La distribution spectrale de l'intensité du rayonnement thermique d'un corps noir à la tem-

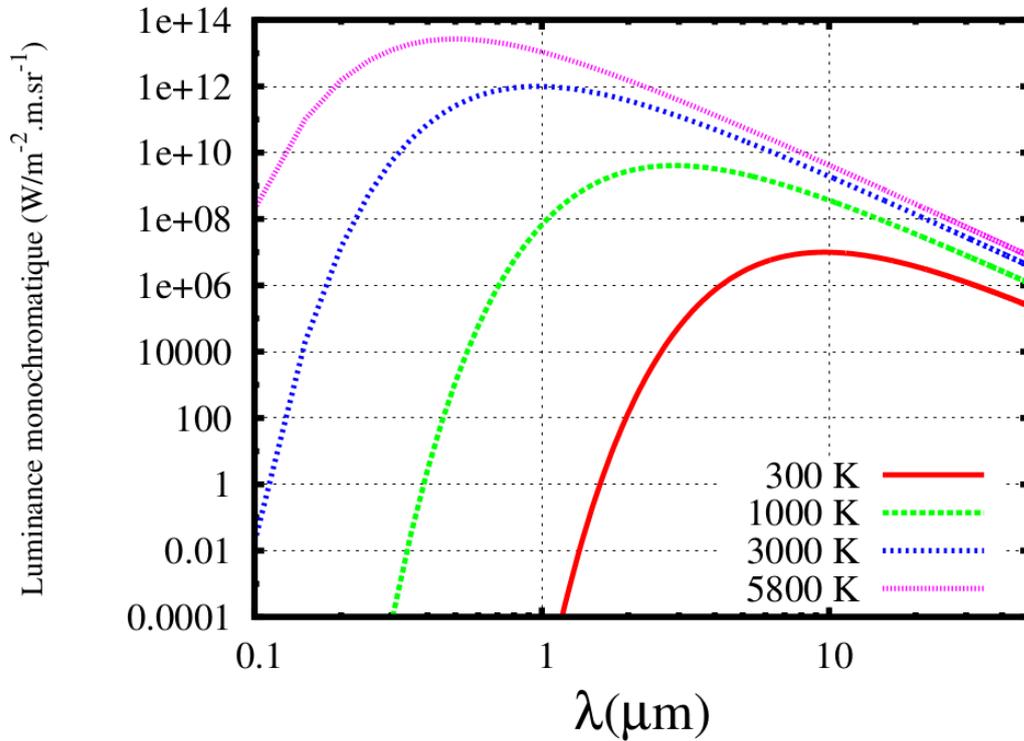


FIGURE 2.2: Luminance énergétique monochromatique d'un corps noir à différentes températures.

pérature T et à la fréquence ν , ou encore luminance monochromatique, est donnée par la loi de Planck (Planck and Masius [1914]) :

$$L_{\nu}^0(T) = \frac{2h\nu^3}{c^2} \frac{1}{\exp\left(\frac{h\nu}{k_b T}\right) - 1} \quad (2.4)$$

où $h = 6,62 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-1}$ est la constante de Planck et $k_b = 1,38 \times 10^{-23} \text{ m}^2 \cdot \text{kg} \cdot \text{s}^{-2}$ et c la célérité de la lumière. La figure 2.2 représente la luminance énergétique monochromatique

d'un corps noir à différentes températures. La température de 5800 K correspond à celle de la photosphère solaire. On observe :

- Un décalage vers le rouge du spectre du corps noir lorsque T diminue.
- Une augmentation de la luminance à toutes les longueurs d'onde lorsque T augmente. Les courbes de luminance de deux corps noirs à deux températures différentes ne se croisent jamais.
- Le rayonnement du CN couvre une gamme spectrale de plus en plus large lorsque la température de ce dernier diminue.
- Deux comportements différents de part et d'autre du maximum d'émission. En effet : Pour les petites longueurs d'onde, la luminance augmente exponentiellement en fonction de la longueur d'onde (Approximation de Wien). Au delà du maximum de luminance, elle diminue comme l'inverse de la puissance quatrième de la longueur d'onde (Loi de Rayleigh-Jeans).

Ces considérations sont de premier ordre et on y aura recours à plusieurs reprises pour interpréter les résultats concernant le rendement et la puissance d'un système photovoltaïque puisque ces grandeurs sont directement déterminées par le spectre du rayonnement à convertir.

Émittance monochromatique

La loi de Planck (expression 2.4) exprime la densité d'énergie par unité de surface et par unité d'angle solide émise par un corps noir dans un intervalle spectral $d\lambda$ et dans une direction donnée. Afin d'obtenir la densité d'énergie émise par un CN dans un demi espace dans un intervalle spectral, on définit l'émittance monochromatique hémisphérique par :

$$M_{\lambda}^0(T) = \int_{\text{demi-espace}} L_{\lambda}^0(T) \quad (2.5)$$

$$= \int_{\phi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} L_{\lambda}^0(T) \cos(\theta) d\Omega \quad (2.6)$$

où θ figure la direction d'émission et $d\Omega$ l'angle solide infinitésimal en stéradian donné en coordonnées sphériques par $d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\phi$ où ϕ est l'angle azimutal.

Loi de Lambert

Si l'émission est isotrope, *i.e.* que la luminance est indépendante de la direction, l'intégrale précédente devient :

$$M_{\lambda}^0(T) = 2\pi \int_{\theta=0}^{\frac{\pi}{2}} L_{\lambda}^0(T) \cos(\theta) \sin(\theta) d\theta = \pi L_{\lambda}^0(T) \quad (2.7)$$

C'est la loi de Lambert. Un CN obéit à la loi de Lambert.

2.5.1.3 Loi de déplacement de Wien

Le décalage vers le rouge du spectre du rayonnement d'un CN lorsque la température diminue, relevé au paragraphe précédent, implique trivialement un déplacement du pic d'intensité vers les plus grandes longueurs d'onde. La loi de déplacement de Wien ([Wien and Lummer \[1895\]](#)), donna, avant même la formulation de la loi de Planck, une relation empirique entre la température du CN et la position du maximum d'intensité :

$$\lambda_m T = 2898 \mu m.K \quad (2.8)$$

où λ_m figure la longueur d'onde du maximum de luminance en microns et T la température du CN en kelvin.

2.5.1.4 Grandeurs totales

Luminance totale

En intégrant la loi de Planck sur tout le spectre, on obtient la densité d'énergie radiative émise par un CN par unité d'angle solide dans une direction donnée. C'est la luminance totale donnée par :

$$L^0(T) = \int L_\lambda^0 d\lambda \quad (2.9)$$

Emittance totale

De même, l'intégrale de l'émittance sur tout le spectre donne la densité surfacique d'énergie émise par un CN dans un demi-espace. C'est l'émittance totale donnée par :

$$M^0(T) = \int M_\lambda^0(T) d\lambda \quad (2.10)$$

L'émittance totale obéit également à la loi de Lambert. On a alors $M^0(T) = \pi L^0(T)$.

Loi de Stefan-Boltzmann

L'émittance totale est par ailleurs donnée par une expression simple en fonction de la température, obtenue expérimentalement par Stefan ([Stefan \[1879\]](#)) en premier lieu puis confirmée théoriquement en utilisant la loi de Planck. C'est la loi de Stefan-Boltzmann :

$$M^0(T) = \sigma T^4 \quad (2.11)$$

où $\sigma = \frac{\pi^2 k_B^4}{60c^2 h^3} \simeq 5,67 \times 10^{-8} \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$.

2.5.1.5 Fractions d'émittance

Il est utile dans plusieurs applications de connaître, étant donnée la distribution spectrale du rayonnement d'un CN (loi de Planck 2.4), la gamme spectrale couverte par le rayonnement thermique, ou une partie de celui-ci. On définit la fraction spectrale $F(\lambda_1, T)$ comme la portion du rayonnement émis par un CN à la température T entre $\lambda = 0$ et une longueur d'onde λ_1 par rapport au rayonnement total émis. Elle est donnée par :

$$F(\lambda_1, T) = \frac{\int_0^{\lambda_1} L_\lambda^0(T) d\lambda}{\int_0^\infty L_\lambda^0(T) d\lambda} \quad (2.12)$$

F dépend clairement de λ_1 et de T . Un changement de variable $X = \lambda_1 T$ mène facilement à une fonction à une seule variable $F(X = \lambda_1 T)$. Le tableau 2.3 en donne quelques valeurs remarquables. Des tables plus détaillées sont disponibles dans la littérature (Moran et al. [2003]). On peut relever plusieurs valeurs remarquables : 25% du rayonnement thermique se fait avant le

$\lambda_1 T$ ($\mu\text{m.K}$)	F	$\lambda_1 T$ ($\mu\text{m.K}$)	F	$\lambda_1 T$ ($\mu\text{m.K}$)	F
1400	0,007790	4200	0,516014	8000	0,856288
2200	0,100888	4800	0,607559	13000	0,955139
2898	0,250108	5600	0,701046	25000	0,992215
3600	0,403607	6200	0,754140	100000	0,999905
3800	0,443382	7000	0,808109	∞	1

TABLE 2.3: Quelques ordres de grandeur de coefficient d'échange convectif.

maximum d'émission ($\lambda_1 T = 2898$)¹. Par ailleurs, 95% du rayonnement se fait entre $\lambda_1 T = 1400$ et $\lambda_1 T = 13000$, *i.e.* entre $0,5\lambda_m$ et $\lambda \simeq 4,5\lambda_m$, c'est ce qu'on appelle « partie utile » du spectre d'un CN.

2.5.2 Corps réels

2.5.2.1 Émissivité

Le CN défini ci-dessus est le corps idéal en rayonnement. Un corps réel non-idéal, rayonnera nécessairement moins qu'un corps noir. On appelle émissivité monochromatique directionnelle (pour une direction n), le rapport, inférieur ou égal à l'unité, de la luminance monochromatique du corps considéré $L_{\lambda,n}^1(T)$ par celle du CN $L_{\lambda,n}^0(T)$:

$$\epsilon(\lambda, n, T) = \frac{L_{\lambda,n}^1(T)}{L_{\lambda,n}^0(T)} \quad (2.13)$$

1. **Application au rayonnement solaire :** le rayonnement solaire peut-être modélisé par le rayonnement d'un CN à $T = 5800$ K. 65% de ce rayonnement est émis entre $\lambda = 0$ et $\lambda = 1,1 \mu\text{m}$, longueur d'onde de la bande interdite du silicium cristallin. Sans considérations plus poussées, il est clair, qu'avec une cellule photovoltaïque classique en silicium cristallin, on ne peut dépasser un rendement de 65% alors que le rendement idéal de Carnot entre deux systèmes à $T_s = 5800$ K et à $T_c = 300$ K (on considère la cellule à température ambiante), donné par $\eta = 1 - \frac{T_c}{T_s}$, est de 94%.

On peut définir de la même façon, une émissivité monochromatique hémisphérique ($\frac{M_\lambda^1(T)}{M_\lambda^0(T)}$), totale directionnelle ($\frac{L_n^1(T)}{L_n^0(T)}$) ou totale hémisphérique ($\frac{M^1(T)}{M^0(T)}$).

2.5.2.2 Loi de Kirchhoff

Absorption et émission de rayonnement par un corps quelconque sont les deux facettes du même phénomène microscopique : la transition d'un système (atome, molécule, électron, phonon, etc.) d'un état énergétique à un autre. En absorbant du rayonnement, le système acquiert de l'énergie et en perd lors de l'émission. A l'équilibre thermodynamique, la probabilité de ces transitions, à une certaine température et pour une longueur d'onde donnée, est la même dans un sens ou dans l'autre (absorption ou émission). Cette propriété a été traduite quantitativement dans la loi dite de Kirchhoff (Kirchhoff [1860]) :

$$\epsilon_\lambda = \alpha_\lambda \quad (2.14)$$

Par linéarité de l'intégration, cette relation reste vraie pour l'émittance monochromatique.

2.5.3 Échange entre deux corps

2.5.3.1 Facteur de forme

On considère deux éléments de surface dA_1 et dA_2 séparés par une distance r . Ces deux surfaces rayonnent dans tout l'espace. dA_2 reçoit uniquement une partie du rayonnement émis par dA_1 . Le rapport de cette partie par le rayonnement émis par dA_1 dans tout l'espace est donné par le facteur de forme :

$$F_{1 \rightarrow 2} = \frac{\cos(\theta_1)\cos(\theta_2)}{\pi r^2} dA_2 \quad (2.15)$$

où θ_1 et θ_2 figurent l'angle que fait le segment liant dA_1 et dA_2 avec leurs normales respectives, \mathbf{n}_1 et \mathbf{n}_2 (Figure 2.3).

D'après la définition 2.15, il vient trivialement que

$$F_{1 \rightarrow 2} dA_1 = F_{2 \rightarrow 1} dA_2 \quad (2.16)$$

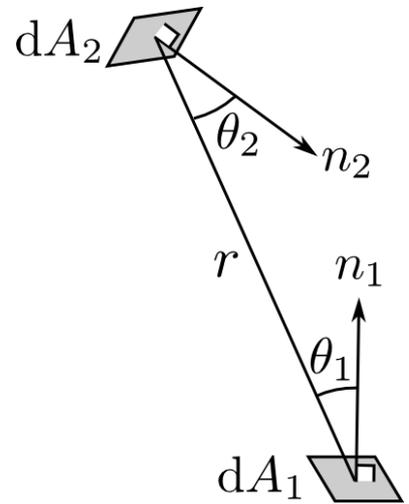


FIGURE 2.3: Facteurs de forme

C'est la relation de réciprocité des facteurs de forme.

2.5.3.2 Flux échangé

L'équation 2.11 donne le flux émis par unité de surface d'un CN à la température T . Pour obtenir le flux échangé entre deux CN aux températures T_1 et T_2 , en supposant un facteur de forme égal à l'unité (par exemple deux plans semi-infinis parallèles séparés d'une distance d),

il suffit d'écrire la différence des flux émis par chaque CN. Il vient :

$$\Phi_{rad} = \sigma(T_1^4 - T_2^4) \quad (2.17)$$

$$= \sigma(T_1 - T_2)(T_1^3 + T_2T_1^2 + T_1T_2^2 + T_2^3) \quad (2.18)$$

Pour les faibles écarts de températures $T_2 - T_1$, la relation précédente peut être linéarisée :

$$\Phi_{rad} = 4\sigma T_1^3(T_1 - T_2) \quad (2.19)$$

Par ailleurs, afin de comparer les échanges radiatifs avec les échanges conductif et convectif précédemment présentés, on peut définir un coefficient d'échange radiatif par :

$$h_{rad} = \frac{\Phi_{rad}}{T_1 - T_2} \quad (2.20)$$

$$= \sigma(T_1^3 + T_2T_1^2 + T_1T_2^2 + T_2^3) \quad (2.21)$$

En supposant la température T_2 constante, h_{rad} augmente comme T_1^3 . La figure 2.4 présente ce « coefficient d'échange radiatif » en fonction de la différence de température $\Delta T = T_1 - T_2$ (On fixe ici $T_2 = 300$ K), ainsi que des ordres de grandeur du coefficient d'échange convectif rapportés au tableau 2.2. On observe que les échanges radiatifs supplantent très rapidement

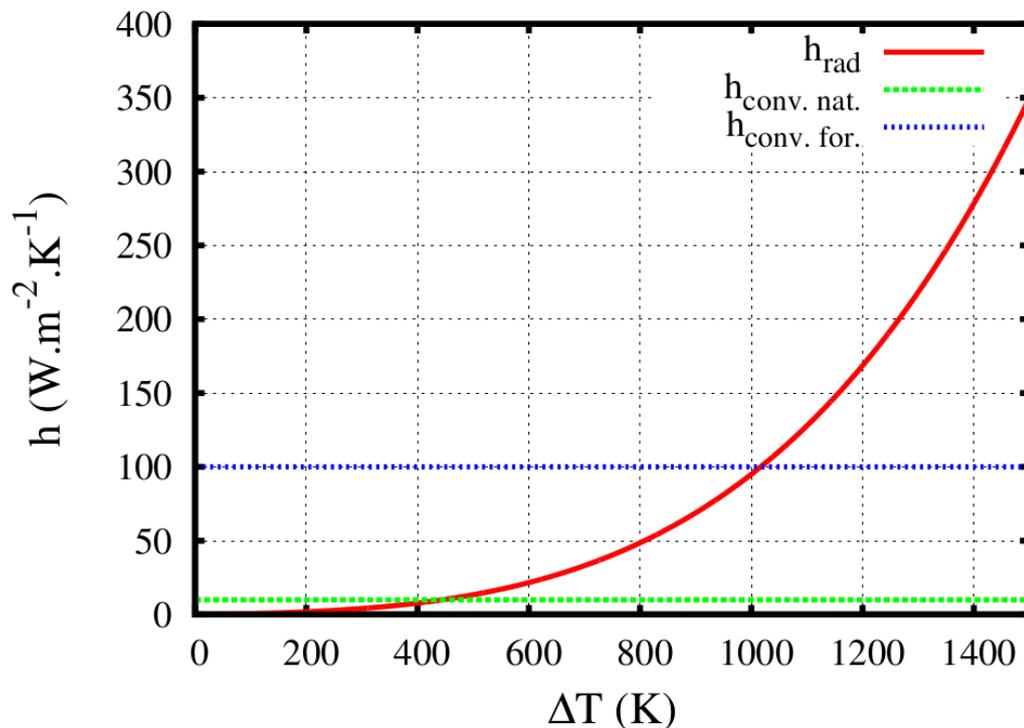


FIGURE 2.4: Comparaison des coefficients d'échange radiatif, convectif et conductif.

la convection naturelle, à partir de $\Delta T \simeq 400$ K et n'égalent les échanges par convection forcée qu'à partir de $\Delta T \simeq 1000$ K. Pour les différences de température considérées ici (jusqu'à

$\Delta T = 1500 \text{ K}$), on est loin d'égaliser les échanges convectifs avec changement de phase ($h = 1000 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$) ou encore les échanges par conduction dans les meilleurs conducteurs ($h = 401$ et $h = 2300 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$ pour le cuivre et le diamant respectivement)¹.

2.5.4 Ondes électromagnétiques

Il n'est pas question ici de donner un cours d'électromagnétisme complet mais d'introduire les notions dont on fera usage de façon récurrente dans la suite. Pour plus de détails, il est possible de trouver dans Slater and Frank [2011] un texte d'initiation très abordable et un cours complet dans Pérez et al. [2001].

2.5.4.1 Spectre électromagnétique

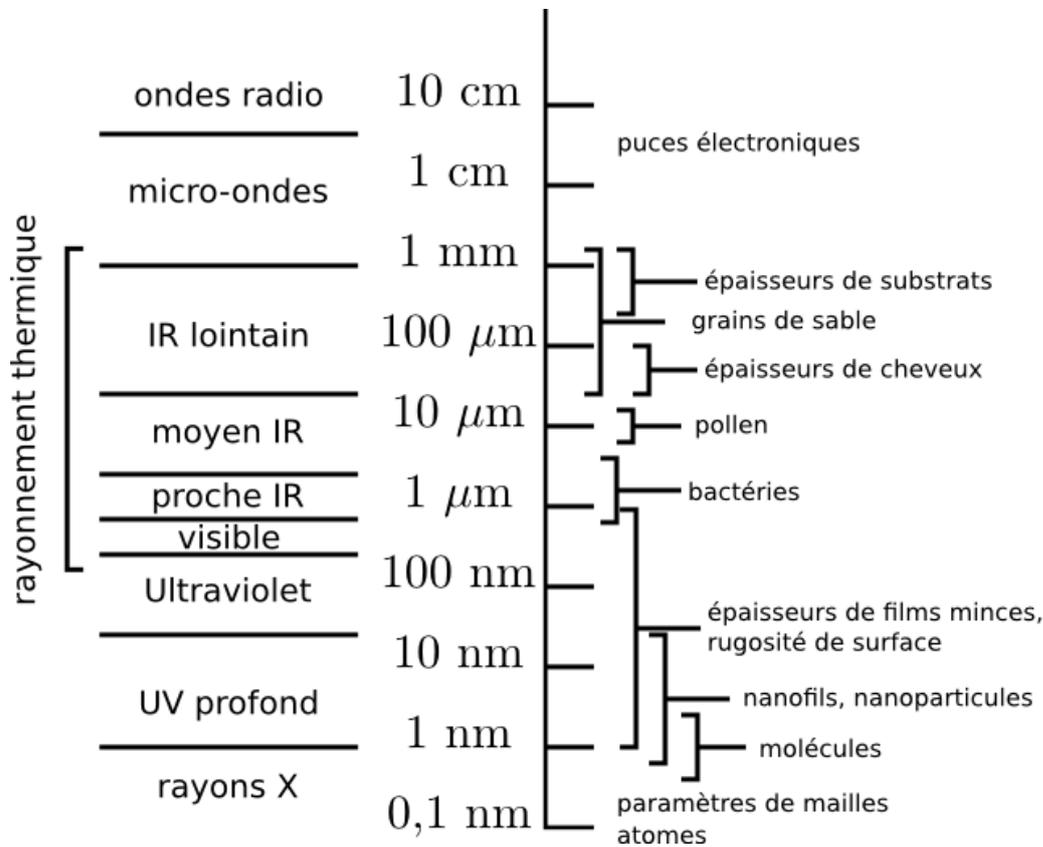


FIGURE 2.5: Spectre électromagnétique et longueurs caractéristiques. (D'après Zhang [2007])

Le rayonnement thermique émis par un CN, et *a fortiori*, par un corps quelconque à l'équilibre thermodynamique à une température donnée se fait, d'après la distribution de Planck (paragraphe 2.5.1.2), sur tout le spectre électromagnétique puisque tous les modes sont présents dans

1. On considère ici les valeurs des conductivités thermiques (cf. Tableau 2.1) bien que la conductivité soit un « coefficient d'échange linéique » et non pas surfacique comme c'est le cas en convection. Il suffit de considérer la conduction dans une plaque plane de $1 \times 1 \text{ m}$ pour se ramener à un coefficient d'échange surfacique.

cette distribution. Or, dans la pratique, l'essentiel de ce rayonnement se fait sur une zone restreinte du spectre, dite « spectre utile » (paragraphe 2.5.1.5). La position de ce spectre utile dépend évidemment de la température du corps en question. Pour une température du corps rayonnant entre 6000 K et 300 K, ce spectre utile peut couvrir une gamme spectrale allant du domaine ultraviolet $\lambda = 0,2 \mu\text{m}$ au lointain infrarouge $\lambda = 43 \mu\text{m}$. La figure 2.5 présente les longueurs d'onde correspondant à différentes régions du spectre électromagnétique ainsi que des longueurs caractéristiques équivalentes. Le développement récent de techniques de fabrication de structures de l'échelle de la longueur d'onde du rayonnement thermique voire sub-longueur d'onde, a ouvert la voie aux applications visant le contrôle de ce type de rayonnement.

2.5.4.2 Équations de Maxwell

Le rayonnement thermique, comme tout rayonnement électromagnétique, est régi par les équations de Maxwell qui relient champ électrique \mathbf{E} , champ magnétique \mathbf{H} , déplacement électrique \mathbf{D} , densité de flux magnétique \mathbf{B} , densité volumique de charges ρ et densité de courant \mathbf{J} :

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.22)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad (2.23)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho_e \quad (2.24)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.25)$$

s'ajoutent à ce jeu d'équations, deux relations constitutives¹. Dans un milieu linéaire isotrope, elles peuvent s'écrire :

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad (2.26)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H} \quad (2.27)$$

où ϵ et μ figurent la permittivité diélectrique et la perméabilité magnétique du milieu respectivement. L'équation de continuité 2.28 quant à elle, peut être facilement obtenue à partir des équations de Maxwell, notamment les équations 2.24 et 2.25.

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0 \quad (2.28)$$

2.5.4.3 Onde plane

Dans un milieu linéaire (ϵ et μ indépendants de l'intensité du champ), homogène (ϵ et μ indépendants de la position), non-dissipatif (ϵ et μ réels), non-magnétique ($\mu = \mu_0$ où μ_0 est la perméabilité du vide) et non conducteur ($\sigma = 0$), *i.e.* dans un diélectrique, la combinaison des

1. En présence d'un moment dipolaire non nul \mathbf{P} , \mathbf{D} est donné par $\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} + \mathbf{P}$ (Slater and Frank [2011]).

equations de Maxwell et des relations constitutives mène à l'équation d'onde 2.29 :

$$\Delta \mathbf{E} = \mu\epsilon \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} \quad (2.29)$$

qui admet comme solution, dans l'hypothèse de l'onde plane¹ monochromatique ($\omega = cte$) le champ donné par la relation 2.30 (Zhang [2007]).

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \quad (2.30)$$

où \mathbf{E}_0 figure l'amplitude du champ électrique, ω la pulsation de l'onde monochromatique, t le temps, \mathbf{k} le vecteur d'onde qui pointe vers la direction de propagation et qui a pour norme $|\mathbf{k}| = \frac{\omega}{c}$ le nombre d'onde et \mathbf{r} le vecteur position.

La notation complexe est généralement utilisée car elle simplifie les calculs. Le champ électrique est toutefois donné par la partie réelle de \mathbf{E} . L'injection de l'expression 2.30 de \mathbf{E} dans les équations de Maxwell, sachant qu'en notation complexe, les opérateurs $\nabla \cdot$ et $\frac{\partial}{\partial t}$ se ramènent à une multiplication par $i\mathbf{k}$ et $-\omega$ respectivement, donne (Zhang [2007]) :

$$\mathbf{k} \times \mathbf{E} = \omega\mu\mathbf{H} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{k} \times \mathbf{H} = -\omega\epsilon\mathbf{E} \quad (2.32)$$

On en déduit que \mathbf{k} , \mathbf{E} et \mathbf{H} forment un triplet orthogonal direct.

2.5.4.4 Polarisation

On a montré au paragraphe précédent, que la solution des équations de Maxwell, sous certaines hypothèses, donne un champ EM tel que \mathbf{k} , \mathbf{E} et \mathbf{H} forment un triplet orthogonal direct. \mathbf{E} peut alors toujours être exprimé dans une base quelconque (\mathbf{a}, \mathbf{b}) du plan orthogonal à \mathbf{k} . D'après l'expression 2.30, $(E_a(t), E_b(t))$, les coordonnées de \mathbf{E} dans cette base, ont une dépendance sinusoïdale en fonction du temps.

Dans le cas le plus général, le rayon vecteur \mathbf{E} balaie une ellipse. On dit que l'onde est polarisée elliptiquement. Dans le cas particulier où (\mathbf{a}, \mathbf{b}) est orthogonale et où les amplitudes maximales des deux composantes de \mathbf{E} sont égales, *i.e.* $E_{a,max} = E_{b,max}$, l'onde est dite polarisée circulairement car \mathbf{E} balaie un cercle.

Dans le cas où l'une des coordonnées (E_a, E_b) est constamment nulle, \mathbf{E} est toujours colinéaire au vecteur de la base correspondant à la coordonnée non nulle. On dit que l'onde est polarisée linéairement.

Pour la décomposition de \mathbf{E} , on a « naturellement » choisi de travailler dans le plan orthogonal à \mathbf{k} puisqu'il contient \mathbf{E} et \mathbf{B} . Or, il est d'usage et également « naturel », lorsqu'on s'intéresse à une onde incidente sur une surface, de se référer au plan d'incidence (\mathbf{k}, \mathbf{n}) où \mathbf{n} figure la normale à la surface en question. La composante de \mathbf{E} contenue dans ce plan, est dite polarisée p (p

1. C'est une onde dont les fronts d'onde, *i.e.* les surfaces équi-phase, sont des plans infinis.

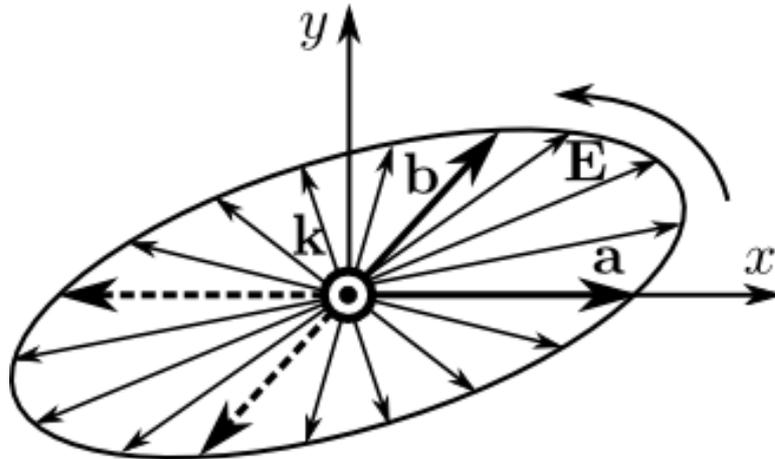


FIGURE 2.6: Polarisation elliptique d'une onde électromagnétique (d'après Zhang [2007]).

pour parallèle au plan) ou transverse magnétique (**TM**), et la composante perpendiculaire à ce plan est dite polarisée *s* (*s* pour *senkrecht*, perpendiculaire en allemand) ou encore transverse électrique (**TE**). A cause de son origine aléatoire, le rayonnement thermique est généralement non polarisé. Dans ce cas, le champ EM est la moyenne arithmétique sur les deux états de polarisation possibles (Zhang [2007]).

2.5.4.5 Transport d'énergie, transport de chaleur

La densité d'énergie transportée par une onde électromagnétique et sa direction de propagation sont données par la norme et la direction du vecteur de Poynting $\mathbf{\Pi}$, défini par (Poynting [1884]) :

$$\mathbf{\Pi} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{\mu_0} \quad (2.33)$$

Avec la notation complexe introduite précédemment pour l'onde plane monochromatique, la moyenne temporelle du vecteur de Poynting est donnée par :

$$\langle \mathbf{\Pi} \rangle = \frac{1}{2\mu_0} \text{Re}(\mathbf{E} \times \mathbf{B}^*) \quad (2.34)$$

où \mathbf{B}^* figure le vecteur conjugué du vecteur champ magnétique complexe.

$\langle \mathbf{\Pi} \rangle$ est homogène à un flux surfacique. L'expression 2.34 appliquée au champ EM du rayonnement thermique donne la densité de flux de chaleur correspondante.

2.5.4.6 Cohérence

Initialement définie et utilisée en optique, la notion de cohérence exprime la tendance du champ en différents points « espace-temps », à avoir des valeurs corrélées (Glauber [1963]). En optique ondulatoire, cela se traduit par la capacité de deux ondes issues de deux points

« espace-temps » différents d'interférer. Dans ce cas, les deux ondes considérées sont cohérentes si elles gardent un déphasage constant au cours du temps. Plus généralement, la notion de cohérence exprime la corrélation entre deux grandeurs physiques. On en présente ici quelques définitions qualitatives largement inspirées du traitement exhaustif de [Mandel and Wolf \[1995\]](#).

Cohérence temporelle

La cohérence temporelle exprime la corrélation entre la valeur d'une onde en un point donné à

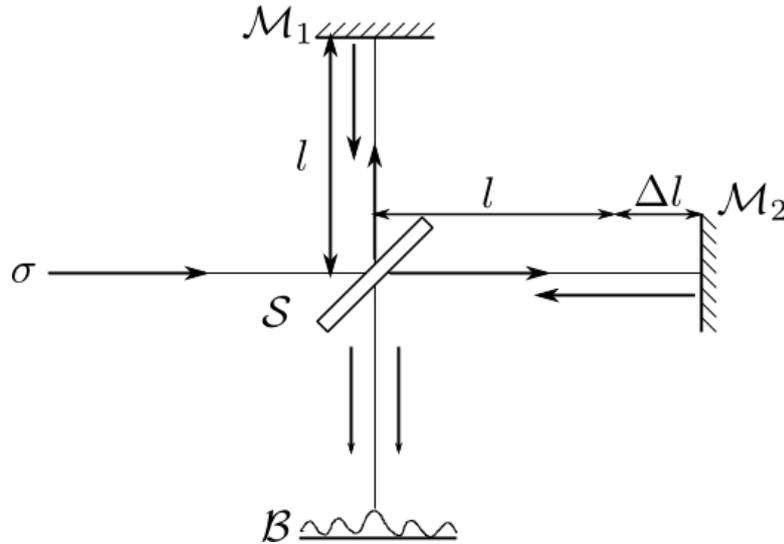


FIGURE 2.7: Illustration de la définition de cohérence temporelle avec une expérience d'interférences par un interféromètre de Michelson.

un instant t , et sa valeur au même point après un délai Δt , à l'instant $t + \Delta t$. Une expérience d'interférométrie avec un interféromètre de Michelson (Figure 2.7) est couramment présentée pour illustrer une manifestation de cohérence temporelle ([Glauber \[2007\]](#); [Mandel and Wolf \[1995\]](#)). Considérons un faisceau de lumière quasi-monochromatique, *i.e.* qui vérifie $\frac{\Delta\nu}{\nu} \ll 1$, et macroscopiquement stationnaire, divisé en deux dans une telle expérience. Le deuxième faisceau parcourt une longueur supplémentaire $\Delta l = c\Delta t$ par rapport au premier, où c figure la célérité de la lumière dans le vide. Si la différence de marche Δl est suffisamment petite, des franges d'interférence sont observées. C'est la manifestation d'une cohérence temporelle. Il est par ailleurs expérimentalement connu que des franges d'interférences apparaissent lorsque la condition 2.35, une sorte de principe d'incertitude de Heisenberg complémentaire, est remplie ([Mandel and Wolf \[1995\]](#)).

$$\Delta t \Delta\nu \leq 1 \quad (2.35)$$

où $\Delta\nu$ figure la largeur spectrale (en terme de fréquences) du rayonnement considéré.

Le délai maximal Δt pour lequel le phénomène d'interférences est observé est dit *temps de*

cohérence et vérifie :

$$\Delta t \sim \frac{1}{\Delta\nu} \quad (2.36)$$

La différence de marche correspondante Δl est par la suite appelée *longueur de cohérence longitudinale*, à ne pas confondre avec la notion d'aire de cohérence utilisée en cohérence spatiale. Elle est donnée par :

$$\Delta l = c\Delta t \sim \frac{c}{\Delta\nu} \quad (2.37)$$

Elle peut également être exprimée en fonction de la longueur d'onde par :

$$\Delta l \sim c \left(\frac{\bar{\lambda}}{\Delta\lambda} \right) \bar{\lambda} \quad (2.38)$$

où $\bar{\lambda}$ et $\Delta\lambda$ figure la longueur d'onde moyenne d'émission et la largeur spectrale respectivement.

Cohérence spatiale

La cohérence spatiale exprime, quant à elle, la corrélation entre la valeur d'une onde à tout instant en deux points distincts x et $x + \Delta x$ d'une source étendue. L'expérience des fentes d'Young (Figure 2.8) est habituellement proposée pour illustrer ce type de cohérence à travers un phénomène d'interférences (Glauber [2007]; Mandel and Wolf [1995]). Considérons une source

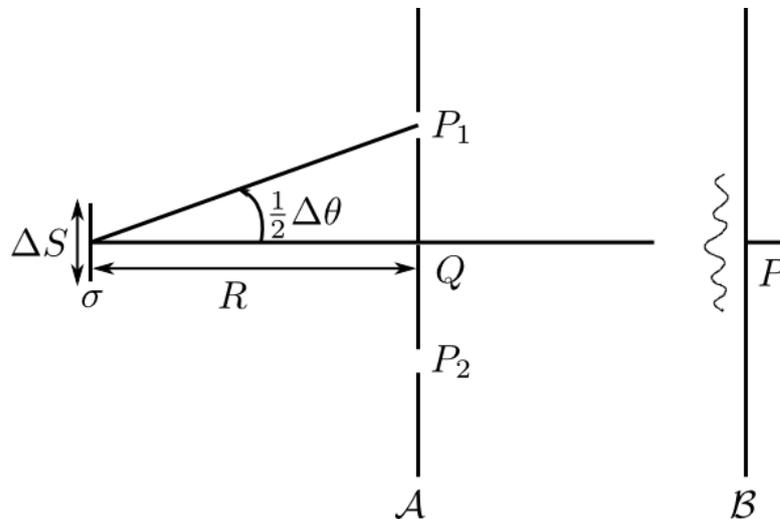


FIGURE 2.8: Illustration de de la définition de cohérence spatiale à travers une expérience des fentes d'Young.

thermique σ , de surface carrée de coté Δs . A une distance R de celle-ci, est positionné un plan \mathcal{A} muni de deux fentes P_1 et P_2 symétriques par rapport à σ . Un plan d'observation \mathcal{B} est situé au delà de \mathcal{A} . L'apparition de franges d'interférence sur le plan d'observation \mathcal{B} dépend de la distance des fentes au plan de symétrie Q , médian de la source et orthogonal à \mathcal{A} . Au delà d'une certaine surface $\Delta\mathcal{A}$ centrée sur Q , aucune interférence ne peut-être observée. $\Delta\mathcal{A}$ est la

surface de cohérence donnée par la relation 2.39 (Mandel and Wolf [1995]).

$$\Delta\mathcal{A} \sim (R\Delta\theta)^2 \sim \frac{R^2\bar{\lambda}^2}{S} \quad (2.39)$$

ou encore

$$\Delta\mathcal{A} \sim \frac{\bar{\lambda}^2}{\Delta\Omega} \quad (2.40)$$

où $\Omega = \frac{S}{R^2}$ figure l'angle solide et $\bar{\lambda}$ la longueur d'onde moyenne d'émission.

La démonstration des expressions des différentes grandeurs de cohérence à partir de fonctions d'auto-corrélation du champ EM utilisant le théorème de Wiener-Khintchine¹ est présentée dans Mandel and Wolf [1995].

2.5.5 Lumière et matière

On a présenté aux paragraphes précédents des éléments de la théorie électromagnétique du rayonnement, qui nous seront utiles par la suite pour calculer les propriétés radiatives d'émetteurs sélectifs. Dans les cas précédents, on s'est souvent intéressé à la description du rayonnement dans le vide. Or, dans bon nombre d'applications, notamment le photovoltaïque et le thermo-photovoltaïque, il s'agit d'interaction entre lumière et matière, notamment, d'absorption et d'émission de la première par la deuxième. On présente aux prochains paragraphes, des concepts physiques ainsi que des outils permettant de décrire ces interactions.

2.5.5.1 Quantification de l'énergie radiative

Malgré l'observation macroscopique que toute quantité d'énergie radiative peut être absorbée ou émise, Planck [1901] montra que l'émission et l'absorption de radiation se fait par des valeurs discrètes, multiples du quanta élémentaire d'un rayonnement à la fréquence ν :

$$E = h\nu \quad (2.41)$$

h est la constante de Planck.

2.5.5.2 Approche corpusculaire

On s'est intéressé jusqu'à présent à une description électromagnétique du rayonnement capable de rendre fidèlement compte de résultats expérimentaux, notamment en optique où l'on s'intéresse généralement à l'intensité du rayonnement, *i.e.* à des valeurs moyennées. Or, « malgré l'accord parfait de la théorie de Maxwell avec l'expérience, l'utilisation de fonctions spatialement continues pour décrire la lumière peut mener à des contradictions avec des expériences,

1. Le théorème de Wiener-Khintchine (Khintchine [1934]; Wiener [1930]) relie la densité spectrale de puissance et la transformée de Fourier de la fonction d'auto-corrélation d'un processus aléatoire stationnaire.

particulièrement lorsqu'il s'agit de génération et de transformation de la lumière comme dans le rayonnement de corps noir, la photoluminescence, \dots » (Einstein [1905a]). Einstein, insatisfait de cette description, en plus d'adopter l'idée de quantification de l'énergie radiative de Planck, proposa une description corpusculaire du rayonnement électromagnétique : l'énergie électromagnétique est transportée par des particules, de masse nulle, et par paquets d'une valeur indivisible $h\nu$. Cela lui permit à l'époque de donner la première explication satisfaisante de l'effet photoélectrique. Par la suite, Louis de Broglie généralisa ce double aspect onde-particule des ondes électromagnétiques à tout type de particule/onde (de Broglie [1924]). A toute particule de quantité de mouvement, ou impulsion, \mathbf{p} , et de masse m , on peut associer une pulsation $\omega = 2\pi\nu$ qui vérifie :

$$\hbar\omega = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} \quad (2.42)$$

où $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

2.5.5.3 Absorption et émission : coefficients d'Einstein

L'émission et l'absorption de rayonnement par la matière peuvent être très simplement modélisées à l'aide de la représentation corpusculaire proposée par Einstein. Considérons un système simple à deux niveaux d'énergie $E_a \leq E_b$ avec N_a et N_b les populations des deux niveaux a et b respectivement. Lorsque le système absorbe un rayonnement d'une fréquence ν tel que $h\nu \geq \Delta E = E_b - E_a$, il passe du niveau fondamental E_a au niveau excité E_b . Inversement, une transition du système du niveau excité au niveau fondamental peut avoir lieu spontanément et s'accompagne de l'émission d'un photon d'une énergie ΔE . Elle peut également être induite par un rayonnement incident. Les probabilités de l'occurrence d'une

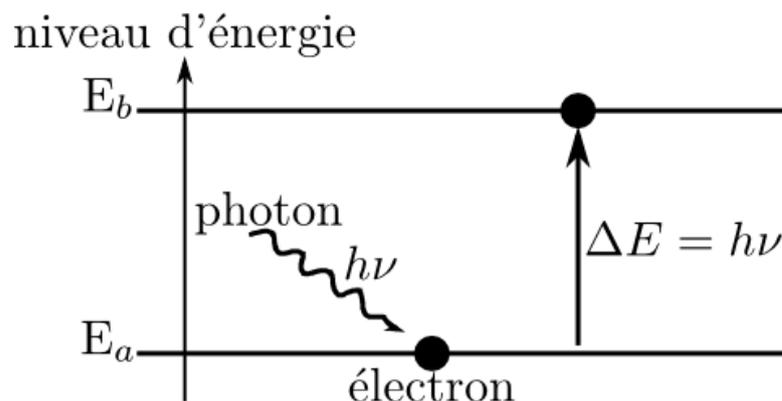


FIGURE 2.9: Absorption d'un photon par un système électronique à deux niveaux.

transition dans un sens ou dans l'autre, induite ou spontanée, sont exprimées par les coefficients d'Einstein pour l'absorption et l'émission (Einstein [1916]). Ici, comme dans le papier fondateur d'Einstein, ils seront considérés comme des coefficients phénoménologiques. Il peuvent toutefois être retrouvés par des raisonnements de mécanique quantique (Loudon [2000]).

Absorption

La conservation de l'énergie est contradictoire avec un passage spontané d'un électron de l'état fondamental E_a à l'état excité E_b . En effet, cette transition ne peut avoir lieu qu'avec l'intervention d'un rayonnement apportant la différence d'énergie ΔE . On dit que c'est une transition induite. On note $B_{ab} \langle u(\omega) \rangle$ la probabilité par unité de temps que cette transition ait lieu. On suppose cette probabilité proportionnelle à la densité de puissance du rayonnement $\langle u(\omega) \rangle$ à la pulsation ω . Le nombre de transitions induites de E_a vers E_b par unité de temps est alors donné par $N_a B_{ab} \langle u(\omega) \rangle$.

Émission

Contrairement à l'absorption, une transition du niveau excité au niveau fondamental peut avoir lieu spontanément, accompagnée de l'émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega = \Delta E$ pour satisfaire la conservation de l'énergie. La probabilité par unité de temps de l'occurrence de cette transition est notée A_{ba} . Le nombre de transitions spontanées de b vers a par unité de temps est donné par $N_b A_{ba}$.

Une transition similaire, du niveau excité au niveau fondamental, peut également avoir lieu, induite par un rayonnement EM incident et est également accompagnée par l'émission d'un photon d'énergie $\hbar\omega$. C'est l'émission induite ou stimulée. Sa probabilité d'occurrence par unité de temps est notée $B_{ba} \langle u(\omega) \rangle$. Elle est également proportionnelle à la densité de puissance du rayonnement à la pulsation considérée. le nombre de ces transitions par unité de temps est donné par $N_b B_{ba} \langle u(\omega) \rangle$

Population d'états

L'équation 2.43 permet, en utilisant les coefficients d'Einstein, de décrire l'évolution temporelle des populations d'états N_a et N_b dans chacun des deux niveaux E_a et E_b respectivement.

$$\frac{dN_a}{dt} = -\frac{dN_b}{dt} = A_{ba}N_b - B_{ab} \langle u(\omega) \rangle N_a + B_{ba} \langle u(\omega) \rangle N_b \quad (2.43)$$

A l'équilibre, il vient :

$$A_{ba}N_b - B_{ab} \langle u(\omega) \rangle N_a + B_{ba} \langle u(\omega) \rangle N_b = 0 \quad (2.44)$$

d'où

$$\langle u(\omega) \rangle = \frac{A_{ba}N_b}{B_{ab}N_a - B_{ba}N_b} \quad (2.45)$$

En l'absence d'énergie radiative autre que celle du rayonnement thermique, il vient

$$\langle u_T(\omega) \rangle = \frac{A_{ba}N_b}{B_{ab}N_a - B_{ba}N_b} \quad (2.46)$$

où $\langle u_T(\omega) \rangle$, figure la densité de puissance du rayonnement thermique. En supposant que la densité d'états dans chaque niveau, à la température T , soit donnée par la distribution de Boltzmann ¹(Boltzmann [1866]), on obtient une expression de la densité spectrale de puissance radiative très similaire à la loi de Planck (expression 2.4). La consistance de l'expression 2.46 avec cette dernière donne ² (Loudon [2000]) :

$$\begin{cases} B_{ab} = B_{ba} \\ (h\omega^3/\pi^2c^3)B_{ba} = A_{ba} \end{cases} \quad (2.47)$$

On en déduit d'une part, que les trois processus d'émission et d'absorption sont liés, et d'autre part, que l'émission stimulée, bien que non triviale à premier abord, est indispensable pour la consistance de la théorie d'Einstein avec la loi de Planck.

Pour un traitement détaillé de ces coefficients et de leurs propriétés, voir Loudon [2000].

2.5.5.4 Permittivité diélectrique et propriétés optiques

Un diélectrique soumis à un champ électrique acquiert un moment dipolaire (Feynman et al. [1963]; Slater and Frank [2011]). Ce moment, noté \mathbf{P} , est dû soit au déplacement d'électrons libres sous l'influence du champ externe, soit à l'orientation uniforme sous l'effet du champ appliqué de dipôles électriques préexistants dans la matière, mais aléatoirement orientés en son absence. Dans un diélectrique isotrope, il est proportionnel au champ appliqué. Il s'écrit alors :

$$\mathbf{P} = \alpha \mathbf{E} \quad (2.48)$$

où α est la polarisabilité du matériau considéré. Elle exprime la tendance des charges libres ou des dipôles présents dans la matière à se réorganiser sous l'effet d'un champ électrique extérieur. \mathbf{P} peut être lié aux charges polarisées ρ_p , *i.e.* qui apparaissent dans le matériau considéré sous l'effet du champ électrique externe, par la relation 2.49 (Slater and Frank [2011]).

$$\nabla \cdot \mathbf{P} = -\rho_p \quad (2.49)$$

On rappelle par ailleurs une relation de base en électromagnétisme, celle du théorème de Gauss qui lie champ électrique et densité volumique de charges :

$$\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho \quad (2.50)$$

1. La distribution de Boltzmann donne la distribution des états d'un système de particules à l'équilibre thermodynamique à une température T assez élevée, ou une densité assez basse, pour négliger les interactions entre particules. Selon cette distribution, le nombre moyen n_i de particules occupant des états ayant une énergie E_i est donné par $n_i = \frac{n}{Z(T)} g_i \exp(\frac{-E_i}{k_B T})$ où $n = \sum_i n_i$ est le nombre total de particules, g_i la dégénérescence de l'état i , *i.e.* le nombre d'états ayant pour énergie E_i , $Z(T) = \sum_i g_i \exp(\frac{-E_i}{k_B T})$ la fonction de partition et k_B la constante de Boltzmann (Lifchitz and Landau [1967]).

2. On considère ici $g_a = g_b$, *i.e.* des dégénérescences égales pour les deux états E_a et E_b afin d'obtenir les conditions 2.47.

ρ peut ici être décomposée en charges intrinsèques ρ_i (présentes dans le matériau en absence de tout champ externe) et en charges polarisées ρ_p . On a alors :

$$\epsilon_0 \nabla \cdot \mathbf{E} = \rho_i + \rho_p \quad (2.51)$$

ou encore

$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}) = \rho_i \quad (2.52)$$

L'équation 2.52 n'est autre que l'une des équations de Maxwell (expression 2.25) avec $\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$. Or, comme \mathbf{P} est proportionnel à \mathbf{E} , on peut écrire

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E} \quad (2.53)$$

où ϵ est la permittivité diélectrique du milieu. C'est une grandeur clé qui apparaîtra systématiquement dans la suite lorsqu'on s'intéresse à la caractérisation optique des matériaux, qui se ramène *in fine*, au calcul de champ EM. Une caractérisation optique phénoménologique d'un milieu se réfère en général à l'indice de réfraction n défini par $n = \frac{c}{v}$ où c est la célérité de la lumière dans le vide et v la vitesse de phase de l'onde EM dans le milieu considéré. La permittivité diélectrique et l'indice de réfraction permettent des descriptions équivalentes et sont liés par la relation (Zhang [2007]) :

$$\epsilon \mu = \tilde{n}^2 = (n + i\kappa)^2 \quad (2.54)$$

où μ est la perméabilité magnétique du milieu et \tilde{n} son indice de réfraction complexe. Sa partie réelle définie plus haut exprime le changement de vitesse de phase dans un milieu, alors que sa partie imaginaire exprime le taux d'absorption de l'onde EM à la traversée du milieu. Dans un milieu non magnétique, $\mu = 1$, et la relation précédente se résume à :

$$\epsilon = \tilde{n}^2 \quad (2.55)$$

2.5.5.5 Interfaces et coefficients de Fresnel

Lorsque une onde EM arrive sur la surface d'un matériau transparent, elle est partiellement réfléchi et partiellement réfractée, *i.e.* transmise à travers cette surface avec un changement de direction. Ces deux phénomènes sont décrits par les lois de Ibn Sahl, plus communément connues sous l'appellation de lois de Snell-Descartes.

Loi de Ibn Sahl

Les lois de réflexion et de réfraction à travers une interface ont été formulées depuis le 10ème siècle par le scientifique perse, installé à Bagdad à l'époque, Ibn Sahl (Kwan et al. [2002], Rashed [1990]). La première de ces lois stipule que le rayon incident, le rayon réfléchi et la normale de

la surface se trouve dans le même plan.

La deuxième exprime une relation entre l'angle d'incidence, l'angle de réflexion et l'angle de réfraction. Au lieu des fastidieux développements géométriques de Ibn Sahl, on propose de dériver cette relation à partir de considérations simples sur le champ électrique de part et d'autre de la surface en question. D'après l'expression 2.30 du champ électrique pour une onde

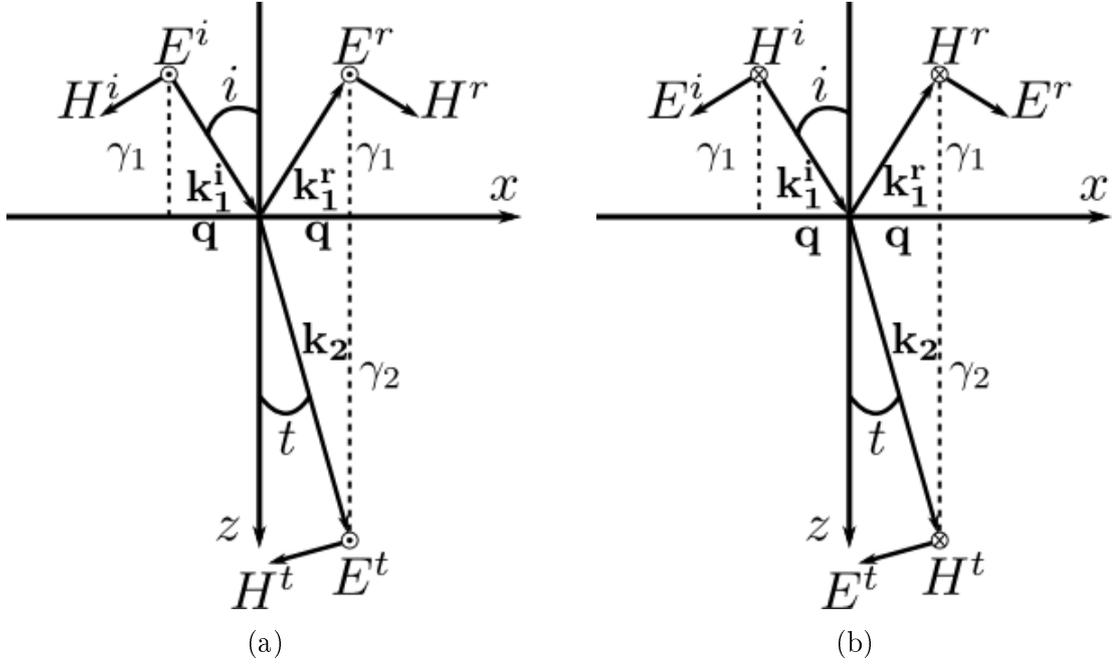


FIGURE 2.10: Réflexion et réfraction d'une onde électromagnétique à une interface pour la polarisation s (a) et p (b).

plane, le champ incident \mathbf{E}^i peut être exprimé par :

$$\mathbf{E}^i = \mathbf{E}_{\max}^i e^{i\omega[t - (x \sin(i) + z \cos(i))/v_1]} \quad (2.56)$$

où $v = \frac{c}{n}$ est la vitesse de propagation de l'onde dans le milieu, c la célérité de la lumière dans le vide et $n = \sqrt{\epsilon\mu}$ l'indice de réfraction du milieu. De la même façon, le champ électrique de l'onde réfractée ou transmise \mathbf{E}^t peut s'écrire :

$$\mathbf{E}^t = \mathbf{E}_{\max}^t e^{i\omega[t - (x \sin(t) + z \cos(t))/v_2]} \quad (2.57)$$

La continuité du champ sur la surface en question, *i.e.* en $z = 0$ implique :

$$\frac{\sin(i)}{\sin(t)} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_2}{n_1} \quad (2.58)$$

C'est la loi de la réfraction.

Le même raisonnement, appliqué à l'onde réfléchie¹, aboutit à l'égalité des angles d'incidence i et de réflexion r .

$$i = r \quad (2.59)$$

Coefficients de Fresnel

Les coefficients de Fresnel pour la réflexion et la transmission expriment le rapport du champ électrique de l'onde réfléchie et transmise par celui de l'onde incidente. On exprime dans les prochaines lignes ces coefficients pour une onde plane incidente sur une interface plane entre deux milieux 1 et 2 pour la polarisation p ². La composante tangentielle du champ EM dans le milieu 1 est la somme de celles du champ incident et du réfléchi :

$$E_x^1 = (E^i + E^r) \cos(i) \quad (2.60)$$

$$H_y^1 = (E^i - E^r)n_1 \quad (2.61)$$

Au milieu 2, on a :

$$E_x^2 = E^t \cos(t) \quad (2.62)$$

$$H_y^2 = E^t n_2 \quad (2.63)$$

La continuité des composantes tangentielles à l'interface donne :

$$(E^i + E^r) \cos(i) = E^t \cos(t) \quad (2.64)$$

$$(E^i - E^r)n_1 = E^t n_2 \quad (2.65)$$

Le rapport de l'expression 2.64 par 2.65 donne :

$$\frac{E^i + E^r}{E^i - E^r} = \frac{n_1 \cos(t)}{n_2 \cos(i)} \quad (2.66)$$

d'où le coefficient de Fresnel pour la réflexion :

$$r_{12} = \frac{E^r}{E^i} = \frac{n_1 \cos(t) - n_2 \cos(i)}{n_1 \cos(t) + n_2 \cos(i)} \quad (2.67)$$

ou encore, exprimé en fonction des fonctions diélectriques et des vecteurs d'onde :

$$r_{12} = \frac{\epsilon_1 \gamma_2 - \epsilon_2 \gamma_1}{\epsilon_1 \gamma_2 + \epsilon_2 \gamma_1} \quad (2.68)$$

1. Il faudra faire attention dans l'expression du champ de l'onde réfléchie au fait que celle-ci se propage dans un sens opposé à celui de l'onde incidente, *i.e.* vers les z négatifs. Le champ s'écrit alors $\mathbf{E}^r = \mathbf{E}_{\max}^r e^{i\omega[t - (x \sin(r) - z \cos(r))/v_1]}$ où r figure l'angle que fait l'onde réfléchie avec la normale à l'interface.

2. Voir l'annexe 7 pour les expressions de ces coefficients en polarisation s , obtenues par des calculs identiques.

où γ_1 et γ_2 sont les composantes normales du vecteur d'onde dans les milieux 1 et 2 respectivement. Notons ici que le vecteur d'onde est décomposé en sa composante parallèle à l'interface \mathbf{q} et sa composante normale à l'interface γ . Il s'écrit alors, dans un milieu i de permittivité diélectrique ϵ_i , $\mathbf{k}_i = (\mathbf{q}_i, \gamma_i)$ où :

$$q_i = |\mathbf{q}_i| = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + 1}} \quad (2.69)$$

et

$$\gamma_i^2 = \epsilon_i k_0^2 - q_i^2 \quad (2.70)$$

Par ailleurs, le produit de 2.64 par 2.65 donne :

$$n_1 \cos(i) [(E^i)^2 - (E^r)^2] = n_2 \cos(t) (E^t)^2 \quad (2.71)$$

L'injection de la relation 2.67 dans celle-ci permet d'obtenir le coefficient de Fresnel pour la transmission :

$$t_{12} = \frac{E^t}{E^i} = \frac{2n_1 \cos(i)}{n_1 \cos(t) + n_2 \cos(i)} \quad (2.72)$$

ou encore

$$t_{12} = \frac{\sqrt{\epsilon_1} \sqrt{\epsilon_2} \gamma_1}{\epsilon_2 \gamma_1 + \epsilon_1 \gamma_2} \quad (2.73)$$

Réciprocité

Il est immédiat d'après les expressions de r_{12} et t_{12} qu'on a :

$$r_{12} = -r_{21} \quad (2.74)$$

et

$$t_{12} n_2 \cos(t) = t_{21} n_1 \cos(i) \quad (2.75)$$

Ce sont les relations de réciprocité des coefficients de Fresnel. Par ailleurs, il vient facilement, d'après les expressions 2.67 et 2.72 :

$$t_{12} t_{21} - r_{12} r_{21} = 1 \quad (2.76)$$

2.5.5.6 Conservation d'énergie

Considérons une surface quelconque et un rayonnement incident sur cette surface. Une partie de ce rayonnement est réfléchi par la surface, une autre partie est absorbée, et une dernière

partie est transmise à travers cette surface. On peut définir alors trois grandeurs énergétiques (Modest [1993]) :

$$R = \frac{\text{énergie radiative réfléchie}}{\text{énergie radiative incidente}} \quad (2.77)$$

$$A = \frac{\text{énergie radiative absorbée}}{\text{énergie radiative incidente}} \quad (2.78)$$

$$T = \frac{\text{énergie radiative transmise}}{\text{énergie radiative incidente}} \quad (2.79)$$

D'après le théorème de Poynting (expression 2.33) et la définition de la densité d'énergie véhiculée par une onde EM qui y est donnée, on a :

$$R = r_{12}^2 \quad (2.80)$$

$$T = t_{12}^2 \quad (2.81)$$

A l'équilibre thermodynamique, la conservation de l'énergie incidente sur la surface donne :

$$R + T + A = 1 \quad (2.82)$$

Si la surface considérée est opaque, on a par définition $T = 0$, et la conservation d'énergie s'exprime simplement par :

$$R + A = 1 \quad (2.83)$$

2.5.6 Calcul en champ lointain

On donne ici, quelques outils qui, en se basant sur les notions introduites aux paragraphes précédents, permettent de calculer les propriétés radiatives d'une structure multi-couche en champ lointain, *i.e.* de calculer la reflectance R , la transmittance T et l'emittance E . Les couches élémentaires de ces structures seront considérées comme des milieux non magnétiques ($\mu = 1$), homogènes et isotropes.

2.5.6.1 Réflexion et transmission sur / à travers un film mince

Considérons un rayonnement incident sur un film mince compris entre deux milieux 1 et 3 (Figure 2.11). On peut, à l'aide des coefficients de réflexion et de transmission de Fresnel définis ci-dessus pour une onde incidente sur une interface, exprimer le champ correspondant à l'onde réfléchie et à l'onde transmise en prenant en compte les différentes multiréflexions qui ont lieu sur les deux interfaces du film considéré.

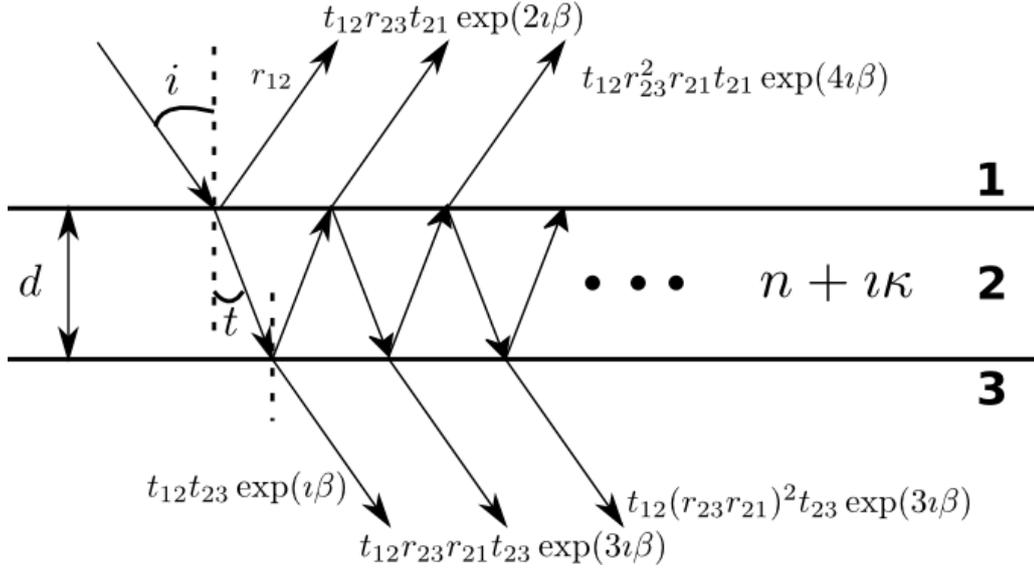


FIGURE 2.11: Réflexion et transmission d'un champ électromagnétique sur et à travers un film mince compris entre deux milieux semi-infinis avec prise en compte des multi-réflexion au sein du film.

Réflexion

Le champ réfléchi est donné par :

$$E^r = E^i (r_{12} + t_{12}r_{23}t_{21} \exp(2i\beta) + t_{12}r_{23}(r_{23}r_{21})t_{21} \exp(4i\beta) + \dots) \quad (2.84)$$

$$= \tilde{r}E^i \quad (2.85)$$

avec $\beta = 2\pi(n/\lambda)d \cos(t)$ la différence de marche due à la traversée du film¹. On remarque que \tilde{r} est la somme de r_{12} et d'une suite géométrique de premier terme $t_{12}r_{23}t_{21} \exp(2i\beta)$ et de raison $r_{23}r_{21} \exp(2i\beta)$. Il vient par conséquent, et en utilisant les relations de réciprocité 2.74 et 2.76 :

$$\tilde{r} = \frac{r_{12} + r_{23} \exp(2i\beta)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(2i\beta)} \quad (2.86)$$

C'est le coefficient de réflexion sur un film mince.

Transmission

De la même façon, il vient pour la transmission :

$$E^t = \tilde{t}E^i \quad (2.87)$$

1. Remarquons que cette relation reste valable dans le cas d'un milieu dissipatif, *i.e.* pour un indice de réfraction complexe. En plus du déphasage dû à la différence de marche optique, apparaît une décroissance exponentielle de l'onde transmise.

avec le coefficient de transmission à travers un film mince :

$$\tilde{t} = \frac{t_{12}t_{23} \exp(i\beta)}{1 + r_{12}r_{23} \exp(2i\beta)} \quad (2.88)$$

2.5.6.2 Structure multi-couche

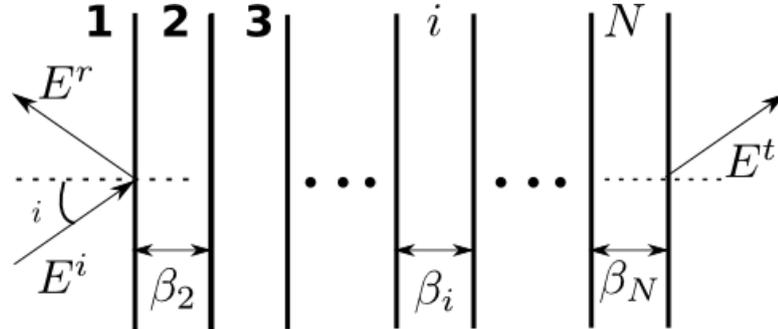


FIGURE 2.12: Réflexion et transmission d'un champ électromagnétique sur et à travers une structure multi-couche composée de N films minces. β_i représente le chemin optique parcouru par l'onde transmise à travers le film i .

Considérons une structure multi-couche composée de la superposition de plusieurs films minces (Figure 2.12). On se propose d'exprimer les coefficients de réflexion et de transmission de cette structure.

Méthode analytique

Rouard [1937] proposa une méthode pour calculer analytiquement le coefficient de réflexion d'une structure bi-couche, constituée de deux films minces 1 et 2 avec des épaisseurs optiques β_1 et β_2 respectivement. Considérons les trois interfaces de la figure 2.13 de haut en bas avec

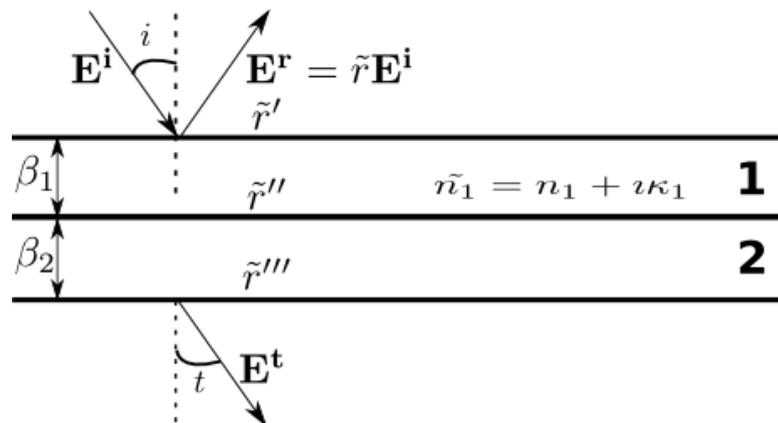


FIGURE 2.13: Réflexion et transmission d'un champ électromagnétique à travers une structure bi-couche composée de deux films minces. La généralisation des expressions des champs réfléchis et transmis à travers cette structure permet d'obtenir des expressions valables pour des structures plus complexes à N films.

des coefficients de réflexion de Fresnel \tilde{r}' , \tilde{r}'' et \tilde{r}''' respectivement. Le coefficient de réflexion du film 2 est donné par :

$$\tilde{r}_2 = \frac{\tilde{r}'' + \tilde{r}''' \exp(-i2\beta_2)}{1 + \tilde{r}''\tilde{r}''' \exp(-i\beta_2)} \quad (2.89)$$

Par ailleurs, celui de toute la structure bi-couche est donné par :

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{r}' + \tilde{r}_2 \exp(-i2\beta_1)}{1 + \tilde{r}'\tilde{r}_2 \exp(-i\beta_1)} \quad (2.90)$$

Ce qui donne au final, en considérant l'expression 2.89 de \tilde{r}_2 :

$$\tilde{r} = \frac{\tilde{r}' + \tilde{r}'' \exp(-2i\beta_1) + \tilde{r}''' \exp[-2i(\beta_1 + \beta_2)] + \tilde{r}'\tilde{r}''\tilde{r}''' \exp(-i\beta_2)}{1 + \tilde{r}'\tilde{r}'' \exp(-i\beta_1) + \tilde{r}'\tilde{r}''' \exp(-i(\beta_1 + 2\beta_2)) + \tilde{r}''\tilde{r}''' \exp(-i\beta_2)} \quad (2.91)$$

Il est possible, comme le proposa Vasicek [1950], d'étendre cette méthode à une structure à n couches, en commençant par la n ème couche, et de procéder de façon itérative, en injectant à chaque fois l'expression du coefficient de réflexion de la couche n dans celui de la couche $n - 1$. On se ramène à chaque itération i , au traitement d'une structure bi-couche : le film $n - i$ constituant la première couche, et l'ensemble des i films suivants constituant la deuxième couche. Cette méthode aboutit certes très rapidement, à partir de la troisième couche, à des expressions analytiques rébarbatives. Elle se prête toutefois facilement à un calcul numérique récursif.

Matrices de transfert

Il est également possible (Yeh [2005]) d'exprimer les relations précédentes, pour une interface, un film mince ou un assemblage de films minces, sous forme matricielle.

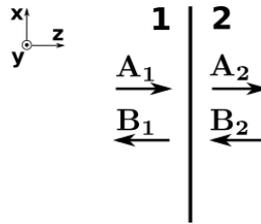


FIGURE 2.14: Décomposition du champ électrique de part et d'autre d'une interface tel que décrit dans le formalisme de la méthode des matrices de transfert.

Réflexion et transmission sur / à travers une interface Il est possible d'exprimer l'onde incidente comme la somme de deux composantes, une se propageant dans le sens des z positifs (A), et une autre dans celui des z négatifs (B). On peut facilement vérifier, que ces

deux composantes de part et d'autre de l'interface, sont reliées par :

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (2.92)$$

où

$$P_{12} = \frac{1}{t_{12}} \begin{pmatrix} 1 & r_{12} \\ r_{12} & 1 \end{pmatrix} \quad (2.93)$$

est dite la matrice de passage entre 1 et 2.

Propagation dans un film Supposons à présent que le milieu 2 soit réduit à un film. A la traversée du film, le champ subit un déphasage. Le champ à l'interface film-milieu 3 peut

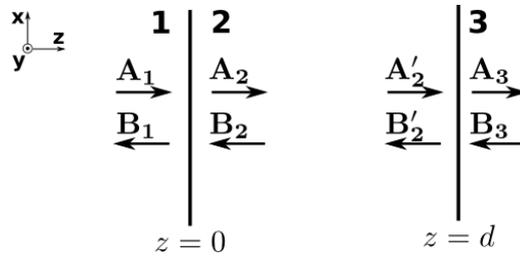


FIGURE 2.15: Décomposition du champ électrique de part et d'autre d'un film mince et à l'intérieur du film, tel que décrit dans le formalisme de la méthode des matrices de transfert.

alors être exprimé par :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \exp(i\beta_2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\beta_2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} \quad (2.94)$$

où β_2 est le chemin optique parcouru dans le milieu 2 tel que défini plus haut.

$$P_2 = \begin{pmatrix} \exp(i\beta_2) & 0 \\ 0 & \exp(-i\beta_2) \end{pmatrix} \quad (2.95)$$

est la matrice de propagation dans le film 2.

À travers un film A l'aide des matrices élémentaires de transmission à travers une interface et de propagation dans un film mince, on peut, par composition, exprimer le champ à la sortie du film. Sachant qu'on a pour l'interface 2 – 3 comme précédemment :

$$\begin{pmatrix} A'_2 \\ B'_2 \end{pmatrix} = P_{23} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (2.96)$$

Il vient pour tout le film :

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \mathcal{J} \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} \quad (2.97)$$

où

$$\mathcal{J} = P_{12}P_2P_{23} \quad (2.98)$$

est la matrice de transfert à travers le film. En posant

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E^i \\ E^r \end{pmatrix} \quad (2.99)$$

et

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E^t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.100)$$

Il vient :

$$\tilde{t} = \frac{E^t}{E^i} = \frac{1}{\mathcal{J}_{11}} \quad (2.101)$$

et

$$\tilde{r} = \frac{E^r}{E^i} = \frac{\mathcal{J}_{21}}{\mathcal{J}_{11}} \quad (2.102)$$

Structure multi-couche Comme pour la méthode analytique, il est possible de déduire par composition les propriétés d'une structure de N films à partir de celles d'un film mince. Les champs incident, réfléchi et transmis peuvent alors être reliés par :

$$\begin{pmatrix} E^i \\ E^r \end{pmatrix} = \mathcal{J}^N \begin{pmatrix} E^t \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.103)$$

avec

$$\mathcal{J}^N = \prod_{i=1}^{N-1} (P_{i\ i+1}P_{i+1}) P_{N1} \quad (2.104)$$

où $P_{i\ i+1} = \frac{1}{t_{i\ i+1}} \begin{pmatrix} 1 & r_{i\ i+1} \\ r_{i\ i+1} & 1 \end{pmatrix}$ est la matrice de passage entre le film i et le film $i + 1$ et $P_i = \begin{pmatrix} \exp(i\beta_i) & 0 \\ 0 & \exp(-i\beta_i) \end{pmatrix}$ est la matrice de propagation dans le film i . Les coefficients de

transmission et de réflexion sont alors donnés par :

$$\tilde{t} = \frac{E^t}{E^i} = \frac{1}{\mathcal{J}_{11}^N} \quad (2.105)$$

et

$$\tilde{r} = \frac{E^r}{E^i} = \frac{\mathcal{J}_{21}^N}{\mathcal{J}_{11}^N} \quad (2.106)$$

2.5.7 Calcul en champ proche

Lorsqu'on s'intéresse au calcul des transferts radiatifs aux petites échelles, petites par rapport à la longueur d'onde caractéristique du rayonnement thermique (de l'ordre de la longueur d'onde de Wien) s'entend, les phénomènes ondulatoires (interférences, diffraction, etc.) deviennent prépondérants. L'approche radiométrique qui se contente d'additionner des grandeurs incohérentes (Loi de Stefan-Boltzmann, Loi de Planck, etc.) sans prendre en compte ces phénomènes n'est alors plus satisfaisante. Il convient alors de dériver l'expression du flux à partir des premiers principes d'électromagnétisme, *i.e.* des équations de Maxwell.

2.5.7.1 Émission thermique : description statistique

Considérons un milieu dispersif de volume \mathcal{V} à l'équilibre à une température non nulle T . L'agitation thermique des charges dans \mathcal{V} fait apparaître des courants fluctuants et des champs fluctuants. En l'absence de courant macroscopique, la moyenne temporelle de ces courants fluctuants est nulle. Ceci n'est pas nécessairement le cas pour leur moyenne quadratique. On sait par ailleurs, d'après le théorème de Poynting (paragraphe 2.5.4.5), que la densité de puissance du champ électromagnétique est une fonction quadratique du champ électrique. D'après le théorème de Wiener-Khinchine évoqué plus haut (paragraphe 2.5.4.6), la densité spectrale de puissance $W(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega)$ d'un processus stochastique stationnaire $X(\mathbf{r}, t)$ est la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation de ce processus par :

$$W(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle X(\mathbf{r}, t) X(\mathbf{r}', t') \rangle e^{i\omega\tau} d\tau \quad (2.107)$$

où $\tau = t - t'$. Une moyenne quadratique de courant et, *a fortiori*, de champ non nulle, aboutit alors à une densité spectrale de puissance non nulle et donc à un transport d'énergie EM.

2.5.7.2 Grandeurs énergétiques

Considérons un volume \mathcal{V} d'un milieu non dispersif supportant des charges ρ et des courants \mathbf{J} . La puissance dissipée par unité de temps est égale au travail de la force de Lorentz donné

par (Jackson [1975]) :

$$P = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (2.108)$$

Dans un milieu dispersif, il convient de considérer les grandeurs monochromatiques. En utilisant la notation complexe introduite plus haut, P peut s'écrire (Joulain [2010]) :

$$P(\mathbf{r}, \omega) = \frac{1}{2} \operatorname{Re} [\mathbf{J}(\mathbf{r}, \omega) \cdot \mathbf{E}^*(\mathbf{r}, \omega)] \quad (2.109)$$

Avec une utilisation judicieuse des équations de Maxwell et d'identités élémentaires de calcul vectoriel, on peut montrer (Joulain [2010]) :

$$P = - \int_{\mathcal{V}} \left[\nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \mathbf{E} \cdot \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \mathbf{H} \cdot \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \right] \quad (2.110)$$

Cette relation, s'écrit sous forme locale :

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{\Pi} - \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} \quad (2.111)$$

où $\mathbf{\Pi} = \mathbf{E} \times \mathbf{H}$ est le vecteur de Poynting et $u = \frac{1}{2}(\mathbf{E} \cdot \mathbf{D} + \mathbf{H} \cdot \mathbf{B})$ est la densité d'énergie EM associée aux charges libres. Dans le cas dispersif, l'utilisation des grandeurs monochromatiques s'impose et $\mathbf{\Pi}$ et u sont exprimées avec des expressions similaires à celle de la puissance dissipée (expression 2.109).

2.5.7.3 Fonctions de Green

Pour déterminer la densité spectrale de puissance du champ EM, il est nécessaire, d'après le théorème de Wiener-Khintchine (expression 2.107) d'accéder à la fonction d'autocorrélation du champ EM. Or, d'après les relations de Maxwell, le champ EM peut être simplement obtenu à partir du courant, par des relations linéaires du type (Rytov et al.) :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) = \nu\mu_0\omega \int_{\mathcal{V}} \mathbf{G}^E(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}', \omega) d^3\mathbf{r}' \quad (2.112)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{G}^H(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \omega) \mathbf{J}(\mathbf{r}', \omega) d^3\mathbf{r}' \quad (2.113)$$

où \mathbf{G}^E et \mathbf{G}^H figurent le tenseur¹ de Green du champ électrique et du champ magnétique respectivement qui dépendent de la géométrie du système considéré. L'intégration s'effectue sur le volume \mathcal{V} du corps considéré. D'après les relations 2.112 et 2.113, connaissant le tenseur

1. La relation est ici tensorielle car les champs électrique et magnétique ne sont pas nécessairement colinéaires au courant.

de Green de la configuration considérée, il suffit d'exprimer le courant en jeu \mathbf{J} , ou, *a minima*, sa fonction d'autocorrélation pour pouvoir accéder aux grandeurs énergétiques pertinentes définies plus haut.

2.5.7.4 Théorème de fluctuation-dissipation

Le théorème de fluctuation dissipation est un puissant outil de physique statistique initialement introduit par Nyquist (Nyquist [1928]) pour décrire des fluctuations thermiques de potentiel dans un circuit électrique. Il a alors démontré une relation entre les fluctuations thermiques de la différence de potentiel aux bornes du circuit à l'équilibre thermodynamique et la résistance de ce même circuit, *i.e.* sa réponse à un champ extérieur¹. Ce théorème a par la suite été successivement généralisé par Onsager [1931], Callen and Welton [1951] et Kubo [1966] et exprime, plus généralement, la relation entre les fluctuations thermiques d'une grandeur physique d'un système à l'équilibre thermodynamique et la réponse de ce système à une excitation extérieure. Physiquement, ceci s'expliquerait par le fait que la relaxation du système suite à une excitation extérieure, ou encore, la dissipation du travail de l'excitation extérieure sous forme de chaleur, fait intervenir le même phénomène physique sous-jacent aux fluctuations de grandeurs physiques à l'équilibre thermodynamique dues à l'agitation thermique. Une conséquence de ce théorème est que la densité spectrale de puissance de l'excitation est déterminée par le phénomène dissipant le travail de cette excitation (Kubo [1966]). Formellement, la dissipation intervient à travers la partie imaginaire de l'admittance du système à l'excitation considérée (conductivité, mobilité, permittivité diélectrique, etc.). En EM, si on considère les courants fluctuants \mathbf{j} , ce théorème s'écrit (Rytov et al.) :

$$\langle j_k(\mathbf{r}, \omega) j_l(\mathbf{r}', \omega') \rangle = 4\pi\omega\epsilon_0 \text{Im}(\epsilon)\Theta(\omega, T)\delta_{kl}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(\omega - \omega') \quad (2.114)$$

où j_k et j_l figurent deux composantes k et l du courant électrique, ϵ_0 la permittivité du vide, $\text{Im}(\epsilon)$ la partie imaginaire de la permittivité diélectrique du milieu, δ_{kl} le symbole de Kronecker, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ et $\delta(\omega - \omega')$ les distributions de Dirac spatiale et fréquentielle, T la température et $\Theta(\omega, T)$ l'énergie moyenne d'un oscillateur harmonique en équilibre à la température T . Cette dernière grandeur est donnée par :

$$\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/(k_bT)} - 1} \quad (2.115)$$



FIGURE 2.16: Milieu semi-infini à surface plane avec une permittivité diélectrique ϵ et à une température T .

2.5.7.5 Émission d'une surface plane

L'application du formalisme exposé ci-dessus à un espace semi-infini (Figure 2.16) à la température T permet de calculer le flux radiatif qui en est issu. Il suffit de calculer la moyenne d'ensemble du vecteur de Poynting dû aux courants fluctuants $\langle \mathbf{\Pi}(\mathbf{r}, \omega) \rangle$ qui se réduit, étant donnée la symétrie du système, à sa composante selon la normale à la surface. Elle est donnée par (Joulain [2010]) :

$$\langle \Pi_z(\mathbf{r}, \omega) \rangle = \frac{\hbar\omega}{4\pi^2} \frac{1}{e^{\hbar\omega/(k_b T)} - 1} \int_0^{\omega/c} q dq (1 - |r_{12}^s|^2 + 1 - |r_{12}^p|^2) \quad (2.116)$$

La sommation jusqu'à $q = k_0 = \omega/c$ signifie que seules les ondes propagatives contribuent au flux émis par la surface. On verra que ceci n'est pas le cas pour le flux échangé entre deux plans séparés de distances nanométriques et que la contribution des ondes de surface¹ est alors prépondérante.

2.5.7.6 Transfert entre deux plans

On se propose de calculer le flux radiatif entre deux milieux semi-infinis plans 1 et 2, caractérisés par leur permittivités diélectriques et leurs températures (ϵ_1, T_1) et (ϵ_2, T_2) et séparés d'une distance d (Figure 2.17). On calcule alors, comme dans le cas précédent, la moyenne d'ensemble du vecteur de Poynting. La densité de flux est dans ce cas donnée par (Joulain [2010]) :

$$\Phi(\omega) = \langle \Pi_z(d^+, T_1) \rangle - \langle \Pi_z(0^-, T_2) \rangle \quad (2.117)$$

1. La première relation de fluctuation dissipation a probablement été, sans être qualifiée de telle, introduite par Einstein dans son article de 1905 sur le mouvement brownien (Einstein [1905b]). En effet, il y présente une relation entre le frottement visqueux sur une particule Brownienne, grandeur fluctuante, et la constante de diffusion du fluide, caractéristique de la réponse du système à une excitation extérieure Kubo [1966].

1. Voir Joulain et al. [2005] pour une étude détaillée de l'importance des ondes de surface dans le transfert radiatif en champ proche.

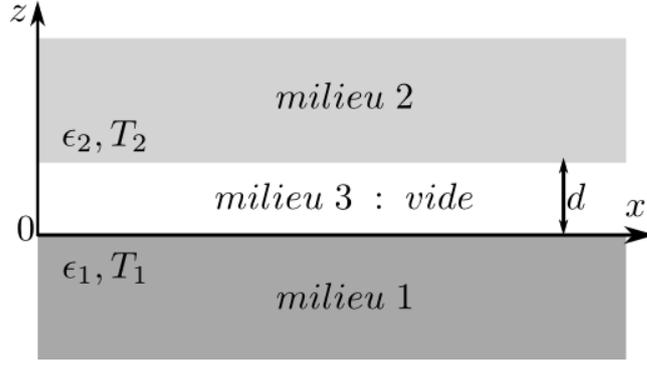


FIGURE 2.17: Deux milieux plans semi-infinis (ϵ_1, T_1) et (ϵ_2, T_2) séparés d'une distance d .

où $\Pi_z(d^+, T_1)$ est la composante normale du vecteur de Poynting à la surface du milieu 2 due aux courants fluctuants dans le milieu 1, et inversement pour $\Pi_z(0^-, T_2)$. Les fonctions de Green utilisées ici pour le calcul de Π sont différentes de celles utilisées dans le cas d'un seul milieu semi-infini et sont disponibles dans la littérature (Sipe [1987]). On peut montrer au final que la densité surfacique monochromatique de flux peut se mettre sous la forme :

$$\Phi(\omega) = \Phi_{prop}(\omega) + \Phi_{evan}(\omega) \quad (2.118)$$

où

$$\Phi_{prop}(\omega) = \sum_{i=s,p} \int d\omega [L_\omega^0(T_1) - L_\omega^0(T_2)] \int \frac{d\Omega \cos(\theta)}{2} \left[\frac{(1 - |r_{31}^i|^2)(1 - |r_{32}^i|^2)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2i\gamma_3 d}|^2} \right] \quad (2.119)$$

et

$$\Phi_{evan}(\omega) = \sum_{i=s,p} \int d\omega \frac{[L_\omega^0(T_1) - L_\omega^0(T_2)]}{k_0^2} \int_{\omega/c}^{\infty} 2qdqe^{-2\text{Im}(\gamma_3)d} \left[\frac{\text{Im}(r_{31}^i) \text{Im}(r_{32}^i)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2i\gamma_3 d}|^2} \right] \quad (2.120)$$

sont les contributions des ondes propagatives et des ondes de surface respectivement.

De la même manière que pour la conduction, la convection ou le rayonnement en champ lointain, il est possible de définir un coefficient d'échange radiatif pour le rayonnement en champ proche h_{rad}^{CP} par :

$$h_{rad}^{CP}(\omega) = \lim_{(T_1 - T_2) \rightarrow 0} \frac{\Phi(\omega)}{T_1 - T_2} \quad (2.121)$$

On représente sur la figure 2.18, le coefficient d'échange radiatif en champ proche pour la configuration plan-plan de la figure 2.17 et où les milieux 1 et 2 sont constitués de carbure de silicium (SiC) et de verre (SiO₂) tour à tour et sont considérés à $T_1 = 300$ K et $T_2 = T_1 + \delta T = 301$ K. Sur la figure 2.18a, on représente h_{rad}^{CP} en fonction de la séparation d des deux milieux. Pour de grandes séparations (par rapport à la longueur d'onde caractéristique du rayonnement thermique), le coefficient d'échange est constant et correspond à la contribution des ondes propaga-

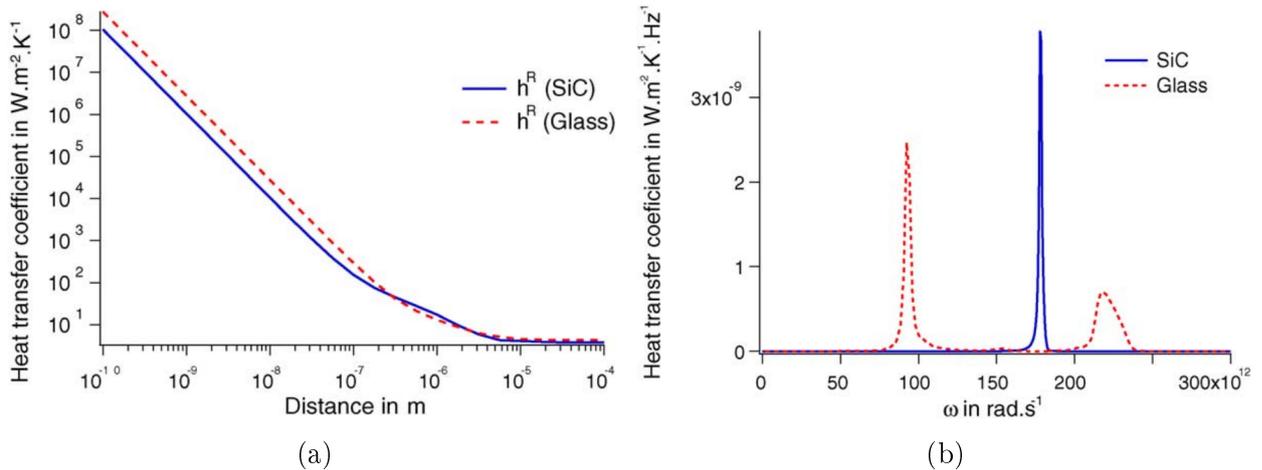


FIGURE 2.18: Dépendance du coefficient de transfert radiatif à la séparation des deux milieux (a) et à la pulsation du rayonnement pour une séparation $d = 10$ nm (b) de deux milieux semi-infinis considérés à $T_1 = 300$ K et $T_2 = T_1 + \delta T = 301$ K. (Source : Joulain et al. [2005])

tives indépendante de la distance. En diminuant d , on remarque une augmentation du coefficient d'échange à des distances comparables à la longueur caractéristique du rayonnement thermique (quelques microns à $T = 300$ K) pour atteindre des valeurs supérieures de plusieurs ordres de grandeur au coefficient d'échange en champ lointain à $d = 10$ nm.

Sur la figure 2.18b, on trace la dépendance fréquentielle du coefficient d'échange pour une séparation constante $d = 10$ nm. On remarque qu'il présente des pics à certaines longueurs d'onde (autour de $\lambda = 10$ μm pour le SiO_2 et $\lambda = 12,6$ μm pour le SiC) qui correspondent aux longueurs d'onde de résonance de la permittivité diélectrique, qui sont, à leur tour, déterminées par les fréquences de résonance des phonons optiques dans le matériau considéré. Ceci trahit le rôle des ondes de surface (évanescents) dans le transfert radiatif en champ proche ce qui peut-être facilement mis en évidence en comparant $\Phi_{prop}(\omega)$ et $\Phi_{evan}(\omega)$ définis ci-dessus.

2.6 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre les outils théoriques nécessaires pour calculer les grandeurs qui nous seront utiles par la suite, notamment le flux radiatif échangé entre la cellule photovoltaïque et l'émetteur sélectif. On a d'abord commencé par une brève présentation des différents modes de transfert de chaleur avec une insistance particulière sur les transferts radiatifs qui sont au centre du présent travail.

L'approche radiométrique classique a été présentée en premier lieu, notamment la loi de Planck du rayonnement du corps noir qui en constitue la pierre angulaire. En effet, la quantification du rayonnement des corps réels ainsi que des flux échangés entre eux se ramène toujours à des calculs de corps noir, moyennant des facteurs de proportionnalité qui dépendent du corps réel considéré. On a par ailleurs montré que la loi de Planck peut-être retrouvée par une approche complètement différente de l'approche électromagnétique de Planck, basée sur une description

corpusculaire de la lumière et qui, pour être consistante avec la théorie de Planck, prédit un mécanisme non trivial d'émission radiative : l'émission stimulée. Ces lois nous seront très utiles pour le calcul des grandeurs pertinentes au chapitre 5 afin d'optimiser les rendements de systèmes thermo-photovoltaïques en champ lointain.

Au delà des lois de rayonnement classique, on a présenté les outils qui permettent de décrire le rayonnement aux courtes échelles d'espace, celles de l'ordre de la longueur d'onde caractéristique du rayonnement thermique considéré. On a veillé dans ce but à exposer qualitativement les fondements du formalisme utilisé : celui de l'électrodynamique fluctuacionnelle qui permet de déduire le coefficient d'échange radiatif en champ proche à partir des fluctuations thermique à l'équilibre thermodynamique de certaines grandeurs du corps considéré, notamment les courants électriques fluctuants. Une application de ce formalisme à un système plan-plan montre que le transfert thermique en champ proche dépasse de plusieurs ordres de grandeur celui en champ lointain. C'est là une piste pour le développement de systèmes thermo-photovoltaïques à forts rendements et fortes puissances qui sera examinée au chapitre 6.

Bibliographie

- L. Boltzmann. Über die mechanische bedeutung des zweiten hauptsatzes der wärmethorie. *Wiener Berichte*, 53 :195–220, 1866. [25](#)
- H. B. Callen and T. A. Welton. Irreversibility and generalized noise. *Phys. Rev.*, 83 :34–40, 1951. [38](#)
- L. de Broglie. *Recherches sur la théorie des quanta*. PhD thesis, Université de Paris, 1924. [23](#)
- A. Einstein. Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of ligh. *Ann. Phys.*, 17 :132, 1905a. [23](#)
- A. Einstein. On the movement of small particles suspended in stationary liquids required by the molecular-kinetic theory of heat. *Ann. Phys. Lpz.*, 17 :549, 1905b. [39](#)
- A. Einstein. Strahlungs-emission und absorption nach der quantentheorie. *Dtsch. Phys. Ges.*, 18 :318–323, 1916. [23](#)
- R.P. Feynman, R.B. Leighton, and M.L. Sands. *Mainly electromagnetism and matter*. The Feynman Lectures on Physics. Addison-Wesley, 1963. [25](#)
- J. B. J. Fourier. *Théorie analytique de la chaleur*. Chez Firmin Didot, père et fils, 1822. [7](#)
- P. Glansdorff. Chaleur. *Encyclopædia Universalis [en ligne]*, 2012. URL <http://www.universalis-edu.com/encyclopedia/chaleur/>. consulté le 27 septembre 2012. [6](#)
- R. J. Glauber. The quantum theory of optical coherence. *Phys. Rev.*, 130 :2529–2539, 1963. [19](#)
- R. J. Glauber. *Quantum Theory of Optical Coherence*. John Wiley & Sons, 2007. [20](#), [21](#)
- F. P. Incropera, D. P. DeWitt, T. L. Bergman, and A. S. Lavine. *Fundamentals of Heat and Mass Transfer 5th Edition with IHT2.0/FEHT with Users Guides*. Wiley, 2001. [6](#)
- J.D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, 1975. [37](#)
- K. Joulain. Radiative transfer on short length scales. In S. Volz, editor, *Microscale and Nanoscale Heat Transfer*, Topics in Applied Physics, pages 107–130. Springer, 2010. [37](#), [39](#)

- K. Joulain, J-Ph. Mulet, F. Marquier, R. Carminati, and J-J. Greffet. Surface electromagnetic waves thermally excited : Radiative heat transfer, coherence properties and casimir forces revisited in the near field. *Surf. Sci. Rep.*, 57(3-4) :59 – 112, 2005. [39](#), [41](#)
- A. Khintchine. Korrelationstheorie der stationären stochastischen prozesse. *Math. Ann.*, 109 : 604–615, 1934. [22](#)
- G. Kirchhoff. I. on the relation between the radiating and absorbing powers of different bodies for light and heat. *Phil. Mag.*, 20(130) :1–21, 1860. [14](#)
- R. Kubo. The fluctuation-dissipation theorem. *Rep. Prog. Phys.*, 29(1) :255, 1966. [38](#), [39](#)
- A. Kwan, J. Dudley, and E. Lantz. Who really discovered snell’s law ? *Phys. World*, 15(4) :64, 2002. [26](#)
- D.R. Lide. *CRC Handbook of Chemistry and Physics : A Ready-reference Book of Chemical and Physical Data*. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 87th Ed. CRC Press, 2007. [8](#)
- E. Lifchitz and L. Landau. *Physique statistique*. Mir, 1967. [25](#)
- R. Loudon. *The Quantum Theory of Light*. Oxford Science Publications. OUP Oxford, 2000. [23](#), [25](#)
- L. Mandel and E. Wolf. *Optical Coherence and Quantum Optics*. Cambridge University Press, 1995. [20](#), [21](#), [22](#)
- G. Martinelli and M. Stefancich. Solar cell cooling. In Antonio L. Luque and Viacheslav Andreev, editors, *Concentrator Photovoltaics*, volume 130 of *Springer Series in Optical Sciences*, pages 133–149. Springer Berlin / Heidelberg, 2007. [9](#)
- M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, 1993. [6](#), [30](#)
- M. J. Moran, H. N. Shapiro, B. R. Munson, and D. P. DeWitt. *Introduction to thermal systems engineering : thermodynamics, fluid mechanics, and heat transfer*. Wiley, 2003. [13](#)
- H. Nyquist. Thermal agitation of electric charge in conductors. *Phys. Rev.*, 32 :110–113, 1928. [38](#)
- L. Onsager. Reciprocal relations in irreversible processes. i. *Phys. Rev.*, 37 :405–426, 1931. [38](#)
- J.P. Pérez, R. Carles, and R. Fleckinger. *Électromagnétisme : fondements et applications : avec 300 exercices et problèmes résolus*. Masson Sciences. Dunod, 2001. [16](#)
- M. Planck. Ueber das gesetz der energieverteilung im normalspectrum. *Ann. Phys-Berlin*, 309 (3) :553–563, 1901. [22](#)

- M. Planck and M. Masius. *The Theory of Heat Radiation*. Blakiston, 1914. [10](#)
- J. H. Poynting. On the Transfer of Energy in the Electromagnetic Field. *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*, 175 :343–361, 1884. [19](#)
- R. Rashed. A pioneer in anaclastics : Ibn sahl on burning mirrors and lenses. *Isis*, 81(3) : 464–491, 1990. [26](#)
- P. Rouard. *Ann. Phys.*, 7 :291, 1937. [32](#)
- A. Royne, J. D. Christopher, and D. R. Mills. Cooling of photovoltaic cells under concentrated illumination : a critical review. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 86(4) :451 – 483, 2005. [9](#)
- J. A. Ruffner. Reinterpretation of the genesis of newton’s “law of cooling”. *Arch. Hist. Exact Sci.*, 2(2) :138–152, 1963. [8](#)
- S.M. Rytov, I.U.A. Kravtsov, and Tatarskiĭ. *Principles of Statistical Radiophysics : Elements of random fields*. [37](#), [38](#)
- R. Siegel. *Thermal Radiation Heat Transfer*. Taylor & Francis, 2001. [6](#)
- J. E. Sipe. New green-function formalism for surface optics. *J. Opt. Soc. Am. B*, 4(4) :481–489, 1987. [40](#)
- J.C. Slater and N.H. Frank. *Electromagnetism*. Dover Books on Physics Series. Dover Publications, 2011. [16](#), [17](#), [25](#)
- J. Stefan. Über die beziehung zwischen der wärmestrahlung und der temperatur. *Sitzungsberichte der mathematisch-naturwissenschaftlichen Classe der kaiserlichen Akademie der Wissenschaften*, 79, 1879. [12](#)
- A. Vasicek. Sur la réflexion de la lumière sur des verres supportant des couches minces multiples. *J. Phys. Radium*, 7 :342–347, 1950. [33](#)
- W. Wien and O. Lummer. Methode zur prüfung des strahlungsgesetzes absolut schwarzer körper. *Ann. Phys.*, 292 :451–456, 1895. [12](#)
- N. Wiener. Generalized harmonic analysis. *Acta Math-Djursholm*, 55 :117–258, 1930. [22](#)
- P. Yeh. *Optical waves in layered media*. Wiley series in pure and applied optics. Wiley, 2005. [33](#)
- Z. M. Zhang. *Nano/microscale Heat Transfer*. McGraw-Hill nanoscience and technology series. McGraw-Hill, 2007. [16](#), [18](#), [19](#), [26](#)

Chapitre 3

La conversion d'énergie radiative

Sommaire

3.1	Introduction	48
3.2	Le thermo-photovoltaïque	48
3.2.1	Le photovoltaïque	48
3.2.1.1	Une brève histoire	48
3.2.1.2	Principe physique	49
3.2.2	Le thermo-photovoltaïque	51
3.2.2.1	Une très brève histoire	51
3.2.2.2	Système	52
3.3	Modèle	54
3.3.1	Modèle électrique	54
3.3.2	Modèle thermique	56
3.4	Quelques dispositifs d'optimisation	58
3.4.1	Le convertisseur	59
3.4.1.1	Cellules multi-jonction	59
3.4.1.2	Cellules à bande intermédiaire	60
3.4.1.3	Cellules à porteurs chauds	61
3.4.2	Le medium	62
3.4.2.1	Le photovoltaïque à concentration (PVC)	62
3.4.2.2	Filtrage	62
3.4.3	La source	63
3.4.4	Limites théoriques de rendement d'un système TPV	64
3.4.4.1	Effet de la largeur de bande interdite du convertisseur	64
3.4.4.2	Effet de la largeur du pic d'émission	65
3.4.4.3	Effets thermiques	67
3.5	Conclusion	69

3.1 Introduction

On présente dans ce chapitre les systèmes dont on vise l'amélioration par le présent travail : le système photovoltaïque (PV) et thermo-photovoltaïque (TPV). Après un bref rappel de l'histoire du développement de ces systèmes et des principes physiques élémentaires gouvernant leur fonctionnement, on présente deux modèles simples qui permettent d'évaluer leurs performances, *i.e.* de calculer efficacité et puissance électrique de sortie, ainsi que la prise en compte des effets thermiques. On rapporte par la suite différentes solutions pour améliorer ces systèmes, étudiées dans la littérature et qui concernent indifféremment des idées en cours de formalisation (cellules à porteurs chauds, à bandes intermédiaires) ou des techniques éprouvées et largement exploitées à l'échelle industrielle (Cellules multi-jonction, photovoltaïque à concentration). Finalement, on clôt ce chapitre par une application des modèles présentés à un système PV avec un émetteur quelconque, avec ou sans filtre et un système TPV à émetteur sélectif. Les résultats de simulations simples montrent alors la supériorité de ce dernier et justifient l'intérêt qu'on portera par la suite à la conception et l'optimisation d'émetteurs sélectifs.

3.2 Le thermo-photovoltaïque

3.2.1 Le photovoltaïque

3.2.1.1 Une brève histoire

L'effet photovoltaïque, consiste, selon son appellation, en une génération d'une différence de potentiel, entre les deux bornes d'une portion d'un matériau, *i.e.* une tension électrique, par des photons incidents. Or, l'appellation effet photo-électrique serait plus approprié puisque le rayonnement incident libère des porteurs de charge, qui, lorsqu'ils s'accumulent dans une région du matériau, finissent par créer une différence de potentiel. Becquerel fut, en 1839, l'un des premiers à observer ce phénomène et à en faire une étude détaillée (Becquerel [1839b]). Un phénomène qui était à l'époque surtout étudié pour ses effets chimiques (Becquerel [1839a])¹. Déjà à l'époque, il en a rapporté certaines applications technologiques comme la thermométrie (Becquerel [1839b]). Plusieurs travaux expérimentaux ont été menés à la fin du XIXème siècle, et qui ont notamment mené à la réalisation expérimentale de la première cellule photovoltaïque (Stoletow [1888], Fritts [1883]) en sélénium, avec un rendement ne dépassant pas le pour-cent. Quelques années plus tard, Albert Einstein (Einstein [1905]) donna au phénomène physique sous-jacent une explication physique satisfaisante qui reste adoptée jusqu'à nos jours et qui permettait d'expliquer ces résultats expérimentaux. C'est l'effet photoélectrique. Russel S. Ohl, des laboratoires Bell, a, quelques décennies plus tard, breveté la première jonction $p-n$ (Ohl [1946]) en silicium²

1. Une application d'envergure exploitant ce phénomène et qui connu ses débuts à cette époque : la photographie. La première photographie (1816) est attribuée à Joseph Nicéphore Niépce, qui réussit alors à obtenir des négatifs sur de l'AgCl connu pour sa photo-sensibilité depuis le Moyen Age.

2. Les photomètres étaient, jusqu'à cette époque, essentiellement fabriqués à base d'oxyde de cuivre et de sélénium.

qui devint l'élément essentiel des cellules photovoltaïques modernes. Ceci ouvrit la porte à un développement très rapide des recherches sur les cellules PV. C'est ainsi que Chapin et ses collègues des laboratoires Bell sont parvenus, quelques années plus tard, à mettre au point une jonction $p-n$ à base de silicium dopé à l'arsenic et au bore, capable d'atteindre une efficacité de 6% (Chapin et al. [1954]). Depuis, des améliorations de rendement ininterrompues ont été rapportées (Green et al. [2012]), et une efficacité record de près de 25%, très proche de la limite théorique de rendement d'une cellule mono-jonction en silicium sous rayonnement solaire direct, a été atteinte avec des cellules en silicium cristallin (Zhao et al. [1998]).

3.2.1.2 Principe physique

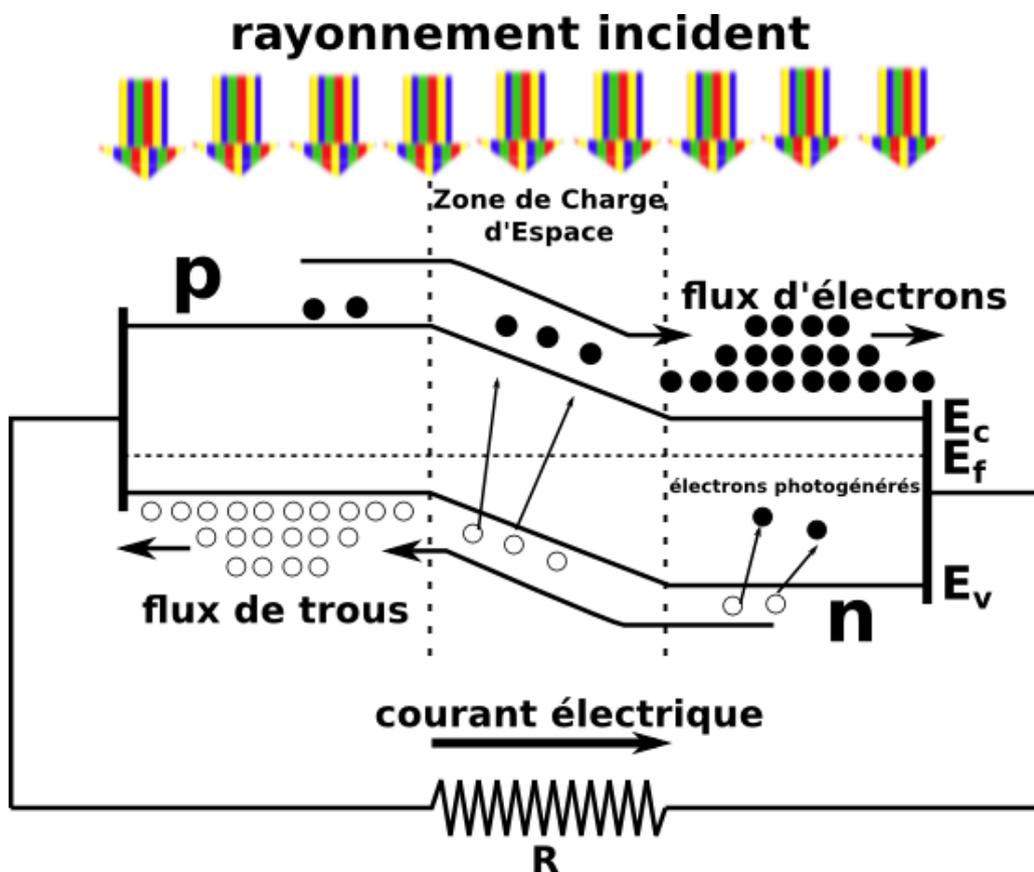


FIGURE 3.1: Jonction $p-n$ soumise à un rayonnement incident.

La figure 3.1 schématise une jonction $p-n$, élément de base d'une cellule PV. La jonction $p-n$ est généralement formée d'un matériau semi-conducteur dans lequel sont introduites des impuretés, *i.e.* d'autres éléments chimiques ayant un électron de valence en plus ou en moins que l'élément semi-conducteur (Figure 3.2). Pour le silicium par exemple, ces impuretés peuvent être du phosphore (donneur) ou du bore (accepteur) respectivement. La densité des impuretés contrôle la densité des porteurs majoritaires (électrons et trous respectivement) dans le semi-conducteur dopé. Au voisinage de la jonction, un porteur majoritaire a tendance à diffuser de l'autre côté de la jonction, où il est minoritaire et où il se recombine. Il laisse alors dans sa région

d'origine un atome ionisé. L'accumulation de charges fixes, *i.e.* d'ions, de part et d'autre de la jonction, dans la zone de charge d'espace (ZCE), crée une différence de potentiel électrostatique (potentiel interne ou tension *built-in*) Φ_b et un fort champ électrique. A l'équilibre, cette différence de potentiel peut-être vue comme une barrière de potentiel qui prohibe davantage de diffusion des porteurs qui y ont donné naissance. Or, il arrive que des porteurs excités par l'agitation thermique, acquièrent une énergie supérieure à Φ_b et se mettent en mouvement à travers la jonction. Ceci donne naissance à un courant dit de saturation J_0 . Par ailleurs, lorsqu'un photon incident est absorbé par la cellule, il crée une paire électron-trou qui est séparée par le fort champ électrique de la ZCE. Les électrons (et les trous) sont alors conduits vers la zone dopée n (et p) où ils deviennent porteurs majoritaires. Le montage de la cellule en circuit avec une faible résistance électrique permet d'observer un photo-courant électrique. Si une différence de potentiel V est appliquée à la cellule en polarisation directe, *i.e.* que le potentiel de la partie dopée n est supérieur à celui de la partie dopée p , le photo-courant est donné par l'équation de la diode (Pankove [1971]) :

$$J = J_0(\exp(\frac{qV}{k_bT}) - 1) \quad (3.1)$$

Par ailleurs, un court-circuit de la jonction fait apparaître un courant de court-circuit J_{sh}

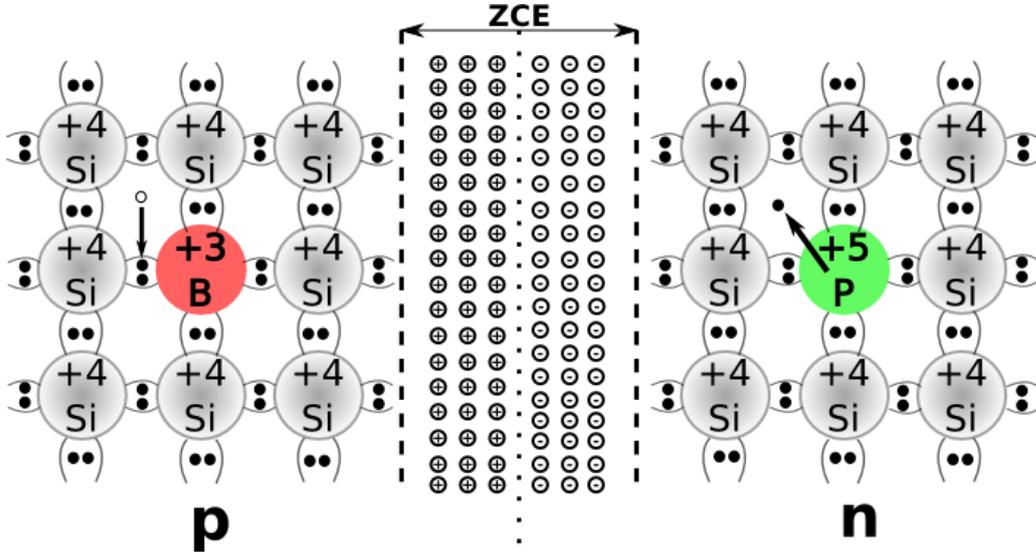


FIGURE 3.2: Schématisation de la création de porteurs majoritaires par introduction d'impuretés et de la ZCE par les charges fixes aux bords de la jonction.

opposé au courant de polarisation directe sous la seule action de la différence de potentiel interne. Par souci de simplicité, on considère des longueurs de diffusion largement supérieures à l'épaisseur de la ZCE, *i.e.* que même des paires électron-trou créées en dehors de la ZCE, à une distance de la jonction inférieure à la longueur de diffusion, contribuent au courant. Le courant

de court-circuit est alors donné par (Pankove [1971]) :

$$J_{sh} = q\mathcal{A}(L_e + L_h)G \quad (3.2)$$

où q est la charge élémentaire, \mathcal{A} l'aire de la jonction, G le taux de génération de paires électron-trou, L_e et L_h les longueurs de diffusion des électrons et des trous respectivement. Le courant total est donc la somme du courant de court-circuit et du courant-photo-généré :

$$J = J_{sh} + J_0(1 - \exp(\frac{qV}{k_bT})) \quad (3.3)$$

3.2.2 Le thermo-photovoltaïque

3.2.2.1 Une très brève histoire

Le thermo-photovoltaïque est une extension de la conversion photovoltaïque, initialement utilisée pour convertir le rayonnement solaire (Becquerel [1839b]), au rayonnement thermique d'un corps chaud quelconque. Le poitevin de naissance, Pierre Aigrin, a été souvent cité (Broman [1995]; Coutts [1999]; White et al. [1961]) comme étant le père du convertisseur thermo-photovoltaïque. Il en fit effectivement une présentation dans le cadre de cours qu'il dispensa en 1960 au MIT (Aigrin [1960]). Nelson, dans sa brève histoire du développement du TPV (Nelson [2003]), relevant cependant l'incertitude qui plane sur la date et le lieu exacts de l'invention des systèmes TPV, est le premier à corriger cette information en reconnaissant sa primauté au système proposé par Kolm (Kolm [1956]) dans le même établissement où Aigrin donna ses conférences. Le système de Kolm utilisait des composants du commerce : une lampe de camping à gaz pour source thermique et une cellule en silicium. Il obtint en sortie une puissance de 1 watt électrique et proposa des améliorations qui permettraient d'atteindre un rendement de 10% (Nelson [2003]). Or, quelques années plus tôt, les laboratoires de la RCA¹ avaient déjà effectué la première réalisation d'un système TPV ayant pour émetteur un déchet radioactif, du strontium-90, avec des rendements très faibles toutefois, ne dépassant très probablement pas le pour-cent. C'était là, l'ancêtre des systèmes TPV GTR (Générateur Thermique à Radio-isotope) proposés des décennies plus tard pour des applications spatiales (Anderson et al. [2005]; Murray et al. [2004]).

Par ailleurs, les systèmes TPV ont reçu depuis le début des années 1990, grâce à la mise au point de convertisseurs photovoltaïques à bande interdite étroite particulièrement pertinents pour la conversion du rayonnement infrarouge, un intérêt croissant (Nelson [2003]). Les réalisations expérimentales présentent toutefois à ce jour, avec des rendements ne dépassant pas les quelques pourcents ($\leq 4\%$), des performances limitées (Bermel et al. [2010]; Bitnar et al.

1. La RCA (Radio Corporation of America) était à l'époque un concurrent historique de AT&T, maison mère de Bell Labs. La démonstration publique du système TPV à base de déchets radioactifs par la RCA en 1954 (Perlin [2004]), fut un élément de pression décisif qui conduit les équipes de Bell Labs. à publier leurs travaux sur les cellules PV solaires avec des rendements avoisinant les 5% quelques mois plus tard (Chapin et al. [1954]).

[2013]; Chan et al. [2013]). Les principaux verrous pour accéder à des performances plus élevées résident dans le contrôle spectral du rayonnement thermique en premier lieu, la maximisation du facteur de forme de la source de chaleur à la cellule ensuite, et en dernier lieu, la conception de réacteurs à rendement élevé lorsque la chaleur est issue d'une réaction chimique (Chan et al. [2013]).

3.2.2.2 Système

A la différence des systèmes photovoltaïques usuels qui convertissent le rayonnement solaire, un système TPV convertit le rayonnement thermique d'un corps chaud quelconque : l'émetteur (Figure 3.3). Cette configuration du système TPV induit plusieurs différences par rapport à un

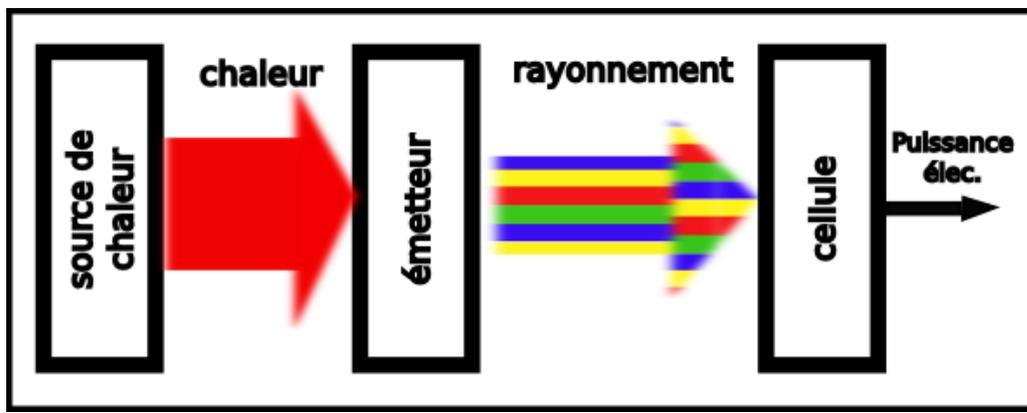


FIGURE 3.3: Illustration schématique d'un système TPV.

système PV solaire traditionnel, qui contribuent à un rendement et une puissance électrique plus élevés :

- La densité de flux que peut recevoir une cellule dans un système TPV est supérieure de plusieurs ordres de grandeurs à celle reçue par une cellule d'un système PV solaire sans concentration malgré la différence de température entre l'émetteur du système TPV et la surface solaire, en faveur de celle-ci. Cet avantage du système TPV est dû à une différence de facteurs de forme. En effet, alors que tout le rayonnement émis par l'émetteur TPV peut être reçu par la cellule, une infime portion ($\simeq 10^{-5}$) du rayonnement solaire parvient à la cellule PV sur terre ou à son voisinage du fait du rapport des angles solides entre le soleil et la cellule. On présente sur la figure 3.4a, la densité du flux émis par un corps noir à 5800 K (équivalent de la surface solaire) et un corps noir à 1000 K en échelle logarithmique. Celui-ci est largement dépassé de plusieurs ordres de grandeur. On présente sur la figure 3.4b les flux reçus par la cellules des systèmes PV et TPV. Le rapport s'inverse en faveur du corps noir à 1000K. Les températures considérées pour les émetteurs TPV varient généralement entre 1000 K et 2000 K (Mauk [2006]). On s'attend à des rapports encore plus avantageux pour le TPV si des températures supérieures à 1000 K sont considérées.

- Le grand facteur de forme d'échanges radiatifs de l'émetteur à la cellule dans un système TPV conduit à des densités de flux équivalentes à celles qu'on obtient dans le solaire à concentration avec des concentrations de plusieurs centaines de soleils¹. Or, on sait depuis Shockley ([Shockley and Queisser \[1961\]](#)), que le rendement théorique maximal sous concentration est plus élevé (41% pour 2000 soleils) que sous rayonnement solaire direct (30%)².
- La loi de Planck du rayonnement du corps noir (paragraphe 2.5.1.2) donne la distribution spectrale du rayonnement émis par un corps noir à l'équilibre thermique à une température donnée. La majeure partie du rayonnement solaire se situe dans la partie visible du spectre EM. En revanche, pour les émetteurs des systèmes TPV, la plus grande partie du rayonnement s'effectue dans le proche et moyen infrarouge. Les meilleurs convertisseurs du rayonnement solaire (cellule en silicium cristallin) n'étant pas très sensibles au rayonnement IR ne sont plus convenables pour le TPV. De nouveaux matériaux développés durant les années 1990, le GaSb notamment ([Ferguson and Fraas \[1995\]](#); [Fraas and Minkin \[2007\]](#)), ont permis une exploitation plus efficace de cette zone du spectre EM et un développement rapide du TPV.

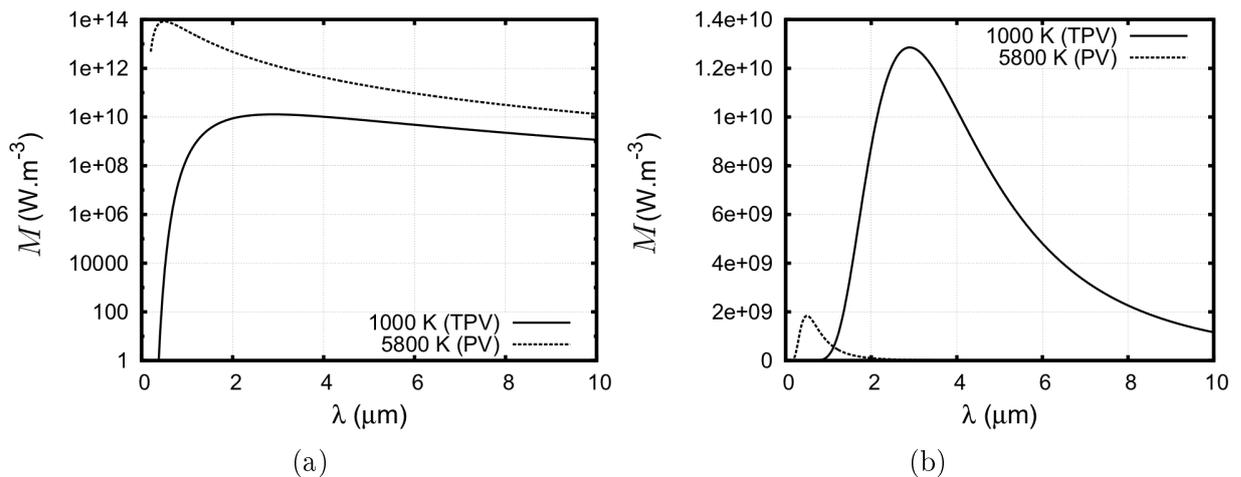


FIGURE 3.4: Émittance hémisphérique d'un corps noir à 5800 K (modèle pour le rayonnement solaire) et d'un corps noir à 1000 K (a) et densité spectrale de flux reçue du soleil au voisinage de la terre et d'un émetteur d'un système TPV à 1000 K (b)

Bien que les principes physiques qui gouvernent le fonctionnement des convertisseurs des systèmes PV et TPV soient les mêmes, les conséquences de ces quelques différences, notamment thermiques, ne sont pas sans incidence sur les rendements et puissances possibles, et sont donc à prendre en compte lors de la modélisation. De plus, au delà de la conversion PV à propre-

1. Un soleil vaut $1000 \text{ W}\cdot\text{m}^{-2}$. Avec un facteur de forme (de l'émetteur à la cellule) de l'ordre de l'unité, la densité de flux incident est équivalente à quelques dizaines de soleils ($\simeq 40$ soleils) pour un émetteur à 1000K et à quelques centaines de soleils ($\simeq 800$ soleils) pour un émetteur à 2000 K.

2. Des travaux expérimentaux récents ont montré que ceci était vrai dans une certaine mesure ([Vossier et al. \[2012\]](#)). Au delà d'une concentration critique, une baisse des rendements, probablement due aux effets thermiques des fortes densités de flux, a été observée.

ment parler, un système TPV effectue une autre conversion de la chaleur en rayonnement par l'émetteur (rendement de réaction de combustion par exemple). Le calcul du rendement d'un système TPV nécessite alors de prendre en compte le rendement de cette conversion en amont :

$$\eta_{TPV} = \eta_E \eta_{PV} \quad (3.4)$$

où η_E , η_{PV} et η_{TPV} figurent le rendement de l'émetteur, du convertisseur PV et du système TPV respectivement. Dans les calculs qui suivront, on considérera un rendement de l'émetteur $\eta_E = 1$.

Pour le calcul de η_{PV} , on présentera à la prochaine section un modèle global simplifié, celui proposé par [Shockley and Queisser \[1961\]](#). On montrera ultérieurement, que le modèle de Shockley permet de rendre compte des tendances générales des différences entre un système PV et un système TPV.

3.3 Modèle

3.3.1 Modèle électrique

On présente dans ce paragraphe un modèle simplifié pour le calcul du rendement d'un système PV ou TPV. Le modèle a été initialement proposé par [Shockley and Queisser \[1961\]](#) et fait depuis référence lorsqu'il s'agit de discuter des limites théoriques de rendement de ces systèmes. Les notations de ces auteurs seront reprises ici. On peut qualifier ce modèle de thermodynamique ou de global car il se base sur un bilan d'énergie radiative, sans entrer dans le détail des processus physiques qui interviennent dans la création des porteurs de charge dans le semi-conducteur et dans leur transport au sein de celui-ci. Malgré sa simplicité, ce modèle permet d'obtenir des ordres de grandeur assez justes des grandeurs pertinentes (tension, intensité, puissance, rendement, etc.), et c'est d'ailleurs pour cette raison qu'il continue à être largement utilisé. L'efficacité η^1 d'un système PV est donnée par le rapport de la puissance électrique P_e par l'énergie radiative incidente P_{rad} .

$$\eta = \frac{P_e}{P_{rad}} \quad (3.5)$$

La puissance radiative incidente est donnée par :

$$P_{rad} = \mathcal{A}F \int_{\Omega} \int_0^{\infty} \epsilon_{\lambda,\theta} L_{\lambda,\theta}(T_e) d\lambda d\Omega \quad (3.6)$$

où \mathcal{A} est la surface du convertisseur (la cellule), F est le facteur de forme de l'émetteur à la cellule, $\epsilon_{\lambda,\theta}$ est l'émissivité de l'émetteur et $L_{\lambda,\theta}(T_e)$ est la luminance énergétique monochromatique d'un corps noir à la température T_e . λ , θ et Ω figurent la longueur d'onde, la direction

1. On utilisera dans ce qui suit les termes "rendement" et "efficacité" indifféremment.

d'émission et l'angle solide respectivement.

La puissance électrique est donnée par

$$P_e = J \cdot V \quad (3.7)$$

où J est le courant électrique et V la différence de potentiel entre les deux bornes de la jonction $p-n$. Afin de simplifier le calcul du courant électrique, on admet plusieurs hypothèses simplificatrices :

- Tous les photons incidents sont absorbés.
- Tout photon ayant une énergie supérieure ou égale à celle de la largeur de bande interdite $E_g = \frac{hc}{\lambda_g}$ (où λ_g est la longueur d'onde équivalente à l'énergie de bande interdite) crée une paire électron-trou (efficacité quantique unité).
- Seules les recombinaisons radiatives sont prises en compte (ni recombinaison Auger, ni Shockley-Read-Hall).
- On considère un facteur de forme égal à celui du disque solaire vu de la terre.

En admettant les hypothèses précédentes, il suffit de déterminer le nombre de photons incidents avec une énergie supérieure ou égale à E_g pour obtenir le nombre d'électrons photo-générés et par conséquent l'intensité et la puissance électriques.

La densité de flux incident de ces électrons est donnée par :

$$Q^i = \int_{\Omega} \int_0^{\lambda_g} \frac{\epsilon_{\lambda,\theta} L_{\lambda,\theta}(T_e)}{(hc/\lambda)} d\lambda d\Omega \quad (3.8)$$

Le taux de recombinaisons radiatives dans la cellule sous illumination, *i.e.* le nombre d'électrons par unité de temps qui connaissent une transition de la bande de conduction à la bande de valence résultant en une émission de photon, est donné par :

$$R_c(V) = 2 \cdot A \cdot Q_c \cdot \exp\left(\frac{V}{V_c}\right) \quad (3.9)$$

où

$$Q_c = \int_{\Omega} \int_0^{\lambda_g} \frac{\epsilon_{\lambda,\theta,c} L_{\lambda,\theta}(T_c)}{(hc/\lambda)} d\lambda d\Omega \quad (3.10)$$

et V est la différence de quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous qui est égale à la différence de potentiel entre les bornes de la jonction $p-n$. V_c vaut $k_b T_c / q$ où k_b est la constante de Boltzmann, T_c la température de la cellule, q la charge électrique élémentaire, et $\epsilon_{\lambda,\theta,c}$ l'émissivité de la cellule.

La relation courant-tension dans la cellule est donnée par :

$$J = J_{sh} + J_0 \left(1 - \exp\left(\frac{V}{V_c}\right)\right) \quad (3.11)$$

où J_{sh} est le courant de court-circuit.

$$J_{sh} = qA(Q^i - 2Q_c) \quad (3.12)$$

et J_0 est le courant de saturation inverse.

$$J_0 = qR_c \exp\left(-\frac{V}{V_c}\right) \quad (3.13)$$

Les relations 3.11, 3.12 et 3.13 sont admises. Leur démonstration, souvent rapportée dans les ouvrages de référence (Rosencher and Vinter [2002], Sze and Ng [2006]), se fait par la résolution des équations de continuité des porteurs de charge de part et d'autre de la jonction.

Finalement, la puissance électrique délivrée par la cellule peut être exprimée autrement que dans l'expression 3.7, à l'aide du courant de court-circuit J_{sh} (exp. 3.12), de la tension de circuit ouvert V_{oc} et du facteur de forme¹ FF par la relation :

$$P_e = FF \cdot J_{sh} \cdot V_{oc} \quad (3.14)$$

La tension de court-circuit peut être obtenue en annulant J dans la relation 3.11, d'où :

$$V_{oc} = \frac{k_b T}{q} \text{Log} \left(\frac{J_{sh}}{J_s} + 1 \right) \quad (3.15)$$

et le facteur de forme FF peut être obtenu à partir de la caractéristique courant-tension de la cellule.

3.3.2 Modèle thermique

La cellule dans un système PV, et dans un système TPV *a fortiori* vu les densités de flux plus importantes, subit un échauffement non négligeable qui n'est pas sans incidence sur les performances du système. Pour prendre en compte ces effets thermiques, on se propose d'utiliser un modèle simple de l'équation de la chaleur (Royne et al. [2005]) :

$$\rho C_p \frac{dT_c}{dt} = P_{rad} + P_e + \Phi_{conv} + \Phi_{rad} + \Phi_{ref} \quad (3.16)$$

où ρ , C_p et T_c figurent la densité de la cellule, sa chaleur spécifique, et sa température respectivement. P_{rad} , P_e , q_{conv} , q_{rad} et q_{ref} figurent (en grandeurs algébriques) les densités de puissance radiative incidente, de puissance électrique, de flux de chaleur convectif, de flux de chaleur radiatif et du flux échangé avec le système de refroidissement respectivement. En régime stationnaire, ces différentes quantités s'équilibrent :

$$P_{rad} + P_e + \Phi_{conv} + \Phi_{rad} + \Phi_{ref} = 0 \quad (3.17)$$

1. Ne pas confondre avec le facteur de forme en transferts radiatifs entre deux corps F .

Les différents flux de chaleur sont donnés par :

$$\Phi_{conv} = \frac{T_c - T_0}{R_{conv}} \quad (3.18)$$

$$\Phi_{rad} = \epsilon\sigma(T_c^4 - T_0^4) \quad (3.19)$$

$$\Phi_{ref} = \frac{T_c - T_0}{R_{ref}} \quad (3.20)$$

où R_{conv} et R_{ref} figurent la résistance thermique de convection¹ et du système de refroidissement et T_0 la température du milieu ambiant. Le tableau 3.1 rapporte des valeurs typiques de résistances thermiques (Martinelli and Stefancich [2007]; Royne et al. [2005]). Par ailleurs,

	Mode	R ($^{\circ}\text{C}/\text{W}\cdot\text{cm}^{-2}$)	Réf.
R_{conv}	Conv. naturelle	$\simeq 1000$	Martinelli and Stefancich [2007]
	Conv. forcée, $v = 4\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	$\simeq 7$	Martinelli and Stefancich [2007]
R_{ref}	Échangeur de chaleur à eau, $\dot{V} = 8\text{l}\cdot\text{min}^{-1}$	$\simeq 2$	Martinelli and Stefancich [2007]
	Puits thermique à micro-canaux	$\simeq 10^{-1}$	Royne et al. [2005]
	Impact de jet liquide	$\simeq 10^{-1} - 10^{-2}$	Royne et al. [2005]
	Convection forcée diphasique	$\simeq 1$	Royne et al. [2005]

TABLE 3.1: Quelques ordres de grandeur de résistances thermiques d'échange par convection naturelle, forcée ou par des systèmes de refroidissement complexes envisageables pour le PV et le TPV.

différentes corrélations ont été proposées par Notton et al. [2005] pour le calcul du coefficient d'échange convectif en convection naturelle et forcée pour différentes géométries. On reste toutefois dans les ordres de grandeurs donnés au tableau 3.1.

L'expression 3.20 du flux radiatif peut être linéarisée pour les petits écarts de température entre la cellule et le milieu ambiant. Ce flux s'écrit lors :

$$\Phi_{rad} = 4\epsilon\sigma T_0^3(T_c - T_0) \quad (3.21)$$

Dans ces conditions, à premier abord, l'équation 3.17 est linéaire. Or, les deux termes P_e et P_{rad} qui y apparaissent ne sont pas indépendants puisqu'ils sont liés par le rendement η selon la relation 3.5. Cette dépendance n'est de surcroît pas linéaire, surtout pour les hautes densités de flux incident. C'est notamment le cas pour le PV solaire à concentration (Vossier et al. [2012]) et, *a fortiori*, pour le TPV où on atteint des densités de flux incident équivalentes à une concentration de quelques centaines de soleils. Par ailleurs, le rendement, et par conséquent la puissance électrique P_e , dépendent de la température². De nombreux auteurs (Wysocki and Rappaport [1960], Radziemska [2003], Coventry [2005], Skoplaki and Palyvos [2009]) ont rapporté une décroissance linéaire du rendement d'une cellule PV en fonction de la température

1. R_{conv} est l'inverse du coefficient d'échange convectif de la loi de Newton plus souvent utilisé.

2. Selon le modèle adopté, ceci est dû à la dépendance du taux de recombinaisons radiatives à la température (modèle de Shockley, paragraphe 3.3.1) et, éventuellement, à la dépendance des propriétés électroniques du semi-conducteur (μ , E_g , etc.) à la température si on envisage de résoudre les équations de transport des charges dans le semi-conducteur.

qui peut être exprimé par :

$$\eta_c = \eta_{ref} [1 - \beta_{ref}(T_c - T_{ref})] \quad (3.22)$$

où η_{ref} est l'efficacité de la cellule à la température de référence T_{ref} , η_c son efficacité à une température quelconque T_c et β_{ref} le coefficient de température de la cellule qui exprime le taux de décroissance de l'efficacité en fonction de la température. Des valeurs typiques du coefficient de température¹ de quelques cellules sont rapportées dans le tableau 3.2². Le couplage

Type	T (°C)	T_{ref} (°C)	$\beta_{ref}(10^{-3} \times C^{-1})$	Réf.
Si	25 – 60	25	4, 5	Skoplaki and Palyvos [2009]
GaSb	0 – 120	0	2, 9*	Ferguson and Fraas [1995]
GaInP/InGaAs/Ge	25 – 65	25	2	Cotal and Sherif [2006]
	65 – 85	65	5	Cotal and Sherif [2006]

TABLE 3.2: Coefficient de température pour différents types de cellules PV.

entre les phénomènes électriques et thermiques, et la prise en compte de la relation 3.22 pour résoudre l'équation non linéaire 3.17 afin d'obtenir la température et le rendement à l'équilibre nécessiteront donc un traitement numérique itératif.

3.4 Quelques dispositifs d'optimisation

Les limites théoriques de rendement des cellules photovoltaïques mono-jonction ont été déterminées très rapidement après le développement des premiers prototypes (Shockley and Queisser [1961]), et sont désormais connues sous l'appellation de limite Shockley-Queisser, qui est de $\eta = 31\%$ pour le rayonnement solaire direct. Les rendements de quelques pour-cents (Chapin et al. [1954]) des premiers prototypes en silicium cristallin, actuellement dites "cellules de première génération", en étaient assez éloignés. Les cellules en films minces, dites de deuxième génération, ne visaient pas à dépasser ces limites, mais obéissaient plutôt à une logique économique : l'utilisation de moins de ressources, en l'occurrence la quantité du matériau semi-conducteur, pour la fabrication des cellules, induit mécaniquement une baisse du coût du Watt crête. Une autre façon d'atteindre cet objectif économique consiste à augmenter les rendements et d'obtenir des puissances supérieures pour la même surface de cellule. C'est le but recherché par la grande variété des cellules PV de troisième génération. La figure 3.5 présente les différents domaines de rendement, de coût du mètre carré de cellule et de coût du watt crête, couverts

1. Il a été montré (Braun et al. [2012]) que le coefficient de température de l'efficacité est dominé par le coefficient de température de la tension de court-circuit. Quand le coefficient de température de l'efficacité n'est pas disponible dans la littérature, on rapporte celui de la tension de court-circuit. Le cas échéant, la valeur est marquée par (*).

2. On retient en général l'ordre de grandeur approximatif d'une baisse d'un demi point de rendement par degré.

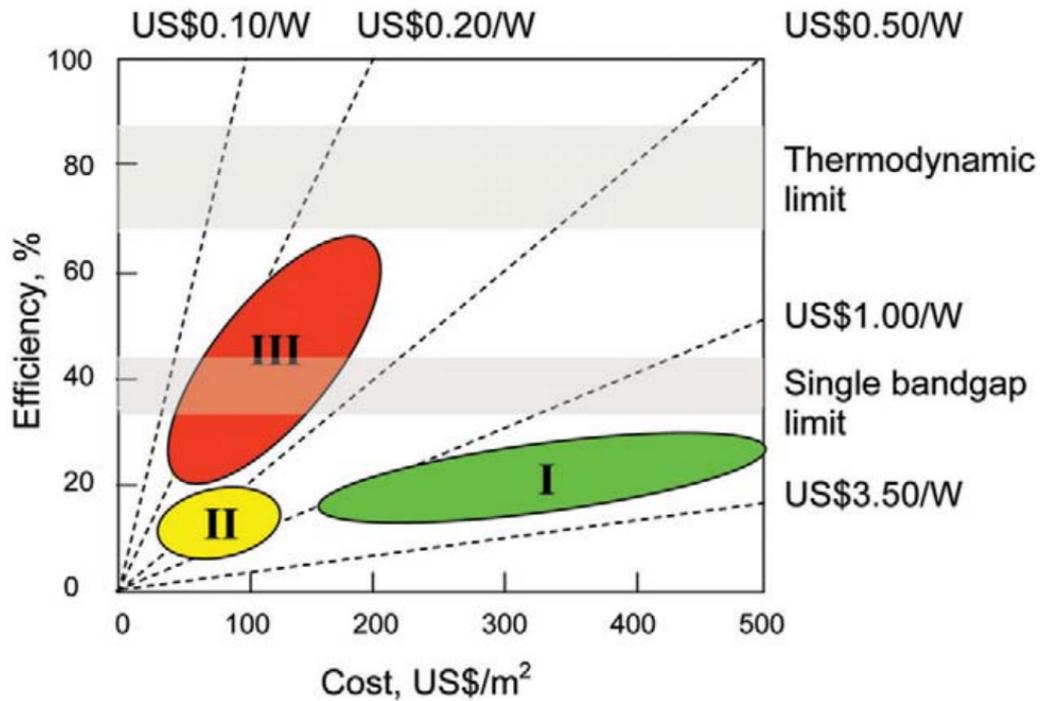


FIGURE 3.5: Rendement et coût du mètre et du watt crête des différentes générations de cellules PV. (Source : Conibeer [2007])

par les trois générations de cellules PV. La limite de Shockley-Queisser étant actuellement approchée de très près (Green et al. [2012]), une grande partie des travaux récents sur les cellules PV vise à les dépasser. Différentes solutions ont été proposées dans ce but. On les présentera brièvement au cours des prochains paragraphes. Pour un traitement plus détaillé, on peut se rapporter à des articles de revue récents sur le sujet (Conibeer [2007]; Green [2002]; Mauk [2006]; Parida et al. [2011]). Ces différentes solutions agissent tantôt sur la cellule elle-même, tantôt sur le moyen de transporter le rayonnement jusqu'à la cellule, tantôt sur la source du rayonnement à convertir. On les classera donc dans ces trois grandes catégories.

La figure 3.6 résume les meilleurs rendements obtenus par ces différentes technologies jusqu'en 2008.

3.4.1 Le convertisseur

3.4.1.1 Cellules multi-jonction

On a évoqué, à plusieurs reprises, le décalage entre le spectre du rayonnement incident et le spectre de sensibilité du convertisseur photovoltaïque comme étant le principal phénomène limitant le rendement des cellules mono-jonction. Une solution pour pallier ce problème, est de superposer plusieurs jonctions $p-n$ sensibles à différentes régions du spectre EM du rayonnement incident (Figure 3.7). L'une des premières réalisations d'une cellule de ce type, une

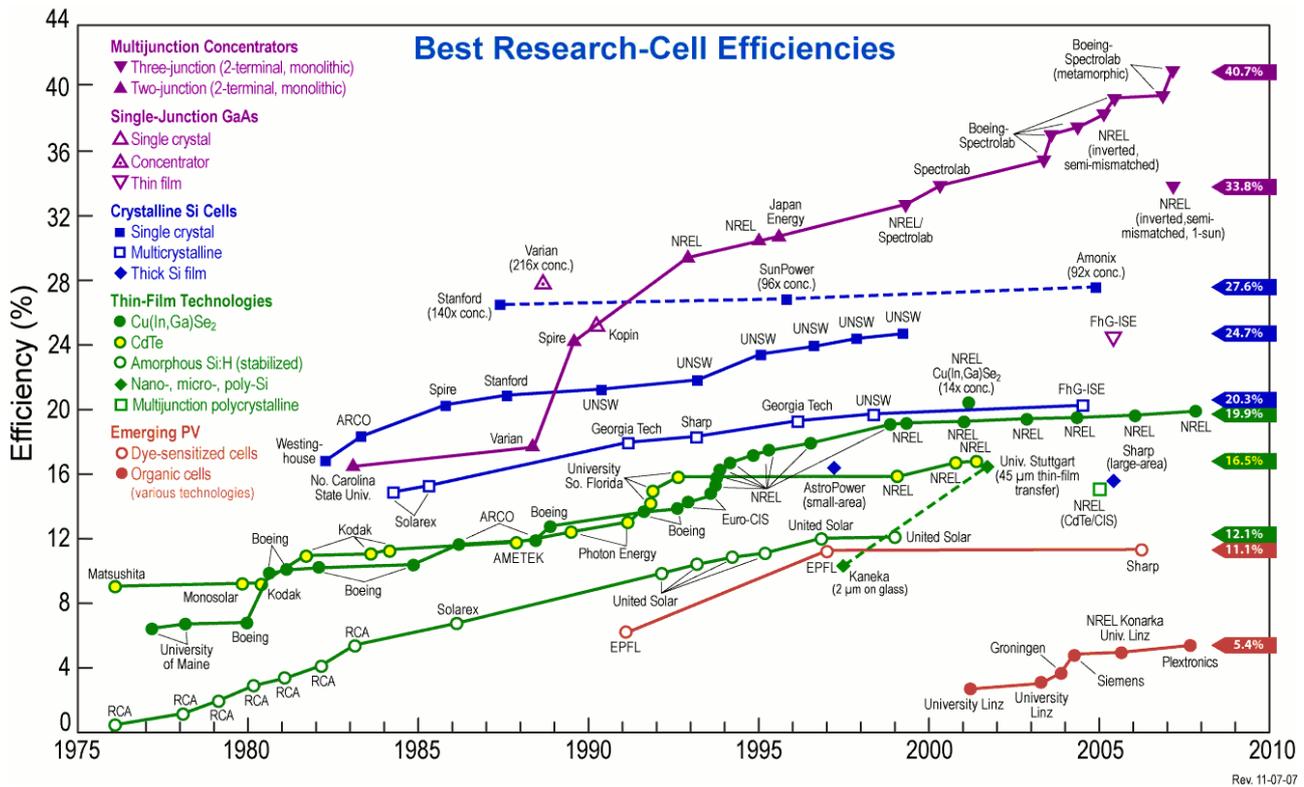


FIGURE 3.6: Meilleurs rendements de laboratoire de différentes technologies de cellules PV (Source : NREL)

double-jonction composée d'une jonction de AlGaAs ($E_g = 1,65 \text{ eV}$)¹ sur une jonction de GaAs ($E_g = 1,424 \text{ eV}$), fut rapportée en 1979 (Bedair et al. [1979]) avec une efficacité inférieure à 10%. Le principe de ce type de cellules est que la jonction supérieure absorbe les photons les plus énergétiques, et que les jonctions suivantes sont choisies (en terme d'épaisseur et d'énergie de bande interdite) de sorte qu'elles puissent absorber et convertir les photons moins énergétiques transmis à travers les jonctions supérieures (Figure 3.7). Ce principe fut proposé pour la première fois par Jackson [1955]. Les rendements théoriques maximaux sont de 68,2% et 86,8% pour le rayonnement solaire direct et sous concentration maximale respectivement (Conibeer [2007]) avec une cellule à une infinité de jonctions. La figure 3.7 représente une triple-jonction. La complexité et donc le coût élevé de ces cellules limitent leur intérêt économique à des applications spécifiques, le spatial et le solaire à concentration notamment. Un rendement expérimental record $\eta = 43,5\%$ a été récemment obtenu avec une triple-jonction (Green et al. [2012]).

3.4.1.2 Cellules à bande intermédiaire

Le principe de ces cellules, dites cellules à bande intermédiaire ou cellule à impuretés, est très similaire à celui des cellules multi-jonction. Dans la cellule multi-jonction, des jonctions supplémentaires ont été ajoutées pour pallier la non-absorption de photons par la première

1. L'énergie de la bande interdite du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dépend de la concentration de Al et donc de Ga. Dans les travaux de Bedair et al. [1979], un alliage avec $x \approx 0,2$ est utilisé.

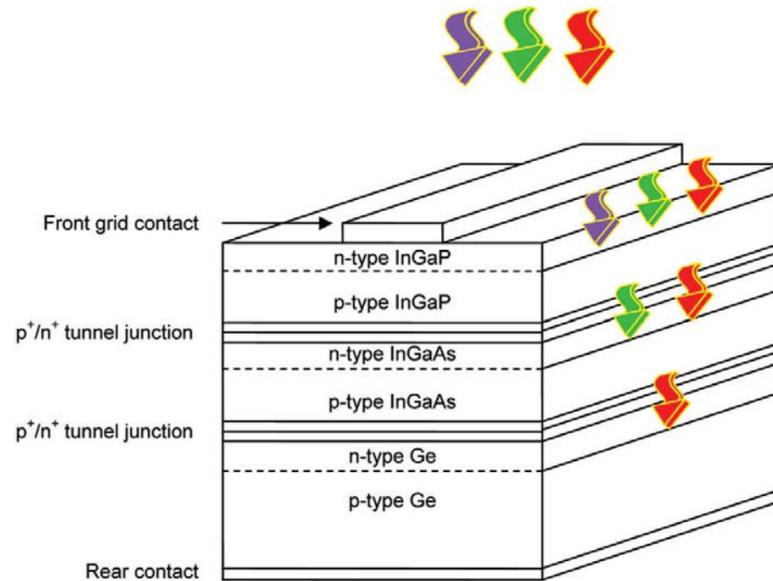


FIGURE 3.7: Schéma d'une cellule tandem à triple-jonction. L'énergie de bande interdite décroît de haut en bas assurant une sélection spectrale des photons de moins en moins énergétiques. (Source : Conibeer [2007])

jonction, *i.e.* les photons ayant une énergie inférieure à celle de la bande interdite de la première jonction. Wolf [1960] a proposé d'exploiter le fait que l'introduction d'impuretés dans un semi-conducteur, puisse permettre des niveaux d'énergie intermédiaires dans la bande interdite, qui rendent ainsi possible l'absorption de photons moins énergétiques¹. Le rendement théorique maximal de ce type de cellules, sous des hypothèses de conditions idéales, est comparable à celui des cellules multi-jonction. En effet, il s'agit, dans les deux cas, de cellules à plusieurs niveaux d'énergie² (Conibeer [2007]; Green [2001a]). En revanche, et contrairement aux cellules multi-jonction, la réalisation pratique des cellules PV à impuretés est restée très limitée.

3.4.1.3 Cellules à porteurs chauds

Les cellules à porteurs chauds permettent d'exploiter avec un rendement accru les photons avec une énergie largement supérieure à E_g . En effet, lorsqu'ils sont absorbés, ces photons donnent naissance à des électrons hautement énergétiques, qu'on appelle par abus de langage « électrons chauds »³. L'énergie de ces électrons peut être exploitée, soit en favorisant l'ionisation de nœuds du réseau cristallin par impact (Green [2001b]), ce qui donnerait naissance à de nouveaux électrons contribuant à un gain en intensité (Würfel [1997]), soit en collectant ces électrons avant qu'ils ne perdent leur excès d'énergie sous forme de chaleur par l'interaction électron-phonon, ce qui mène à un gain de tension électrique (Conibeer [2007]). Les dernières

1. C'est la recombinaison assistée par les pièges ou impuretés, ou encore recombinaison Read-Shockley-Hall d'après les noms des premiers physiciens à la décrire (Hall [1952]; Shockley and Read [1952]).

2. Des cellules à plusieurs niveaux d'énergie peuvent également être réalisées par l'introduction de puits quantiques multiples (Conibeer [2007]; Green [2001a]).

3. On ne peut pas parler de température *stricto sensu* pour un électron. En revanche, en connaissant le niveau d'énergie E de l'électron, on peut définir une température équivalente d'après la relation $k_b T \propto E$.

années ont été marquées par la prolifération de travaux théoriques sur ce type de cellules (Conibeer et al. [2009]; König et al. [2010]; Le Bris [2011]) sans réalisation expérimentale notable, le problème essentiel résidant dans la réalisation de contacts sélectifs pour la récupération des électrons chauds avant leur thermalisation.

3.4.2 Le medium

Parmi les différentes solutions ingénieuses proposées dans la littérature pour améliorer les rendements des cellules PV, une grande partie se focalise sur le traitement du rayonnement incident, avant son absorption, afin de l'adapter à un convertisseur donné et d'augmenter les rendements. Cette adaptation, peut se faire, soit en modifiant la distribution spectrale du rayonnement, en sélectionnant une région plus ou moins grande du spectre EM, soit en gardant la distribution spectrale intacte, et en concentrant le rayonnement incident.

3.4.2.1 Le photovoltaïque à concentration (PVC)

On sait depuis Shockley (Shockley and Queisser [1961]) que la concentration permet d'augmenter la limite théorique de rendement de 31% à 41% pour une cellule mono-jonction. En effet, la dépendance de la puissance électrique au flux incident n'est pas linéaire. Alors que la dépendance de J_{sh} à l'intensité lumineuse incidente est presque linéaire (Koster et al. [2005]), les relations 3.15 et 3.14 aboutissent à une proportionnalité entre la puissance électrique et le logarithme de l'intensité lumineuse, si on considère un facteur de forme constant.

Les premières réalisations de systèmes PVC datent des années 1970 (Sala and Luque [2007]). Ces réalisations se sont cependant limitées à des travaux expérimentaux ou des prototypes. L'apparition de cellules à très haut rendement, notamment les cellules multi-jonction durant les années 1980, en permettant d'augmenter considérablement les puissances électriques envisageables, ont stimulé le développement à une échelle industrielle du solaire PVC. Après deux décennies de développement, et malgré un record de rendement de $\eta \simeq 43\%$ (Green et al. [2012]), et des projets pour un total de 5,5 GW en cours de réalisation, la puissance PVC installée à travers le monde en 2011, n'a pas dépassé les 28 MW sur une puissance PV totale entre 60 et 70 GW (Smith and Cohn [2012]). Les prix élevés des cellules multi-jonction et de systèmes de suivi précis, rendent cette technologie peu attrayante économiquement.

3.4.2.2 Filtrage

Le principal phénomène limitant le rendement d'une cellule PV est la discordance entre le spectre solaire et le spectre de sensibilité maximale du convertisseur. Une solution pour pallier ce problème consiste à filtrer le rayonnement incident pour ne laisser parvenir à la cellule PV que la partie qui sera convertie avec un rendement maximal. Il est primordial, pour augmenter le rendement global du système, de récupérer l'énergie du rayonnement non transmis, par exemple en la renvoyant à l'émetteur d'un système TPV pour augmenter sa température et

par conséquent, l'intensité de son rayonnement thermique. On présente, sur la figure 3.8 une illustration schématique d'un système TPV. Pour optimiser le rendement, le filtre utilisé doit

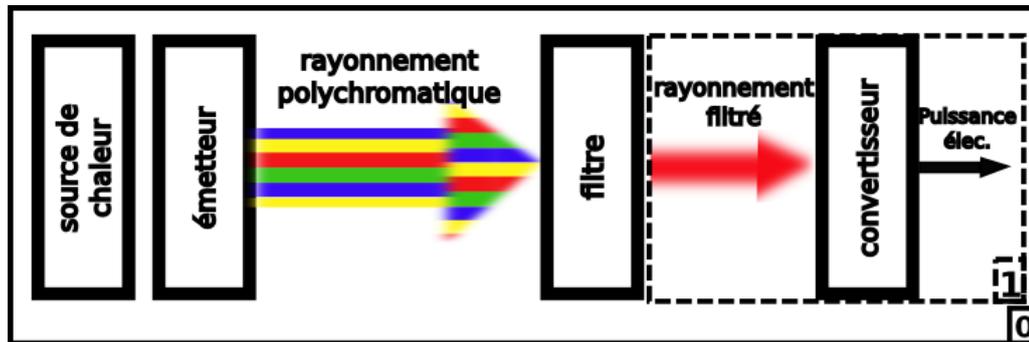


FIGURE 3.8: Système TPV avec un émetteur corps noir filtré.

avoir une forte transmission dans la région des photons « utiles » : *i.e.* pour $\lambda \leq \lambda_g$ et une grande réflectance partout ailleurs ($\lambda \geq \lambda_g$) (Chubb [2007]). Une grande variété de filtres peut être utilisée, tels que les filtres interférométriques à une ou plusieurs couches, des filtres plasma, des combinaisons des deux, ou encore des filtres à réseaux résonnants (Basu et al. [2007]; Coutts [1999]). Des réflecteurs au dos de la cellule PV peuvent également être utilisés pour récupérer l'énergie du rayonnement non absorbé (Wang et al. [2003]). Pour une présentation détaillée, Chubb [2007] leur consacre un chapitre entier. On comparera, à la section 3.4.4 un système TPV à filtre idéal avec un système TPV à émetteur sélectif.

3.4.3 La source

La dernière catégorie de notre classification, regroupe les solutions qui se proposent de contrôler l'émission des photons, afin d'obtenir un rayonnement composé de photons « utiles » uniquement, *i.e.* des photons avec une énergie $E_{max} \leq E \leq E_g$. Il est important ici d'avoir une énergie maximale E_{max} au delà de laquelle les photons sont inhibés puisque les photons très énergétiques par rapport à E_g sont la source la plus importante de baisse de rendement. De plus, leur excès d'énergie chauffe la cellule ce qui induit une baisse de rendement supplémentaire. Ne pas définir E_{max} reviendrait à utiliser un simple filtre passe haut (en terme d'énergie ou de fréquences). La figure 3.9 représente un système TPV à émetteur sélectif (ES). On présente au paragraphe 5.2 une revue détaillée des différentes familles d'émetteurs sélectifs.

Par ailleurs, on présente aux prochains paragraphes quelques résultats de l'application des modèles électrique et thermique (paragraphes 3.3.1 et 3.3.2) à un système TPV à ES. On montrera alors l'intérêt de ce système par rapport à un système PV / TPV à filtre ou à source quelconque.

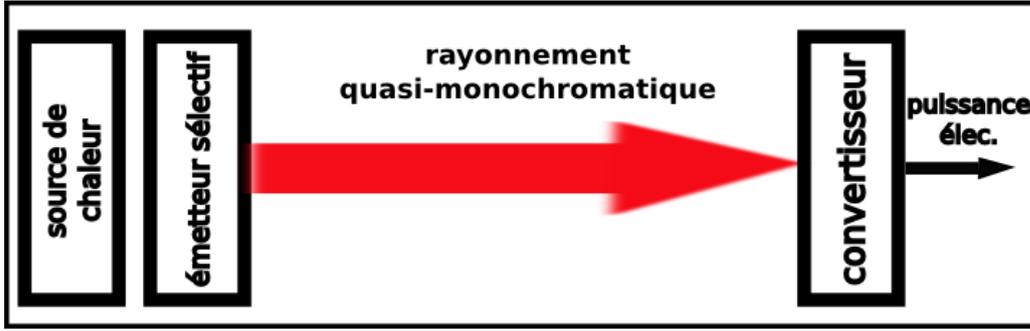


FIGURE 3.9: Système TPV avec un émetteur sélectif.

3.4.4 Limites théoriques de rendement d'un système TPV

3.4.4.1 Effet de la largeur de bande interdite du convertisseur

Le modèle de Shockley-Queisser (paragraphe 3.3.1) est appliqué à un système TPV utilisant le rayonnement solaire direct et un émetteur sélectif respectivement. On compare l'efficacité des deux systèmes en fonction de la largeur de bande interdite du convertisseur définie par la longueur d'onde λ_g équivalente à l'énergie du gap E_g . On calcule pour cela η donnée par l'équation 3.5. λ_g apparaît dans les équations 3.8 and 3.10 et sa valeur affecte essentiellement les valeurs du rayonnement incident absorbé (énergie convertie) et du taux de recombinaison radiative. Le rayonnement solaire est modélisé par un corps noir à $T_s = 5800$ K. L'émissivité du CN est $\epsilon_{CN} = 1$ pour toute longueur d'onde. l'émetteur sélectif émet dans une gamme de longueur d'onde étroite sous $\lambda_{peak} = 1,0 \mu\text{m}$ à $T_e = 5800$ K. Son émissivité est modélisée par une fonction porte entre $0,8 \mu\text{m}$ and $1,0 \mu\text{m}$ comme suit :

$$\begin{cases} \epsilon_{ES}(\lambda) = 1 \text{ pour } \lambda \in [0,8, 1]\mu\text{m} \\ \epsilon_{ES}(\lambda) = 0 \text{ sinon} \end{cases} \quad (3.23)$$

La cellule photovoltaïque est considérée à $T_c = 300$ K. L'efficacité du système TPV en fonction de la longueur d'onde de la bande interdite du convertisseur λ_g est tracée sur la figure 3.10. Avec un émetteur CN, une efficacité maximale $\eta_{CN,max} \simeq 0,3$, connue sous l'appellation de limite Shockley-Queisser est observée pour $\lambda_g \simeq 1 \mu\text{m}$ ¹. Cette limite supérieure est essentiellement due à deux phénomènes : la non conversion de photons avec une énergie inférieure à E_g et la thermalisation du surplus d'énergie contenu dans les photons à énergie plus élevée que E_g . Un filtre passe-haut (en terme de fréquences) suffirait pour augmenter l'efficacité en éliminant les photons à faible énergie. Le système est présenté sur la figure 3.8. Une efficacité maximale $\eta_{filtre,max} = 0,4$ peut alors être atteinte. Pour obtenir ce résultat, on fait l'hypothèse que le rayonnement non transmis par le filtre est récupéré par le système par un moyen quelconque. L'inverse mènerait à des rendements inférieurs. En effet, le rendement calculé ici et qui donne

1. Cette valeur est très proche de la longueur d'onde du gap du silicium ce qui en fait un excellent candidat pour la conversion photovoltaïque du rayonnement solaire.

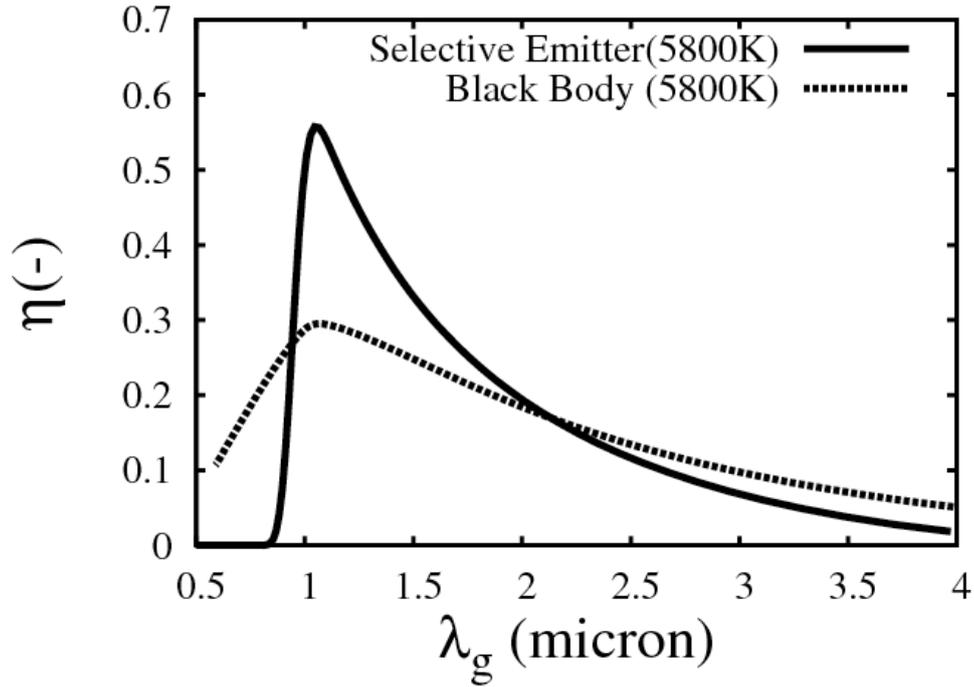


FIGURE 3.10: Efficacité d'un système TPV avec un émetteur CN et un ES, les deux à 5800 K, fonction de la largeur de bande interdite de la cellule photovoltaïque.

ces résultats supérieurs à ceux de Shockely-Queisser est celui du sous-système **(1)** (Figure 3.8). Le rendement du système global **(0)** reste inchangé puisque, une grande partie du rayonnement émis par l'émetteur, la partie filtrée, est perdue. Un ES permet d'aller au delà et d'effectuer cette récupération des photons perdus dans un système TPV à filtre. En effet, sachant qu'il seraient convertis, soit avec un rendement non-optimal, soit non convertis du tout, les photons trop ou peu énergétiques (par rapport à E_g), ne sont pas émis et leur énergie contribue au réchauffement de l'émetteur donc au final à augmenter l'intensité du rayonnement émis selon la distribution de Planck. Le rendement maximal théorique avoisine alors $\eta_{ES,max} \simeq 0,6$ pour $\lambda_g \simeq 1 \mu\text{m}$. De plus, la configuration du système (Fig. 3.9) est plus simple que la précédente. On observe également sur la figure 3.10, comme on pourrait s'y attendre, vu la distribution spectrale du rayonnement de l'ES, une forte et rapide baisse de l'efficacité pour l'ES autour $\lambda = 1,1 \mu\text{m}$. De plus, étant donné que l'émission de l'ES au delà $\lambda = 1,1 \mu\text{m}$ est quasi-nulle, la baisse d'efficacité est beaucoup plus rapide que celle du CN lorsque l'énergie de bande interdite de la cellule s'éloigne de la position du pic d'émission de l'ES. Un émetteur sélectif est donc seulement intéressant lorsqu'il est couplé avec le bon convertisseur.

3.4.4.2 Effet de la largeur du pic d'émission

Une différence essentielle entre le rayonnement d'un CN et celui d'un ES à la même température, est que ce dernier peut être contrôlé de différentes façons. Pour maximiser le rendement avec un CN, un seul convertisseur, dans le cadre des cellules mono-jonction, peut être envisagé, celui avec une largeur de bande interdite autour de $E_g = 1,1 \text{ eV}$ si on parle du rayonnement so-

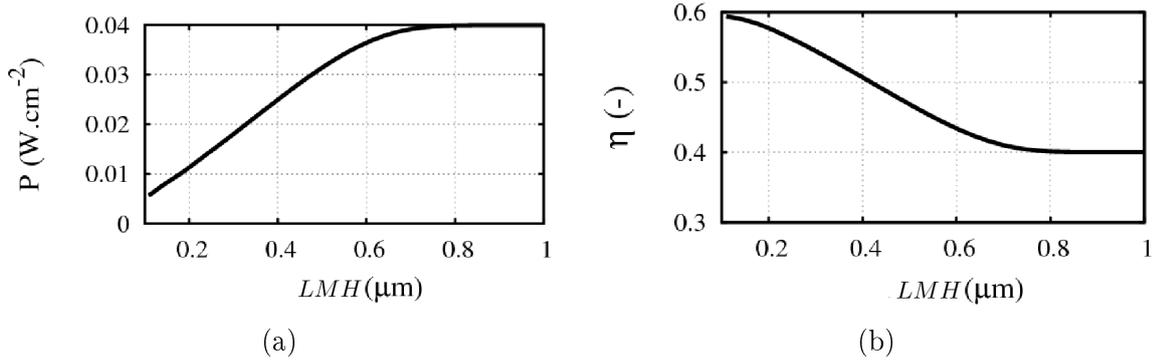


FIGURE 3.11: Puissance électrique (a) et efficacité (b) en fonction de la largeur à mi-hauteur (LMH) du pic d'émission de l'émetteur sélectif.

laire par exemple. Sous ces conditions, et avec une densité de flux incident $\Phi^i = 0,135 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$, le rendement maximal du système est $\eta_{CN,max} = 0,3$ et la puissance électrique maximale est $P_{CN,max} = 0,04 \text{ W}\cdot\text{cm}^{-2}$. Un ES peut en revanche être adapté à différents convertisseurs en décalant la position du pic d'émission, ou encore la longueur d'onde de coupure pour les ES à large bande d'émission. De plus, une large gamme de rendements et de puissances électriques peut être obtenue si on peut contrôler la largeur du pic d'émission. On calcule ici l'efficacité η et la puissance électrique P_e d'un système TPV avec un ES comme données par les équations 3.5 et 3.7 respectivement, en fonction de la largeur du pic d'émission. La largeur à mi hauteur (LMH) du pic apparaît dans la définition de ϵ_{ES} comme suit :

$$\begin{cases} \epsilon_{SE}(\lambda) = 1 \text{ pour } \lambda \in [1 - LMH, 1] \mu\text{m} \\ \epsilon_{SE}(\lambda) = 0 \text{ sinon} \end{cases} \quad (3.24)$$

On fait varier LMH entre $0,1 \mu\text{m}$ et $0,9 \mu\text{m}$. Elle affecte essentiellement le calcul du rayonnement émis donc celui du rayonnement absorbé par la cellule et celui de la puissance électrique résultante. On fixe $E_g = 1,1 \text{ eV}$. La figure 3.11 présente la puissance électrique et l'efficacité d'un système TPV en fonction de la LMH du pic d'émission. Avec un ES, la même puissance maximale $P_{CN,max}$ peut être atteinte avec une efficacité supérieure à $\eta_{CN,max} = 0.3$. Des efficacités encore plus élevées peuvent être atteintes avec des puissances électriques inférieures cependant. Un compromis entre puissance et efficacité est donc à trouver pour chaque application.

On tient finalement à souligner que les conditions d'utilisation d'un ES et du rayonnement solaire direct ne sont pas les mêmes. D'une part, le facteur de forme d'un ES à une cellule est supérieur à celui du disque solaire à la cellule de plusieurs ordres de grandeur. D'autre part, les ES ne sont pas susceptibles d'atteindre la température du disque solaire et on sait pertinemment que le flux émis dépend de la température. Cette comparaison académique a toutefois été présentée par souci de simplicité, et pour mettre en valeur l'utilité potentielle des ES. Des conditions de fonctionnement plus réalistes seront considérées plus tard, notamment au chapitre 5.

3.4.4.3 Effets thermiques

On résout l'équation de la chaleur d'une cellule photovoltaïque (Figure 3.16) en silicium cristallin sous illumination solaire (modélisé par un CN à 5800 K) et sous rayonnement d'un ES en utilisant le modèle du paragraphe 3.3.1 pour le calcul du rendement η . La figure 3.12 présente l'évolution en fonction du temps, de l'efficacité d'une cellule en silicium sous rayonnement solaire (modélisée par un CN à 5800 K) et sous celui, totalement fictif, d'un ES à 5800 K (émissivité modélisée par une fonction porte de largeur $0,2 \mu\text{m}$ entre $0,7 \mu\text{m}$ et $0,9 \mu\text{m}$. On considère un facteur de forme unité de l'ES à la cellule.).

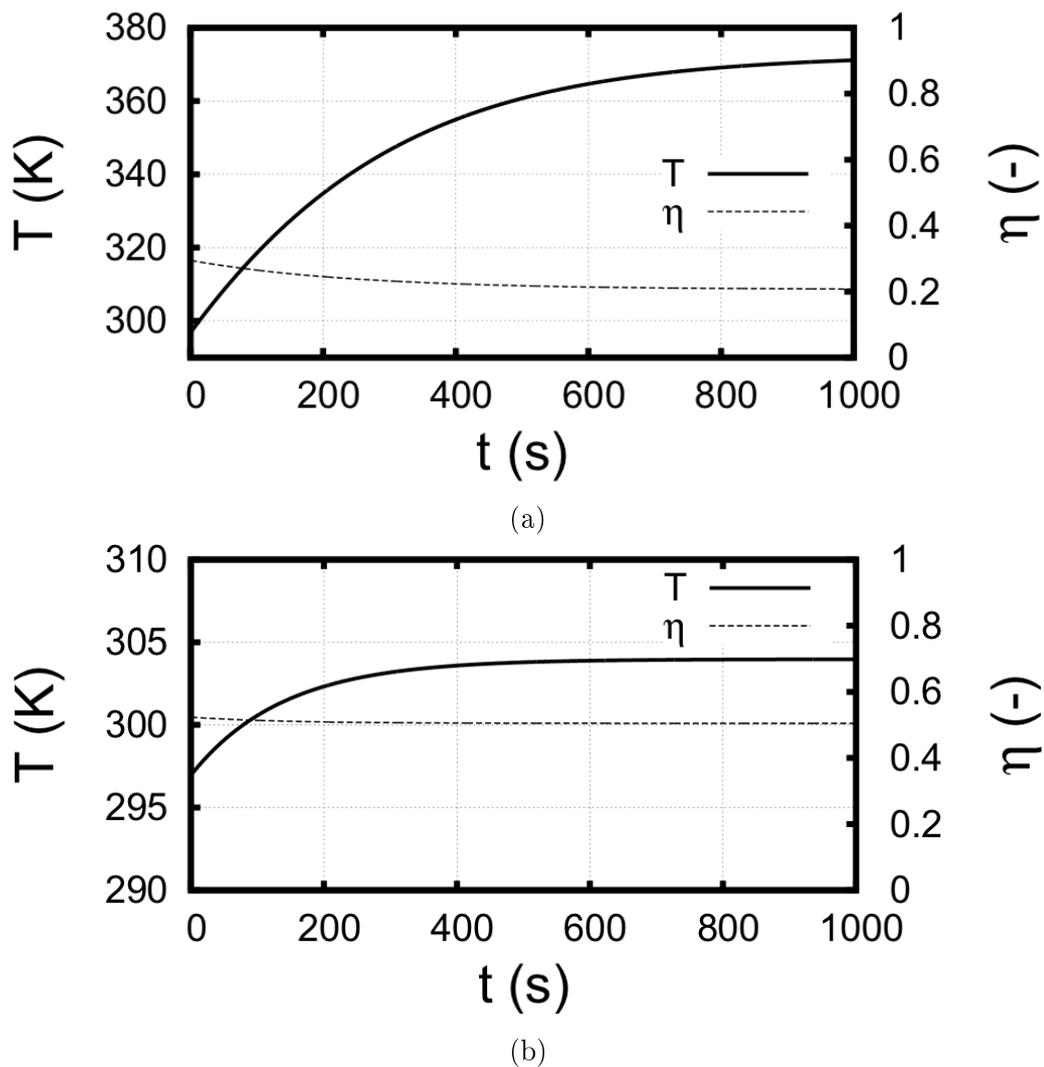


FIGURE 3.12: Évolution de la température et de l'efficacité d'une cellule en silicium exposée à un rayonnement d'un CN à 5800 K (a), et à celui d'un ES (b) dans un environnement à température ambiante de $25 \text{ }^\circ\text{C}$ avec une émissivité modélisée par une fonction porte de largeur $0,2 \mu\text{m}$ entre $0,7 \mu\text{m}$ et $0,9 \mu\text{m}$. On considère un facteur de forme unité de l'ES à la cellule.

Corps noir

La température d'équilibre de la cellule sous rayonnement solaire est de $391 \text{ }^\circ\text{C}$ (3.12a) soit une

élévation de température de plus de 90 °C par rapport à l'ambiante. Ce résultat est consistant avec les températures usuellement mesurées ou considérées pour des études théoriques (Skoplaki and Palyvos [2009], Ferguson and Fraas [1995], Cotal and Sherif [2006]). Simultanément à cette hausse de température, on observe une décroissance de l'efficacité du système. L'efficacité passe ainsi de 29% à 298 K à 19% à 391 K, soit une baisse relative de 35%. On retrouve par ailleurs un coefficient de température de l'efficacité, $\beta = 3,5 \times 10^{-3}$ également en accord avec ce qui est rapporté dans la littérature (Tableau 3.2).

Émetteur sélectif

L'avantage premier des émetteurs sélectifs est qu'ils permettent d'adapter le spectre d'émission de la source thermique au spectre de conversion (essentiellement défini par la largeur de bande interdite du semi-conducteur considéré). Ceci aboutit naturellement à une augmentation de l'efficacité. Cela a déjà été démontré théoriquement pour un système fonctionnant à température ambiante (environ 300 K) (Nefzaoui et al. [2012]). Un avantage subsidiaire surgit lorsqu'on essaie de considérer des conditions de fonctionnement réalistes avec prise en compte des effets thermiques. En effet, la grande efficacité des systèmes TPV, permet d'éviter les pertes thermiques et leurs effets néfastes sur le rendement. Ces effets sont doublement néfastes :

- L'énergie non convertie en électricité fait baisser le rendement.
- Cette énergie, si elle se traduit par une augmentation de la température du système conduira à une détérioration des performances.

En diminuant les pertes thermiques et en évitant l'augmentation en température du système, un émetteur sélectif permet de maintenir un convertisseur TPV très proche de sa température de fonctionnement optimale. Ceci est illustré par la figure 3.12b : on observe une très faible augmentation de la température de la cellule (moins de 10 K) et une baisse relative de l'efficacité de 3,8%.

Flux ou sélectivité

Le moindre échauffement de la cellule avec l'émetteur sélectif est dû à deux phénomènes :

- La sélectivité du rayonnement permet un meilleur taux de conversion. Une moindre proportion du flux incident est ainsi dissipée sous forme de chaleur.
- Le flux incident avec l'émetteur sélectif est inférieur à celui du corps noir. En effet avec des valeurs maximales du flux du même ordre, le spectre plus étendu du CN permet d'avoir un flux total incident plus important.

Afin de séparer ces deux phénomènes, on normalise les flux et on prend un flux incident égal à celui que recevrait une cellule en orbite terrestre. On obtient alors les évolutions de température et d'efficacité présentées sur la figure 3.13. On observe toujours une augmentation de température plus faible avec l'émetteur sélectif. Avec le CN, on observe une augmentation de température de 74 °C et une baisse relative d'efficacité de 29%. On obtient une efficacité à l'équilibre de 21%. Avec l'ES, on observe une augmentation de température de 58 °C et une baisse relative d'efficacité de 24%. On obtient une efficacité à l'équilibre de 43%. La sélectivité

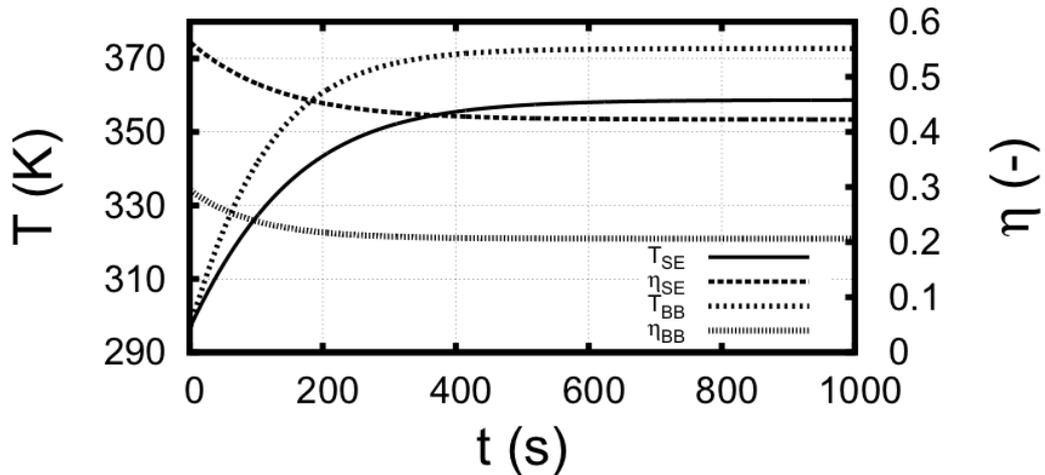


FIGURE 3.13: Évolution de la température et de l'efficacité d'une cellule en silicium avec un ES et un CN à 5800 K dans un environnement à température ambiante de 25 °C. On considère ici la même densité de flux incident de $0,1 \text{ W.cm}^{-2}$.

du rayonnement incident contribue donc effectivement à un moindre échauffement de la cellule et à un maintien du rendement du système à un niveau relativement élevé.

Les deux modèles relativement simples, thermique et celui de Shockley-Queisser, ont permis d'évaluer certains effets thermiques sur les performance des systèmes TPV.

3.5 Conclusion

On a présenté dans ce chapitre les systèmes qu'on se propose d'optimiser dans ce travail, *i.e.* les systèmes TPV avec émetteurs sélectifs. Ces systèmes font partie d'une large panoplie de techniques mises au point pour dépasser les rendements actuels des systèmes PV. Un aperçu historique du développement de la conversion PV de l'énergie radiative et une revue des différentes solutions envisagées pour ses développements présents et futurs ont initialement été présentés. On a ensuite rapporté un modèle électrique simple qui nous a permis de retrouver la limite théorique de rendement d'une cellule PV mono-jonction sous rayonnement solaire direct, connue depuis [Shockley and Queisser \[1961\]](#). On a également proposé un modèle thermique, qui nous a permis de retrouver les baisses de rendement des systèmes PV dues à une élévation de la température de fonctionnement et qui sont désormais largement connues. On s'est ensuite focalisé sur l'une des solutions présentées, le TPV avec émetteurs sélectifs. L'application des mêmes modèles à cette solution, nous a permis de montrer qu'un émetteur sélectif associé à un convertisseur PV convenable permet :

- de dépasser la limite de Shockley-Queisser du rendement d'une cellule PV mono-jonction sous rayonnement solaire direct et concentré (31% et 41% respectivement).
- un moindre échauffement de la cellule PV (en considérant la même densité de flux radiatif incident) et d'éviter par conséquent les baisses de rendement des cellules PV dues à une

élévation de la température en fonctionnement.

L'intérêt de ces systèmes étant confirmé, on se propose à présent de concevoir et d'optimiser des ES pour des applications TPV. Dans ce but, on expose au prochain chapitre différentes méthodes d'optimisation qui peuvent être appliquées pour résoudre ce genre de problèmes. L'une d'entre elles, la méthode d'optimisation par essaims de particules sera appliquée au chapitre suivant et les ES obtenus y seront présentés.

Bibliographie

- P. Aigrin. The thermophotovoltaic converter. Unpublished lectures given at Department of Electrical Engineering, MIT, Cambridge, MA, 1960/61. (Reprint not available), 1960. [51](#)
- D.J. Anderson, W.A. Wong, and K.L. Tuttle. An overview and status of nasa's radioisotope power conversion technology. Technical report, NRA, NASA/TM-2005-213980, 2005. [51](#)
- S. Basu, Y.-B. Chen, and Z. M. Zhang. Microscale radiation in thermophotovoltaic devices – a review. *Int. J. Energ. Res.*, 31(6-7) :689–716, 2007. [63](#)
- A.E. Becquerel. Recherches sur les effets de la radiation chimique de la lumière au moyen des courants électriques. *C. R. Acad. Sci.*, 9 :145 – 149, 1839a. [48](#)
- A.E. Becquerel. Mémoire sur les effets électriques produits sous l'influence des rayons solaires. *C. R. Acad. Sci.*, 9 :561 – 567, 1839b. [48](#), [51](#)
- S. M. Bedair, M. F. Lamorte, and J. R. Hauser. A two-junction cascade solar-cell structure. *Appl. Phys. Lett.*, 34(1) :38–39, 1979. [60](#)
- Peter Bermel, Michael Ghebrebrhan, Walker Chan, Yi Xiang Yeng, Mohammad Araghchini, Rafif Hamam, Christopher H. Marton, Klavs F. Jensen, Marin Soljačić, John D. Joannopoulos, Steven G. Johnson, and Ivan Celanovic. Design and global optimization of high-efficiency thermophotovoltaic systems. *Opt. Express*, 18(S3) :A314–A334, Sep 2010. [51](#)
- B. Bitnar, W. Durisch, and R. Holzner. Thermophotovoltaics on the move to applications. *Applied Energy*, 105(0) :430 – 438, 2013. ISSN 0306-2619. [51](#)
- A. Braun, E. A. Katz, and J. M. Gordon. Basic aspects of the temperature coefficients of concentrator solar cell performance parameters. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, pages n/a–n/a, 2012. [58](#)
- L. Broman. Thermophotovoltaics bibliography. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, 3(1) :65–74, 1995. [51](#)
- Walker R. Chan, Peter Bermel, Robert C. N. Pilawa-Podgurski, Christopher H. Marton, Klavs F. Jensen, Jay J. Senkevich, John D. Joannopoulos, Marin Soljačić, and Ivan

- Celanovic. Toward high-energy-density, high-efficiency, and moderate-temperature chip-scale thermophotovoltaics. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2013. doi : 10.1073/pnas.1301004110. [52](#)
- D. M. Chapin, C. S. Fuller, and G. L. Pearson. A New Silicon p–n Junction Photocell for Converting Solar Radiation into Electrical Power. *J. Appl. Phys.*, (25) :676, 1954. [49](#), [51](#), [58](#)
- D. Chubb. *Fundamentals of Thermophotovoltaic Energy Conversion*. Elsevier Science, 2007. [63](#)
- G. Conibeer. Third-generation photovoltaics. *Materials Today*, 10(11) :42 – 50, 2007. [59](#), [60](#), [61](#)
- G. Conibeer, N. Ekins-Daukes, J-F. Guillemoles, D. König, E-C. Cho, C-W. Jiang, S. Shrestha, and M.A. Green. Progress on hot carrier cells. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 93(6–7) : 713–719, 2009. 17th International Photovoltaic Science and Engineering Conference. [62](#)
- H. Cotal and R. Sherif. Temperature-dependent emissivity of silicon-related materials and structures. volume 1, pages 845 – 848, 2006. [58](#), [68](#)
- T.J. Coutts. A review of progress in thermophotovoltaic generation of electricity. *Renewable Sustainable Energy Rev.*, 3(2–3) :77 – 184, 1999. [51](#), [63](#)
- J. S. Coventry. Performance of a concentrating photovoltaic/thermal solar collector. *Sol. Energy*, 78(2) :211 – 222, 2005. ISES Solar World Congress 2003. [57](#)
- A. Einstein. Concerning an heuristic point of view toward the emission and transformation of ligh. *Ann. Phys.*, 17 :132, 1905. [48](#)
- L.G. Ferguson and L.M. Fraas. Theoretical study of gasb pv cells efficiency as a function of temperature. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 39(1) :11 – 18, 1995. [53](#), [58](#), [68](#)
- L. Fraas and L. Minkin. Tpv history from 1990 to present & future trends. *AIP Conference Proceedings*, 890(1) :17–23, 2007. [53](#)
- C. E. Fritts. On a new form of selenium photocell. *Am. J. Sci.*, 26 :465, 1883. [48](#)
- M. A. Green. Multiple band and impurity photovoltaic solar cells : General theory and comparison to tandem cells. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, 9(2) :137–144, 2001a. [61](#)
- M. A. Green. Third generation photovoltaics : Ultra-high conversion efficiency at low cost. *Prog. Photovoltaics Res. Appl.*, 9(2) :123–135, 2001b. [61](#)
- M. A. Green. Third generation photovoltaics : solar cells for 2020 and beyond. *Physica E*, 14 (1–2) :65 – 70, 2002. [59](#)

- M. A. Green, K. Emery, Y. Hishikawa, W. Warta, and E. D. Dunlop. Solar cell efficiency tables (version 39). *Prog. Photovolt. : Res. Appl.*, 20(1) :12–20, 2012. [49](#), [59](#), [60](#), [62](#)
- R. N. Hall. Electron-hole recombination in germanium. *Phys. Rev.*, 87 :387–387, 1952. [61](#)
- E. D. Jackson. Areas for improvement of the semiconductor solar energy converter. *Trans. of the Conference on the Use of Solar Energy*, page 122, 1955. [60](#)
- H. H. Kolm. Solarbattery power source. *Quarterly Progress Report Solid State Research, Group 35, (Lexington, MA : MIT Lincoln Laboratory)*, page 13, 1956. [51](#)
- L. J. A. Koster, V. D. Mihailetschi, R. Ramaker, and P. W. M. Blom. Light intensity dependence of open-circuit voltage of polymer : fullerene solar cells. *Appl. Phys. Lett.*, 86(12) :123509, 2005. [62](#)
- D. König, K. Casalenuovo, Y. Takeda, G. Conibeer, J.F. Guillemoles, R. Patterson, L.M. Huang, and M.A. Green. Hot carrier solar cells : Principles, materials and design. *Physica E*, 42(10) : 2862–2866, 2010. 14th International Conference on Modulated Semiconductor Structures. [62](#)
- A. Le Bris. *Étude de faisabilité d'un dispositif photovoltaïque à porteurs chauds*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2011. [62](#)
- G. Martinelli and M. Stefancich. Solar cell cooling. In Antonio L. Luque and Viacheslav Andreev, editors, *Concentrator Photovoltaics*, volume 130 of *Springer Series in Optical Sciences*, pages 133–149. Springer Berlin / Heidelberg, 2007. [57](#)
- M. Mauk. Survey of thermophotovoltaic (tpv) devices. In A. Krier, editor, *Mid-infrared Semiconductor Optoelectronics*, volume 118 of *Springer Series in Optical Sciences*, pages 673–738. Springer Berlin / Heidelberg, 2006. [52](#), [59](#)
- C. S. Murray, C. J. Crowley, S. Murray, N. A. Elkouh, R. W. Hill, and D. E. Chubb. Thermophotovoltaic converter design for radioisotope power systems. *AIP Conference Proceedings*, 738 (1) :123–132, 2004. [51](#)
- E. Nefzaoui, J. Drevillon, and K. Joulain. Selective emitters design and optimization for thermophotovoltaic applications. *J. Appl. Phys.*, 111(8) :084316, 2012. [68](#)
- R. E. Nelson. A brief history of thermophotovoltaic development. *Semicond. Sci. Tech.*, 18(5) : S141, 2003. [51](#)
- G. Notton, C. Cristofari, M. Mattei, and P. Poggi. Modelling of a double-glass photovoltaic module using finite differences. *App. Therm. Eng.*, 25(17–18) :2854 – 2877, 2005. [57](#)
- R. S. Ohl. Light-sensitive Electric Device, 1946. [48](#)

- J. I. Pankove. *Optical Processes in Semiconductors*. Dover Books on Physics. Dover, 1971. [50](#), [51](#)
- B. Parida, S. Iniyan, and R. Goic. A review of solar photovoltaic technologies. *Renewable and Sustainable Energy Rev.*, 15(3) :1625 – 1636, 2011. [59](#)
- J. Perlin. The silicon solar cell turns 50. Technical report, National Renewable Energy Laboratory, 2004. [51](#)
- E. Radziemska. The effect of temperature on the power drop in crystalline silicon solar cells. *Renew. Energ.*, 28(1) :1 – 12, 2003. [57](#)
- E. Rosencher and B. Vinter. *Optoélectronique : cours et exercices corrigés*. Sciences Sup. Dunod, 2002. [56](#)
- A. Royne, J. D. Christopher, and D. R. Mills. Cooling of photovoltaic cells under concentrated illumination : a critical review. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 86(4) :451 – 483, 2005. [56](#), [57](#)
- G. Sala and A. Luque. Past experiences and new challenges of pv concentrators. In A. L. Luque and V. Andreev, editors, *Concentrator Photovoltaics*, volume 130 of *Springer Series in Optical Sciences*, pages 1–23. Springer Berlin / Heidelberg, 2007. [62](#)
- W. Shockley and H. J. Queisser. Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells. *J. Appl. Phys.*, 32 :510–519, 1961. [53](#), [54](#), [58](#), [62](#), [69](#)
- W. Shockley and W. T. Read. Statistics of the recombinations of holes and electrons. *Phys. Rev.*, 87 :835–842, 1952. [61](#)
- E. Skoplaki and J.A. Palyvos. On the temperature dependence of photovoltaic module electrical performance : A review of efficiency/power correlations. *Sol. Energy*, 83(5) :614 – 624, 2009. [57](#), [58](#), [68](#)
- R. Smith and L. Cohn. Cpv sector finally taking off? *Sun and wind energy*, pages 75–79, 2012. [62](#)
- A. Stoletow. Sur une sorte de courants électriques provoqués par les rayons ultraviolets. *Phil. Mag.*, 26 :317, 1888. [48](#)
- S. M. Sze and K. K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience publication. Wiley, 2006. [56](#)
- A. Vossier, D. Chemisana, G. Flamant, and A. Dollet. Very high fluxes for concentrating photovoltaics : Considerations from simple experiments and modeling. *Renew. Energ.*, 38 (1) :31 – 39, 2012. [53](#), [57](#)

- C. A. Wang, P. G. Murphy, P. W. O'Brien, D. A. Shiau, A. C. Anderson, Z. L. Liao, D. M. DePoy, and G. Nichols. Wafer-bonded internal back-surface reflectors for enhanced tpv performance. *AIP Conference Proceedings*, 653(1) :473–481, 2003. [63](#)
- D. C. White, B. D. Wedlock, and J. Blair. Recent advance in thermal energy conversion. pages 125–132, 1961. [51](#)
- M. Wolf. *Proc. IRE*, 48 :1246, 1960. [61](#)
- J. J. Wysocki and P. Rappaport. Effect of temperature on photovoltaic solar energy conversion. *J. Appl. Phys.*, 31(3) :571–578, 1960. [57](#)
- P. Würfel. Solar energy conversion with hot electrons from impact ionisation. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 46(1) :43–52, 1997. [61](#)
- J Zhao, A. Wang, M. A. Green, and F. Ferrazza. 19.8% efficient “honeycomb” textured multicrystalline and 24.4% monocrystalline silicon solar cells. *Appl. Phys. Lett.*, 73(14) :1991–1993, 1998. [49](#)

Chapitre 4

Méthodes d'optimisation pour problèmes difficiles

Sommaire

4.1	Introduction	77
4.2	Problèmes difficiles	78
4.3	Quelques méta-heuristiques	81
4.3.1	Algorithmes génétiques	81
4.3.1.1	Jargon	82
4.3.1.2	Principe	83
4.3.1.3	Applications	86
4.3.2	Essaims de particules	86
4.3.2.1	Jargon	87
4.3.2.2	Principe	87
4.3.2.3	Applications	92
4.4	Conclusion	93

4.1 Introduction

On a présenté aux chapitres précédents les outils physiques permettant de calculer les grandeurs qu'on vise à optimiser dans le présent travail. En effet, on a commencé au chapitre 2 par une introduction aux différents modes de transfert de chaleur avec une insistance particulière sur les transferts radiatifs qui sont au cœur de la conversion thermo-photovoltaïque. Les outils d'électromagnétisme présentés, permettront de calculer les propriétés radiatives des émetteurs sélectifs à concevoir et à optimiser dans la suite de ce travail et de caractériser le rayonnement à convertir. On a ensuite présenté au chapitre 3 les phénomènes physiques gouvernant la conversion photovoltaïque de rayonnement. Ils permettront de calculer les performances finales d'un système TPV utilisant les émetteurs sélectifs optimisés : sa puissance électrique et

son efficacité en l'occurrence. Dans ce chapitre, on présente les méthodes d'optimisation utilisées pour obtenir les émetteurs sélectifs en question. On commence pour cela par une brève définition des « problèmes difficiles », et on présente par la suite deux méta-heuristiques capables de résoudre le problème ici-traité. La première est celle des algorithmes génétiques (AG) 4.3.1, déjà utilisés avec succès, malgré quelques limitations, pour la conception d'émetteurs sélectifs (Drevillon and Ben-Abdallah [2007]). On identifiera ces limitations et on proposera pour les pallier, l'optimisation par essaims de particules (OEP).

4.2 Problèmes difficiles

La définition d'un problème comme difficile est très subjective puisqu'elle dépend de l'état de la connaissance du problème en question. Il est toutefois possible de donner les grandes lignes permettant de désigner, qualitativement au moins, un problème comme difficile (Dréo et al. [2005]). En général, on prend pour cela en compte le coût en ressources éventuellement prohibitif de la résolution d'un problème ou, pire encore, l'impossibilité de trouver une solution. Quantitativement, Clerc [2004] donne quelques outils formels d'estimation de difficulté et qui se ramènent en général au calcul de la probabilité d'échec au premier essai de résolution. Pour un problème à variables continues, l'impossibilité de localiser la région de l'optimum global à partir de propriétés particulières du problème (propriétés mathématiques de la fonctionnelle à optimiser ou de la topologie de l'espace de recherche), peut le faire qualifier de difficile. C'est le cas par exemple pour un problème où la fonctionnelle à optimiser présente de nombreux minima locaux, lorsqu'elle est fortement irrégulière, non différentiable ou encore discontinue. On donne sur la figure 4.1 des illustrations intuitives de quelques espaces de recherche unidimensionnels présentant quelques une des propriétés qui rendent difficile la recherche de l'optimum. Dans leur tentative de répondre à la question « Pourquoi l'optimisation est-elle difficile ? », Weise et al. [2009] ont fait un inventaire exhaustif des différents facteurs qui contribuent à rendre un problème difficile à optimiser et les ont classés dans les catégories suivantes :

- **La convergence prématurée** a lieu lorsque l'algorithme se retrouve après un nombre réduit d'itérations dans un optimum local du problème, avec aucune possibilité d'en sortir et d'explorer d'autres régions de l'espace de recherche où se trouverait l'optimum global. Une solution à ce problème consiste à assurer lors de la définition des différents paramètres de l'algorithme d'optimisation, un équilibre entre exploration de l'espace de recherche et exploitation des régions intéressantes, *i.e.* qui se trouvent autour d'optima. Dans des algorithmes à base de populations comme les algorithmes génétiques ou l'optimisation par essaims de particules, ceci consiste à assurer tout au long de l'algorithme une bonne diversité des populations en jeu.
- **La rugosité** : une forte rugosité de l'espace de recherche (Figure 4.1c) équivaut à de grands « gradients » de la fonctionnelle à optimiser par rapport à un ou plusieurs paramètres. C'est ce qu'on appelle autrement, une faible causalité, *i.e.* qu'une faible vari-

ation d'un paramètre induit une forte variation de la fonctionnelle à optimiser. Ceci est généralement dû à un mauvais choix de la fonctionnelle par l'opérateur et pourrait être évité par une redéfinition de celle-ci. Une utilisation conjointe d'un algorithme d'optimisation locale avec l'algorithme d'optimisation globale peut toutefois lisser l'espace de recherche sans passer par une redéfinition de la fonction objectif (Ross [1999]).

- **l'espace de recherche trompeur** contient une information de gradient intéressante qui guide les solutions possibles loin des optima. Une grande population et le maintien d'un niveau élevé de diversité peuvent pallier ce problème.
- **La neutralité** : on parle de neutralité lorsque l'espace de recherche présente un « relief » très plat, *i.e.* lorsque la fonction objectif prend des valeurs identiques ou très proches pour un grand domaine des paramètres d'entrée. Aucune information de gradient intéressante n'est alors disponible dans ce domaine. Pour y évoluer localement, les méthodes de gradient sont alors à proscrire et d'autres règles d'évolution locale, stochastiques notamment, peuvent être utilisées pour résoudre ce problème. La neutralité peut également être évitée par une redéfinition de la fonction objectif.
- **L'épistasie** en génétique est l'interaction entre gènes non allèles¹. En optimisation, elle peut être entendue comme l'interaction entre paramètres contrôlant des propriétés différentes du système considéré. Une valeur d'un paramètre peut par exemple, pour une fonction objectif donnée, complètement masquer l'effet de la variation d'autres paramètres. On peut alors penser avoir trouvé une solution optimale alors que tous les paramètres n'ont pas été pris en considération. Ce problème est essentiellement dû au choix de la fonction objectif, et doit être pris en compte lors de la définition de celle-ci.

La plupart de ces facteurs peuvent souvent être évités par un choix judicieux de la fonction objectif. Lorsque ceci n'est pas le cas, ils posent de sérieux problèmes d'exploitation locale de certaines régions de l'espace de recherche. Les méta-heuristiques définissent des règles générales, souvent stochastiques, d'exploitation et d'exploration d'un espace de recherche. On présente à la prochaine section deux de ces méthodes qui seront utilisées par la suite pour la conception et l'optimisation d'émetteurs sélectifs : les algorithmes génétiques et l'optimisation par essaims de particules.

1. Le génotype d'un individu comprend, pour chaque propriété (la couleur des yeux par exemple), deux gènes, issus chacun d'un parent. Si les deux gènes sont identiques l'individu est dit homozygote. Si les deux gènes sont différents, l'individu est hétérozygote et ces deux gènes homologues différents constituent un couple d'allèles (Génermont).

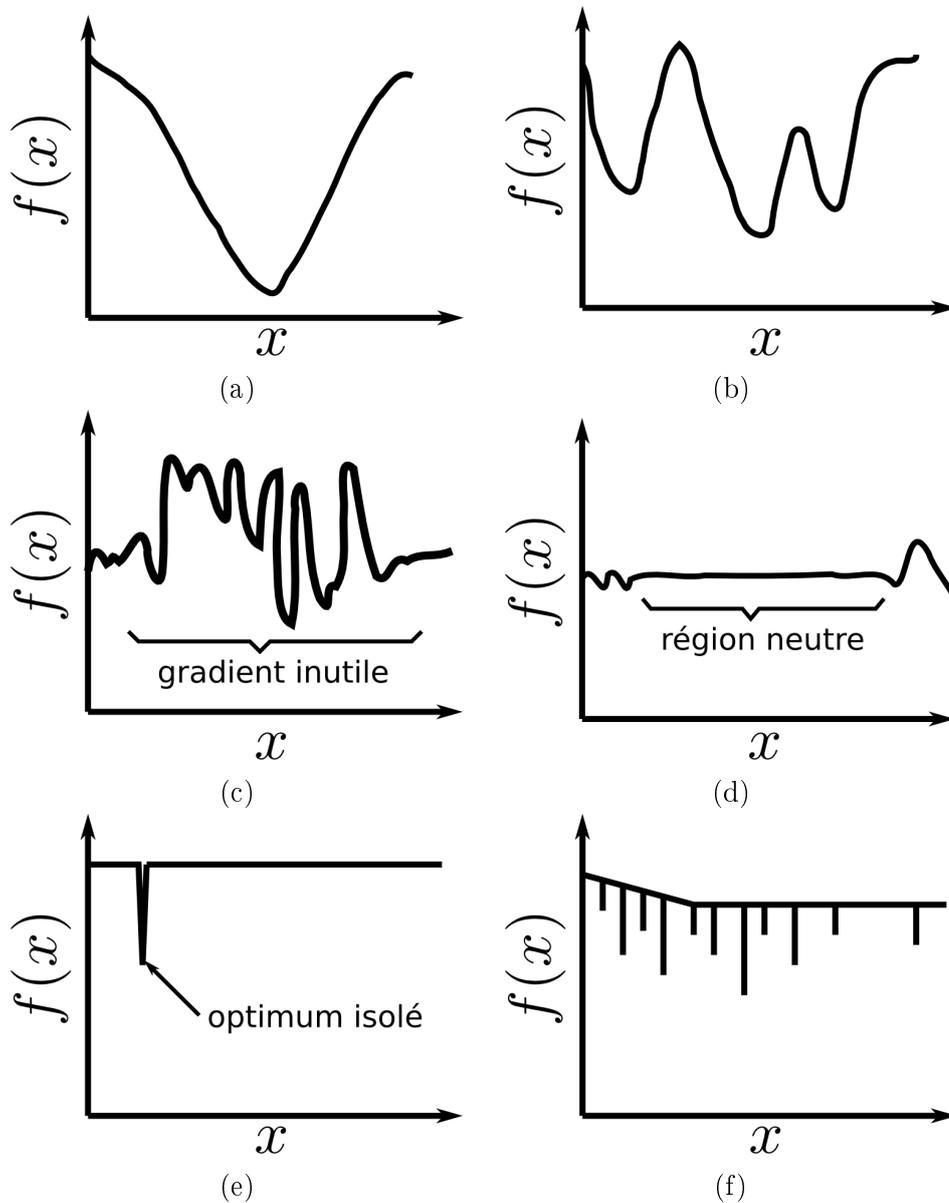


FIGURE 4.1: Différents facteurs de difficulté pour la minimisation d'une fonctionnelle f : la multimodalité, *i.e.* la multiplicité de minima locaux (b), une forte irrégularité (ou encore « rugosité ») (c), la neutralité (d), l'épistasie (e), ou encore la combinaison de plusieurs de ces facteurs, ici épistasie et multimodalité (f). La figure (a) représente un problème « facile » où il s'agit d'optimiser une fonction continue, dérivable et fortement convexe présentant un seul optimum.

4.3 Quelques méta-heuristiques

Les méta-heuristiques sont des méthodes d'optimisation qui améliorent itérativement une solution d'un problème donné par rapport à une mesure de la qualité de la solution. Leur appellation vient du fait qu'elles sont postérieures aux méthodes d'optimisation classiques (méthode de gradient, simplex, etc.), ou heuristiques classiques, et permettent de pallier certaines lacunes de celles-ci (Dréo et al. [2005]). Ces méthodes sont des méthodes itératives, de la même façon que les méthodes classiques. Elles présentent en revanche, des différences fondamentales avec celles-ci (Kennedy et al. [2001]), en ce qu'elles sont notamment :

- Des méthodes à population : on améliore à chaque itération un ensemble de N solutions possibles (contre une seule dans les méthodes à gradient), les unes bénéficiant des améliorations des autres. Ceci est fondamentalement différent de N exécutions successives d'une méthode à gradient avec différentes conditions initiales et d'une compilation de toute l'information obtenue à la fin de ce jeu d'exécutions. Ce dernier cas peut être vu comme « l'interaction linéaire » de N systèmes. Dans le premier, il s'agirait plutôt « d'interactions non-linéaires ». Il en résulte une exploration beaucoup plus rapide du même espace de recherche.
- Des méthodes directes : elles ne nécessitent pas de calcul de la dérivée de la fonction à optimiser pour évaluer la distance à un optimum local. Ceci assure, d'une part, un gain de temps lors de l'exécution puisque une seule évaluation de la fonction à optimiser est nécessaire à chaque itération (contre deux pour le gradient). D'autre part, cela rend possible l'optimisation de fonctions non dérivables.
- Des méthodes stochastiques : les règles d'évolution, *i.e.* d'amélioration des solutions sont de natures probabiliste¹. Cette propriété permet de pallier nombre de facteurs de difficulté introduits précédemment, en ce qu'elle permet d'une part, d'éviter les minima locaux, et d'autre part, une exploration plus rapide de vastes espaces de recherche.

4.3.1 Algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques, probablement les premières méta-heuristiques et les premiers de la grande famille des algorithmes évolutionnaires, sont de loin les plus utilisés de nos jours². Ils trouvent leur origine dans les travaux du biologiste Fraser (Fraser [1962]) qui travaillait dans les années 1950 sur la modélisation de systèmes génétiques d'organismes vivants et leur simulation numérique (Kennedy et al. [2001]). C'est John Holland qui a, au cours de ses travaux en intelligence artificielle sur les systèmes adaptatifs, développé, quelques années plus tard, la méthode d'optimisation à proprement parler (Holland [1962, 1975/1992]).

1. Dans les méthodes de descente, une règle déterministe d'usage pour minimiser une quantité est de s'orienter dans l'espace de recherche dans la direction opposée à celle du gradient de la quantité en question qui se trouve être la direction de déplacement optimale. C'est la famille des méthodes à gradient (Culioli [1994]).

2. D'après les données bibliométriques de Web Of Knowledge ou Google Scholar en cherchant différentes méta-heuristiques.

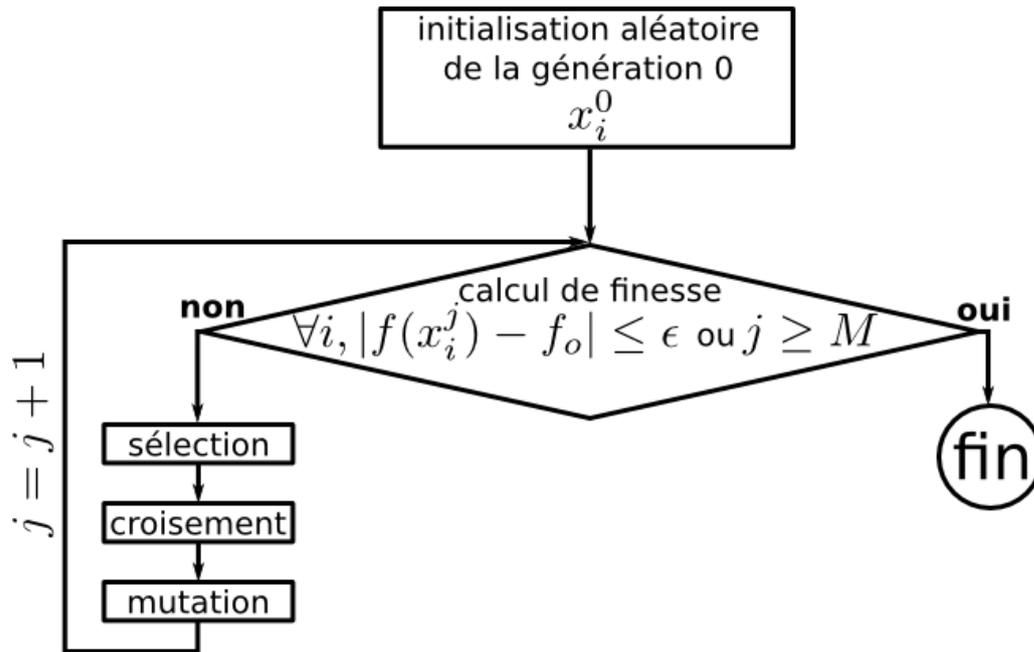


FIGURE 4.2: Diagramme simplifié d'un algorithme génétique

4.3.1.1 Jargon

Avant d'exposer le principe de cette méthode d'optimisation il convient de définir les termes qui seront utilisés dans la suite :

- **chromosome** : un chromosome est une solution possible. Pour un problème à résoudre dans un espace de recherche de dimension D où chaque dimension correspond à un paramètre de la fonctionnelle à optimiser, un chromosome est un vecteur de dimension D . Chaque gène i du chromosome (coordonnée i du vecteur correspondant) représente une valeur du paramètre à optimiser.
- **individu** : un individu est une solution possible. Dans la suite, l'utilisation de ce terme sera équivalente à celle de chromosome.
- **population** : une population est un ensemble de N individus, ou de solutions possibles, qu'on cherche à améliorer au cours de l'algorithme. Les algorithmes génétiques sont en général à population constante, bien que certaines variantes proposent d'utiliser des populations à nombre d'individus variable.
- **génération** : est la population à une itération j de l'algorithme.
- **finesse** : est une fonction de l'espace de recherche dans \mathbb{R} qui caractérise la qualité de chaque individu, *i.e.* de chaque solution possible. Elle est évaluée à chaque itération de l'algorithme pour tous les individus d'une population et permet d'en sélectionner les « meilleurs ».
- **opérateur** : les opérateurs sont des opérations élémentaires qui permettent le changement d'état et l'évolution d'un individu, *i.e.* d'une solution possible au cours de l'exécution de l'algorithme. Les opérateurs principaux d'un AG sont la sélection, le croisement et la

mutation.

4.3.1.2 Principe

La figure 4.2 est un diagramme simplifié d'un algorithme génétique. On présente dans ce qui suit le déroulement de chaque étape de ce diagramme.

Représentation des paramètres

L'information génétique en biologie est binaire : un gène du génotype d'un individu peut être ou non exprimé dans son phénotype. Par analogie, les données binaires se prêtent plus intuitivement au traitement par l'algorithme génétique le plus simple. Pour les paramètres à valeurs réelles ou entières, il est possible de les représenter dans une base binaire, comme il est usuel de faire en informatique, ou de décomposer leur domaine de variation en niveau de gris. Ce dernier cas correspondrait à l'implémentation d'une expression partielle d'un gène en génétique. Considérons un problème à un seul paramètre x qui peut avoir des valeurs dans le domaine $[x_{min}, x_{max}]$. Si x est codé sur 8 bits par exemple, il aura, au cours de l'exécution de l'AG, une valeur sous forme binaire x_b comprise entre 0 (00000000) et 255 (11111111). La valeur réelle du paramètre, pertinente pour la résolution du problème physique est alors donnée par $x = x_{min} + \frac{x_{max} - x_{min}}{255} x_b$.

Dans la suite, on considérera exclusivement des valeurs binaires pour illustrer le fonctionnement d'un AG.

Initialisation

L'algorithme commence par une initialisation aléatoire d'une population de N individus. Avec une bonne connaissance du problème à résoudre, l'initialisation peut être déterministe pour accélérer la convergence de l'algorithme. Une combinaison des deux méthodes peut aussi être envisagée. Chaque individu est représenté par un vecteur de dimension D . Chaque coordonnée i du vecteur correspond à un paramètre du problème à optimiser. Des populations de taille moyenne sont recommandées, *i.e.* $N \in [20 : 200]$ tout en prenant en compte la dimension D de l'espace de recherche. La taille de la population augmente en général de manière proportionnelle à D (De Jong [1975]; Kennedy et al. [2001]).

Évaluation ou calcul de finesse

Il est fréquent de connaître les propriétés idéales du système à atteindre (Puissance ou rendement maximal d'une cellule PV par exemple.). L'algorithme consiste alors à ajuster les paramètres du système pour s'en approcher. La finesse peut-à l'instar être définie comme la différence (ou la distance) des propriétés du système avec un jeu de paramètres donné et les propriétés cibles ou objectif. Il s'agit alors de la minimiser.

Dans un problème d'optimisation de transferts de chaleur, la finesse peut être égale au flux échangé et il s'agit alors de la maximiser. Dans ces deux cas, la finesse est égale à une grandeur

physique. Il est toutefois déconseillé d'utiliser les grandeurs physiques comme fonction de « finesse ». Cela soulève plusieurs problèmes pour l'application des différents opérateurs de l'algorithme Kennedy et al. [2001]. L'un de ces problèmes est qu'après plusieurs itérations, les différentes solutions sont assez proches, de même pour leurs performances physiques. Ceci rend l'opération suivante de l'AG, en l'occurrence la sélection relativement difficile. Une fonction de finesse qui permettrait de distribuer uniformément les différentes solutions sur un intervalle donné, $[0, 1]$ par exemple, rendrait plus simple cette opération. D'autres solutions, telle que la normalisation de la finesse, ont été proposées dans la littérature (Kennedy and Eberhart [1995]; Kreinovich et al. [1993]). Outre ce problème, la mauvaise définition de la finesse est en général source de plusieurs facteurs de difficulté du problème d'optimisation (Weise et al. [2009]).

Sélection

La sélection est le premier opérateur d'un AG. Cet opérateur traduit un approche élitiste des AG, en assurant « la survie du meilleur ». En effet, chaque individu d'une génération j a une probabilité de passage à la génération $j + 1$, proportionnelle à sa finesse, *i.e.* à sa qualité. Un algorithme de sélection communément utilisé est celui de la roulette. On construit une roulette de N cases inégales. Chaque case correspond à un individu et sa surface est proportionnelle à la finesse de cet individu. Un tour de roulette permet de sélectionner un individu pour la génération suivante. On effectue autant de tours que d'individus nécessaires pour la génération suivante. Le nombre d'individus sélectionnés n_s est en général strictement inférieur à N . Les $N - n_s$ individus restants pour maintenir une population constante sont créés par croisement.

Croisement

Le croisement est l'opérateur principal et fondamentalement génétique de cet algorithme. C'est

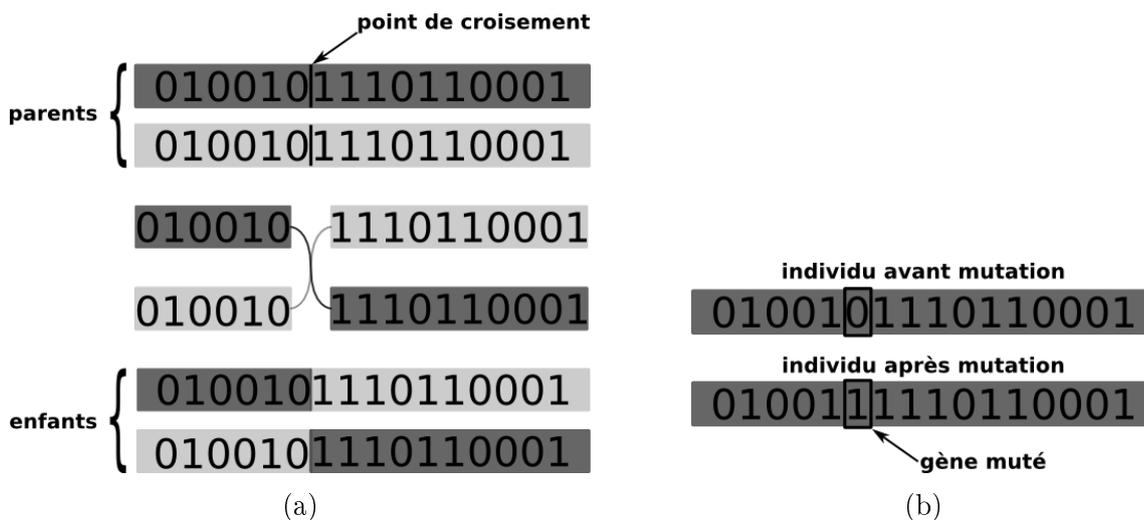


FIGURE 4.3: Opération de croisement entre deux individus (a) et de mutation d'un individu (b) dans un algorithme génétique.

l'équivalent de la reproduction sexuelle chez le vivant au cours de laquelle des individus mettent

en commun du matériel génétique pour constituer le matériel génétique d'un nouvel individu. Une stratégie de croisement générale et largement utilisée (Holland [1975/1992]; Kennedy et al. [2001]) nécessite deux paramètres : une probabilité de croisement et un point de croisement. Pour chaque individu, on calcule une probabilité de croisement. Si cette probabilité est suffisamment élevée (le seuil est à définir par l'opérateur), cet individu est alors sélectionné pour une opération de croisement. On sélectionne par la suite aléatoirement un autre individu pour effectuer le croisement. Afin de croiser les deux individus parents, il faut préciser les gènes qui seront pris chez l'un et l'autre. Un point $k_c \in [1 : D - 1]$ de croisement est alors défini aléatoirement. Les gènes dans $[1 : k_c]$ seront prélevés chez le premier parent, et les restants pour compléter D gènes seront pris chez le deuxième parent. Un schéma simplifié de cette opération est présenté sur la figure 4.3a. Un croisement à plusieurs points, ou un croisement aléatoire gène par gène peuvent également être adoptés (Kennedy et al. [2001]). Il est important de noter que l'individu enfant ne remplacera pas les parents mais les individus à plus faible finesse. Ceci est dû au fait que le croisement n'assure pas que l'enfant sera plus performant que les parents. Afin de ne pas perdre la meilleure performance d'une génération à la génération suivante, il est important de préserver les meilleurs individus. Par ailleurs, le croisement ainsi effectué entre des individus à finesse élevée favorise l'exploitation du voisinage de ces individus puisque les enfants, sous certaines conditions, sont toujours dans un voisinage assez proche des parents.

Mutation

La mutation dans un algorithme génétique consiste en la modification aléatoire de la valeur d'un gène d'un individu (Figure 4.3b). On définit en général une probabilité de mutation. Holland recommande une probabilité de $1/10000$ (Holland [1992]). Une probabilité de $1/1000$ est par ailleurs couramment utilisée (Kennedy et al. [2001]). L'implémentation la plus simple adopte une probabilité de mutation constante tout le long de l'algorithme. Cette stratégie n'est probablement pas la plus efficace (Eberhart and Shi [1998]). En effet, au début de l'algorithme, grâce à la nature généralement stochastique de l'initialisation, les différents individus sont distribués aléatoirement dans l'espace de recherche et une modification aléatoire d'un gène n'affectera que très peu cette distribution, contrairement au croisement qui éliminera rapidement les solutions les moins pertinentes. En revanche, après un certain nombre d'itérations, les différents individus ont tendance à se concentrer autour d'un optimum et la population tend à s'uniformiser. L'effet de la mutation est alors plus remarquable et permet d'éviter une stagnation de toutes les solutions autour d'un optimum local au lieu de l'optimum global recherché. L'utilisation d'un taux de mutation croissant au cours de l'algorithme est donc vivement recommandée (Eberhart and Shi [1998]; Kennedy et al. [2001]). Le croisement étant l'opérateur fondamental qui permette aux solutions de l'AG d'évoluer, il est possible, bien que ce ne soit pas l'implémentation la plus répandue, d'imaginer un AG basique sans mutation (Holland [1992]).

4.3.1.3 Applications

Malgré leur relative ancienneté, les algorithmes génétiques n'ont commencé à être utilisés pour l'optimisation de problèmes physiques qu'au début des années 1980 ([Goldberg \[1983\]](#)). Les premières applications pour des structures optiques multi-couches, des filtres notamment, remontent au début des années 1990 ([Michielssen et al. \[1992\]](#)). La méthode s'est depuis largement répandue. Les émetteurs sélectifs et cristaux photoniques 1D étant structurellement très similaires aux filtres multi-couches, plusieurs auteurs s'en sont récemment inspirés pour concevoir et optimiser des cristaux photoniques et des émetteurs / absorbeurs / concentrateurs pour applications photovoltaïques ([Celanovic et al. \[2004\]](#); [Drevillon and Ben-Abdallah \[2007\]](#); [El-Kady et al. \[2008\]](#); [Noboru and Toshikazu \[2011\]](#)).

Bien qu'ils aient produit des résultats innovants, les algorithmes génétiques, ne sont pas nécessairement, du moins sous leur forme rudimentaire présentée ci-dessus, les plus adaptés à ces problèmes pour plusieurs raisons. On en donne ici quelques unes :

- Les paramètres (épaisseurs des couches, propriétés optiques, etc.) sont des variables réelles. Leur traitement par l'algorithme sous leur forme native implique une complexification supplémentaire de celui-ci.
- Les différents opérateurs, le croisement et la mutation en particulier, ont des effets qui évoluent entre le début et la fin de l'algorithme, à cause, notamment, de la distribution de la population à ces différents stades. Ces effets ne sont pas favorables au maintien d'une certaine diversité de l'ensemble des solutions considérées. Cette diversité peut toutefois être assurée au pris d'une complexification supplémentaire : l'adoption de probabilités de croisement et de mutation dynamiques.

Ces particularités du comportement des algorithmes génétiques peuvent être gênantes pour la résolution du problème traité dans ce rapport. L'optimisation par essaims de particules y apporte des solutions élégantes, notamment à travers la structure de l'espace de recherche (sous ensemble de \mathbb{R}^n) le caractère stochastique de l'accélération des particules. Elle sera présentée aux prochains paragraphes.

4.3.2 Essaims de particules

L'optimisation par essaims de particules, une méta-heuristique beaucoup plus récente que les algorithmes génétiques, a été présentée pour la première fois par [Kennedy and Eberhart \[1995\]](#) et a donc bénéficié d'un demi siècle de travaux sur les algorithmes évolutionnaires.

4.3.2.1 Jargon

- **espace de recherche** : pour un problème à D paramètres, l'espace de recherche \mathcal{E} est un sous ensemble¹ de \mathbb{R}^D contenant toutes les valeurs admissibles des D paramètres.
- **particule** : une particule est une solution possible au problème à résoudre. C'est l'équivalent d'un individu (ou chromosome) dans un algorithme génétique. Une particule est définie par sa position (vecteur) dans \mathcal{E} .
- **essaim** : un essaim de particules est un ensemble de solutions possibles qui sont vouées à être améliorées au cours de l'algorithme d'optimisation. C'est l'équivalent de la population d'un AG.
- **position** : la position d'une particule dans l'espace de recherche de dimension D est un vecteur de \mathbb{R}^D donnant les valeurs des D paramètres du problème. A cause de la nature des opérateurs, les données sont généralement traitées par l'algorithme sous forme réelle et non binaire.
- **vitesse** : permet l'évolution des solutions dans l'OEP en modifiant les positions des particules dans \mathcal{E} selon des lois du mouvement qui seront exposées au paragraphe 4.3.2.2.
- **voisinage** : le voisinage d'une particule est un sous-ensemble de la population donné par une règle définie par l'opérateur. Le plus simple est de définir un voisinage statique, *i.e.* qui ne change pas au cours de l'algorithme. Considérons une population de N particules numérotée de 1 à N où chaque particule a un voisinage de $2n_v$ particules avec $n_v \leq \frac{N-1}{2}$. Le voisinage de la particule i est constitué des particules $[i-1, i-2, \dots, i-n_v, i+1, i+2, \dots, i+n_v]$. On assure une fermeture circulaire de la population en imposant $i-1 = N$ et $i+1 = 1$ pour $i = 1$ et $i = N$ respectivement. Un voisinage dynamique dépend des positions des particules à chaque itération. le voisinage de la particule i serait alors constitué des $2n_v$ particules les plus proches² de i dans l'espace de recherche. Cette deuxième implémentation, bien que plus complexe à mettre en œuvre que celle du voisinage statique, n'est pas nécessairement plus efficace puisqu'elle tend, via les échanges d'information entre voisins, à limiter la portée des échanges d'information dans \mathcal{E} . Elle est en revanche utile pour explorer finement une région particulière \mathcal{E} . Un calcul combinatoire simple permet de montrer que n_v ne doit pas être très grand³ pour assurer une propagation efficace de l'information dans tout l'essaim au bout d'un nombre limité d'itérations (Clerc [2004]). De plus, et aussi contre-intuitif que cela puisse paraître, un voisinage restreint est beaucoup plus efficace que le plus grand voisinage possible (tout le groupe) pour les problèmes difficiles, présentant de nombreux minima locaux (Clerc [2004]).

4.3.2.2 Principe

1. L'inclusion de \mathcal{E} dans \mathbb{R}^D est stricte car les valeurs admissibles des paramètres physiques sont en général bornées.

2. La position d'une particule étant représentée par un vecteur de \mathbb{R}^D , D étant la dimension de l'espace de recherche, la distance est ici exprimée au sens de la norme usuelle sur \mathbb{R}^D .

3. $n_v = 1$ est suffisant pour une grande gamme de tailles d'essaims, de 10 à 300 particules Clerc [2004].

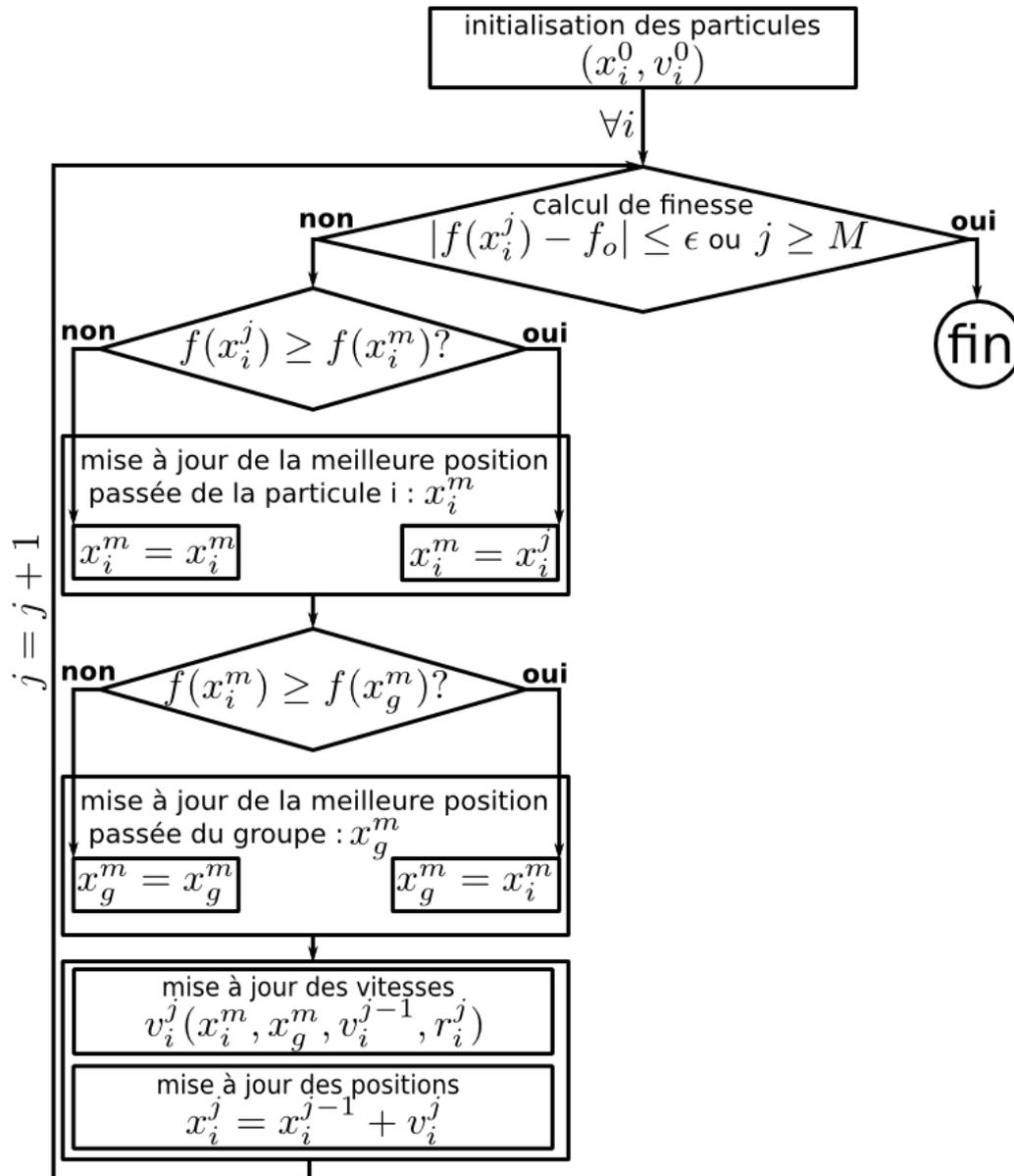


FIGURE 4.4: Diagramme d'un algorithme d'optimisation par essais de particules.

Kennedy [1998] ramène le comportement socio-cognitif universel des individus dans une société à trois actions fondamentales : évaluer, comparer et imiter. Ces trois actions sont les trois opérations de base d'un algorithme d'OEP. L'OEP est ainsi fondée, d'après les opérations énoncées ci-dessus, sur un principe collaboratif des différentes particules, à la différence des AG fondés sur une philosophie élitiste où les différents individus, dont seuls les meilleurs survivent, sont en compétition. On présente aux prochains paragraphes les étapes essentielles de l'implémentation d'une OEP basique.

Représentation des paramètres

Il a été précisé dans les définitions précédentes que chaque solution est représentée par la position d'une particule dans un espace de recherche \mathcal{E} , sous ensemble de \mathbb{R}^D où D est le nombre de

paramètres du problème. L'OEP se prête donc plus intuitivement au traitement des paramètres sous leur forme réelle, puisque la valeur de chaque paramètre est donnée par la valeur d'une coordonnée de la position d'une particule dans \mathcal{E} .

Initialisation

L'initialisation des particules se fait de manière aléatoire. On commence par semer aléatoirement les particules dans \mathcal{E} . Leurs vitesses peuvent être initialisées aléatoirement ou à des valeurs nulles. Il s'agit par la suite de définir les équations du mouvement, *i.e.* les règles pour le déplacement des différentes particules dans \mathcal{E} à la recherche d'un optimum.

Évaluation

Cette étape consiste à évaluer par une fonction d'évaluation f qui traduit la qualité de la solution (sa distance à un objectif par exemple) la qualité de la solution représentée par la position d'une particule. C'est l'équivalent du calcul de la fitness d'un individu dans un algorithme génétique. Cette évaluation enrichit la connaissance que l'essaim a de l'espace de recherche et permet d'orienter les autres particules vers les régions à fort potentiel comme on le verra par la suite. Une qualité suffisante de la position, à définir par l'opérateur, à une itération donnée, permet de mettre fin à l'algorithme.

Comparaison

La position évaluée est comparée à l'expérience individuelle de la particule considérée et à l'expérience du groupe.

Mise à jour de la mémoire individuelle Suite à son évaluation, si la position courante x_i^j représente une solution de meilleure qualité que la meilleure position passée de la particule considérée x_i^m , la mémoire de la particule i est mise à jour pour prendre la position courante en compte comme étant la meilleure position rencontrée au cours de son expérience. On a alors :

$$\begin{cases} x_i^m = x_i^j & \text{si } f(x_i^j) > f(x_i^m) \\ x_i^m = x_i^m & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.1)$$

Mise à jour de la mémoire collective De la même façon, la meilleure performance passée du voisinage de chaque particule i est sauvegardée dans sa mémoire collective x_v^m et mise au profit de la collectivité. La position de la particule i est donc, à chaque itération, comparée à la meilleure position passée des particules de son voisinage et enrichit éventuellement cette connaissance collective. Il vient alors :

$$\begin{cases} x_v^m = x_i^j & \text{si } f(x_i^j) > f(x_v^m) \\ x_v^m = x_v^m & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.2)$$

Il existe deux implémentations courantes de cette interaction des particules :

- Le voisinage est constitué d'un nombre très limité de particules. Chaque particule aura alors sa propre version la mémoire collective $x_{v,i}^m$.
- Le voisinage comprend toute les particules de l'essaim et la mémoire collective x_v^m est la même pour toutes les particules.

Il est à noter que cette étape est cruciale puisque c'est elle qui assure un fonctionnement collectif de l'essaim, l'échange d'information entre ses différentes composantes et par conséquent, une exploration plus efficace de \mathcal{E} .

Imitation ou les équations de mouvement

Cette opération permet aux solutions d'évoluer au cours de l'algorithme tout en profitant de la connaissance accumulée par chaque particule et par le groupe à un stade donné. Un schéma en est donné sur la figure 4.5. Elle se déroule en deux étapes :

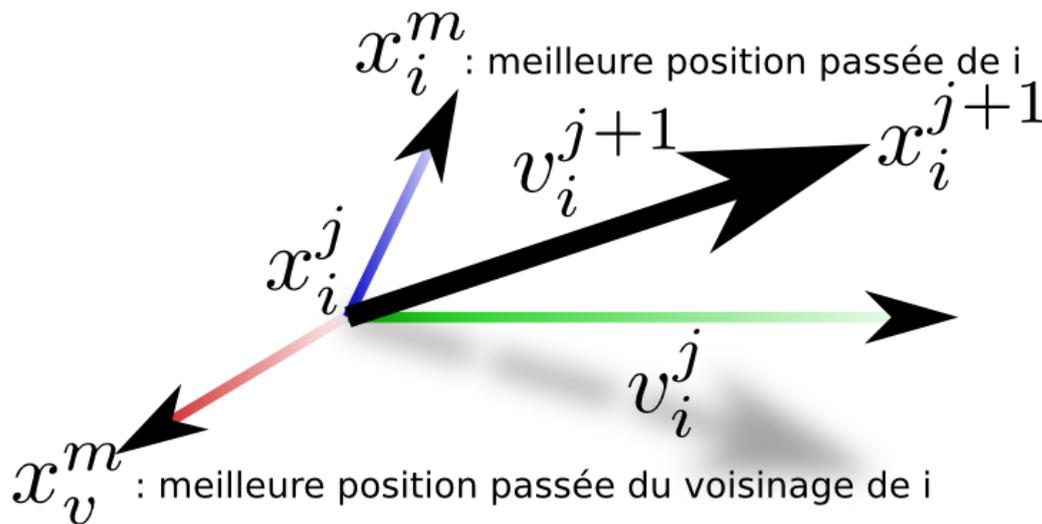


FIGURE 4.5: Évolution de la position d'une particule i , *i.e.* d'une solution, dans un algorithme d'OEP.

Calcul de vitesse Pour évoluer dans \mathcal{E} , une particule doit avoir une vitesse non nulle. En OEP, le calcul de vitesse permet de mutualiser les expériences individuelles et collectives pour orienter les solutions dans les directions pertinentes. La vitesse d'une particule i à une itération, ou un pas de déplacement, j est la combinaison de trois composantes :

- une composante inertielle : en l'absence de toute expérience individuelle et collective, la particule continue dans la même direction que celle du déplacement précédent. Elle est donnée par :

$$\mathbf{v}_{i,inert}^j = \mathbf{v}_i^{j-1} \quad (4.3)$$

- une composante cognitive qui prend en compte l'expérience de la particule considérée et tend à orienter celle-ci vers sa meilleure position passée. Elle est donnée par :

$$\mathbf{v}_{i,cog}^j = \mathbf{x}_i^m - \mathbf{x}_i \quad (4.4)$$

- une composante sociale qui prend en compte l'expérience collective en orientant la particule considérée vers la meilleure position passée des particules de son voisinage. Elle est donnée par :

$$\mathbf{v}_{i,soc}^j = \mathbf{x}_{v,i}^m - \mathbf{x}_i \quad (4.5)$$

Chaque composante k de la vitesse (composante dans \mathcal{E} s'entend) de la particule i est au final donnée par la première équation du mouvement :

$$v_{i,k}^j = \omega_1 v_{i,k,inert}^j + \omega_2 r_1 v_{i,k,cog}^j + \omega_3 r_2 v_{i,k,soc}^j \quad (4.6)$$

où ω_1 , ω_2 et ω_3 sont des facteurs du poids de la composante inertielle, cognitive et sociale respectivement. Ils permettent de contrôler plus finement le comportement de chaque particule. r_1 et r_2 sont deux facteurs aléatoires (variables aléatoires à distribution uniforme dans $[0, 1]$) qui permettent d'obtenir une distribution de positions relativement uniforme entre la position courante, la meilleure position passée de la particule considérée et la meilleure position passée du voisinage. Ne pas les utiliser favoriserait des directions particulières au dépend des autres et interdirait l'exploration d'une grande partie de l'espace de recherche (Clerc [2004]). Il est également important de noter que pour les mêmes raisons de distribution uniforme, les coefficients aléatoires ne sont pas les mêmes pour le calcul des différentes composantes de \mathbf{v}_i^j . Pour une compréhension plus fine du fonctionnement d'un algorithme d'OEP, une brève discussion des poids des différentes composantes du vecteur vitesse n'est pas sans intérêt : un fort poids de la composante inertielle favorise par exemple une exploration rapide de tout l'espace de recherche. Son faible poids favorise l'exploration lente et fine de régions particulières. Il peut être intéressant d'avoir un fort poids inertiel au début de l'algorithme et de le réduire lorsque l'algorithme est assez avancé pour explorer finement le voisinage de bonnes solutions. Un fort poids de la composante cognitive tend à confiner une particule autour de sa meilleure performance passée ce qui risque de la faire évoluer très peu alors qu'une forte composante sociale tend à uniformiser rapidement tout l'essaim. Le choix du jeu de paramètres « optimal » a été l'objet d'une littérature assez abondante mais reste problème-dépendant et doit être défini par l'expérience. Clerc fait une brève synthèse de cette littérature en un nombre réduit de règles à suivre. On adoptera pour notre travail les valeurs qu'il suggère, soit $\omega_1 = 0,7$ et $\omega_2 = \omega_3 = 1,43$ (Clerc [2004]).

Calcul de position La dernière étape de l'algorithme est l'évolution des solutions, *i.e.* la mise à jour des positions des différentes particules. La position de la particule i est donnée par

la deuxième équation du mouvement :

$$x_i^{j+1} = x_i^j + v_i^j \quad (4.7)$$

On rappelle que la non homogénéité apparente de l'équation 4.7 est due au fait que chaque itération est assimilée à un pas de temps unitaire. Une différence de deux positions à deux itérations consécutives est donc homogène à une vitesse.

Contrôle et confinement Après le calcul de la nouvelle position et avant de l'affecter à la particule en question, il convient de contrôler que cette position ne se situe pas en dehors de l'espace de recherche, auquel cas, il faudrait confiner la particule à cet espace. En effet, pour des problèmes physiques comme ceux qui nous intéressent, un paramètre ne peut en général évoluer que sur un domaine limité de \mathbb{R} . L'épaisseur d'un film mince, par exemple, ne peut pas prendre des valeurs négatives. Il convient donc de prévoir des règles à appliquer lorsqu'une coordonnée d'une particule sort de son domaine admissible et que la particule sort de \mathcal{E} . Différentes solutions sont envisageables : on peut imaginer de repositionner la particule en question au point le plus proche de l'espace de recherche avec une vitesse nulle (ne pas réinitialiser la vitesse rend très probable la sortie de la particule de \mathcal{E} à l'itération suivante), ou encore de la repositionner dans \mathcal{E} , au point symétrique de sa position hors- \mathcal{E} par rapport à la frontière (Clerc [2004]). Il est à noter ici le caractère « naturel » de la prise en compte de certaines contraintes du type $x_k^{min} \leq x_k \leq x_k^{max}$ sur les paramètres en OEP.

Condition d'arrêt

Les trois étapes d'évaluation, de comparaison et d'imitation sont réitérées pour les N particules de l'essaim jusqu'à l'obtention d'une solution satisfaisante. Si tel n'est pas le cas, l'algorithme s'arrête après un nombre maximal d'itérations M défini par l'opérateur. Il est évident et intuitif que pour l'obtention d'une solution au problème, les deux paramètres N et M ne sont pas indépendants. Si la taille « optimale » de la population d'un AG augmente avec le nombre de paramètres du problème à résoudre, ceci n'est pas le cas en OEP. En effet, l'exploration de \mathcal{E} n'est pas uniquement tributaire du nombre de particules qu'on y sème mais est surtout contrôlée par la loi de composition des vitesses et par les valeurs maximales admissibles des vitesses. De grandes vitesses favoriseront une exploration rapide de différentes régions de \mathcal{E} . Clerc [2004] recommande ainsi des essaims de 20 à 40 individus. Le nombre d'itérations dépendra alors de la difficulté du problème et est laissé au choix de l'opérateur.

4.3.2.3 Applications

Étant donnée la relative « jeunesse » de l'OEP, son utilisation pour la résolution de problèmes d'ingénierie, notamment ceux de structures optiques fonctionnelles : filtres, absorbeurs/émetteurs sélectifs, est beaucoup plus limitée et récente que celle des AG (Arabshahi and Asmari [2010]; Goudos and Sahalos [2006]; Nefzaoui et al. [2010]). Les études comparatives de différentes

méthodes d'optimisation au type de problèmes qui nous intéressent ici, *i.e.* ceux des structures optiques multi-couches, tendent à affirmer une supériorité relative, notamment en coût de calcul et en qualité des solutions obtenues, de l'OEP sur les AG (Armaki et al. [2009]; Chamaani et al. [2007]; Goudos and Sahalos [2006]). C'est notamment pour cette raison que cette méthode est majoritairement adoptée dans ce travail.

4.4 Conclusion

Les méthodes d'optimisation utilisées dans ce travail pour la conception et l'optimisation d'émetteurs sélectifs ont été l'objet de ce troisième chapitre. On a d'abord commencé par une définition de la notion de « problème difficile ». Malgré les différentes considérations théoriques qu'on peut faire, il en ressort clairement que cette définition reste très subjective et tributaire de l'état de l'art du problème considéré. Quantitativement, cette notion peut être corrélée au montant des ressources nécessaires pour la résolution du problème. Étant donné le nombre de paramètres élevé en jeu dans un problème d'optimisation des propriétés radiatives d'une structure multi-couche à nombre de couches élevé (nombre de couches, épaisseur de chaque couche, propriétés optiques de chaque couche), il est très difficile d'explorer tout l'espace de recherche avec les méthodes itératives classiques en un temps raisonnable et l'utilisation de méthodes alternatives, notamment les méta-heuristiques, peut se révéler d'une aide précieuse. Dans la deuxième partie de ce chapitre, on s'est employé à la présentation de deux de ces méthodes :

- Les algorithmes génétiques qui ont été récemment utilisés avec succès (Drevillon and Ben-Abdallah [2007]; El-Kady et al. [2008]) pour résoudre ce type de problèmes et qu'on a essayé d'adapter pour simplifier les résultats déjà obtenus.
- L'optimisation par essais de particules qui permettent de dépasser certaines lacunes des algorithmes génétiques, notamment pour leur prise en charge « naturelle » des grandeurs réelles et pour leur efficacité supérieure dans ce type de problèmes (Armaki et al. [2009]; Chamaani et al. [2007]) et qui ont été à l'origine de l'essentiel des résultats présentés dans ce rapport.

On présente au prochain chapitre les émetteurs sélectifs obtenus par l'application de ces deux algorithmes qui se divisent en deux catégories : des émetteurs bi-couches à base de systèmes antireflet et des émetteurs à quatre couches à base de cavités résonnantes. On consacra une grande partie de ce chapitre à une étude de la robustesse de ces solutions, notamment à travers l'étude de leur sensibilité à différents paramètres : les dimensions des différentes couches, leurs propriétés optiques et la température.

Bibliographie

- H. Arabshahi and M. Asmari. Optimum designing of thin film filter layers of SiO₂ and SnTe based on optical particle swarm optimizer. *Intern. J. Phys. Sci.*, 5(5) :57–61, 2010. [92](#)
- M.G. Armaki, J. Haddadnia, and J. Baedi. Designing optical filter with absorption effect by using pso algorithm. In *Emerging Trends in Electronic and Photonic Devices Systems, 2009. ELECTRO '09. International Conference on*, pages 548–551, dec. 2009. [93](#)
- I. Celanovic, F. O'Sullivan, M. Ilak, J. Kassakian, and D. Perreault. Design and optimization of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications. *Opt. Lett.*, 29(8) : 863–865, 2004. [86](#)
- S. Chamaani, S.A. Mirtaheri, M. Teshnehlab, and M.A. Shooredeli. Modified multi-objective particle swarm optimization for electromagnetic absorber design. In *Applied Electromagnetics, 2007. APACE 2007. Asia-Pacific Conference on*, pages 1–5, dec. 2007. [93](#)
- M. Clerc. *L'optimisation par essaims particulaires*. Hermes Science Publications, 2004. [78](#), [87](#), [91](#), [92](#)
- J.C. Culioli. *Introduction à l'optimisation*. Ellipses, 1994. [81](#)
- K.A. De Jong. *An Analysis of the Behavior of a Class of Genetic Adaptive Systems*. PhD thesis, Dept. of Computer and Communication Sciences, University of Michigan, 1975. [83](#)
- J. Dréo, A. Pétrowski, P. Siarry, E. Taillard, and A. Chatterjee. *Metaheuristics for Hard Optimization : Methods and Case Studies*. Springer, 2005. [78](#), [81](#)
- J. Drevillon and Ph. Ben-Abdallah. Ab initio design of coherent thermal sources. *J. Appl. Phys.*, 102(11) :114305, 2007. [78](#), [86](#), [93](#)
- R. C. Eberhart and Y. Shi. Comparison between genetic algorithms and particle swarm optimization. In V.W. Porto, N. Saravanan, D. Waagen, and A.E. Eiben, editors, *Evolutionary Programming VII*, volume 1447 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 611–616. Springer Berlin Heidelberg, 1998. [85](#)
- I. El-Kady, G. B. Farfan, R. Rammohan, and M. M. Reda Taha. Photonic crystal high-efficiency multispectral thermal emitters. *Appl. Phys. Lett.*, 93(15) :153501, 2008. [86](#), [93](#)

- A.S. Fraser. Simulation of genetic systems. *J. Theor. Biol.*, 2(3) :329 – 346, 1962. [81](#)
- D.E. Goldberg. *Computer-aided gas pipeline operation using genetic algorithms and rule learning*. PhD thesis, Dept. of Computer and Communication Sciences, University of Michigan, 1983. [86](#)
- S. K. Goudos and J. N. Sahalos. Microwave absorber optimal design using multi-objective particle swarm optimization. *Microwave Opt. Technol. Lett.*, 48(8) :1553–1558, 2006. [92](#), [93](#)
- J. Générmont. « phÉnotype »,encyclopædia universalis [en ligne], consulté le 3 décembre 2012 . [79](#)
- J. Holland. Genetic algorithms. *Sci. Am.*, 267(1), 1992. [85](#)
- J. H. Holland. Outline for a logical theory of adaptive systems. *J. ACM*, 9(3) :297–314, 1962. [81](#)
- J. H. Holland. *Adaptation in natural and artificial systems : an introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. Bradford Books. MIT Press, 1975/1992. [81](#), [85](#)
- J. Kennedy. Thinking is social : Experiments with the adaptive culture model. *J. of Conflict Resolut.*, 42(1) :56–76, 1998. [87](#)
- J. Kennedy and R. Eberhart. Particle swarm optimization. *Proc. Int. Conf. Neural Networks*, 4 :1942–1948, 1995. [84](#), [86](#)
- J. Kennedy, R.C. Eberhart, and Y. Shi. *Swarm Intelligence*. The Morgan Kaufmann Series in Artificial Intelligence. Elsevier Science, 2001. [81](#), [83](#), [84](#), [85](#)
- V. Kreinovich, C. Quintana, and O. Fuentes. Genetic algorithms : What fitness scaling is optimal? *Cybernet. Syts.*, 24(1) :9–26, 1993. [84](#)
- E. Michielssen, S. Ranjithan, and R. Mittra. Optimal multilayer filter design using real coded genetic algorithms. *IEE Proceed. J. Optoelectron.*, 139(6) :413–420, 1992. [86](#)
- E. Nefzaoui, J. Drevillon, and K. Joulain. Nanostructures thermal emission optimization using genetic algorithms and particle swarms. In *International Conference on Evolutionary Computation (ICEC 2010)*, Valence, Spain, 2010. SciTePress. [92](#)
- Y. Noboru and I. Toshikazu. Design of wavelength selective concentrator for micro pv/tpv systems using evolutionary algorithm. *Opt. Express*, 19(14) :13140–13149, 2011. [86](#)
- B. Ross. A lamarckian evolution strategy for genetic algorithms. In *In L. Chambers (Ed.), The Practical Handbook of Genetic Algorithms, 3 (Boca Raton)*, pages 1–16. CRC Press, 1999. [79](#)

T. Weise, M. Zapf, R. Chiong, and A. J. Nebro Urbaneja. Why is optimization difficult? In Raymond Chiong, editor, *Nature-Inspired Algorithms for Optimisation*, volume 193 of *Studies in Computational Intelligence*, chapter 1, pages 1–50. Springer, 2009. [78](#), [84](#)

Chapitre 5

Émetteurs sélectifs en champ lointain

Sommaire

5.1	Introduction	100
5.2	État de l'art	100
5.2.1	Surfaces nanostructurées : les réseaux de surface	101
5.2.2	Structures multi-couches	101
5.2.2.1	Multi-couches ordonnées : les cristaux photoniques	102
5.2.2.2	Multi-couches désordonnées	102
5.2.2.3	Structures antireflet	103
5.2.2.4	Cavités résonnantes	105
5.2.3	Structures hybrides	105
5.3	Conception et optimisation	106
5.3.1	Problème à résoudre	106
5.3.2	Résultats	107
5.3.2.1	Structures bi-couches	107
5.3.2.2	Structures 4-couches : cavités Fabry-Pérot	112
5.3.3	Stabilité des solutions	117
5.3.3.1	Épaisseur des couches	118
5.3.3.2	Propriétés optiques	120
5.3.3.3	Effets thermiques	123
5.4	Conclusion	128

5.1 Introduction

On a rappelé au chapitre 3 les limites de rendement des systèmes photovoltaïques, limites connues depuis plusieurs décennies. On a également montré que ces limites sont dues à l'incompatibilité entre le spectre d'émission des sources de rayonnement (le soleil par exemple) et le spectre de conversion optimal des convertisseurs photovoltaïques. On a par ailleurs évoqué, parmi les solutions pour améliorer les rendements des systèmes TPV, l'utilisation d'émetteurs sélectifs (ES) : ils constituent des adaptateurs de rayonnement qui permettent d'obtenir un rayonnement incident ajusté aux exigences optimales du convertisseur. On présentera dans ce chapitre des émetteurs sélectifs relativement simples sous forme de structures 1D composées de deux à quatre couches de films minces de métaux, diélectriques et semi-conducteurs. On commencera d'abord dans la section 5.2 par faire une revue de la littérature sur les différents types d'émetteurs sélectifs. On proposera par la suite différentes structures obtenues par la méthode d'optimisation par essaims de particules présentée au paragraphe 4.3.2.2. Ces structures se divisent en deux catégories : des structures bi-couches dont les propriétés radiatives particulières sont dues à un phénomène d'antireflet et des structures quatre-couches formant des cavités résonnantes. On présentera et caractérisera les propriétés radiatives de ces structures au paragraphe 5.3.2. Enfin, le paragraphe 5.3.3 présentera une étude de la robustesse des émetteurs sélectifs par rapport à différents paramètres de fabrication (dimensions des films, qualité optique) et de fonctionnement (température).

5.2 État de l'art

Plusieurs solutions pour améliorer les rendements des systèmes TPV ont été rapportées au paragraphe 3.4 du chapitre 3. Parmi ces solutions, les émetteurs sélectifs occupent une position privilégiée puisqu'ils permettraient de dépasser la limite largement connue et adoptée de Shockley-Queisser. C'est notamment pour cette raison, conjuguée au développement rapide des techniques de nano-fabrication, que les quinze dernières années ont vu apparaître une littérature abondante présentant une grande variété d'émetteurs sélectifs qu'on se propose de rapporter dans les prochains paragraphes. Ici, on entend ce terme dans le sens large. Il désigne toute structure permettant de sélectionner le domaine spectral/directionnel d'émission thermique par rapport au domaine d'émission d'un corps noir à la même température, que ce soit sous forme d'un pic d'émission étroit ou d'une bande de forte émissivité plus ou moins large. On fait le choix de classer ces structures en deux grandes catégories : la première regroupe les structures nécessitant une micro/nano-structuration fine de la surface des matériaux tels que les réseaux de surface et la deuxième regroupe les structures résultant de l'assemblage simple de deux films plans ou plus, dans une ou plusieurs directions. C'est ce qu'on appellera structures multi-couches dans le sens large (on ne se limitera pas aux structures 1D). Il existe par ailleurs des structures qui combinent multi-couches et surfaces nano-structurées qu'on qualifiera de « structures hybrides » et qu'on présentera en dernier lieu.

5.2.1 Surfaces nanostructurées : les réseaux de surface

Hesketh et al. [1986] ont mis expérimentalement en évidence des maxima d'émittance à intervalles de longueur d'onde périodiques pour les deux états de polarisation dans du silicium fortement dopé microstructuré en surface. Les fréquences des maxima dépendaient de la périodicité de la microstructuration. Ce phénomène s'explique par un couplage entre des ondes stationnaires à la surface du réseau (des plasmons-polaritons dans ce cas) et les ondes propagatives. De plus, ces propriétés étaient fortement directionnelles (Hesketh et al. [1988]) contrairement au rayonnement thermique classique d'un corps noir. Depuis, le même phénomène a été observé avec d'autres matériaux, polaires comme le SiC (Le Gall et al. [1997], Greffet et al. [2002]) ou métalliques comme l'or (Kreiter et al. [1999]) et le tungstène (Laroche et al. [2005a]). Pour les

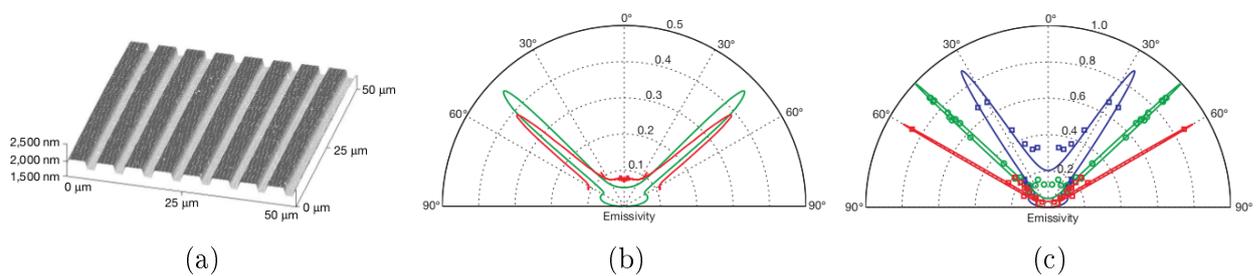


FIGURE 5.1: Réseau de surface sur un substrat de SiC (a), son émissivité pour la polarisation p à $\lambda = 11,36\mu\text{m}$, mesures expérimentales en rouge et calculs théoriques en vert (b) et l'émissivité pour la polarisation p à $\lambda = 11,04$: bleu, $\lambda = 11,36$: rouge et $\lambda = 11,86$: vert (c). (Source : Greffet et al. [2002])

premiers, on observe une émission thermique fortement directionnelle pour la polarisation p due à la diffraction des phonon-polaritons de surface par le réseau. Pour les deuxièmes, c'est la diffraction des plasmons-polaritons de surface qui est à l'origine de ces propriétés optiques particulières. Plus récemment, des réseaux de surfaces bi-dimensionnels ont permis d'étendre ces propriétés aux deux états de polarisation pour les métaux, notamment le tungstène (Nghia et al. [2012]) et les matériaux polaires, le SiC en l'occurrence (Arnold et al. [2012]).

5.2.2 Structures multi-couches

Les structures multi-couches composent une grande famille d'émetteurs sélectifs très étudiée, notamment expérimentalement, étant donné le développement rapide des techniques de fabrication de films minces durant les dernières décennies. Dans ces structures, les films minces peuvent présenter un certain ordre. C'est le cas des cristaux photoniques. Des films minces disposés de façon aléatoire et désordonnée peuvent aussi donner un émetteur sélectif. Finalement, des structures multi-couches plus simples, car constituées d'un nombre réduit de films, formant des cavités résonnantes ou combinant des revêtements antireflets avec un matériau présentant une forte absorptivité peuvent également présenter des propriétés radiatives intéressantes.

5.2.2.1 Multi-couches ordonnées : les cristaux photoniques

Les cristaux photoniques (CP) sont des structures optiques périodiques (dans une ou plusieurs directions) qui permettent de contrôler l'état des photons de la même façon que les états électroniques sont contrôlés dans les structures périodiques des cristaux. On observe alors des bandes d'énergie interdites pour les photons dans ces structures qu'on appelle, par analogie, band-gap photonique. L'une des premières introductions théoriques contemporaines de ces structures dans le cas le plus général (3D) est due à [Yablonovitch \[1987\]](#) qui proposa des structures périodiques présentant un band-gap photonique inhibant l'émission de photons indésirables. Des applications dans le PV pour inhiber la recombinaison radiative ou comme réflecteurs de cavités résonnantes ont été évoquées. Toutefois, le principe des CP 1D sous forme de multi-couches de diélectriques (des miroirs de Bragg par exemple) avait déjà été évoqué longtemps auparavant ([Bykov \[1975\]](#); [Rayleigh \[1888\]](#)). Ils ont par la suite largement été exploités pour la mise au point

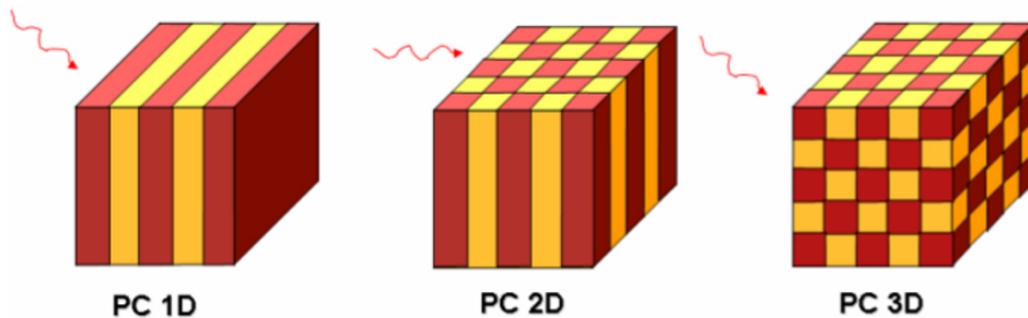


FIGURE 5.2: Cristaux photoniques 1D, 2D et 3D (Source : [Drevillon \[2007\]](#))

de structures 1D et 3D présentant une sélectivité spectrale ([Celanovic et al. \[2004\]](#); [Lin et al. \[2003\]](#)) et directionnelle ([Biswas et al. \[2001\]](#)) à base de métaux ([Rinnerbauer et al. \[2012\]](#)) de diélectriques ([O'Sullivan et al. \[2005\]](#)) ou d'une combinaison des deux ([Narayanaswamy et al. \[2004\]](#)). Si les CP mono-dimensionnels peuvent être assimilés à des structures multi-couches sans difficulté, c'est loin d'être le cas pour les CP 2D ou 3D qui nécessitent en général une nano-structuration fine et qu'on classerait plus naturellement parmi les structures à surfaces / volumes nano-structurés, au même titre que les réseaux de surface.

5.2.2.2 Multi-couches désordonnées

Des émetteurs sélectifs multi-couches à grand nombre de couches ont également été mis au point en introduisant un désordre plus ou moins grand dans des CP.

Désordre faible

Quelques années seulement après les premières réalisations des CP, [Özbay and Temelkuran \[1996\]](#) ont montré que l'introduction d'un défaut dans un CP, *i.e.* un élément qui briserait la périodicité du cristal, pouvait en conservant globalement le band-gap photonique, y introduire des pics d'émission selon la nature du défaut. Selon cette idée, [Ben-Abdallah and Ni \[2005\]](#)

ont par exemple étudié les propriétés optiques d'un miroir de Bragg de dix couches au milieu duquel est introduit un défaut diélectrique plan (Figure 5.3a) dont la permittivité diélectrique est modélisée par un modèle de Lorentz et qui présente une forte résonance au milieu du band-gap photonique du CP. On observe alors (Figure 5.3b) l'apparition, au milieu du band-gap, un pic d'émission isotrope dû au couplage entre les modes de surface du super-réseau et les modes de vibration du défaut. Lee et al. [2005] ont étudié une structure très similaire où le défaut, un

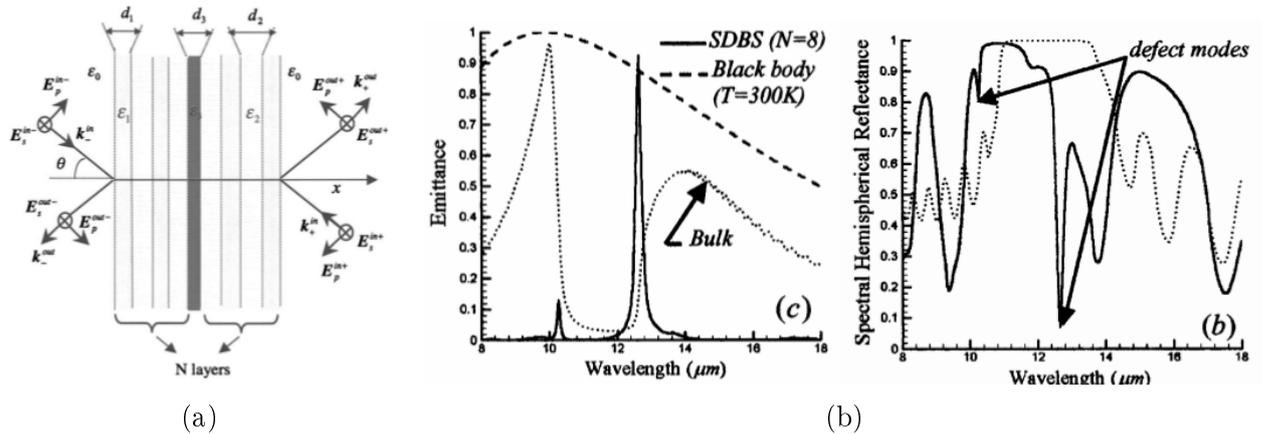


FIGURE 5.3: Miroir de Bragg avec un défaut diélectrique (SiC en l'occurrence) plan (a) et son émittance et réflectance hémisphérique spectrale (ligne continue) comparées à celles du SiC massif et du miroir de Bragg sans défaut respectivement (pointillés) (b). (Source : Ben-Abdallah and Ni [2005])

film mince d'un matériau polaire, le SiC en l'occurrence, est apposé à une extrémité du cristal photonique. Cette structure présente une émissivité isotrope spectralement cohérente pour les deux états de polarisation dans le moyen infrarouge.

Désordre fort

Inspirés par les possibilités offertes par les CP partiellement désordonnés, Drevillon and Ben-Abdallah [2007] ont poussé le désordre plus loin et ont montré qu'il était possible d'obtenir des émetteurs sélectifs dans le proche et le moyen infrarouge, en disposant un grand nombre de films minces de métaux et de diélectriques, ou de différents diélectriques, de façon aléatoire. Ces derniers (*i.e.* les ES composés de diélectriques) présentent des propriétés isotropes pour les deux états de polarisation, ce qui n'est pas le cas de ceux composés de métaux et de diélectriques.

5.2.2.3 Structures antireflet

Des structures multi-couches plus simples ont été proposées et étudiées pendant et après la seconde guerre mondiale, notamment pour des applications de télé-détection (Hadley and Dennison [1947], Salisbury [1952]), *i.e.* pour des ondes radios essentiellement. Ces structures présentent des propriétés optiques particulières, notamment une forte absorption des ondes électromagnétiques dans un domaine bien précis, plus ou moins large, de longueurs d'onde. Elles exploitent les propriétés absorbantes d'un film conducteur positionné un quart de longueur

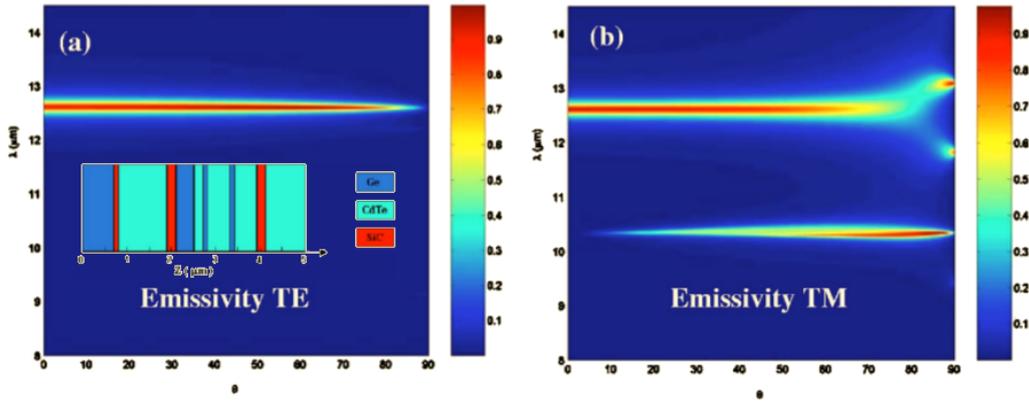


FIGURE 5.4: Structure multi-couche aléatoire formée de films minces de Ge, SiC et CdTe ainsi que son émissivité spectrale et directionnelle pour la polarisation s et p . (Source : [Drevillon and Ben-Abdallah \[2007\]](#))

d'onde au dessus d'un miroir parfait. On observe alors une réflectance nulle à cette longueur d'onde et ses diviseurs entiers (Figure 5.5). L'épaisseur du diélectrique entre le miroir et le film absorbant fait en sorte que le rayonnement réfléchi par le miroir interfère constructivement avec le rayonnement incident au niveau du film absorbant. Si le film est suffisamment absorbant, l'onde résultante est entièrement absorbée. On obtient alors un système antireflet avec une absorptivité élevée, et par conséquent, selon la loi de Kirchhoff, une forte émissivité. Ces struc-

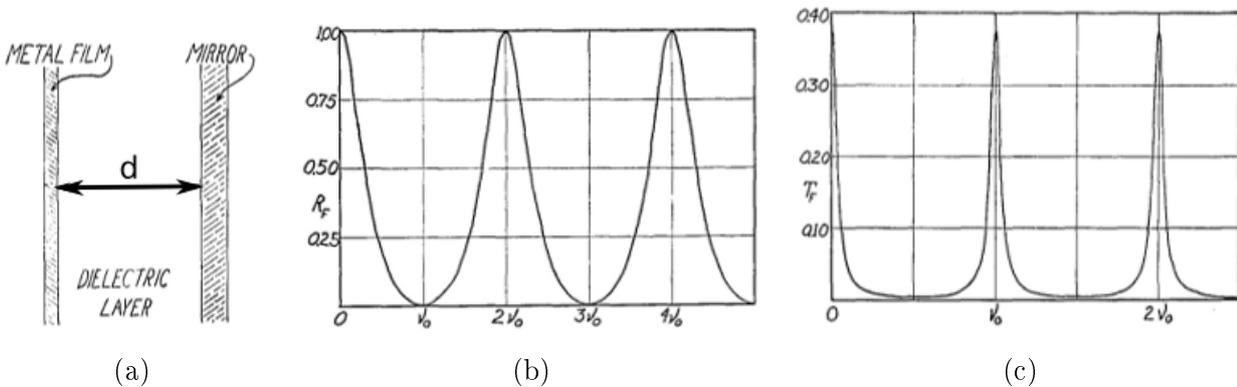


FIGURE 5.5: Arrangement des films dans la structure antireflet (a), son coefficient de réflexion (b) et de transmission (c) en fonction de la fréquence. ν_0 figure la fréquence correspondant à la longueur d'onde définie par $\lambda_0 = 4d$. (Source : [Hadley and Dennison \[1947\]](#))

tures ont tout naturellement connu un regain d'intérêt durant les deux dernières décennies en tant qu'absorbeurs/émetteurs sélectifs pour des applications de détection infrarouge ou de conversion d'énergie radiative ([Bauer \[1992\]](#); [Laroche et al. \[2005b\]](#); [Monzón and Sánchez-Soto \[1994\]](#)) ou encore en tant qu'absorbeurs sélectifs sur de larges bandes spectrales dans le domaine radio pour des applications de télécommunication ([Roland \[2003\]](#)). Un autre système antireflet à deux films minces présentant une forte émissivité, composé d'un film de FeSi_2 revêtant un substrat d'acier inoxydable a été récemment proposé par [Kaneko et al. \[2011\]](#). Des structures

similaires composées d'un revêtement d'oxyde de terre rare sur un substrat métallique ont été étudiées près de vingt ans auparavant (Chubb and Lowe [1993]).

5.2.2.4 Cavités résonnantes

Des structures à faible nombre (trois) de films minces similaires ont également été exploitées pour mettre au point des émetteurs sélectifs. À la différence des structures présentées au paragraphe précédent, ces structures constituent des cavités Fabry-Pérot résonnantes dans l'infrarouge (Celanovic et al. [2005]; Kollyukh et al. [2007]; Wang et al. [2009]). L'épaisseur de

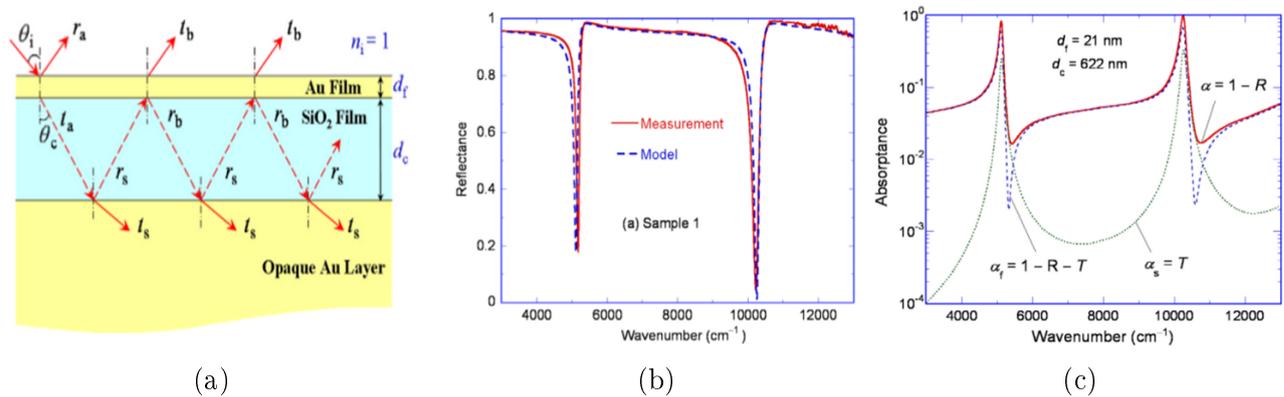


FIGURE 5.6: Cavité Fabry-Pérot résonnante asymétrique (a), sa réflectance (b) et son absorptivité (c) à incidence normale. (Source : Wang et al. [2009])

la cavité diélectrique permet de contrôler la position du pics d'émission alors que la qualité des réflecteurs est déterminante pour le facteur de qualité¹ de la structure. L'idée de ce dispositif est toutefois très antérieure à ces travaux récents, et avait déjà été évoquée et étudiée théoriquement par les mêmes Hadley and Dennison [1947] pour des applications de filtrage en optique infrarouge.

5.2.3 Structures hybrides

Diverses nano-structures ont récemment été étudiées pour leurs propriétés d'émission cohérente et on ne saurait les classer dans les catégories précédemment listées. Elles sont en revanche souvent des combinaisons des différentes structures précédemment présentées, et les phénomènes physiques en jeu sont les mêmes que ceux précédemment décrits. On pourrait citer, sans prétention d'exhaustivité, des structures à base d'oxydes de terres rares (ces matériaux étant très intéressants pour leur tenue en température et leur stabilité), que ce soit sous forme de fibres totalement désordonnées (Starvaggi et al. [2011]), partiellement organisées (Aljarrah et al. [2011]), de structures cristallines (Ghanashyam et al. [1999]) ou de revêtements (Bitnar et al. [2002]). On peut aussi relever le recours fréquent aux CP. Les CP inhibent l'émission sur une large bande. Combinés à des structures absorbantes (donc émettantes) à une longueur

1. Pour la définition du facteur de qualité, voir paragraphe 5.3.2.1.

d'onde dans cette bande interdite, une nano-antenne sous forme de baguette (Biswas et al. [2001]), ou encore un réseau de surface (Fu et al. [2009]) par exemple, ils donnent une structure finale à émission sélective.

5.3 Conception et optimisation

5.3.1 Problème à résoudre

Il a été rappelé précédemment qu'une part substantielle de l'énergie radiative incidente n'est pas convertie en électricité avec les systèmes PV/TPV usuels, notamment la part contenue dans les photons ayant une énergie largement supérieure ou inférieure à l'énergie du gap. Dans cette section, on propose une méthode pour concevoir et optimiser des émetteurs afin de prohiber l'émission de ces photons. Dans la suite, seules des structures unidimensionnelles (1D) seront considérées. Un ES émettant dans une bande spectrale étroite avec une largeur à mi-hauteur prédéfinie autour de la longueur d'onde du pic d'émission est recherché.

On rappelle l'expression de l'émittance hémisphérique spectrale d'un corps quelconque (Modest [1993]) :

$$M_\lambda = \int_{\Omega=0}^{2\pi} \epsilon_{\lambda,\theta} L_{\lambda,\theta}(T_e) \cos(\theta) d\Omega \quad (5.1)$$

où $L_{\lambda,\theta}(T_e)$ est la luminance énergétique monochromatique d'un corps noir à la température d'émission T_E dans la direction θ . Pour un premier calcul, la position du pic d'émission et sa largeur sont choisies arbitrairement. On montrera ultérieurement qu'elles peuvent être contrôlées selon les besoins applicatifs. Le pic d'émission est modélisé par une gaussienne. Les propriétés optiques de la cible sont données par :

$$\begin{cases} \epsilon_{cible}(\lambda, \theta) = \epsilon_{max} \exp\left[-\frac{(\lambda-\lambda_p)^2}{\alpha}\right] \text{ pour } \theta \in [0, \frac{\pi}{2}] \\ \rho_{cible}(\lambda, \theta) = 1 - \epsilon_{cible}(\lambda, \theta) \end{cases} \quad (5.2)$$

où $\epsilon(\lambda, \theta)$ et $\rho(\lambda, \theta)$ figurent l'émissivité et la réflectivité spectrale et directionnelle de la structure respectivement. $\epsilon_{max} = 1$ est la valeur maximale de l'émissivité et le paramètre α permet le contrôle de la largeur à mi-hauteur (LMH) de la gaussienne. La deuxième équation du système 5.2 suppose implicitement, d'après la loi de Kirchhoff, un corps opaque. La structure aura donc une transmittance nulle. Étant donné qu'on cherche une structure avec une émissivité et une réflectivité données, la fonction objectif suivante doit être minimisée :

$$\begin{aligned} f &= \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} [\epsilon_{cible}(\lambda, \theta) - \epsilon_{struc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda \\ &+ \sum_p \int_{\theta_1}^{\theta_2} \int_{\lambda_{min}}^{\lambda_{max}} [\rho_{cible}(\lambda, \theta) - \rho_{struc}^p(\lambda, \theta)]^2 d\theta d\lambda \end{aligned} \quad (5.3)$$

où la somme discrète s'effectue sur les deux états de polarisation du rayonnement thermique. ϵ_{cible} et ρ_{cible} sont l'émissivité et la réflectivité recherchées et ϵ et ρ sont celles de la structure optimisée. La structure susceptible d'exhiber de telles propriétés n'est pas connue *a priori*. Un problème inverse où le nombre de couches, leur composition et leur arrangement sont inconnus doit donc être résolu. Pour une structure avec N couches, au moins $2N$ paramètres doivent être déterminés : la composition et l'épaisseur de chaque couche. Les méthodes d'optimisation stochastiques semblent les plus appropriées pour résoudre ce genre de problèmes à moindre coût.

5.3.2 Résultats

L'algorithme présenté dans le paragraphe 4.3.2.2 a été appliqué pour trouver des solutions avec des structures multi-couches 1D. Les populations utilisées sont composées de 20 particules. 500 itérations ont été suffisantes pour trouver des solutions satisfaisantes. Pendant le processus d'optimisation, le nombre maximal de couches a été fixé à 50, le but étant de trouver des structures les plus simples possibles. Les épaisseurs maximale et minimale des couches ont été fixées à 30 nm et 1000 nm respectivement. La concentration de dopage maximale a été fixée à $5 \times 10^{20} (\text{cm}^{-3})$. Les données correspondant à des concentrations plus élevées sont peu disponibles dans la littérature. Les propriétés optiques à 300 K ont été utilisées. Plusieurs structures avec une émission thermique quasi-cohérente à différentes longueurs d'onde ont été obtenues. Les plus simples, constituées de deux à quatre couches sont présentées dans la suite.

5.3.2.1 Structures bi-couches

Plusieurs structures bi-couches présentant une émission quasi-cohérente ont été obtenues. Ces structures présentent un pic d'émissivité à une longueur d'onde donnée, et une émissivité quasi-nulle partout ailleurs. Elles sont constituées d'un film de matériau transparent sur un film plus fin d'un diélectrique absorbant. Le matériau transparent joue le rôle d'un revêtement antireflet (Zhang [2007]) à la longueur d'onde du pic alors que le matériau dissipatif, s'il est bien choisi, est capable d'amplifier la partie du rayonnement transmise par l'antireflet et absorbée, donc émise autour du pic d'émission. L'amplification est la plus spectaculaire autour des modes de résonance du réseau du matériau absorbant donc autour des résonances de sa permittivité diélectrique. Une structure bi-couche antireflet est présentée sur la figure 5.7a. On considère que la structure est immergée dans l'air, sans substrat. Les indices de réfraction de l'air et du revêtement sont $n_{air} = 1$ et n_{rev} respectivement. d figure l'épaisseur du revêtement. Sous certaines conditions (Drevillon et al. [2011]), cette structure peut présenter une réflectance nulle à $\lambda = 4n_{rev}d$.

La réflectance à incidence normale de la structure de la figure 5.7a composée d'une couche de germanium (Ge) (le germanium est transparent dans le moyen infrarouge) de 735 nm d'épaisseur sur un substrat d'un matériau fictif, ayant pour indice de réfraction la partie réelle de l'indice de réfraction du carbure de silicium (SiC) est présentée sur la figure 5.8. On observe un minimum

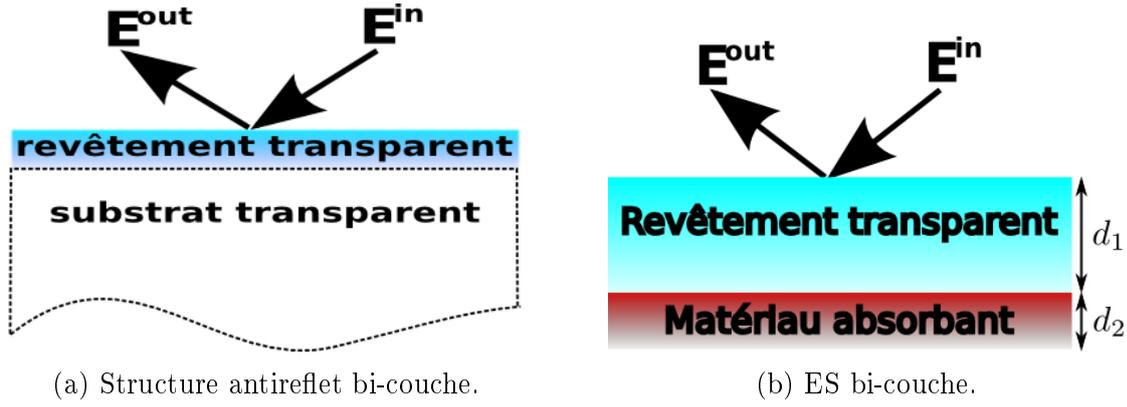


FIGURE 5.7: Structures bi-couches.

de réflectance à $\lambda \simeq 12,6 \mu\text{m}$, soit $\lambda_T = 2\pi c/\omega_{TO}$. Cette longueur d'onde de réflectance nulle est ajustée pour correspondre à la longueur d'onde de résonance de la permittivité diélectrique du SiC comme montré sur la figure 5.8. Elle peut être décalée si nécessaire en faisant varier l'épaisseur du revêtement. Cette structure ne présente ni émission ni absorption du rayonnement puisque les deux matériaux ne sont pas dissipatifs. On rappelle que la permittivité diélectrique du SiC est donnée par le simple oscillateur de Lorentz (Palik [1985]) :

$$\epsilon = \epsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right) \quad (5.4)$$

où $\omega_{TO} = 14,937 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$, $\omega_{LO} = 18,253 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$, $\Gamma = 8,966 \times 10^{11} \text{ rad.s}^{-1}$ et $\epsilon_\infty = 6,7$ sont la pulsation des phonons optiques transverses et longitudinaux, la constante d'amortissement et la constante diélectrique pour les hautes fréquences respectivement.

Le substrat de la structure précédente est remplacé par un film mince de SiC. Ce film doit être assez épais¹ pour absorber tout le rayonnement incident autour de $\lambda_p = 12,6 \mu\text{m}$. Pour le calcul suivant, une couche de 65 nm d'épaisseur est considérée. On remarque une baisse de l'émissivité pour les grands angles d'incidence. On remarque également que pour les incidences rasantes, un deuxième pic apparaît sur l'autre bord de la bande Reststrahlen², *i.e.* à ω_{LO} .

Seules les grandeurs normales sont ici présentées (Figure 5.9). En effet, tout le rayonnement incident entre 0° et 90° est réfracté à l'intérieur d'un cône très étroit de 14° dans le premier film puisque l'indice de réfraction du germanium ($n_{Ge} = 4$) présente un fort contraste avec l'indice de l'air ($n_{air} = 1$)³. On trace toutefois sur la figure 5.10 l'émissivité en polarisation p de cette structure pour 3 angles d'incidence afin d'apprécier plus finement la variation angulaire de cette grandeur.

1. L'épaisseur ne doit toutefois pas dépasser une valeur de quelques centaines de nanomètres. En effet, au delà de 200 nm, on observe une perte de cohérence de l'émission de la structure.

2. De l'allemand, littéralement, bande de rayons « restants » ou « résiduels » en français. Le premier bord est défini par ω_{TO} . Cette appellation est due au fait que dans cette bande, pour le SiC massif par exemple, la réflectance est très élevée et les ondes EM sont interdites de propagation.

3. L'angle de réfraction maximal est donné par $\theta_{max} = \text{asin} \left(\frac{n_{air}}{n_{Ge}} \sin \left(\frac{\pi}{2} \right) \right)$.

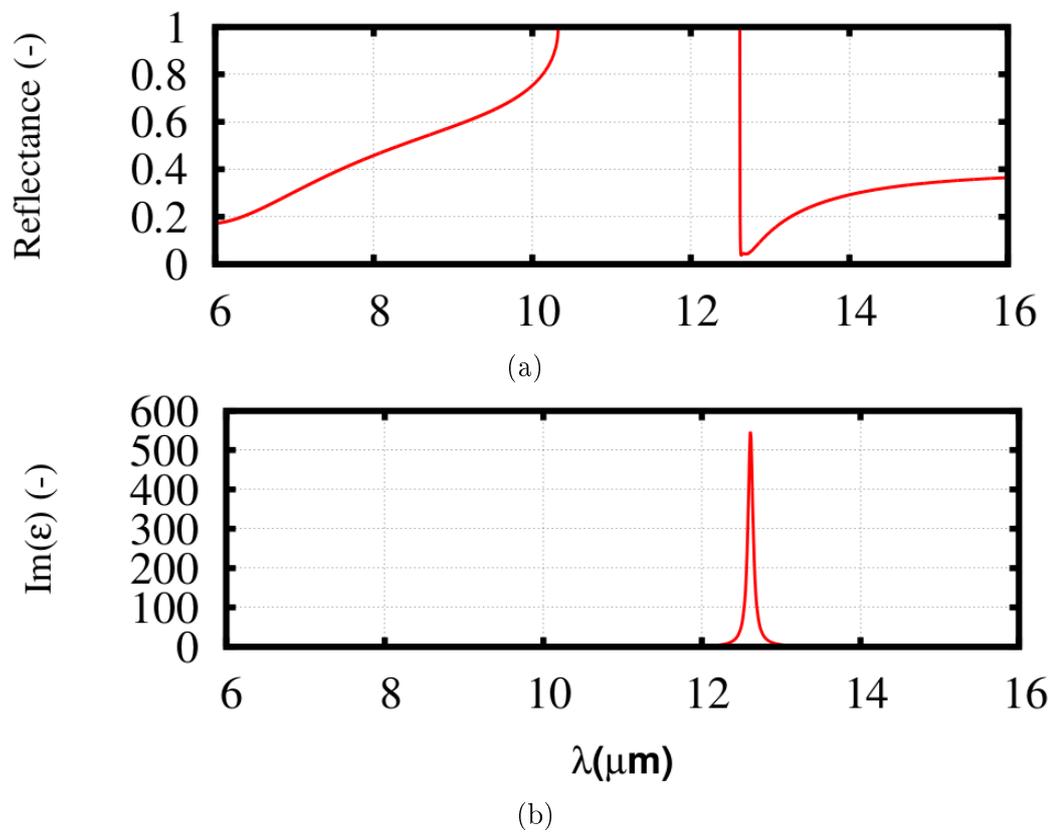


FIGURE 5.8: La réflectance d'un film mince de germanium sur un substrat transparent fictif (a) et le coefficient d'absorption du SiC, $\text{Im}(\epsilon)$ (b). Le minimum de la réflectance correspond à la longueur d'onde de résonance du coefficient d'absorption du SiC.

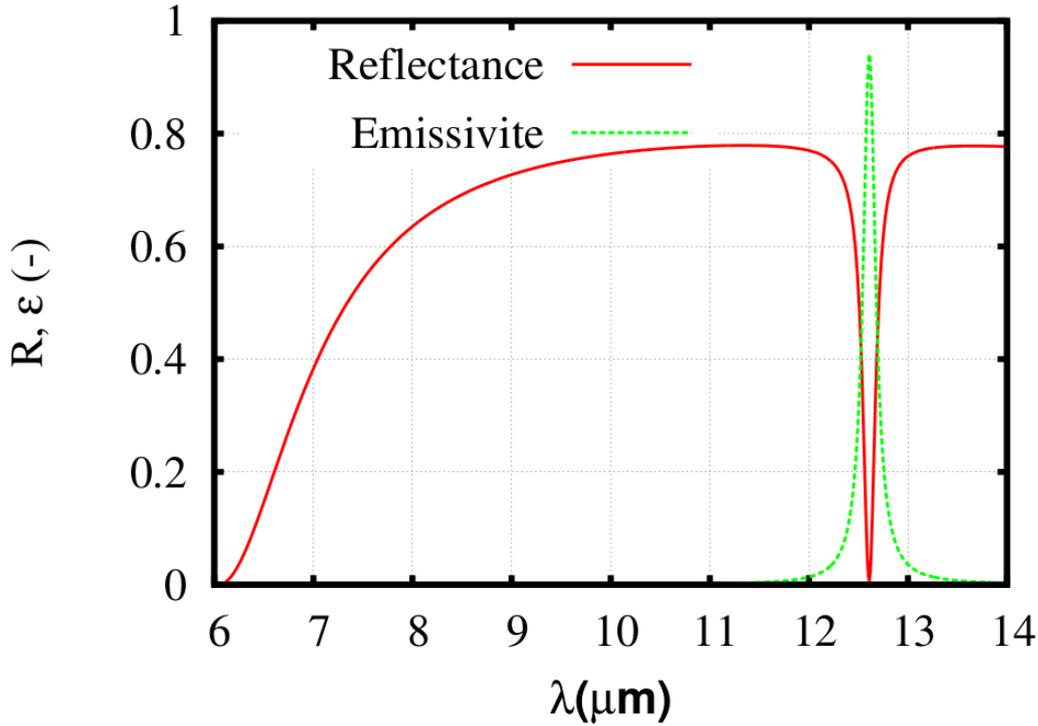


FIGURE 5.9: Réflectance et émissivité normale d'une structure bi-couche constituée d'un film de germanium de 735 nm et d'un film de SiC de 65 nm.

D'autres structures fonctionnant selon le même principe ont été obtenues. Le revêtement antireflet est toujours constitué de germanium alors que le nitrure de bore (BN) et le nitrure d'aluminium (AlN) sont utilisés en tant que matériaux absorbants. Les vibrations du réseau du BN et AlN présentent de fortes résonances dans le moyen infrarouge de manière similaire au SiC. L'épaisseur du revêtement a été optimisée pour ajuster le minimum de réflectance à la longueur d'onde de résonance de la permittivité diélectrique des semi-conducteurs alors que l'épaisseur de ceux-ci est ajustée afin d'assurer l'absorption de la totalité du rayonnement incident autour du creux d'antiréflexion¹. L'émissivité à incidence normale de ces structures est présentée sur la figure 5.12. Leurs dimensions et propriétés radiatives sont résumées dans le tableau 5.1. Le facteur de qualité Q est défini comme suit :

$$Q = \frac{LMH}{\lambda_p} \quad (5.5)$$

La permittivité diélectrique du AlN est modélisée par un simple oscillateur de Lorentz. Les paramètres du modèle sont $\omega_{TO} = 12,346 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$, $\omega_{LO} = 17 \times 10^{13} \text{ rad.s}^{-1}$, $\Gamma = 1,88 \times 10^{12}$, $\epsilon_\infty = 4,77$. La permittivité diélectrique du BN est modélisée par un modèle à

1. L'épaisseur optimale du matériau absorbant dépend en premier lieu de la valeur du coefficient d'extinction $\kappa = \text{Im}(\epsilon)$. Un coefficient d'extinction plus grand conduit à une épaisseur de film plus faible. C'est pour cette raison que le SiC qui présente la résonance la plus forte de son coefficient d'extinction (en comparaison avec BN et AlN) conduit au film absorbant le moins épais (voir Tableau 5.1)

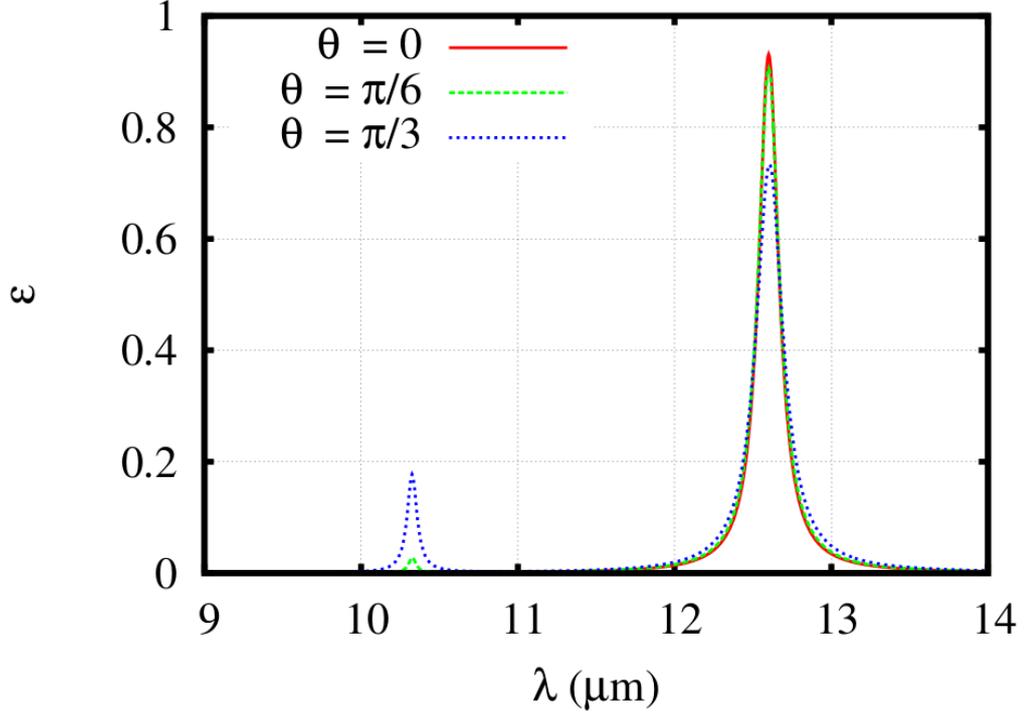


FIGURE 5.10: Émissivité de la même structure pour différents angles d'incidence : $\theta = 0$, $\theta = \frac{\pi}{6}$ et $\theta = \frac{\pi}{3}$

n°	Coating	Lossy Mat.	d_1 (nm)	d_2 (nm)	λ_p (μm)	LMH (μm)	Q (-)
1	Ge	SiC	735	65	12,6	0,17	74,1
2	Ge	BN	450	310	9,2	0,9	10,2
3	Ge	AlN	950	300	15,3	0,7	21,8

TABLE 5.1: Différentes structures bi-couches présentant une émission spectralement quasi-cohérente dans le moyen infrarouge. d_1 et d_2 figurent les épaisseurs du revêtement antireflet et du matériau dissipatif respectivement. λ_p , LMH et Q figurent la position du pic, sa largeur à mi-hauteur, et le facteur de qualité.

quatre paramètres :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + 4\pi\rho\omega_0^2 \left(1 + \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i\Gamma\omega} \right) \quad (5.6)$$

où $\epsilon_\infty = 4,5$, $4\pi\rho = 2,6$, $\omega_0 = 1065 \text{ cm}^{-1}$ et $\Gamma = 40,5 \text{ cm}^{-1}$ sont la valeur limite de la permittivité diélectrique à hautes fréquences, l'amplitude de la résonance, la pulsation du phonon TO et la constante d'amortissement (Palik [1985]).

Conclusion

En utilisant différents semi-conducteurs à large gap, il a été possible d'obtenir une émission quasi-cohérente à différentes longueurs d'onde et des pics d'émission de différentes largeurs. Les possibilités offertes par ces structures restent cependant très limitées puisque la position du pic d'émission et sa largeur sont complètement déterminées par les modes de résonance du

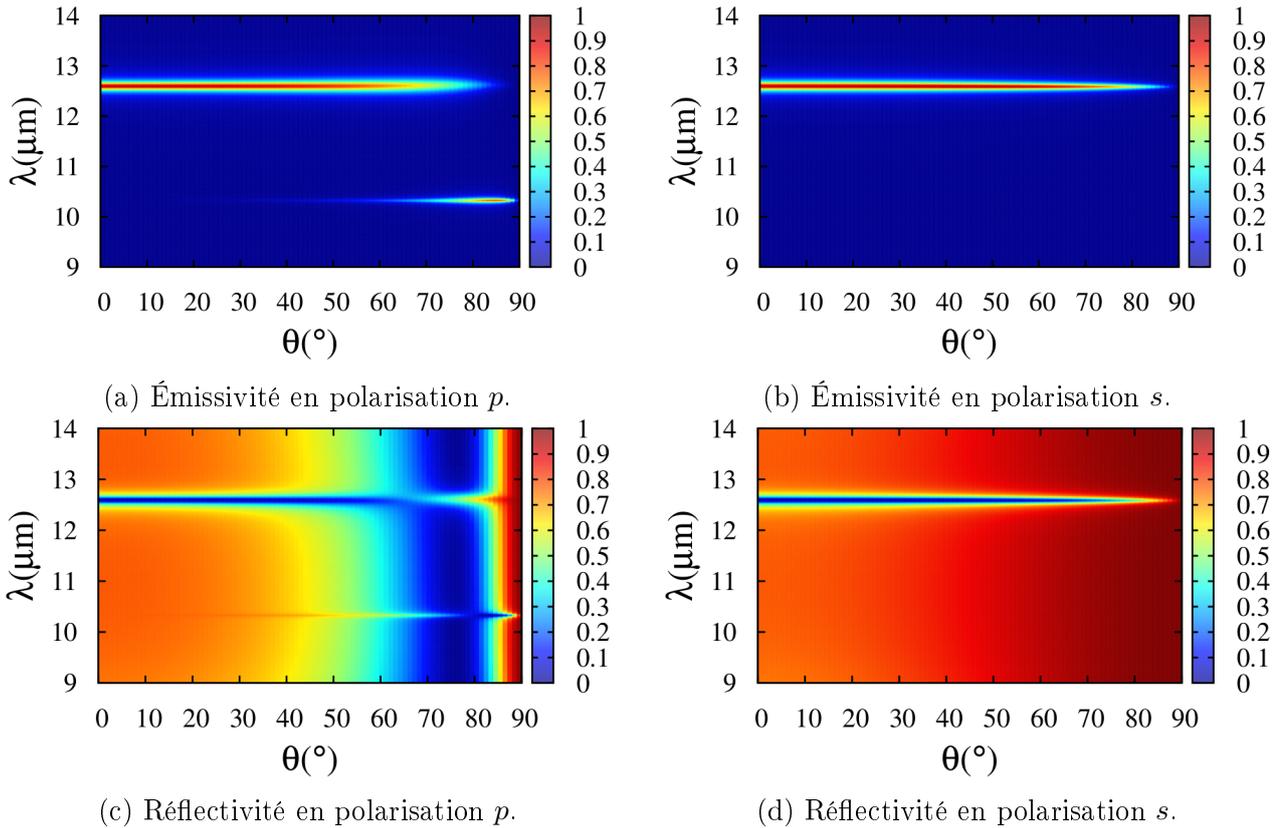


FIGURE 5.11: Émissivité (a-b) et réflectivité (c-d) spectrale et directionnelle d'une structure bi-couche constituée d'un film de germanium de 735 nm et d'un film de SiC de 65 nm pour la polarisation p et s .

réseau du semi-conducteur et de leurs intensités respectivement. Ces grandeurs sont difficilement contrôlables. De plus, les modes résonnants des vibrations du réseau se situent généralement dans le moyen voire le lointain infrarouge, qui sont des domaines spectraux peu intéressants pour des applications photovoltaïques. On explorera dans la suite les larges possibilités offertes par des structures légèrement plus complexes, car constituées de quatre couches.

5.3.2.2 Structures 4-couches : cavités Fabry-Pérot

D'autres structures composées de quatre films, obtenues par la même méthode d'optimisation, présentent également un rayonnement thermique cohérent. Ces structures alternent nécessairement un matériau transparent et un matériau absorbant pour former une cavité. La figure 5.13 illustre une structure à quatre couches. Des métaux nobles (or et argent) et des semi-conducteurs très fortement dopés (silicium) sont utilisés en tant que matériaux absorbants. N'importe quel matériau transparent peut être utilisé pour les films transparents. Le silicium intrinsèque est transparent dans la gamme de longueur d'onde considérée avec $\epsilon_{Si} = 11,7$ (Palik [1985]). Il sera utilisé pour les calculs qui suivent.

Des structures avec une émission cohérente dans le proche et le moyen infrarouge sont recherchées. L'émissivité cible à incidence normale est donnée sur la figure 5.15. C'est la même pour les deux états de polarisation. Plusieurs solutions présentant une émissivité très proche ont été

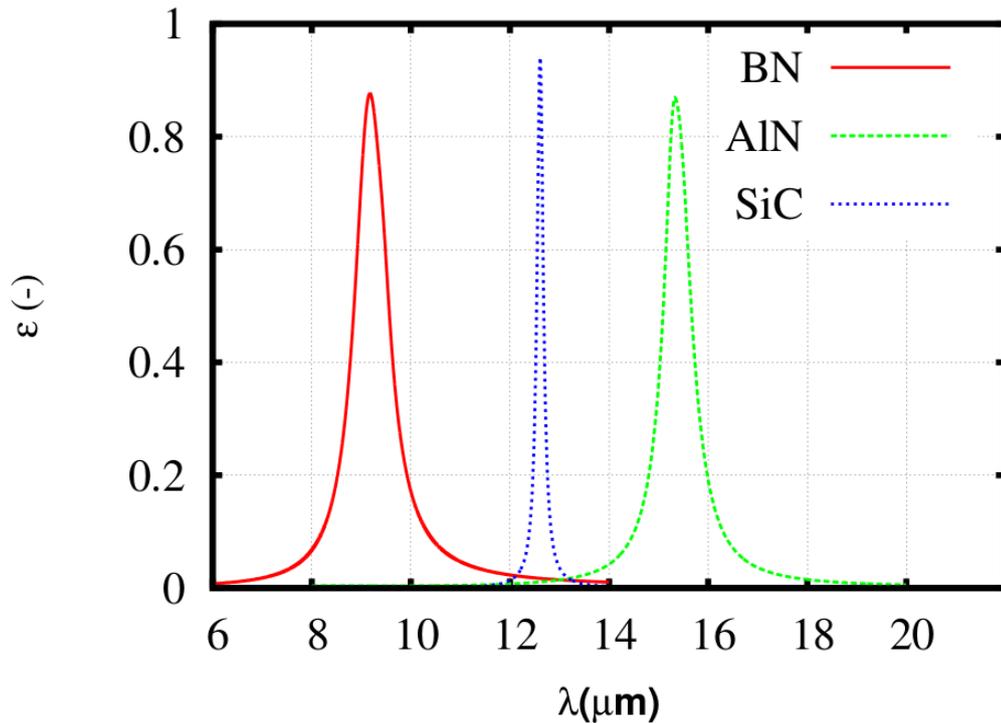


FIGURE 5.12: Émissivité spectrale à incidence normale de structures bi-couches composées d'un revêtement de germanium et de films minces de BN, SiC et AlN.

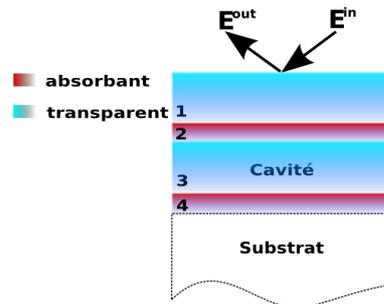


FIGURE 5.13: Une structure à quatre couches alternant matériaux transparent et absorbant

obtenues. L'émissivité et la réflectivité spectrale et directionnelle d'une structure silicium / or (Si/Au/Si/Au), avec les épaisseurs des différentes couches $d_1 = 90$ nm, $d_2 = 40$ nm, $d_3 = 170$ nm et $d_4 = 400$ nm., sont présentées sur la figure 5.14 pour les deux polarisations. Dans un but de comparaison avec la cible, l'émissivité spectrale en incidence normale est représentée sur la figure 5.15. Un pic d'émissivité est effectivement observé autour de $1,5 \mu\text{m}$ et une émissivité nulle ailleurs comme spécifié pour la cible. L'émissivité de la structure (Tableau 5.3, $n^\circ 1$) pour différentes incidences est présentée sur la figure 5.16. Le pic d'émissivité de la structure n'est pas parfaitement isotrope. Il atteint sa valeur maximale autour de $\theta = \frac{\pi}{3}$. On observe aussi pour cet angle d'incidence un léger déplacement vers le bleu de sa position ainsi qu'un léger rétrécissement. La caractérisation des pics correspondant aux différents angles d'incidence est résumée dans le tableau 5.2. Par souci de comparaison, on présente sur la figure 5.17 l'émittance hémisphérique spectrale de cette structure et celle d'un corps noir. Les deux sont considérés à $T = 1900$ K afin de faire coïncider le maximum d'émission du corps noir dont la position est

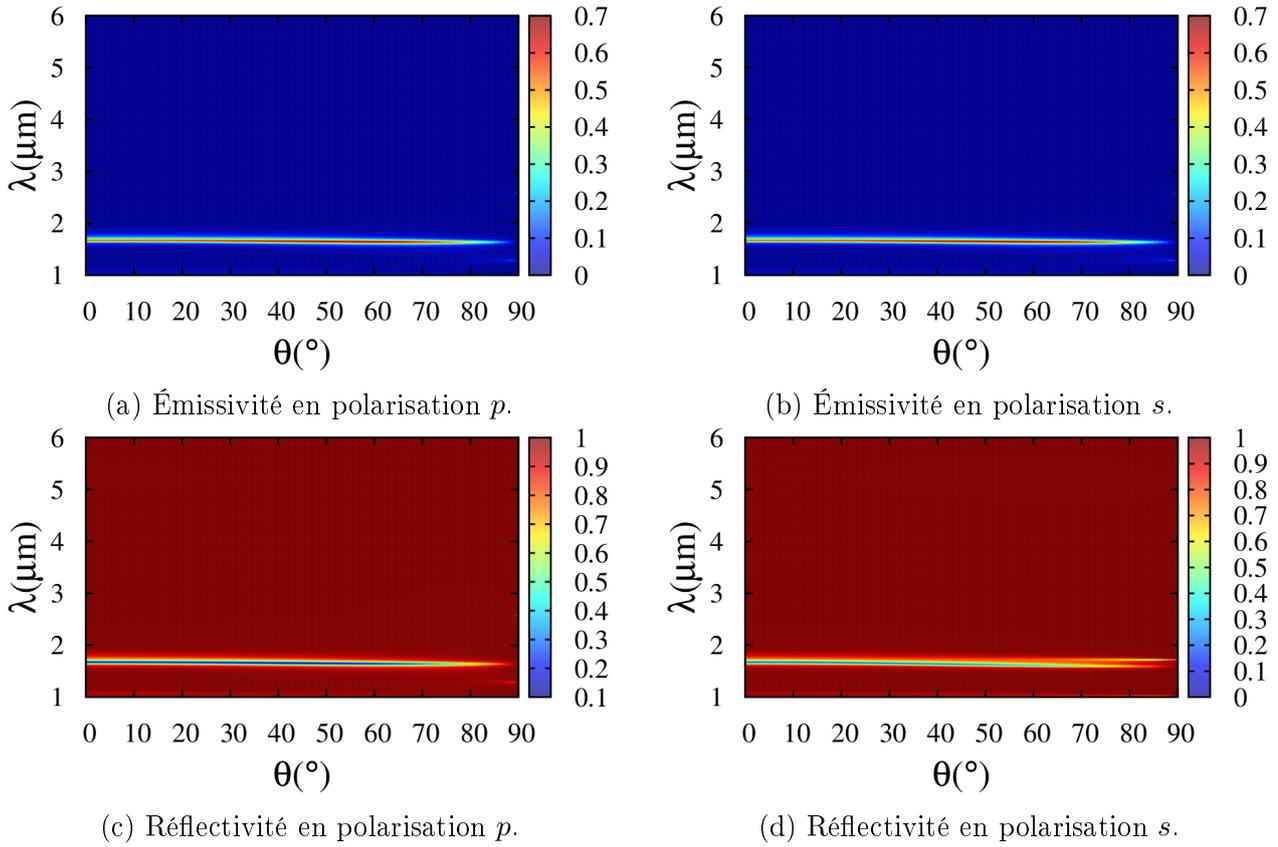


FIGURE 5.14: Émissivité (a-b) et réflectivité (c-d) spectrale et directionnelle de la structure quatre-couche (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) pour la polarisation p et s .

θ	λ_p (μm)	LMH ($\times 10^{-2}\mu\text{m}$)	Q (-)
0	1,675	7,5	22,3
$\pi/6$	1,665	7,5	22,2
$\pi/3$	1,645	7	23,5
$\pi/2$	1,675	7,5	22,3

TABLE 5.2: Caractérisation des pics d'émissivité d'un ES quatre-couche (fig. 5.16).

donnée par la loi de Wien avec le pic d'émission. On obtient une intensité maximale d'émission comparable pour les deux structures, malgré un spectre beaucoup plus étroit pour l'ES. En effet, alors que 95% du rayonnement du corps noir considéré est émis entre $0,75 \mu\text{m}$ et $6 \mu\text{m}$, celui de l'ES est émis entre $1,44 \mu\text{m}$ et $1,56 \mu\text{m}$ si on considère sa largeur à mi-hauteur.

Le pic d'émission de ces structures peut être expliqué par des modes résonnants dans une cavité Fabry-Pérot (Wang et al. [2009]) où les films d'or ou de silicium fortement dopé, ces derniers

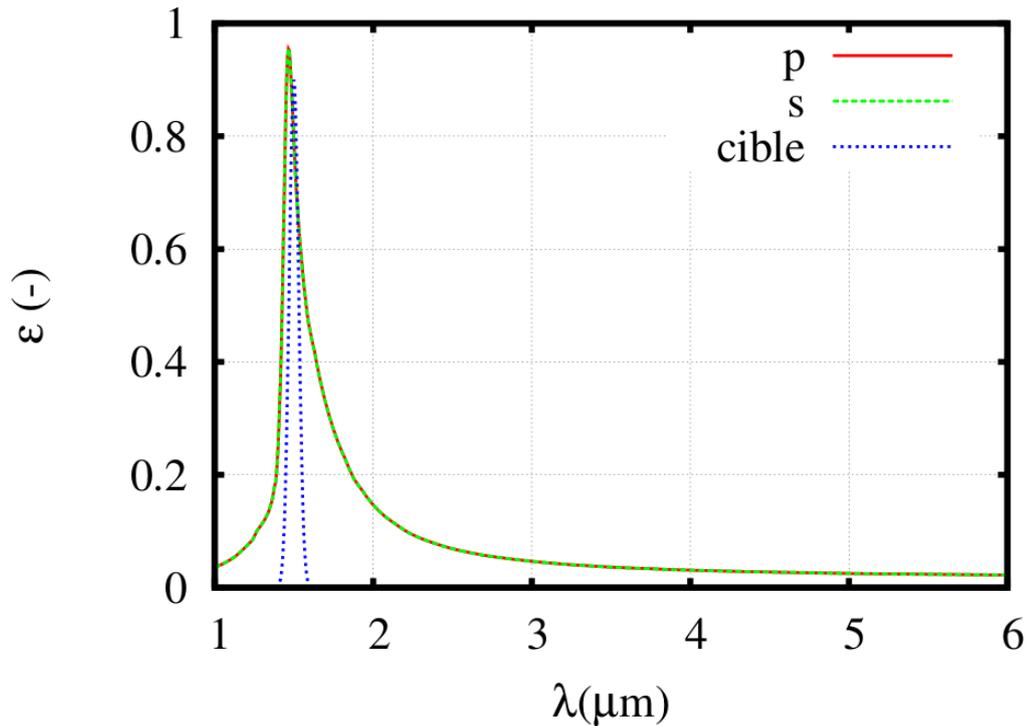


FIGURE 5.15: Émissivité cible pour les polarisation p (Transverse Magnétique) et s (Transverse Électrique) ainsi que celles d'une structure à quatre couches (trait plein).

ayant un comportement quasi-métallique¹, jouent le rôle de réflecteurs². Le film non-dissipatif joue le rôle de la cavité. Les longueurs d'onde des modes résonnants à incidence normale sont données par :

$$\lambda_m \simeq \frac{2n_c d_c}{m} \quad (5.7)$$

où n_c et d_c sont l'indice de réfraction et l'épaisseur de la cavité respectivement, et m un entier qui définit l'ordre du mode résonnant. D'après l'expression 5.7, l'épaisseur optique de la cavité ($n_c d_c$ à incidence normale) est cependant le paramètre de contrôle essentiel de la position du pic. Une rigoureuse égalité n'apparaît pas dans la relation 5.7 car la position du pic dépend également, bien qu'à un degré moindre, des épaisseurs et des propriétés optiques des réflecteurs. Par ailleurs, le contrôle des propriétés optiques des réflecteurs, notamment celles du silicium dopé à travers le degré de dopage, permet de contrôler la qualité de la résonance, *i.e.* l'intensité du pic et sa largeur.

Finalement, la température du corps noir est ajustée afin de faire correspondre la longueur d'onde de Wien avec celle du premier mode de résonance. Par conséquent, les pics de résonance

1. La forte densité des porteurs de charge à un niveau de dopage très élevé confère au silicium dopé des propriétés optiques, de réflexion notamment, proches de celles des métaux.

2. Les métaux nobles, notamment l'or et l'argent, sont de très bons réflecteurs pour le rayonnement infrarouge. En effet, ils présentent un indice de réfraction très petit par rapport à l'unité autour de $\lambda = 1\mu\text{m}$ et un coefficient d'extinction très élevé. La réflectance donnée par $R = \frac{|\tilde{n}-1|^2}{|\tilde{n}+1|^2}$ peut alors être approchée par $\frac{\kappa^2+1}{\kappa^2+1} = 1$ où \tilde{n} et κ figurent l'indice de réfraction complexe et le coefficient d'extinction respectivement.

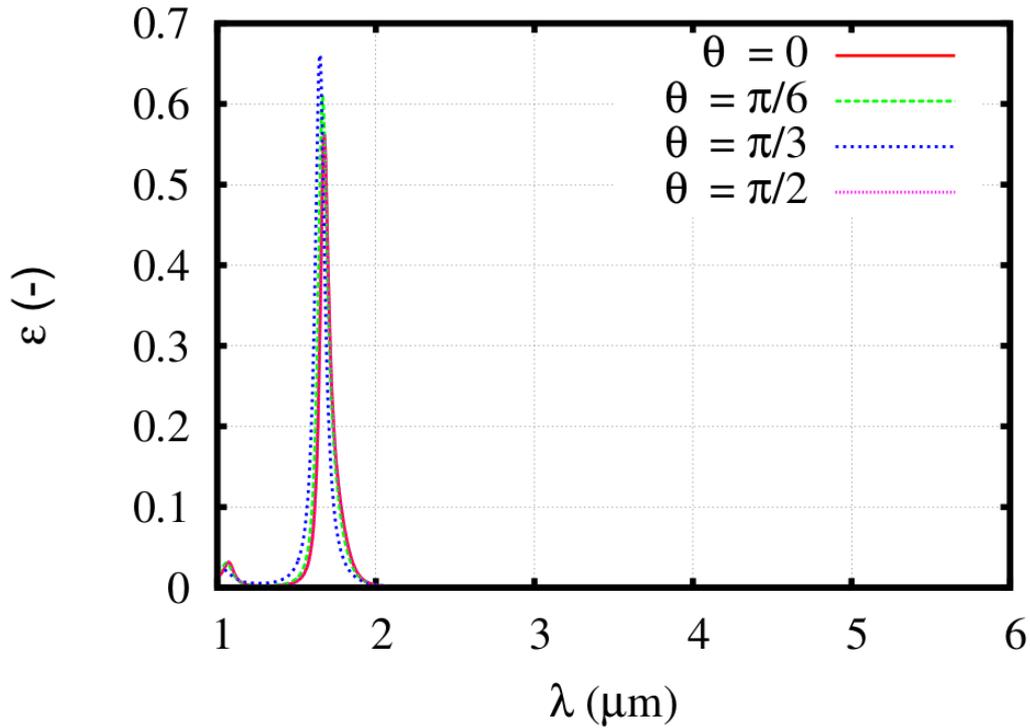


FIGURE 5.16: Émissivité de l'ES quatre-couches (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) pour différents angles d'incidence.

de la cavité Fabry-Pérot sont modulés par la loi de Planck. Le mode de premier ordre est ainsi amplifié et ceux d'ordre inférieur fortement atténués.

D'autres structures présentant des pics d'émission à d'autres longueurs d'onde sont reportées dans les tableaux 5.3 et 5.4.

n°	0	1	d_1 (nm)	d_2 (nm)	d_3 (nm)	d_4 (nm)	N (10^{20}cm^{-3})
1	Si	Si dopé	375	48	194	30	3,72
2	Si	Si dopé	375	48	194	30	2,72
3	Si	Si dopé	375	48	194	30	1,72
4	Si	Or	87	36	150	390	–
5	Si	Or	87	36	200	390	–
6	Si	Or	87	36	250	390	–

TABLE 5.3: Différentes structures à quatre couches présentant une émission spectrale cohérente dans le proche infrarouge. Des structures silicium / silicium dopé et silicium / or sont présentées ici. Leurs paramètres (épaisseurs des couches et concentration de dopage) ont été déterminés avec la méthode d'optimisation par essais de particules

Conclusion

Dans ce paragraphe, on a montré la possibilité d'obtenir des émetteurs sélectifs relativement simples (4 couches) contrôlables en terme de longueur d'onde d'émission et de largeur de pic, *i.e.* en terme de flux émis. Ces émetteurs sélectifs alternent matériau transparent et matériau réflecteur dans le proche infrarouge afin de former des cavités résonnantes. Combiner les possibilités de ces ES avec les relations (LMH,P) et (LMH,η) présentées au paragraphe 3.4.3

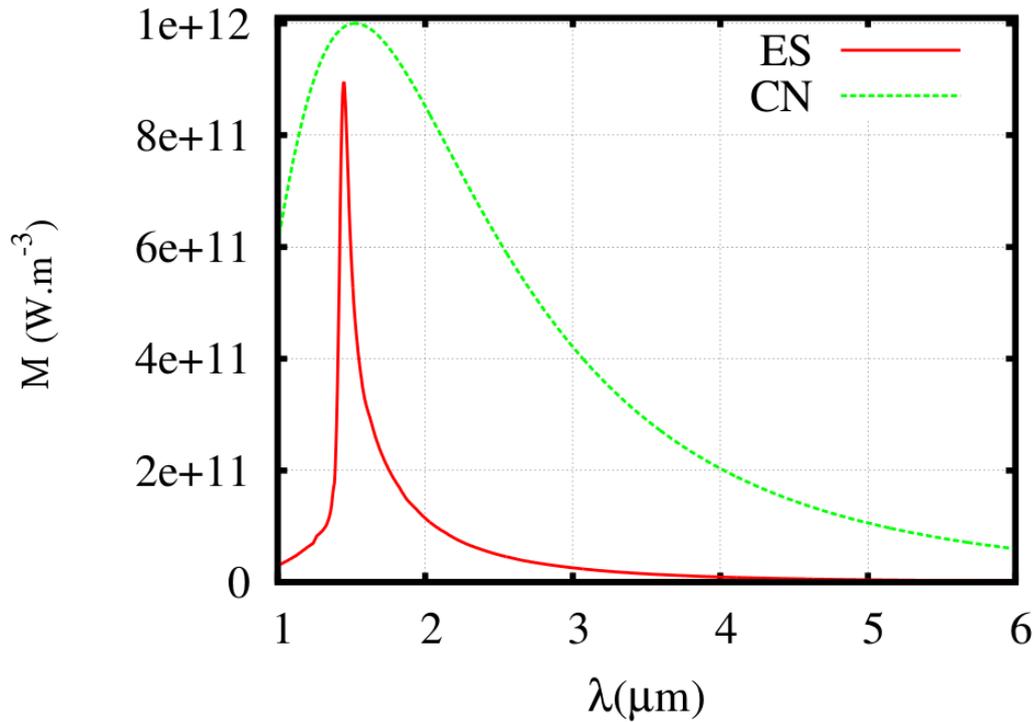


FIGURE 5.17: Emittance hémisphérique d'un corps noir et de la structure Au/Si à quatre couches, les deux à 1900 K.

n°	λ_p (μm)	LMH (μm)	Q (-)
1	1,8	0,1	18
2	1,8	0,18	10
3	1,8	0,36	4,9
4	1,4	0,14	10
5	1,76	0,15	11,7
6	2,1	0,14	15

TABLE 5.4: Caractérisation des pics d'émission (émittance hémisphérique) observés avec les structures présentées dans le tableau 5.3.

permettrait de faire le choix convenable pour atteindre des objectifs d'efficacité et de puissance donnés.

5.3.3 Stabilité des solutions

Les propriétés des structures présentées tout au long des précédents paragraphes, qu'elles soient structurales (épaisseurs, état de surface ...) ou optiques (indice de réfraction) présentent en conditions réelles de fonctionnement, des écarts par rapport à celles définies en amont. En effet, la précision des méthodes de fabrication, l'expansion thermique due aux températures de fonctionnement par définition élevées pour un système TPV, l'usure de fonctionnement, etc. peuvent être à l'origine de tels écarts. On se propose dans les paragraphes suivants d'évaluer l'impact de tels écarts sur les propriétés qui nous intéressent ici, en l'occurrence les propriétés

radiatives de l'ES. On prendra un exemple de chaque catégorie de structures : La structure SiC/Ge pour les structures bi-couches et la structure Si/Si dopé (structure n°1, Tableau 5.3) pour les structures à quatre couches. On évaluera la variation de l'émittance hémisphérique spectrale $M(\lambda)$ pour de faibles variations des différents paramètres, à travers notamment la position du pic λ_p , sa largeur à mi-hauteur LMH , la valeur maximale de l'émittance M_{max} et sa valeur intégrée donnant la densité surfacique de flux Φ . Les variations relatives d'une grandeur x parmi celles-ci ($x \in \{\lambda_p, LMH, M_{max}, \Phi\}$) par rapport à leurs valeurs pour l'ES sans perturbation seront notées $\frac{dx}{x}$.

5.3.3.1 Épaisseur des couches

On se propose dans ce paragraphe d'étudier l'impact d'une certaine variation de l'épaisseur des couches par rapport aux épaisseurs optimales sur l'émittance de l'ES.

Structures bi-couches

On considérera à titre d'exemple la structure SiC/Ge (Tableau 5.1, n°1). La figure 5.18 présente l'émittance hémisphérique de cette structure à $T_e = 300\text{K}$ pour une variation des épaisseurs des deux couches de $\pm 10\%$. Graphiquement, on ne remarque pas de variation notable des propriétés optiques. Le tableau 5.5 résume les grandeurs caractéristiques des pics d'émission pour ces mêmes variations des dimensions des deux couches. On remarque alors que la position du pic est quasiment inchangée avec une variation maximale de moins de 0,2% autour de la position optimale $\lambda_p = 12,61(\mu\text{m})$. En effet, pour ces émetteurs sélectifs bi-couches, la fréquence du pic d'émission est déterminée par les fréquences de résonance de vibration du réseau du matériau absorbant qui sont des valeurs intrinsèques à ces matériaux. En revanche, la LMH , la valeur maximale du pic d'émission et par conséquent le flux total émis sont plus sensiblement affectés par ces variations des dimensions des couches et avoisinent les 5% pour l'émittance maximale ainsi que pour le flux total émis. En effet, la variation de l'épaisseur de la couche de Ge modifie la qualité de l'antireflecteur et donc la quantité de rayonnement qui parvient au matériau absorbant/émetteur et donc l'intensité de l'absorption/émission. Par ailleurs, une variation de l'épaisseur de la couche dissipative fait varier la quantité de rayonnement absorbé/émis.

Structures 4-couches

Les structures Si / Si dopé sont les structures à quatre couches les plus intéressantes puisque elles sont les plus contrôlables (en terme de position et de largeur de pic). La figure 5.19 présente la variation de l'émittance hémisphérique de la structure à quatre couches (n°1, Tableau 5.3) due à une variation de l'épaisseur de chaque couche. Pour les couche 1, 2 et 4 qui ne sont pas responsables de la position du pic d'émissivité, l'émittance hémisphérique a été calculée pour la même température $T_e = 1745\text{K}$. Pour la couche 3, étant donné que son épaisseur contrôle la position du pic d'émissivité, la température T_e a été ajustée pour faire correspondre cette position avec le maximum de la fonction de Planck. Les trois températures $T_e = 1870\text{K}$, $T_e = 1745$

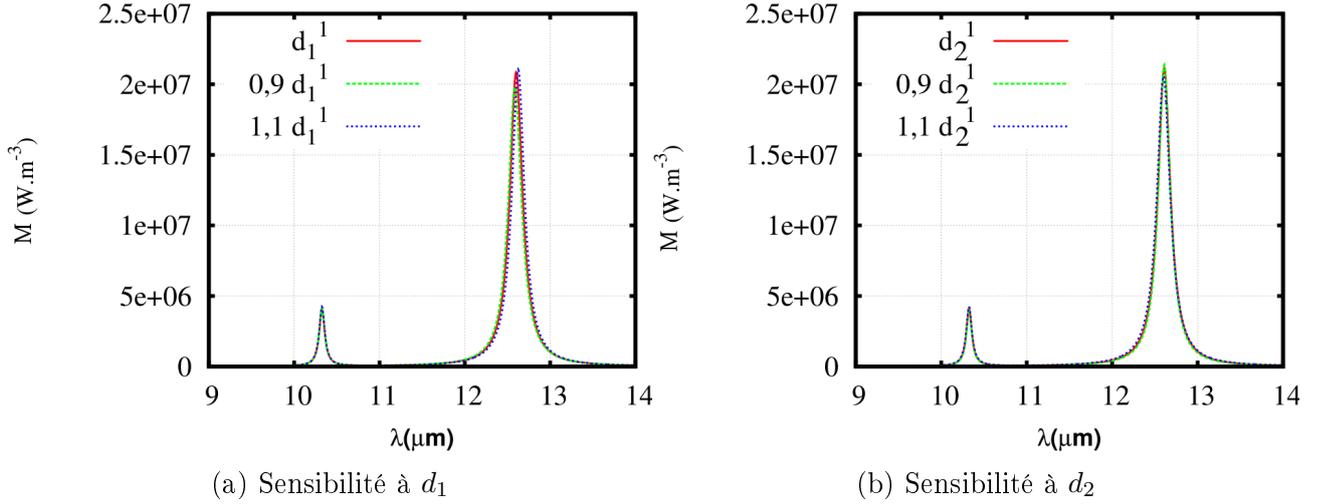


FIGURE 5.18: Émittance hémisphérique d'un ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^\circ 1$) avec une variation de $\pm 10\%$ des dimensions des deux couches. d_i^1 figure l'épaisseur de la couche i de la structure.

	d_1^1	$d_1^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_1^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,61	12,62	$0,2 \times 10^{-2}$	12,58	$-0,12 \times 10^{-2}$
$LMH(\mu\text{m})$	$1,8 \times 10^{-1}$	$1,75 \times 10^{-1}$	$-2,78 \times 10^{-2}$	$1,9 \times 10^{-1}$	$5,56 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W}\cdot\text{m}^{-3})$	$2,09 \times 10^7$	$2,11 \times 10^7$	$0,88 \times 10^{-2}$	$1,98 \times 10^{11}$	$-5,14 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W}\cdot\text{m}^{-2})$	6,28	6,28	0	6,23	$-0,71 \times 10^{-2}$
	d_2^1	$d_2^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_2^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,61	12,6	$-0,08 \times 10^{-2}$	12,61	0
$LMH(\mu\text{m})$	$1,75 \times 10^{-1}$	$1,9 \times 10^{-1}$	$8,57 \times 10^{-2}$	$1,65 \times 10^{-1}$	$-5,71 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W}\cdot\text{m}^{-3})$	$2,11 \times 10^7$	$2,06 \times 10^7$	$-2,71 \times 10^{-2}$	$2,14 \times 10^7$	$1,18 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W}\cdot\text{m}^{-2})$	6,28	6,52	$3,72 \times 10^{-2}$	6,01	$-4,4 \times 10^{-2}$

TABLE 5.5: Propriétés radiatives de l'ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^\circ 1$) avec des variations de $\pm 10\%$ des dimensions des différentes couches. $\frac{dx}{x}$ figure la variation relative du paramètre considéré (λ_p , LMH , M_{max} et Φ) pour la variation relative de d_i^1 spécifiée dans la colonne précédente.

K et $T_e = 1620$ K ont été utilisées pour $d_3 = 0,9 \times d_3^1$, $d_3 = d_3^1$ et $d_3 = 1,1 \times d_3^1$ respectivement.

Le tableau 5.6 résume la variation des propriétés radiatives pertinentes (position du pic λ_p , largeur à mi-hauteur LMH et le maximum de l'émittance hémisphérique) pour une variation de 10% des épaisseurs des différentes couches.

La position du pic λ_p dépend principalement de l'épaisseur de la cavité d_3 selon la relation 5.7. On remarque cependant qu'une modification de l'épaisseur de la cavité, si elle permet de décaler la position du pic, ne suffit pas pour obtenir la structure optimale pour ce nouveau pic d'émission puisque, pour $d_3 = 0,9 \times d_3^1$, avec $\lambda_p = 1,54 \mu\text{m}$ et $T_e = 1870$ K, alors que le maximum de la fonction de Planck à cette température est supérieur à celui avec $T_e = 1745$ K, on obtient une émittance hémisphérique maximale inférieure.

Les dimensions des différentes couches affectent la largeur à mi-hauteur du pic d'émission. Pour une variation de 10% des épaisseurs des différentes couches, la variation de la LMH varie entre 6% et 19%. Cependant, cette grandeur reste plus sensible aux variations des épaisseurs des

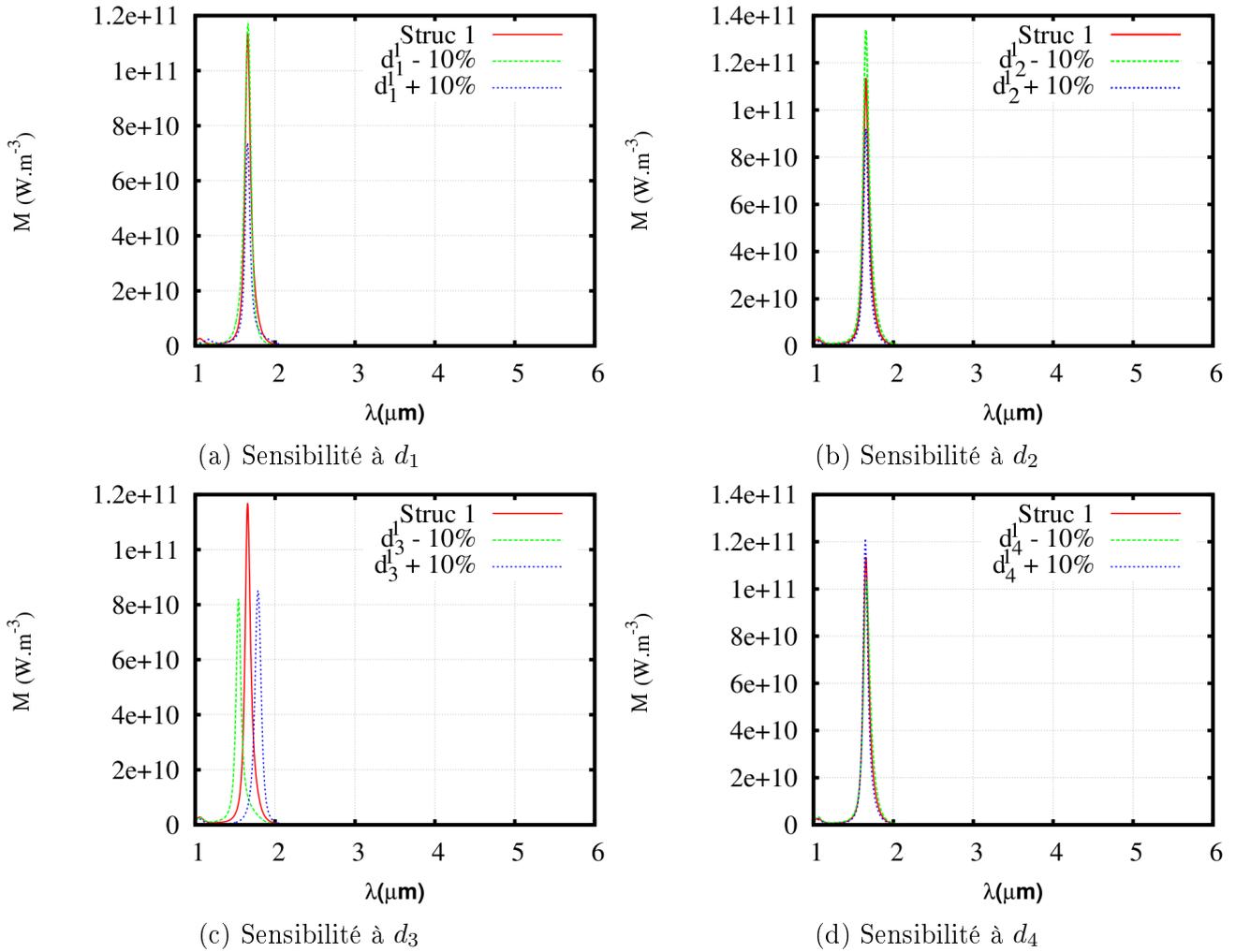


FIGURE 5.19: Émittance hémisphérique de l'ES à quatre-couches (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) avec une variation de $\pm 10\%$ des dimensions des différentes couches.

couches 1 et 4 avec des variations entre 12% et 19%.

Par ailleurs, l'émittance hémisphérique maximale subit des variations relatives assez importantes (jusqu'à 35% environ) pour les mêmes variations relatives des dimensions des différentes couches. C'est aussi le cas pour le flux total émis par l'ES. Les épaisseurs des couches 1, 2 et 3 sont celles qui affectent le plus ces grandeurs.

5.3.3.2 Propriétés optiques

Les propriétés optiques des matériaux utilisés peuvent être différentes des valeurs usuellement rapportées dans la littérature de référence (Palik [1985]) pour différentes raisons : méthodes de dépôt des films minces, température de fonctionnement, etc. Dans ce paragraphe, on propose d'apprécier l'effet d'un écart de $\pm 10\%$ sur tout le spectre de la valeur de la permittivité diélectrique des différents matériaux utilisés par rapport à leurs valeurs « standard » (Palik [1985]).

	d_1^1	$d_1^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_1^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,66	$0,3 \times 10^{-2}$	1,655	0
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	7×10^{-2}	$-12,5 \times 10^{-2}$	$9,5 \times 10^{-2}$	$18,75 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$7,37 \times 10^{10}$	$-34,7 \times 10^{-2}$	$1,17 \times 10^{11}$	$3,45 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31 \times 10^4$	$8,57 \times 10^3$	$-34,82 \times 10^{-2}$	$1,44 \times 10^4$	$9,57 \times 10^{-2}$
	d_2^1	$d_2^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_2^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,655	0	1,655	0
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	$7,5 \times 10^{-2}$	$-6,25 \times 10^{-2}$	$8,5 \times 10^{-2}$	$6,25 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$9,2 \times 10^{10}$	$-18,63 \times 10^{-2}$	$1,34 \times 10^{11}$	$18,52 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31 \times 10^4$	$1,00 \times 10^4$	$-23,87 \times 10^{-2}$	$1,69 \times 10^4$	$28,28 \times 10^{-2}$
	d_3^1	$d_3^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_3^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,785	$7,85 \times 10^{-2}$	1,54	$-6,95 \times 10^{-2}$
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	9×10^{-2}	$12,5 \times 10^{-2}$	$7,5 \times 10^{-2}$	$-6,25 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$8,51 \times 10^{10}$	$-24,7 \times 10^{-2}$	$8,21 \times 10^{10}$	$-27,31 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31 \times 10^4$	$1,02 \times 10^4$	$-22,16 \times 10^{-2}$	$9,76 \times 10^4$	$-25,76 \times 10^{-2}$
	d_4^1	$d_4^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$d_4^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,65	$-0,3 \times 10^{-2}$	1,665	$0,6 \times 10^{-2}$
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	7×10^{-2}	$-12,5 \times 10^{-2}$	$9,5 \times 10^{-2}$	$18,75 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$1,21 \times 10^{11}$	$7,44 \times 10^{-2}$	$1,04 \times 10^{11}$	$-7,9 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31 \times 10^4$	$1,21 \times 10^4$	$-7,6 \times 10^{-2}$	$1,41 \times 10^4$	$7,25 \times 10^{-2}$

TABLE 5.6: Propriétés radiatives de l'ES à quatre-couches (Tableau 5.3, $n^\circ 1$) avec des variations de $\pm 10\%$ des dimensions des différentes couches. d_i^1 figure l'épaisseur de la couche i de la première structure à quatre couches du tableau 5.3. $\frac{dx}{x}$ figure la variation relative du paramètre considéré (λ_p, LMH, M_{max} et Φ) pour la variation relative de d_i^1 spécifiée dans la colonne précédente.

Structures bi-couches

Les valeurs rapportées dans le tableau 5.7 montrent que les propriétés radiatives de l'émet-

	ϵ_1^1	$\epsilon_1^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$\epsilon_1^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,61	12,61	0	12,61	0
$LMH(\mu\text{m})$	$1,75 \times 10^{-1}$	$1,75 \times 10^{-1}$	0	$1,75 \times 10^{-1}$	0
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$2,11 \times 10^7$	$2,11 \times 10^7$	0	2,11	0
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	6,28	6,28	0	6,28	0
	ϵ_2^1	$\epsilon_2^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$\epsilon_2^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,61	12,61	0	12,61	0
$LMH(\mu\text{m})$	$1,75 \times 10^{-1}$	$1,75 \times 10^{-1}$	0	$1,75 \times 10^{-1}$	0
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$2,11 \times 10^7$	$2,11 \times 10^7$	0	2,11	0
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	6,28	6,28	0	6,28	0

TABLE 5.7: Propriétés radiatives de l'ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^\circ 1$) avec des variations de $\pm 10\%$ de la fonction diélectrique des différentes couches.

teur bi-couche considéré (Tableau 5.1, $n^\circ 1$) sont très peu sensibles, voire pas du tout, aux faibles variations de la permittivité diélectrique des deux matériaux utilisés. Ce résultat est aussi vérifié pour les autres structures bi-couche. Il est cependant important de noter que les matériaux obtenus par certaines techniques de nano-fabrication peuvent différer des matériaux

« standard » (en général mono-cristaux de haute qualité) ce qui induit des écarts des valeurs des propriétés optiques largement supérieurs aux écarts considérés ici. Dans ces cas là, il conviendra d'effectuer une étude au cas par cas.

Structures quatre-couches

On considère de nouveau l'ES quatre-couche Si / Si dopé (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$). Pour le silicium dopé, la permittivité diélectrique et donc l'indice de réfraction dépendent directement du niveau de dopage. On évaluera donc la sensibilité des propriétés radiatives de l'ES par rapport à des variations relatives de $\pm 10\%$ du niveau de dopage. La figure 5.20 présente la variation relative des parties réelle et imaginaire de la permittivité diélectrique du silicium dopé pour une variation relative de $\pm 10\%$ du niveau de dopage. On observe une variation relative du même ordre de $\text{Re}(\epsilon)$ et $\text{Im}(\epsilon)$ qui varie entre 10% et 15%.

On se propose donc d'évaluer l'effet d'une variation de cet ordre de la permittivité diélectrique

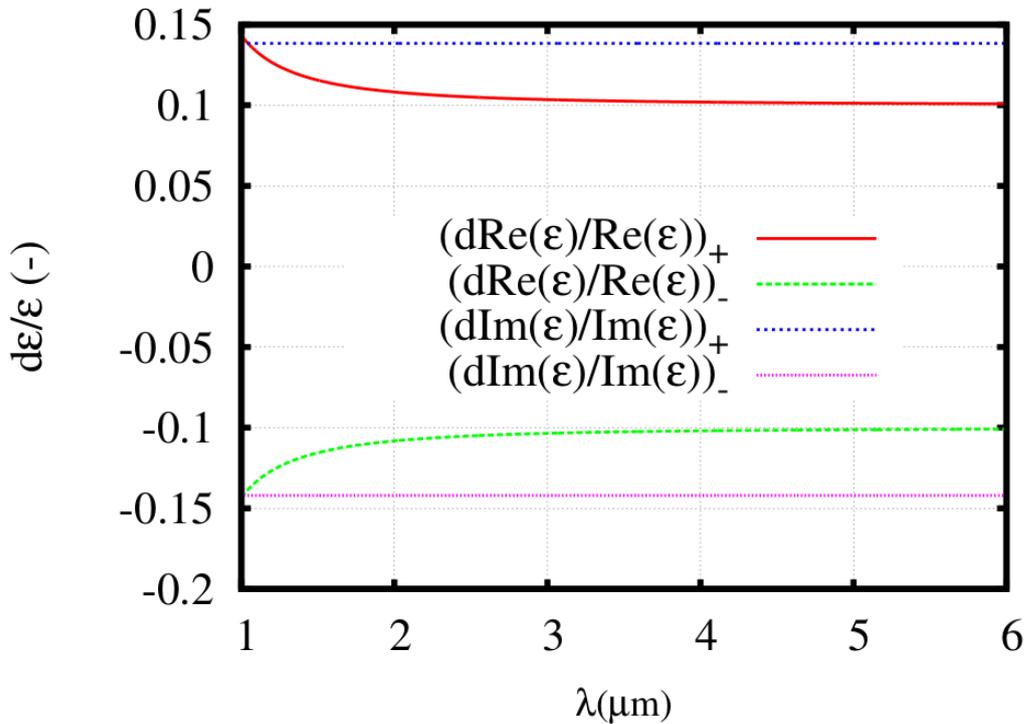


FIGURE 5.20: Variation relative de la partie réelle et imaginaire de la permittivité diélectrique du silicium dopé p à $N = 3,72 \times 10^{20} \text{ (cm}^{-3}\text{)}$ pour une variation de $\pm 10\%$ de la concentration de dopage. $(dx/x)_+$ et $(dx/x)_-$ figurent $\frac{x(N+0.1 \times N) - x(N)}{x(N)}$ et $\frac{x(N-0.1 \times N) - x(N)}{x(N)}$ respectivement.

sur les propriétés radiatives de l'ES. La figure 5.21 présente l'émittance hémisphérique de l'ES quatre-couche (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) pour une variation de $\pm 10\%$ de la permittivité diélectrique du matériau transparent (Fig. 5.21a) et de la concentration de dopage du matériau réflecteur (Fig. 5.21a). On remarque que les propriétés radiatives de cet ES dépendent très peu du premier paramètre alors qu'une variation du second induit un décalage de la position du pic et un changement de son intensité. Ces différentes variations sont résumées dans le tableau 5.8. Elle sont relativement importantes et on atteint des variations de flux émis de l'ordre de 30% pour

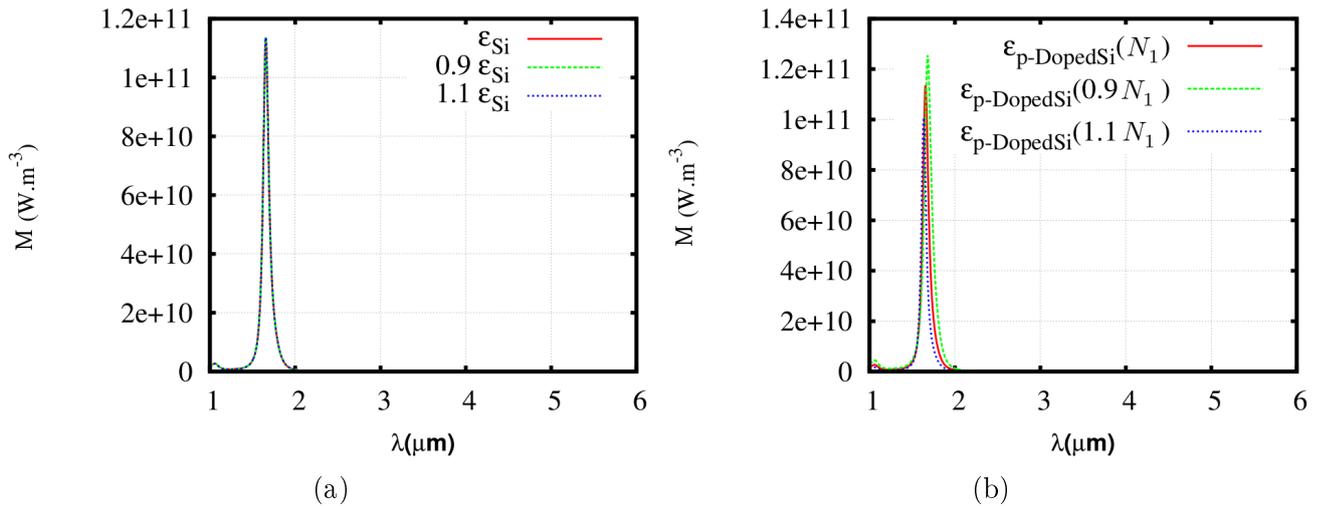


FIGURE 5.21: Émittance hémisphérique de l'ES à quatre-couches (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) avec une variation de $\pm 10\%$ de la permittivité diélectrique du silicium cristallin intrinsèque (5.21a) et de la concentration de dopage du silicium dopé p (5.21b)

$$N = 0,9 \times N_1.$$

	ϵ_{Si}^1	$\epsilon_{Si}^1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$\epsilon_{Si}^1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,655	0	1,655	0
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	8×10^{-2}	0	8×10^{-2}	0
$M_{max} (\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$1,13 \times 10^{11}$	0	$1,13 \times 10^{11}$	0
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31^4$	$1,31^4$	0	$1,31^4$	0
	N_1	$N_1 \times 1,1$	$\frac{dx}{x}$	$N_1 \times 0,9$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	1,655	1,635	$-1,21 \times 10^{-2}$	1,679	$1,51 \times 10^{-2}$
$LMH(\mu\text{m})$	8×10^{-2}	7×10^{-2}	$-12,5 \times 10^{-2}$	1×10^{-1}	25×10^{-2}
$M_{max} (\text{W.m}^{-3})$	$1,13 \times 10^{11}$	$1,01 \times 10^{11}$	$-11,34 \times 10^{-2}$	$1,25 \times 10^{11}$	$10,43 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	$1,31 \times 10^4$	$9,84 \times 10^3$	$-25,14 \times 10^{-2}$	$1,77 \times 10^4$	$34,64 \times 10^{-2}$

TABLE 5.8: Propriétés radiatives de l'ES quatre-couche (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) avec des variations de $\pm 10\%$ des permittivités diélectriques des différentes couches.

5.3.3.3 Effets thermiques

Afin d'obtenir des densités de flux importantes, et une distribution spectrale intéressante pour une conversion TPV (correspondance de la longueur d'onde de Wien avec le gap du semi-conducteur), les émetteurs sélectifs sont considérés à des températures relativement élevées de 1000 à 2000 K. La première dépendance en température des ES apparaît explicitement dans l'expression (5.1) à travers l'intensité énergétique spectrale et directionnelle du corps noir. Elle a été prise en compte dans les calculs qui précèdent. La dépendance implicite en température, notamment celle des propriétés optiques (permittivité diélectrique) et mécaniques (expansion thermique) des matériaux utilisés, sera considérée dans les paragraphes suivants. Étant donné

que l'impact d'une variation relative des dimensions des couches et de leurs propriétés optiques ont été considérés au paragraphe 5.3.3.1, il suffit ici d'évaluer l'effet de la température sur les dimensions des couches et les propriétés optiques des matériaux.

La température peut affecter les épaisseurs des couches de la structure ainsi que les propriétés optiques des matériaux. On quantifiera dans la suite ces deux effets afin d'évaluer la pertinence de leur prise en compte.

Épaisseur des couches

L'augmentation du volume des couches à haute température (et donc de leurs épaisseurs) est exprimée par le coefficient d'expansion thermique des matériaux :

$$\alpha = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right) \quad (5.8)$$

Les valeurs de ce paramètre pour différents matériaux qui nous intéressent sont rapportées dans le tableau 5.10. Dans le cas général, α tends vers une valeur constante pour des températures suffisamment élevées. En première approximation, on considérera la valeur maximale pour toute température au dessus de la température ambiante. Il est alors clair qu'on surestime l'effet de l'expansion thermique. On considère aussi que l'augmentation de volume est isotrope. L'augmentation selon une direction est alors donnée par :

$$\frac{dR}{R} = \frac{1}{3} \frac{dV}{V} \quad (5.9)$$

On considère les différents matériaux à 1000 K et on calcule la variation de l'épaisseur d'une

Matériau	T(K)	α (10^{-6} K^{-1})
Ge	300	6
	350	6,5
Si	300	2,6
	500	3,4
	1000	4,25
3C-SiC	300	3,8
	500	3,8
	900	4,8
6H-SiC	300	4,3 ($\parallel_c \text{ axis}$)
		4,7 ($\perp_c \text{ axis}$)

TABLE 5.9: Coefficient d'expansion thermique pour le germanium, le silicium non dopé et le carbure de silicium à différentes températures (Source : Ioffe Institute New Semiconductor Materials Database)

couche. On supposera ici, par souci de simplicité, que le coefficient d'expansion thermique est indépendant du dopage. Les variations relatives des dimensions des différentes couches sont de l'ordre du millièrme. On a vu dans les paragraphes précédents que les variations des propriétés

Matériau	α (10^{-6} K $^{-1}$)	$\frac{dV}{V}$ (10^{-3})	$\frac{dR}{R}$ (10^{-3})
Ge	6,5	6,5	2,17
Si	4,25	4,25	1,42
3C-SiC	4,8	4,8	1,6
6H-SiC	4,7	4,7	1,57

TABLE 5.10: Augmentation relative de volume et expansion thermique relative selon une direction dues à une augmentation de température de 1000 K.

radiatives sont du même ordre (ou inférieures) que les variations relatives des dimensions des différentes couches. Les variations des dimensions des émetteurs sélectifs dues à une élévation de la température jusqu'à 1000 K n'affecteront donc quasiment pas leurs propriétés radiatives. En effet, bien que la longueur d'onde du système anti-reflet de la structure bi-couche et les modes de la cavité résonnante dépendent des épaisseurs des films, ces épaisseurs seront trop peu affectées par l'élévation de température. Il en sera de même pour les propriétés radiatives de l'ES.

Propriétés optiques

Le comportement des propriétés optiques de certains matériaux (SiC, Si dopé, etc.) à haute température est détaillé dans l'annexe 7. On considérera un exemple d'ES bi-couche et un quatre-couche à 300 K et à une autre température plus élevée. Pour les différents cas, la fonction de Planck sera évaluée pour une température constante, la plus élevée entre les deux en l'occurrence, ceci afin d'isoler l'effet de la température sur les propriétés optiques des matériaux.

Cas du SiC/Ge (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) :

On présente sur la figure 5.22 l'émittance hémisphérique de l'ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) à $T_e = 770$ K. Les propriétés optiques des matériaux sont considérées tantôt à $T = 300$ K tantôt à $T = 770$ K. On observe sur la figure de faibles variations des propriétés radiatives. Afin de les apprécier plus précisément, on résume dans le tableau 5.11 les caractéristiques des différents pics pour les différentes configurations. On obtient alors un flux maximal avec les propriétés du SiC et du Ge à $T = 770$ K avec une augmentation de 20% par rapport aux calculs avec les propriétés à température ambiante malgré un élargissement du pic d'émission donc une perte de cohérence.

Cas du Si/Si dopé :

L'expression (5.7) exprime les modes permis par la cavité. Ils dépendent directement de son épaisseur et de son indice de réfraction. Ces deux paramètres varient avec la température. On a montré précédemment que l'influence de la température sur les dimensions de la cavité avait des effets négligeables sur les propriétés radiatives. En revanche, la qualité des réflecteurs, constitués de couches de métal ou de silicium hautement dopé, dépend directement de la permittivité diélectrique de ces matériaux qui varie bien évidemment avec la température. Dans la suite, on quantifiera l'influence d'une élévation de la température sur la permittivité diélectrique du matériau absorbant et par conséquent sur les propriétés optiques de l'ES. À la différence des

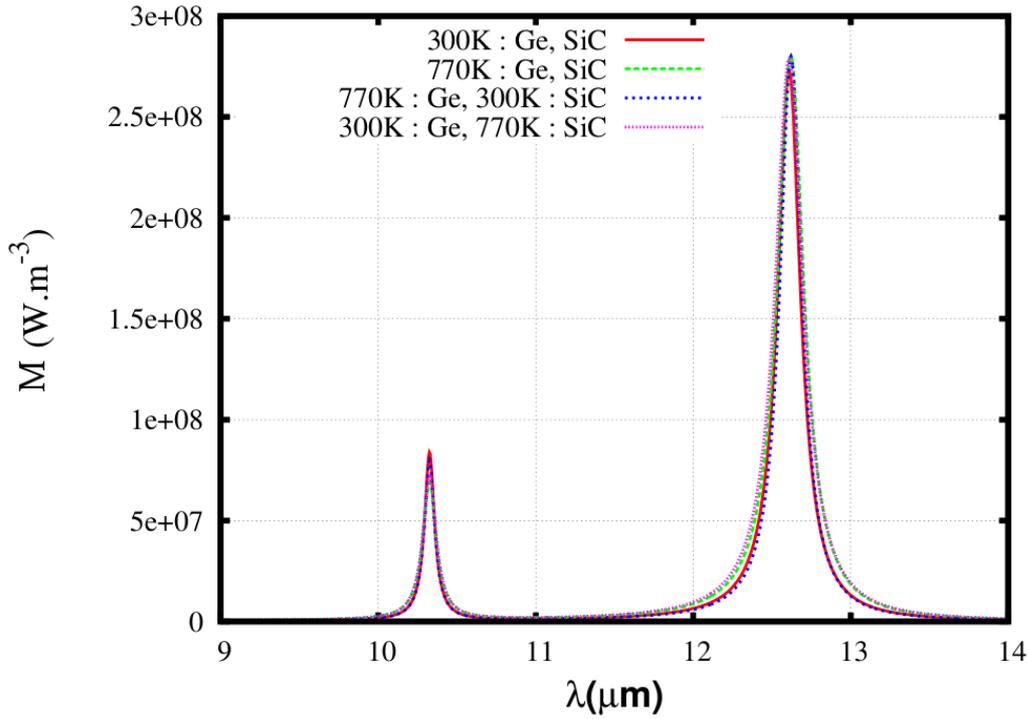


FIGURE 5.22: Émittance hémisphérique de l'ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) à 770 K calculée avec les propriétés optiques des matériaux à 300 K et à 770 K.

	300 K : Ge, SiC	770 K : Ge, SiC	300 K : Ge, 770 K : SiC	770 K : Ge, 300 K : SiC
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,61	12,61	12,62	12,62
$LMH(\mu\text{m})$	$1,8 \times 10^{-1}$	$2,2 \times 10^{-1}$	$2,1 \times 10^{-1}$	$1,7 \times 10^{-1}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	$2,73 \times 10^8$	$2,79 \times 10^8$	$2,81 \times 10^8$	$2,8 \times 10^8$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	85,4	104	101	83,1
		$\frac{dx}{x}$	$\frac{dx}{x}$	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	—	0	$7,9 \times 10^{-4}$	$7,9 \times 10^{-4}$
$LMH(\mu\text{m})$	—	$2,22 \times 10^{-1}$	$1,67 \times 10^{-1}$	$-5,56 \times 10^{-2}$
$M_{max}(\text{W.m}^{-3})$	—	$2,2 \times 10^{-2}$	$2,9 \times 10^{-2}$	$2,72 \times 10^{-2}$
$\Phi(\text{W.m}^{-2})$	—	$2,22 \times 10^{-1}$	$1,81 \times 10^{-1}$	$-2,64 \times 10^{-2}$

TABLE 5.11: Caractéristiques des pics d'émittance hémisphérique de la figure 5.22 et leurs variations relatives par rapport au pic à température ambiante.

études de sensibilité sur les autres paramètres, on ne considère pas ici l'ES $n^{\circ}1$, du Tableau 5.3. En effet, les propriétés électroniques disponibles dans la littérature pour le silicium dopé ne dépassent généralement pas une concentration de dopage de 10^{20} cm^{-3} ce qui nous oblige à considérer des ES avec du silicium dopé à des concentrations inférieures. On considère alors un ES quatre-couches au silicium et silicium dopé p avec $d_1 = 375 \text{ nm}$, $d_2 = 90 \text{ nm}$, $d_3 = 180 \text{ nm}$, $d_4 = 70 \text{ nm}$ et $N = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. La mobilité des électrons/trous est le seul paramètre du modèle présenté à l'annexe 7 affecté par le changement de température. Pour la dépendance de la mobilité à la température, on adopte le modèle de Arora et al. [1982] qui donne les valeurs rapportées dans les tableau 5.12. On remarque une diminution relative de la mobilité de près de

50% lorsqu'on passe de 300 K à 1000 K. On calcule l'émittance hémisphérique de cet ES à 1000 K avec les propriétés optiques du silicium dopé à température ambiante, à 500 K et à 1000 K (Figure 5.23). Aucune variation notable de cette grandeur ne peut être relevée graphiquement. L'augmentation de la température, dans les proportions présentées qui correspondent largement à des températures fonctionnelles, bien qu'elle affecte les propriétés électroniques et optiques du matériau absorbant, n'affecte aucunement les propriétés radiatives de l'ES. Finalement,

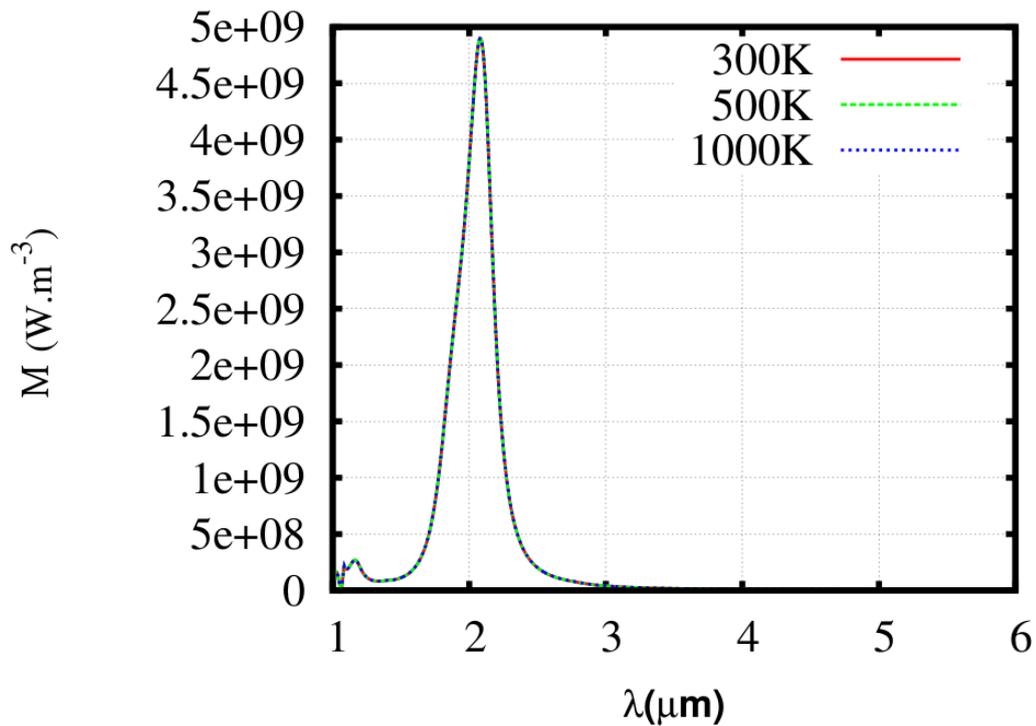


FIGURE 5.23: Émittance hémisphérique de l'ES quatre-couches précédemment décrit à 1000 K calculée avec les propriétés optiques du silicium dopé à 300 K, 500 K et 1000 K.

T (K)	300	500	1000
μ ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	55,38	41,84	28,84
ρ ($\Omega.\text{cm}^{-1}$)	$1,13 \times 10^{-3}$	$1,49 \times 10^{-3}$	$2,17 \times 10^{-3}$

TABLE 5.12: Mobilité et résistivité des trous du silicium dopé à $N_1 = 10^{20}$ (cm^{-3}) pour différentes températures

les propriétés optiques du silicium intrinsèque dépendent également de la température. On a montré au paragraphe 5.3.3.2 que des variations de $\pm 10\%$ de la permittivité diélectrique du silicium n'affectait pas les propriétés radiatives de l'ES. Par ailleurs, les données de la littérature (Annexe 7) montrent, pour une élévation de température entre 300 K et 1000 K, une variation des propriétés optiques du silicium de cet ordre ($\pm 10\%$). On peut donc affirmer qu'elle n'aura pas d'influence notable sur les propriétés radiatives de l'ES.

5.4 Conclusion

Dans ce chapitre, des émetteurs sélectifs relativement simples (des structures multi-couches 1D composées de deux à quatre couches) obtenus par la méthode d'optimisation par essais de particules (paragraphe 4.3.2.2) ont été présentés. La simplicité de leur structure faciliterait leur fabrication pour d'éventuelles applications. Par ailleurs, ces émetteurs sélectifs couvrent une large gamme de longueurs d'onde allant du proche (aux alentours de $2 \mu\text{m}$) au moyen infrarouge (aux alentours de $10 \mu\text{m}$ et au delà) ce qui permet d'envisager différents usages : conversion TPV, détection infrarouge, etc. Les structures à quatre couches, avec leur grande flexibilité, en ce qui concerne la position du pic d'émission et sa largeur facilement contrôlables, sont des candidats très intéressants, adaptables à différentes applications TPV, selon que l'on privilégie la puissance ou le rendement, étant donné qu'un compromis entre ces deux objectifs est toujours à définir. On a également montré à travers une étude de sensibilité au paragraphe 5.3.3 que les propriétés radiatives qui nous intéressent dans ces structures, sont robustes par rapport à de faibles variations (de l'ordre de 10%) des dimensions et des propriétés optiques des films et des matériaux utilisés, quelle qu'en soit l'origine. On a également montré que les émetteurs sélectifs proposés conservent leurs propriétés radiatives intéressantes quand la température augmente jusqu'à 1000 K.

En revanche, quels que soient les gains d'efficacité atteignables, le travail en champ lointain rencontre la limite infranchissable de la puissance du corps noir puisqu'en « sélectionnant » (avec un ES) une partie du rayonnement émis par celui-ci, on réduit mécaniquement la puissance récupérable. Cette baisse de puissance est certes compensée par un facteur de forme élevé (de l'ordre de l'unité) en thermo-photovoltaïque mais on peut toujours envisager des puissances dépassant de plusieurs ordres de grandeur celle émise par un corps noir. Ceci est possible en considérant les transferts radiatifs en champ proche. Ce sera l'objet du prochain chapitre.

Bibliographie

- M. T. Aljarrah, R. Wang, E. A. Evans, C. B. Clemons, and G. W. Young. Experimental characterization and modeling of a nanofiber-based selective emitter for thermophotovoltaic energy conversion : The effect of optical properties. *J. Appl. Phys.*, 109(3) :034306, 2011. [105](#)
- Ch. Arnold, F. Marquier, M. Garin, F. Pardo, S. Collin, N. Bardou, J-L. Pelouard, and J-J. Greffet. Coherent thermal infrared emission by two-dimensional silicon carbide gratings. *Phys. Rev. B*, 86 :035316, 2012. [101](#)
- N. D. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 29(2) : 292 – 295, 1982. [126](#)
- S. Bauer. Optical properties of a metal film and its application as an infrared absorber and as a beam splitter. *Am. J. Phys.*, 60(3) :257–261, 1992. [104](#)
- Ph. Ben-Abdallah and B. Ni. Single-defect bragg stacks for high-power narrow-band thermal emission. *J. Appl. Phys.*, 97(10) :104910, 2005. [102](#), [103](#)
- R. Biswas, E. Ozbay, B. Temelkuran, M. Bayindir, M. M. Sigalas, and K.-M. Ho. Exceptionally directional sources with photonic-bandgap crystals. *J. Opt. Soc. Am. B*, 18(11) :1684–1689, 2001. [102](#), [106](#)
- B. Bitnar, W. Durisch, J.-C. Mayor, H. Sigg, and H.R. Tschudi. Characterisation of rare earth selective emitters for thermophotovoltaic applications. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 73(3) : 221 – 234, 2002. [105](#)
- V. P. Bykov. Spontaneous emission from a medium with a band spectrum. *Sov. J. Quant. Electron.*, 4 :861, 1975. [102](#)
- I. Celanovic, F. O’Sullivan, M. Ilak, J. Kassakian, and D. Perreault. Design and optimization of one-dimensional photonic crystals for thermophotovoltaic applications. *Opt. Lett.*, 29(8) : 863–865, 2004. [102](#)
- I. Celanovic, D. Perreault, and J. Kassakian. Resonant-cavity enhanced thermal emission. *Phys. Rev. B*, 72(7) :075127, 2005. [105](#)

- D. L. Chubb and R. A. Lowe. Thin-film selective emitter. *J. Appl. Phys.*, 74(9) :5687–5698, 1993. [105](#)
- J. Drevillon. *Design ab-initio de matériaux micro et nanostructurés pour l'émission thermique cohérente en champ proche et en champ lointain*. PhD thesis, Ecole Polytechnique de l'Université de Nantes, 2007. [102](#)
- J. Drevillon and Ph. Ben-Abdallah. Ab initio design of coherent thermal sources. *J. Appl. Phys.*, 102(11) :114305, 2007. [103](#), [104](#)
- J. Drevillon, K. Joulain, Ph. Ben-Abdallah, and E. Nefzaoui. Far field coherent thermal emission from a bilayer structure. *J. Appl. Phys.*, 109(3) :034315, 2011. [107](#)
- H-k. Fu, Y-W. Jiang, M-W. Tsai, S-C. Lee, and Y-F. Chen. A thermal emitter with selective wavelength : Based on the coupling between photonic crystals and surface plasmon polaritons. *J. Appl. Phys.*, 105(3) :033505, 2009. [106](#)
- M. K. Ghanashyam, M. Rajendran, D. R. Pyke, and A. K. Bhattacharya. Spectral emissivity of ytterbium oxide-based materials for application as selective emitters in thermophotovoltaic devices. *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, 59(4) :337 – 348, 1999. [105](#)
- J-J. Greffet, R. Carminati, K. Joulain, J-Ph. Mulet, S. Mainguy, and Y. Chen. Coherent emission of light by thermal sources. *Nature*, 416(6876) :61–64, 2002. [101](#)
- L. N. Hadley and D. M. Dennison. Reflection and transmission interference filters. *J. Opt. Soc. Am.*, 37(6) :451–453, 1947. [103](#), [104](#), [105](#)
- P. J. Hesketh, J. N. Zemel, and B. Gebhart. Organ pipe radiant modes of periodic micromachined silicon surfaces. *Nature*, 324 :549–551, 1986. [101](#)
- P. J. Hesketh, J. N. Zemel, and B. Gebhart. Polarized spectral emittance from periodic micromachined surfaces. ii. doped silicon : Angular variation. *Phys. Rev. B*, 37 :10803–10813, 1988. [101](#)
- Y. Kaneko, M. Suzuki, K. Nakajima, K. Kimura, K. Akiyama, K. Harutsugu, H. Wakabayashi, and T. Makino. Antireflection coatings with FeSi₂ layer : Application to spectrally selective infrared emitter. *Phys. Procedia*, 11(0) :71 – 74, 2011. [104](#)
- O. G. Kollyukh, V. P. Kyslyi, A. I. Liptuga, V. Morozhenko, V. I. Pipa, and E. F. Venger. Coherent thermal radiation of Fabry-Perot resonator structures. *Semicond. Phys. Quant. Electron. Optoelectron.*, 10(4) :94 – 102, 2007. [105](#)
- M. Kreiter, J. Oster, R. Sambles, S. Herminghaus, S. Mittler-Neher, and W. Knoll. Thermally induced emission of light from a metallic diffraction grating, mediated by surface plasmons. *Opt. Commun.*, 168(1–4) :117 – 122, 1999. [101](#)

- M. Laroche, C. Arnold, F. Marquier, R. Carminati, J.-J. Greffet, S. Collin, N. Bardou, and J.-L. Pelouard. Highly directional radiation generated by a tungsten thermal source. *Opt. Lett.*, 30(19) :2623–2625, 2005a. [101](#)
- M. Laroche, F. Marquier, R. Carminati, and J.-J. Greffet. Tailoring silicon radiative properties. *Opt. Commun.*, 250(4–6) :316 – 320, 2005b. [104](#)
- J. Le Gall, M. Olivier, and J.-J. Greffet. Experimental and theoretical study of reflection and coherent thermal emission by a sic grating supporting a surface-phonon polariton. *Phys. Rev. B*, 55 :10105–10114, 1997. [101](#)
- B. J. Lee, C. J. Fu, and Z. M. Zhang. Coherent thermal emission from one-dimensional photonic crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 87 :071904 – 071904–3, 2005. [103](#)
- S.-Y. Lin, J. G. Fleming, and I. El-Kady. Three-dimensional photonic-crystal emission through thermal excitation. *Opt. Lett.*, 28(20) :1909–1911, 2003. [102](#)
- M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. McGraw-Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, 1993. [106](#)
- J. J. Monzón and L. L. Sánchez-Soto. Optical performance of absorber structures for thermal detectors. *Appl. Opt.*, 33(22) :5137–5141, 1994. [104](#)
- A. Narayanaswamy, J. Cybulski, and G. Chen. 1d metallo-dielectric photonic crystals as selective emitters for thermophotovoltaic applications. *AIP Conference Proceedings*, 738(1) : 215–220, 2004. [102](#)
- N-H. Nghia, Y-B. Chen, and Y-L. Lo. Development of a polarization-insensitive thermophotovoltaic emitter with a binary grating. *Opt. Express*, 20(6) :5882–5890, 2012. [101](#)
- Francis O’Sullivan, Ivan Celanovic, Natalija Jovanovic, John Kassakian, Shoji Akiyama, and Kazumi Wada. Optical characteristics of one-dimensional Si/SiO₂ photonic crystals for thermophotovoltaic applications. *J. Appl. Phys.*, 97(3) :033529, 2005. [102](#)
- E. Özbay and B. Temelkuran. Reflection properties and defect formation in photonic crystals. *Appl. Phys. Lett.*, 69(6) :743–745, 1996. [102](#)
- E. D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, Boston, 1985. [108](#), [111](#), [112](#), [120](#)
- J. W. S. Rayleigh. On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by prof. stokes. *Phil. Mag.*, 26 :256–265, 1888. [102](#)
- V. Rinnerbauer, S. Ndao, Y. X. Yeng, W. R. Chan, J. J. Senkevich, J. D. Joannopoulos, M. Soljagic, and I. Celanovic. Recent developments in high-temperature photonic crystals for energy conversion. *Energy Environ. Sci.*, pages –, 2012. [102](#)

- A. G. Roland. Thin, broadband salisbury screen absorber, 2003. [104](#)
- W. W. Salisbury. Absorbent body for electromagnetic waves, 1952. [103](#)
- G. W. Starvaggi, M. Hoffman, C. B. Clemons, and G. W. Young. Design of selective emitting media within a cylindrical tube for conversion of wasted heat energy to electrical energy. *J. Appl. Phys.*, 109(1) :013112, 2011. [105](#)
- L.P. Wang, B.J. Lee, X.J. Wang, and Z.M. Zhang. Spatial and temporal coherence of thermal radiation in asymmetric fabry-perot resonance cavities. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 52(13-14) : 3024 – 3031, 2009. [105](#), [114](#)
- E. Yablonovitch. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 58 :2059–2062, 1987. [102](#)
- Z. M. Zhang. *Nano/microscale Heat Transfer*. McGraw-Hill nanoscience and technology series. McGraw-Hill, 2007. [107](#)

Chapitre 6

Vers des puissances ultimes de systèmes TPV : transfert en champ proche

Sommaire

6.1	Introduction	133
6.2	Formalismes	135
6.2.1	Formulation exacte : flux total	135
6.2.2	Formulation approchée	136
6.2.2.1	Linéarisation et coefficients d'échange	136
6.2.2.2	Approximation asymptotique en champ proche extrême	138
6.3	Optimisation	139
6.3.1	État de l'art	139
6.3.2	Résultats	141
6.3.2.1	Modèle de Drude	142
6.3.2.2	Modèle de Lorentz	147
6.4	Conclusion	152

6.1 Introduction

Le précédent chapitre a traité de la conception et de l'optimisation d'émetteurs sélectifs en champ lointain. On a alors proposé des émetteurs permettant d'obtenir des efficacités dépassant la limite de Shockley-Queisser avec des puissances comparables voire supérieures à celles des systèmes actuels sous rayonnement solaire non concentré. La limite de ce genre de dispositifs réside toutefois dans le fait qu'un émetteur sélectif, en exploitant une partie limitée du spectre, émettra toujours moins qu'un corps noir à la même température ce qui a pour effet de limiter les puissances envisageables. Or, il a été théoriquement montré dès la fin des années 1960 ([Cravalho et al. \[1967\]](#); [Polder and Van Hove \[1971\]](#)) que le flux échangé par deux milieux séparés par de très faibles distances (typiquement des distances inférieures à la longueur d'onde caractéristique

du rayonnement thermique) pouvait dépasser la limite du corps noir, essentiellement grâce à la contribution des ondes de surface à cet échange. Depuis, ce phénomène a reçu une attention croissante, jusqu'à ses récentes vérifications expérimentales (Kittel [2005]; Narayanaswamy et al. [2008]; Rousseau et al. [2009b]) pour des séparations nanométriques, principalement pour des géométries dissymétriques, pointe-plan ou sphère-plan. Par ailleurs, plusieurs groupes se sont intéressés à la géométrie plan-plan potentiellement utile dans une multitude d'applications, qu'il s'agisse de refroidissement de composants électroniques à très forte densité de flux (Guha et al. [2012]) ou de conversion d'énergie (Basu et al. [2009]). Ces travaux ont majoritairement concerné, d'un point de vue théorique, des diélectriques, très souvent le carbure de silicium (Francoeur et al. [2010]; Mulet et al. [2002]; Rousseau et al. [2012]) dont les phonon-polaritons de surface contribuent fortement à l'augmentation du flux en champ proche (CP), et des métaux ou assimilés, du tungstène (Francoeur et al. [2011]; Laroche et al. [2006]) et du silicium très fortement dopé (Basu et al. [2010]; Rousseau et al. [2009a]) présentant des plasmon-polaritons de surface.

Afin de concevoir des émetteurs sélectifs pour applications thermo-photovoltaïques, objectif premier de ce travail, l'idée d'exploiter le rayonnement en CP n'est donc pas dénuée de toute pertinence étant donné la nature partiellement cohérente de ce rayonnement et les très fortes densités de flux en jeu. On s'est par conséquent initialement proposé d'appliquer les algorithmes d'optimisation stochastiques pour la conception et l'optimisation d'émetteurs sélectifs CP. Bien que les algorithmes stochastiques permettent des économies de coût numérique, ils nécessitent très souvent, du fait de leur nature itérative, un grand nombre d'évaluations de la quantité à optimiser. Afin de minimiser le coût numérique de ces méthodes, il est possible de minimiser en amont le temps de calcul de la quantité à optimiser, en l'occurrence le flux échangé en CP entre deux corps. Une expression asymptotique approchée du flux en CP a été récemment proposée par Rousseau et al. [2009a] et semble particulièrement intéressante pour l'objectif recherché. Il est toutefois nécessaire de confirmer ses performances (temps de calcul, précision), du moins avec les modèles usuels de fonctions diélectriques (Drude et Lorentz), avant de l'exploiter dans un travail d'optimisation globale d'émetteurs sélectifs et de systèmes TPV.

Dans ce chapitre, on se propose de déterminer les matériaux, dont les fonctions diélectriques sont modélisées par un modèle de Drude ou un modèle de Lorentz, susceptibles de maximiser l'échange entre deux milieux plans semi-infinis séparés d'une distance nanométrique. On procède pour cela à une étude paramétrique de ces modèles en calculant le flux échangé avec une formulation exacte et une formulation asymptotique dont on comparera la précision et les performances. On considérera ensuite, deux matériaux largement utilisés pour étudier le transfert radiatif en champ proche, en l'occurrence le silicium dopé et le carbure de silicium, afin de les situer par rapport aux matériaux optimaux. Finalement, on vérifiera pour les deux modèles, la condition d'identité des matériaux des deux milieux pour maximiser l'échange et on discutera de sa criticité.

6.2 Formalismes

Pour des fins d'optimisation, on rapporte différentes approches proposées dans la littérature pour calculer le transfert radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis séparés d'une distance nanométrique. Certaines de ces approches aboutissent à des formulations qui, sans perte de généralité, se prêteraient plus facilement aux calculs itératifs d'optimisation, en permettant, comme on le verra par la suite, un gain considérable dans la consommation de ressources.

6.2.1 Formulation exacte : flux total

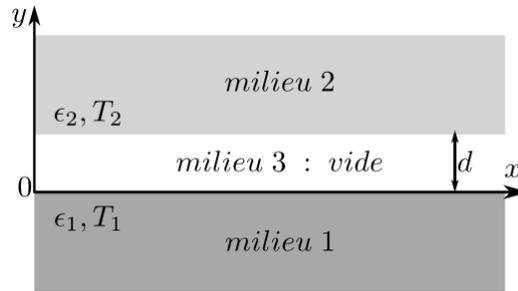


FIGURE 6.1: Deux milieux plans semi-infinis séparés d'une distance d .

On a présenté au chapitre 2 l'expression du flux radiatif en champ proche échangé par deux milieux plans semi-infinis séparés d'une distance d . Le calcul direct consiste à écrire, en utilisant le théorème de fluctuation dissipation, le champ électromagnétique dans un milieu dû aux courants fluctuants de l'autre milieu. La connaissance des courants et des champs dans chaque milieu permet de calculer la puissance dissipée, la densité d'énergie, et le vecteur de Poynting. Le flux radiatif échangé est par la suite obtenu à partir de la différence des vecteurs de Poynting des ondes EM émises par chaque milieu. On rappelle ici l'expression du flux initialement obtenue par [Polder and Van Hove \[1971\]](#) et précédemment présentée au paragraphe 2.5.7.6 ([Vолоkitin and Persson \[2007\]](#)) :

$$\Phi = \Phi^{prop} + \Phi^{evan} \quad (6.1)$$

où

$$\Phi^{prop} = \sum_{i=s,p} \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} [\Theta(\omega, T_1) - \Theta(\omega, T_2)] \int_0^{\frac{\omega}{c}} \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \frac{(1 - |r_{31}^i|^2)(1 - |r_{32}^i|^2)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2i\gamma_3 d}|^2} \quad (6.2)$$

et

$$\Phi^{evan} = \sum_{i=s,p} 4 \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} [\Theta(\omega, T_1) - \Theta(\omega, T_2)] \int_{\frac{\omega}{c}}^\infty \frac{d^2q}{(2\pi)^2} e^{2i\gamma_3 d} \frac{\text{Im}(r_{31}^i) \text{Im}(r_{32}^i)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2i\gamma_3 d}|^2} \quad (6.3)$$

sont les contributions des ondes propagatives et des ondes évanescentes respectivement.

$$\Theta(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_b T}} - 1} \quad (6.4)$$

est l'énergie moyenne d'un oscillateur de Planck à la température T . r_{jk}^i sont les coefficients de réflexion de Fresnel en passant du milieu j au milieu k pour la polarisation i . γ_3 est la composante normale du vecteur d'onde dans le milieu 3 et est définie par :

$$\gamma_3 = \sqrt{\left(\frac{\omega}{c}\right)^2 - q^2} \quad (6.5)$$

où \mathbf{q} est la composante parallèle du vecteur d'onde. Notons que pour $q > \frac{\omega}{c}$, γ_3 est imaginaire pur, les ondes sont évanescentes et leur amplitude décroît exponentiellement en s'éloignant de la surface. Il n'est donc pas rare de trouver chez certains auteurs, l'expression $e^{2i\gamma_3 d}$ remplacée par $e^{-2|\gamma_3|d}$ ou encore $e^{-2|\gamma_3''|d}$ (avec $\gamma_3'' = \text{Im}(\gamma_3)$) qui sont bien évidemment équivalentes. Le calcul du flux radiatif en champ proche passe ici par une double intégration, sur la pulsation ω et sur la composante parallèle du vecteur d'onde \mathbf{q} . Ce calcul peut se révéler parfois assez gourmand en ressources, notamment pour la contribution des ondes évanescentes, où le vecteur d'onde de coupure de l'intégrale sur q n'est pas connu *a priori*¹.

6.2.2 Formulation approchée

À partir de l'expression générale du flux radiatif en champ proche présentée au paragraphe précédent, moyennant quelques hypothèses, [Rousseau et al. \[2012\]](#) ont donné une expression asymptotique du transfert radiatif en champ proche, notamment de la contribution évanescente qui est plus problématique en terme de temps de calcul, ce qui permet de se passer de la double intégration pour son évaluation.

6.2.2.1 Linéarisation et coefficients d'échange

Pour de faibles écarts de température δT , [Rousseau](#) propose de linéariser l'expression du flux et de définir un coefficient d'échange radiatif total h_{tot} par :

$$\Phi(l, T) = h_{tot}\delta T \quad (6.6)$$

$$= (h_{prop} + h_{evan})\delta T \quad (6.7)$$

Ce coefficient d'échange peut être décomposé en deux coefficients h_{prop} et h_{evan} correspondant à la contribution propagative et évanescente respectivement. Pour chaque « composante »

1. Certains auteurs ont proposé des approximations du vecteur d'onde de coupure q_c à adopter : $q_c = 1/d$ pour [Rousseau et al. \[2009a\]](#) et [Bihs et al. \[2010\]](#), $q_c = \sqrt{4/d^2 + (\omega/c)^2}$ pour [Ben-Abdallah and Joulain \[2010\]](#) et $q_c = 1/a$ pour [Wang et al. \[2009\]](#) où a figure le paramètre de maille du matériau considéré. On a adopté dans ce travail $q_c = \frac{50}{d}$.

monochromatique du flux, ces deux coefficients d'échange sont donnés par :

$$h_{prop}(\omega) = \frac{\Phi_{prop}(\omega)}{\delta T} \quad (6.8)$$

$$= \left[\int_0^{\frac{\omega}{c}} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \underbrace{\left(\frac{(1 - |r_{31}^i|^2)(1 - |r_{32}^i|^2)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2\gamma_3 d}|^2} \right)}_{\tau_{prop}^i(r_{jk}, d)} \right] \times \frac{\partial \Theta(\omega, T)}{\partial T} \quad (6.9)$$

et

$$h_{evan}(\omega) = \frac{\Phi_{evan}(\omega)}{\delta T} \quad (6.10)$$

$$= \left[\int_{\frac{\omega}{c}}^{\infty} \frac{d^2 q}{(2\pi)^2} \underbrace{\left(4 \times e^{2\gamma_3 d} \frac{\text{Im}(r_{31}^i) \text{Im}(r_{32}^i)}{|1 - r_{31}^i r_{32}^i e^{2\gamma_3 d}|^2} \right)}_{\tau_{evan}^i(r_{jk}, d)} \right] \times \frac{\partial \Theta(\omega, T)}{\partial T} \quad (6.11)$$

en supposant les propriétés optiques à ce stade indépendantes de la température, ce qui est vrai pour de faibles variations de T . La symétrie du problème permet de transformer l'intégrale surfacique sur \mathbf{q} en une intégrale linéique comme suit :

$$\int d^2 q = 2\pi \int q dq \quad (6.12)$$

Il vient alors :

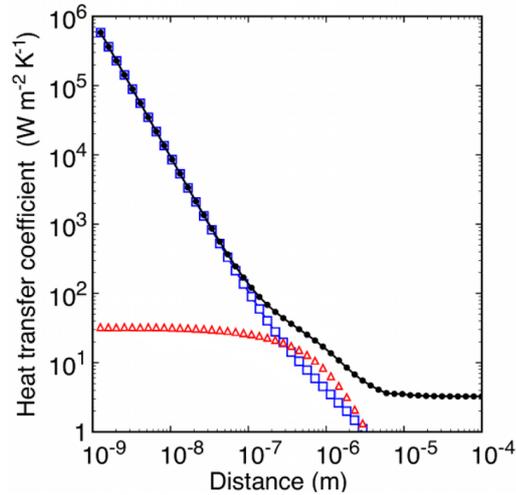


FIGURE 6.2: Contribution évanescence du coefficient d'échange pour les polarisations p (carrés) et s (triangles) en fonction de la séparation entre les deux milieux semi-infinis en SiC à 300 K ainsi que le coefficient d'échange total (points). (Source : Rousseau et al. [2012])

$$h_{prop}^i(\omega) = 2\pi h^0(\omega, T) \times \int_0^{\frac{\omega}{c}} \frac{q dq}{q_0^2} \tau_{prop}^i(r_{jk}^i, d) \quad (6.13)$$

et

$$h_{evan}^i(\omega) = 2\pi h^0(\omega, T) \times \int_{\frac{\omega}{c}}^{\infty} \frac{q dq}{q_0^2} \tau_{evan}^i(r_{jk}^i, d) \quad (6.14)$$

avec

$$h^0(\omega, T) = \frac{q_0^2}{4\pi^2} \frac{\partial \Theta}{\partial T} \quad (6.15)$$

$$= \frac{1}{T} \frac{\hbar \omega}{k_b T} \frac{\hbar \omega^3}{4\pi^2 c^3} \left(\frac{1}{2 \sinh(\frac{\hbar \omega}{2k_b T})} \right)^2 \quad (6.16)$$

la dérivée de la loi de Planck de la luminance monochromatique du corps noir à un coefficient multiplicatif près. $\tau_{prop}^i(r_{jk}^i, d)$ et $\tau_{evan}^i(r_{jk}^i, d)$ figurent une sorte de facteur de transmission modal pour la polarisation i pour les modes propagatifs et les modes évanescents respectivement. Ces facteurs dépendent des coefficients de Fresnel r_{jk}^i , de la séparation d et du vecteur d'onde q .

A ce stade, le flux radiatif s'écrit certes sous une forme compacte mais son évaluation se ramène toujours au calcul d'une intégrale double. On trace sur la figure 6.2, le coefficient d'échange radiatif total en champ proche entre deux milieux semi-infinis plans de SiC à $T = 300$ K en fonction de l'épaisseur de la cavité les séparant, ainsi que les coefficients des contributions évanescentes (tels que définis au paragraphe précédent) en polarisation p et s . On observe que pour des séparations nanométriques ($d \leq 10^{-7}$ en l'occurrence), la contribution évanescente en polarisation p domine les autres composantes et assure la totalité de l'échange. On s'intéressera au prochain paragraphe au coefficient d'échange correspondant, *i.e.* à h_{evan}^p .

6.2.2.2 Approximation asymptotique en champ proche extrême

On s'intéresse ici à la contribution évanescente en polarisation p . On suppose alors de fait :

– $d \ll \lambda_T$.

– $q > q_0 = \frac{\omega}{c}$ d'où $\gamma_3 = \sqrt{q_0^2 - q^2} = \nu \gamma$. On choisira conventionnellement $\gamma \geq 0$.

On considérera uniquement des diélectriques ou des matériaux dont la fonction diélectrique est modélisée par un modèle de Drude avec une pulsation plasma inférieure au petahertz pour lesquels la contribution évanescente en polarisation p est prépondérante. En effet, ceci n'est pas vrai pour les métaux¹ (Chapuis et al. [2008]). On suppose également qu'on est dans la limite électrostatique, *i.e.* que $q \gg q_0$. Ceci implique que le coefficient de Fresnel en polarisation p entre le milieu 3 et le milieu k usuellement défini par :

$$r_{3k}^p = \frac{\epsilon_k(\omega)\gamma_3 - \gamma_k}{\epsilon_k(\omega)\gamma_3 + \gamma_k} \quad (6.17)$$

1. La résonance plasma des métaux nobles par exemple se situe dans l'ultraviolet avec ω_p de l'ordre du petahertz.

devienne indépendant de γ et se ramène par conséquent à :

$$r_{3k}^p = \frac{\epsilon_k(\omega) - 1}{\epsilon_k(\omega) + 1} \quad (6.18)$$

On procède aux changements de variables suivants :

$$u = \frac{\hbar\omega}{k_b T} \quad (6.19)$$

$$\gamma = \sqrt{q^2 - q_0^2} \quad (6.20)$$

$$X = 2\gamma q_T u d \quad (6.21)$$

avec $q_T = \frac{1}{\lambda_T} = \frac{k_b T}{\hbar c}$ le vecteur d'onde caractéristique du rayonnement thermique. On peut alors montrer¹ que h_{evan}^p s'écrit sous la forme :

$$h_{evan}^p(u, T, d) = \frac{3}{2\pi^3} \frac{g_0}{d^2} h^0(u) \times \frac{\text{Im}(r_{31}) \text{Im}(r_{32})}{\text{Im}(r_{31} r_{32})} \text{Im}(\text{Li}_2(r_{31} r_{32})) \quad (6.22)$$

où Li_2 est la fonction dilogarithme (voir [Abramowitz and Stegun \[1965\]](#) pour la définition et l'annexe [.3.2](#) pour l'évaluation numérique), $h^0(u) = \frac{u^2}{(e^u - 1)^2}$ et $g_0 = \frac{\pi^2 k_b^2 T}{3h}$ est le quantum de conduction.

Le flux radiatif en champ proche peut alors être obtenu par :

$$\Phi(T, d) = \left(\int_0^\infty h_{evan}^p(u, T, d) du \right) \times \delta T \quad (6.23)$$

On se ramène alors, pour le calcul du flux, à un calcul d'intégrale simple ce qui faciliterait *a priori* l'optimisation numérique du transfert radiatif en champ proche entre deux plans. Étant donné le nombre d'hypothèses utilisées pour parvenir à ce résultat, il convient de contrôler *a posteriori* le résultat obtenu à l'issue de l'optimisation de cette expression par un calcul direct.

6.3 Optimisation

6.3.1 État de l'art

Différents groupes se sont déjà intéressés à la question de la maximisation du transfert radiatif en champ proche, notamment au cas particulier du système plan-plan. Celui de Zhuomin Zhang de Georgia Tech. a été particulièrement prolifique à ce sujet. [Basu et al. \[2008\]](#) ont commencé par mener une étude paramétrique théorique du transfert entre deux plans semi-infinis de silicium fortement dopé, étant donné que, comme on l'a vu au chapitre précédent pour les émetteurs sélectifs en champ lointain, les propriétés optiques de ce matériau peuvent être contrôlées avec le niveau de dopage. Sa constante diélectrique est modélisée par un modèle

1. Le détail du calcul a été rapporté à plusieurs reprises par [Rousseau et al. \[2009a, 2010, 2012\]](#).

de Drude où le niveau de dopage affecte la pulsation plasma ω_p et le coefficient d'amortissement Γ , deux paramètres qu'on considérera (cf. paragraphe 6.3.2.1) pour un matériau quelconque. Ils ont alors montré que le spectre du flux radiatif présente un pic autour de la fréquence plasma, que ce pic observe un décalage vers le bleu lorsqu'on augmente le dopage (Ceci est dû à la dépendance de ω_p au dopage). Ils montrent également que le flux échangé augmente avec le dopage et qu'il atteint un extremum qui dépend de la température considérée et de ω_p . Pour la température ambiante, ce maximum est observé pour une concentration aux alentours de 10^{19} cm^{-3} et 10^{20} cm^{-3} (Notons que [Rousseau et al. \[2009a\]](#) sont parvenus avec une autre approche à des conclusions similaires pour le silicium dopé). Finalement, ils considèrent des échanges entre deux milieux différemment dopés et penchent vers la conclusion intuitive que l'échange est maximal pour des milieux identiques puisque le couplage entre modes des deux milieux est alors plus efficace, puisque les mêmes modes sont présents dans l'un comme dans l'autre. [Basu and Zhang \[2009\]](#) ont par la suite dépassé le cas particulier du silicium dopé par une étude paramétrique sur un matériau totalement fictif afin d'obtenir une condition simple à satisfaire pour maximiser le flux échangé. En considérant deux milieux plans semi-infinis identiques, la permittivité diélectrique maximisant l'échange est de la forme $\epsilon = -1 + i\delta$ où $\text{Im}(\epsilon) = \delta \ll 1$. L'hypothèse d'un milieu non dispersif faite ici est certes forte, elle reste toutefois envisageable, avec un méta-matériau par exemple et sur une gamme spectrale limitée. Simultanément, [Wang et al. \[2009\]](#) ont considéré des hypothèses plus réalistes et ont généralisé les premiers résultats obtenus pour du silicium dopé à d'autres matériaux réels (SiC, MgO) ou des matériaux fictifs modélisés par des modèles usuels (Drude et Drude-Lorentz). Pour le premier, les paramètres considérés sont la permittivité diélectrique pour les hautes fréquences ϵ_∞ , la pulsation plasma et le coefficient d'amortissement. Pour le second, s'y rajoute la pulsation des phonons optiques transverses ω_0 . Les auteurs en dégagent les tendances générales suivantes :

- Le modèle de Drude permet de maximiser le flux de façon plus importante que le modèle de Drude-Lorentz. Pour cette raison, lorsque $\omega_0 = 0$ dans le modèle Lorentz, *i.e.* lorsque les deux modèles se confondent, ce dernier offre ses performances maximales. On s'intéressera donc par la suite au modèle de Drude.
- Pour le modèle de Drude :
 - Diminuer ϵ_∞ maximise le flux car on s'approche des conditions idéales présentées par [Basu and Zhang \[2009\]](#).
 - A température ambiante, un maximum est observé pour $\omega_p \simeq 10^{14} \text{ rad.s}^{-1}$ et $\Gamma/\omega_p \simeq 0,1$. La position de ce maximum dépend étroitement de la température et de ϵ_∞ de la même façon qu'il a été observé précédemment pour le silicium dopé. De plus, le maximum est réalisé par un compromis entre la largeur du pic du spectre du flux (contrôlé par Γ) et sa position (contrôlée par ω_p) .

Plus récemment, certains auteurs se sont intéressés au graphène dont la fréquence des plasmon-polaritons, à la différence des métaux nobles, se situe dans le térahertz, ce qui le rend particulièrement intéressant pour du transfert radiatif autour de la température ambiante ([Svetovoy](#)

et al. [2012]). De plus, ses propriétés optiques peuvent être contrôlées par le niveau de dopage ou par le potentiel chimique. Par ailleurs, le graphène est un matériau non-local, *i.e.* sa permittivité diélectrique et notamment la fréquence plasma, dépend du vecteur d'onde. Ceci ouvre un vaste champ d'application puisque la diversité de ses modes résonants permet d'envisager leur couplage avec les modes de matériaux différents. Ces auteurs ont alors montré qu'il était possible, avec des films de graphène déposés à la surface de diélectriques ne présentant pas de phonon-polaritons de surface, d'augmenter considérablement le transfert radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis de trois voire quatre ordres de grandeur. Cette augmentation décroît toutefois rapidement avec la température et reste spectaculaire uniquement pour des températures inférieures à l'ambiante. Messina et al. [2012] ont par ailleurs montré pour un système plan-plan de carbure de silicium (SiC), que la superposition d'un film de graphène à l'un des deux plans semi-infinis permet d'élargir le spectre utile de la densité locale d'états en faisant apparaître de nouveaux pics, dus au couplage des plasmon-polaritons du graphène avec les phonon-polaritons du SiC. A des distances nanométriques, les nouveaux modes couplés contribuent à une augmentation du transfert radiatif en champ proche. Notons ici le potentiel applicatif du graphène en tant qu'émetteur sélectif dans des systèmes TPV en champ proche. En effet, le caractère contrôlable des fréquences de résonance de ses plasmon-polaritons, que ce soit par le dopage ou par la variation du potentiel chimique à l'aide d'une différence de potentiel, permet de les ajuster au gap du convertisseur PV de la même façon qu'en champ lointain (voir chapitre 5). Messina and Ben-Abdallah [2012] ont montré pour un système TPV composé d'un émetteur en nitrure de bore (BN) (à $T_e = 450$ K) et d'une cellule PV en antimoine d'indium (InSb) (à $T_c = 300$ K), qu'un film de graphène sur la cellule, avec un potentiel chimique de 0.5 eV, permet de multiplier par deux l'efficacité maximale du système (pour atteindre $\eta \simeq 20\%$) et d'augmenter sa puissance électrique de près d'un ordre de grandeur. Des performances supérieures, correspondant à des températures de fonctionnement plus élevées (de 600 K à 1200 K), ont été récemment présentées par Ilic et al. [2012] qui ont considéré un système légèrement différent dans lequel le graphène joue le rôle d'émetteur sélectif. Des études antérieures s'étaient déjà intéressées aux systèmes TPV en champ proche à base d'émetteurs métalliques présentant des plasmon-polaritons de surface tel que le tungstène (Basu et al. [2009]; Francoeur et al. [2011]; Laroche et al. [2006]) mais le graphène semble accaparer l'attention récente de la communauté étant donné la panoplie de possibilités qu'il permet d'envisager, notamment grâce à la « flexibilité » de ses modes de surface.

6.3.2 Résultats

Les formalismes présentés à la section 6.2, notamment aux paragraphes 6.2.1 et 6.2.2 ont été utilisés pour calculer le flux radiatif entre deux plans semi-infinis. Les fonctions diélectriques de

ces plans sont modélisées par un modèle de Drude et un modèle de Lorentz locaux¹, usuellement utilisés pour une grande variété de matériaux. Les calculs sont effectués en faisant varier les paramètres de ces deux modèles dans des domaines couvrant leur domaines usuels pour des matériaux réels. Les calculs sont effectués pour deux plans de matériaux identiques et deux plans de matériaux différents autour d'une température de 300 K. L'objectif de ce travail est triple :

- Pour deux plans du même matériau : déterminer les fonctions diélectriques, fictives en l'occurrence, maximisant l'échange radiatif en champ proche afin de guider le choix, pour une application donnée, parmi les matériaux réels qui s'en approchent ou lors de la conception de méta-matériaux.
- Pour deux plans de matériaux distincts : vérifier l'hypothèse, largement utilisée, et éventuellement son domaine de validité, stipulant que l'échange est maximal entre matériaux identiques à cause du couplage des modes de surface supportés par les deux milieux. Le couplage serait plus efficace lorsque les modes présents dans les deux milieux sont identiques.
- Comparer, en terme de temps de calcul et de précision, différentes méthodes d'optimisation basées sur les formalismes présentés au début de ce chapitre.

6.3.2.1 Modèle de Drude

On rappelle l'expression de la permittivité diélectrique dans ce modèle :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega} \quad (6.24)$$

où ϵ_∞ figure la limite hautes fréquences de la permittivité diélectrique, ω_p la pulsation plasma et Γ le coefficient d'amortissement.

Matériaux identiques

Pour $\epsilon_\infty = 1$, on calcule le flux transmis entre deux plans semi-infinis identiques séparés d'une distance $d = 10$ nm dont les fonctions diélectriques sont modélisées par le modèle de Drude. On fait varier les deux paramètres restants du modèle, *i.e.* la pulsation plasma ω_p et le coefficient d'amortissement Γ dans les domaines $[10^{-13} \text{ rad.s}^{-1}, 10^{-15} \text{ rad.s}^{-1}]$ et $[10^{-2} \times \omega_p, 10 \times \omega_p]$ respectivement. Ce domaine couvre notamment les valeurs prises par ces paramètres pour du silicium fortement dopé. A titre d'exemple, on rappelle au tableau 6.1 des ordres de grandeur de ces paramètres pour le silicium fortement dopé avec une concentration autour de 10^{19} cm^{-3} . Ce matériau a déjà été considéré par certains auteurs (Basu et al. [2010]; Rousseau et al. [2009a]) et par nous même au chapitre précédent à des fin d'optimisation.

1. La séparation des deux plans considérée dans ce travail, en l'occurrence $d = 10$, est largement supérieure à la distance de manifestation des phénomènes liés à la non-localité de la fonction diélectrique (Chapuis et al. [2008]; Ezzahri et al.). C'est pour cela que seuls des modèles locaux de la permittivité diélectrique sont considérés dans cette étude.

Le premier milieu est considéré à 300 K et le second à 299 K.

n°	Type de dopage	$N \times 10^{-19}$ (cm ⁻³)	ϵ_∞	$\omega_p \times 10^{-14}$ (rad.s ⁻¹)	$\frac{\Gamma}{\omega_p}$
1	Si :B	27	11,8	16	$6,7 \times 10^{-1}$
2	Si :B	6,7	11,8	8,3	$1,7 \times 10^{-1}$
3	Si :P	10	11,8	9,7	$5,1 \times 10^{-1}$
4	Si :P	5,3	11,8	7,28	10^{-1}
5	Si :P	1,6	11,8	4	$1,3 \times 10^{-1}$
6	Si :P	0,52	11,8	2,3	6×10^{-2}

TABLE 6.1: Ordres de grandeur des paramètres du modèle de Drude pour la permittivité diélectrique du silicium fortement dopé p et n (où N figure la concentration de dopage) au bore (Si :B) et au phosphore (Si :P) respectivement. (Source : [Borghesi et al. \[1985\]](#))

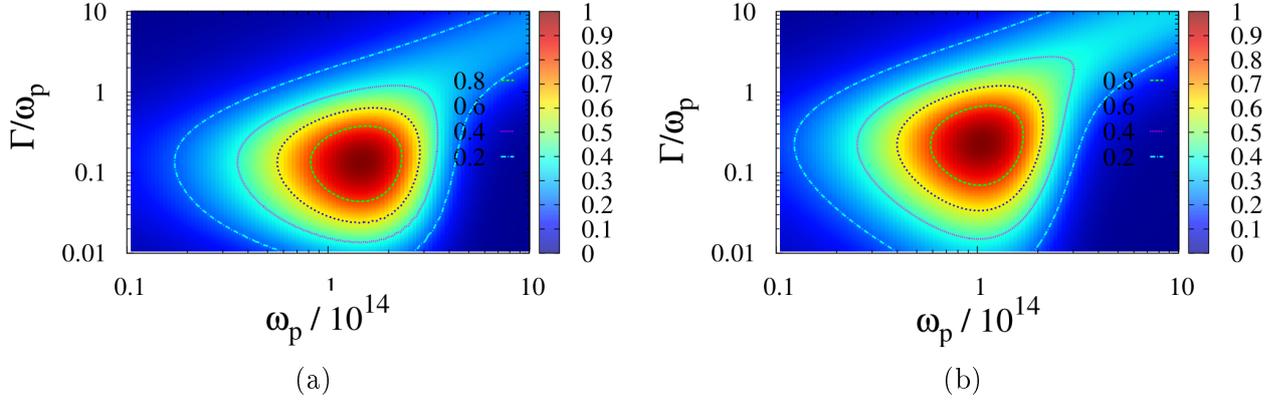


FIGURE 6.3: Flux radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis identiques, dont les fonctions diélectriques sont modélisées par le modèle de Drude. Le flux représenté ici est adimensionné par sa valeur maximale et obtenu par calcul direct (Figure 6.3a) et par calcul asymptotique (Figure 6.3b).

Effet de la pulsation plasma et de l'amortissement On présente sur la figure 6.3 le flux adimensionné (par sa valeur maximale) échangé par les deux milieux. Les résultats présentés sont obtenus par calcul direct (Figure 6.3a) de la double intégrale sur les fréquences et les nombres d'onde donnant le flux échangé (expressions 6.1, 6.2 et 6.3) et par l'évaluation de l'expression asymptotique (expressions 6.23 et 6.22) en champ proche extrême dans l'approximation électrostatique (Figure 6.3b). Seule la polarisation p est considérée ici étant donné sa contribution prépondérante.

La première remarque à faire, eu égard à notre objectif, est l'existence d'un maximum. Ces figures nous informent également, au delà de la position du maximum, de la sensibilité du transfert aux variations sur les différents paramètres. On observe alors qu'une variation relative entre 22% et 27% sur ω_p et de près de 50% sur Γ permettent de rester au dessus de $0,95 \times \Phi_{max}$. On retrouve ici des valeurs de variations relatives admissibles légèrement supérieures à celles présentées par [Basu et al. \[2010\]](#).

Méthode	ϵ_∞	$\omega_p \times 10^{-14}$ (rad.s ⁻¹)	$\frac{\gamma}{\omega_p}$	Φ_{max} (W.m ⁻²)	N_1	N_2	t (s)
D	1	1,51	0,17	229336	500	100	32921
A	1	1,05	0,24	229208	1000	100	23
D	5	2,51	$3,7 \times 10^{-2}$	78656	500	100	14864
A	5	0,79	11×10^{-2}	78676	1000	100	13
D	10	3,47	$1,51 \times 10^{-2}$	42123	400	100	13952
A	10	0,76	$6,91 \times 10^{-2}$	43128	1000	100	13
D	20	4,57	$2,29 \times 10^{-3}$	24269	400	100	16961
A	20	0,72	$3,71 \times 10^{-2}$	22621	1000	100	13

TABLE 6.2: Paramètres du modèle de Drude maximisant l'échange radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis identiques dont les permittivités diélectriques sont modélisées par ce modèle. Les valeurs sont obtenues par calcul direct (D) et par calcul approché (A). N_1 et N_2 figurent le nombre de pas du maillage fréquentiel et du maillage sur les paramètres de contrôle respectivement.

Effet de la limite hautes fréquences de la permittivité diélectrique On présente également sur la figure 6.4 des résultats similaires pour $\epsilon_\infty = 5$ (Figures 6.4a et 6.4b) et $\epsilon_\infty = 10$ (Figures 6.4c et 6.4d). On observe, comme rapporté par Basu et al. [2010] une baisse du flux maximal lorsque ϵ_∞ augmente. En effet, d'après les travaux d'optimisation préliminaires rapportés par Basu and Zhang [2009], une permittivité diélectrique dont la partie réelle est égale à -1 et la partie imaginaire la plus petite possible maximisent l'échange. Étant donné que la partie réelle de ϵ dans le modèle de Drude est égale à $\epsilon_\infty - \text{Re}(\frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega})$. Étant donné le domaine de variation de ω considéré, des valeurs de ϵ_∞ petites sont plus à même de réaliser la condition précédente.

Calcul direct et calcul approché Les valeurs maximales du flux Φ_{max} obtenues par le calcul direct et le calcul asymptotique sont quasiment identiques, avec une erreur relative de l'ordre de 10^{-4} pour le calcul approché (cf. Tableau 6.2). Dans le cas $\epsilon_\infty = 1$, ces maxima sont réalisés pour $\omega_p = 1,51 \times 10^{14}$ rad.s⁻¹ et $\frac{\Gamma}{\omega_p} = 1,7 \times 10^{-1}$ avec le calcul direct et pour $\omega_p = 1,05 \times 10^{14}$ rad.s⁻¹ et $\frac{\Gamma}{\omega_p} = 0,24 \times 10^{-1}$ avec le calcul approché. Contrairement au cas de la valeur maximale du flux, l'erreur est ici considérable, allant jusqu'à 27% et 82% pour ω_p et Γ respectivement. Un calcul exact du flux échangé avec les paramètres optimaux obtenus par calcul approché donne une valeur de flux inférieure de 30% à sa « vraie » valeur maximale. Contrairement à la détermination de la valeur maximale du flux échangé, l'approximation asymptotique n'est pas très précise lorsqu'il s'agit de déterminer la position de ce maximum. L'écart entre les paramètres optimaux donnés par les deux méthodes augmente lorsque ϵ_∞ diminue (voir Tableau 6.2). Notons toutefois l'économie en consommation de ressources réalisée par l'utilisation de la méthode approchée (Tableau 6.2) : la figure 6.3a (calcul direct) a été obtenue en 32921 sec-

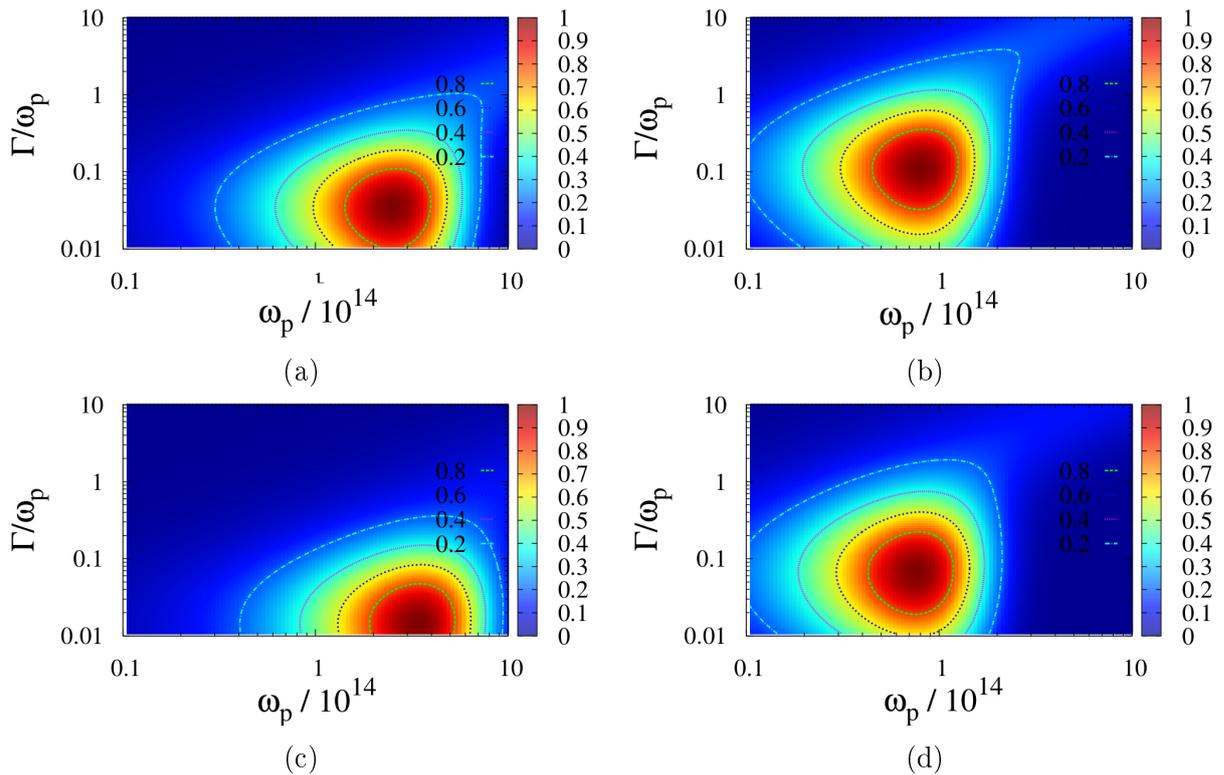


FIGURE 6.4: Transfert maximal en champ proche entre deux plans semi-infinis modélisés par un modèle de Drude avec variation de la limite hautes fréquences de la permittivité diélectrique ($\epsilon_\infty = 5$: (a-b), $\epsilon_\infty = 10$: (c-d)). Les résultats sont obtenus par calcul exact (colonne de gauche) et par calcul approché (colonne de droite).

ondes¹, contre 23 secondes pour la figure 6.3b (calcul asymptotique), soit un rapport de près de 1500 entre les deux. Ce rapport varie selon le degré de précision recherché, notamment en fonction du pas d'intégration sur la composante parallèle du vecteur d'onde. Plus ce pas est fin, plus ce rapport est défavorable pour le calcul direct.

Cas du silicium dopé à 300 K On présente également sur la figure 6.5 le flux échangé entre deux plans semi-infinis, modélisés par un modèle de Drude avec $\epsilon_\infty = \epsilon_{\infty, Si} = 11.8$. Le but ici est de savoir si le silicium dopé, largement utilisé pour augmenter le transfert en champ proche grâce à la flexibilité de sa permittivité diélectrique, permet d'atteindre les performances maximales qu'on peut obtenir avec un modèle de Drude². On positionne sur la même figure les points correspondant à du silicium dopé tirés du tableau 6.1. On retrouve ici le résultat rapporté par Basu et al. [2010] et Rousseau et al. [2009a] selon lequel l'échange est maximal pour une concentration de dopage entre 10^{19} cm^{-3} et 10^{20} cm^{-3} . La carte de la figure 6.5 est

1. Les calculs ont été réalisés sur un processeur Intel(R) Xeon(R) E5620 @ 2.40GHz, avec 12288 Kb de mémoire cache et 4 Go de RAM. Lorsque le calcul est effectué sur plusieurs processeurs identiques, ce qui a toujours été le cas pour les calculs directs, le temps donné ici correspond à la somme des temps de calcul effectués par tous les processeurs.

2. En effet, ϵ_∞ est le seul paramètre non-contrôlable dans le modèle de la permittivité diélectrique du silicium dopé.

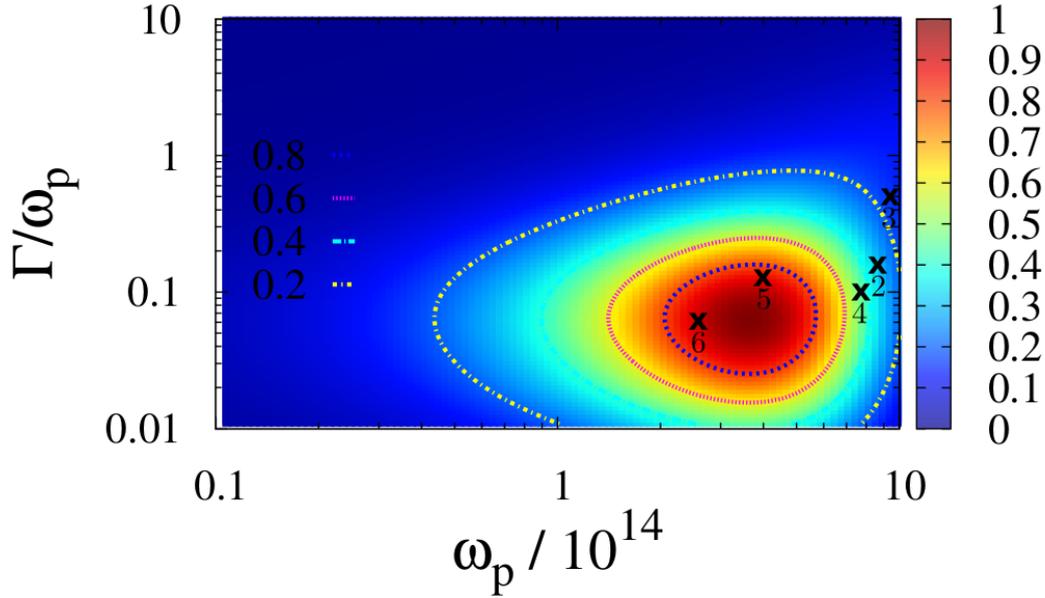


FIGURE 6.5: Flux adimensionné échangé en champ proche entre deux milieux plans semi-infinis modélisés par un modèle de Drude avec $\epsilon_\infty = \epsilon_{\infty, Si} = 11.8$. Les points \times correspondent à du silicium dopé p et n à différentes concentrations de dopage (voir Tableau 6.1 pour les valeurs correspondantes des paramètres.).

obtenue par calcul direct du flux total alors que celle présentée par Rousseau et al. [2009a] est issue d'un calcul asymptotique. Des écarts quant à la position de l'optimum sur les deux cartes sont alors possibles. On peut également noter à travers la figure 6.5 que le silicium dopé aux alentours de 10^{19} cm^{-3} , est « bien adapté » à cet objectif de maximisation puisqu'il permet d'atteindre les densités de flux maximales (environ $0,9 \times \Phi_{max}$) qu'on pourrait obtenir avec un modèle de Drude pour $\epsilon_\infty = 11,8$.

Matériaux distincts

Au paragraphe précédent, le flux échangé a toujours été calculé et optimisé entre deux milieux du même matériau. Dans ce paragraphe, on cherche à vérifier la validité de l'hypothèse stipulant que l'échange est maximal entre milieux identiques. En effet, des milieux identiques à des températures voisines supportent des modes identiques avec des densités proches, ce qui augmente la probabilité du couplage de ces derniers et par conséquent, l'efficacité de l'échange. Cette vérification présente un intérêt pratique évident puisque les matériaux en jeu dans des réalisations réelles présenteront toujours quelques écarts. On considère des matériaux autour de 300 K. Leurs fonctions diélectriques sont modélisés par un modèle de Drude. On prend $\epsilon_\infty = 1$, sachant que le raisonnement et les conclusions restent valables lorsque ϵ_∞ varie. On fixe les paramètres du modèle du premier matériau aux valeurs optimales rapportées au tableau 6.2, en l'occurrence, $\omega_{p,1} = 1,51 \times 10^{14} \text{ rad.s}^{-1}$ et $\Gamma_1/\omega_{p,1} = 0,17$. Les paramètres de contrôle ici sont ceux du modèle de Drude du deuxième matériau, *i.e.* $\omega_{p,2}$ et Γ_2 . On représente sur la figure 6.6 le flux adimensionné échangé entre les deux milieux plans semi-infinis en fonction du rapport

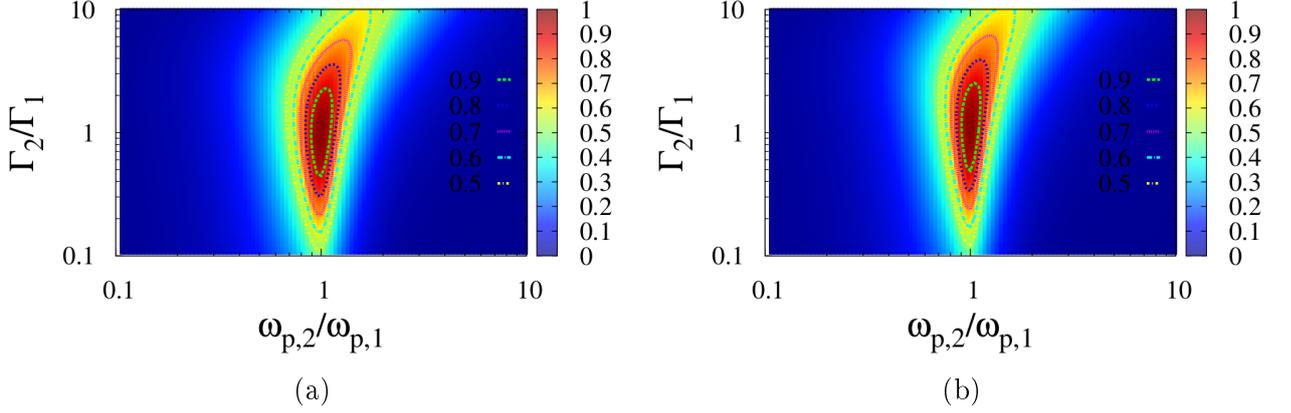


FIGURE 6.6: Flux radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis de matériaux différents dont les permittivités diélectriques sont modélisées par un modèle de Drude, en fonction du rapport des pulsations plasma et des coefficients d’amortissement. Résultats obtenus par calculs asymptotique (a) et par calcul direct (b).

des pulsations plasma $\omega_{p,2}/\omega_{p,1}$ et celui des coefficients d’amortissement Γ_2/Γ_1 . Remarquons que les résultats du calcul direct et du calcul asymptotique coïncident presque parfaitement. On observe également que le maximum est effectivement réalisé autour de $(\omega_{p,2}/\omega_{p,1}, \Gamma_2/\Gamma_1) = (1, 1)$, *i.e.* pour des matériaux identiques. Le sensibilité¹ du flux par rapport ω_p est largement supérieure à celle par rapport à Γ . A titre d’exemple, le flux se maintient à des valeurs élevées $\Phi > 0.9 \times \Phi_{max}$ pour $\Gamma_2/\Gamma_1 \in [0, 49; 2, 53]$ et $\omega_{p,2}/\omega_{p,1} \in [0, 9; 1, 1]$. Une variation de 10% sur ω_p induit une variation relative comparable sur le flux échangé alors qu’une variation qui peut aller jusqu’à 150% sur Γ induit une variation sur Φ qui reste limitée à 10%. On remarque également que la variation de Φ dépend du signe de la variation relative du paramètre considéré (une augmentation et une diminution du paramètre dans les mêmes proportions n’ont pas le même effet). Finalement, la sensibilité du flux par rapport à ω_p diminue lorsque Γ augmente. Ceci est lié au fait que le coefficient d’amortissement Γ contrôle la largeur du pic de la distribution spectrale du flux échangé (Basu et al. [2010]). Une valeur plus élevée de ce coefficient donne un pic plus large ce qui autorise des écarts plus importants sur sa position contrôlée par ω_p .

6.3.2.2 Modèle de Lorentz

On rappelle l’expression de la permittivité diélectrique dans ce modèle :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega - \omega_0^2} \quad (6.25)$$

où $\omega_p^2 = \omega_{LO}^2 - \omega_0^2$ avec ω_{LO} la pulsation des phonons optiques longitudinaux, $\omega_0 = \omega_{TO}$ ² celle des phonons transverses optiques et Γ le coefficient d’amortissement.

1. Le terme de sensibilité par rapport à un paramètre x désigne ici le rapport d’une variation relative du flux par une variation relative du paramètre. Si on note s_x cette grandeur, elle sera alors donnée par $s_x = \frac{d \text{Log}(\Phi)}{d \text{Log}(x)} = \frac{d\Phi/\Phi}{dx/x}$.

2. On préfère cette notation à ω_{TO} pour maintenir des notations homogènes avec Wang et al. [2009].

On procède aux mêmes examens que pour le modèle de Drude. On commence par chercher l'optimum de l'échange entre deux milieux du même matériau, tout en comparant les performances, en terme de précision et de consommation de ressources, de deux méthodes. Ensuite, on examine l'échange entre deux milieux de matériaux différents afin de vérifier l'hypothèse de l'échange maximal entre deux milieux identiques ainsi que son domaine de validité.

Matériaux identiques

On considère tout d'abord des matériaux identiques, le milieu 1 à 300 K et le milieu 2 à 299 K. Le modèle de Lorentz comprend un paramètre supplémentaire par rapport au modèle de Drude, en l'occurrence la pulsation des phonons optiques transverses ω_0 . Dans cette étude, on fixe $\omega_0 = \omega_{0,SiC} = 1,49 \times 10^{14}$ rad.s $^{-1}$. On se ramène alors à une étude à deux paramètres comme pour le modèle de Drude. Les paramètres de contrôle choisis ici sont le rapport de la pulsation des phonons optiques longitudinaux par celle des phonons optiques transverses $\frac{\omega_{LO}}{\omega_0}$ et celui du coefficient d'amortissement par la pulsation des phonons optiques transverses $\frac{\Gamma}{\omega_0}$.

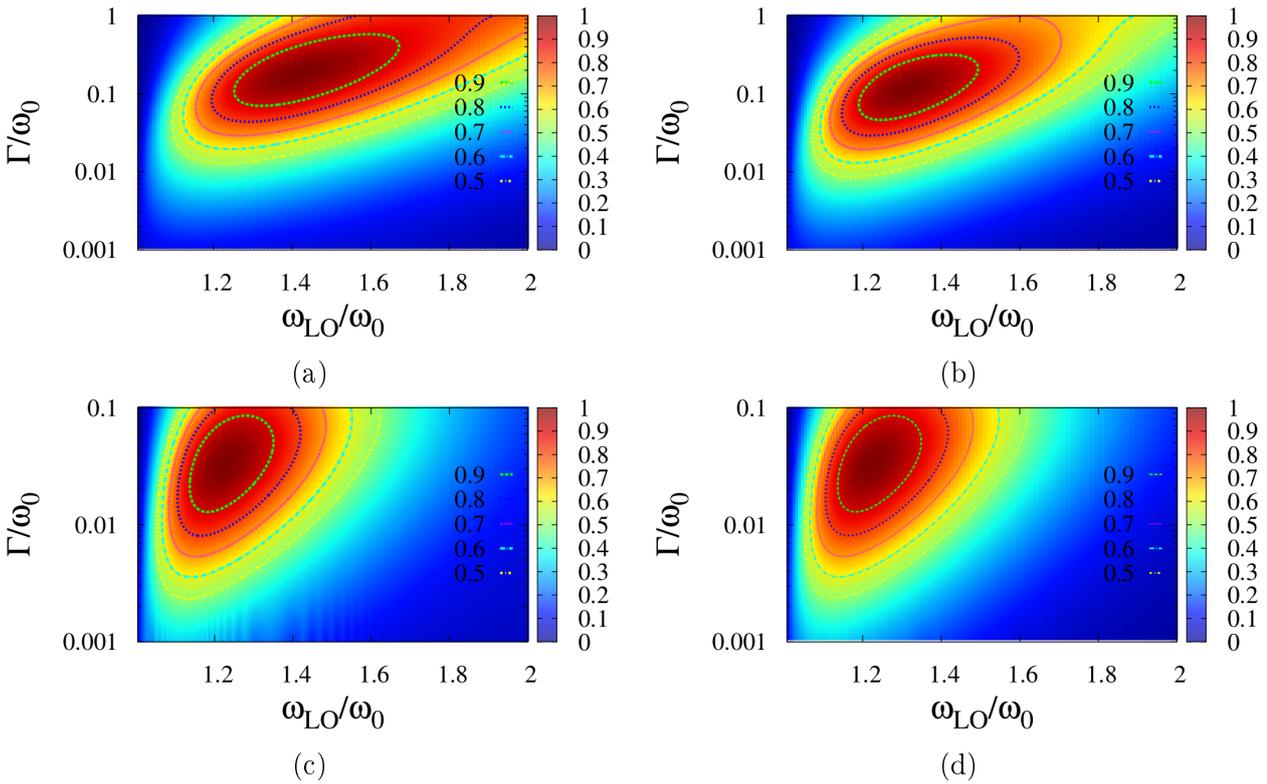


FIGURE 6.7: Flux adimensionné échangé entre deux plans semi-infinis modélisés par un modèle de Lorentz pour $\epsilon_\infty = 1$ par calcul exact (a) et calcul asymptotique (b) et $\epsilon_\infty = 10$ par calcul exact (c) et asymptotique (d). Voir Tableau 6.3 pour les données pertinentes.

Effets de la pulsation des phonons optiques longitudinaux et du coefficient d'amortissement On présente sur la figure 6.7 le flux adimensionné échangé entre deux milieux plans semi-infinis dont les fonctions diélectriques sont modélisées par un modèle de

Lorentz avec $\epsilon_\infty = 1$ et $\epsilon_\infty = 10$ calculé par calcul exact (colonne de gauche) et calcul asymptotique (colonne de droite). Quelques données pertinentes de cette figure et de la figure 6.8, se rapportant notamment à la position du maximum, à la valeur maximale du flux et au temps de calcul, sont résumées dans le tableau 6.3.

On observe tout d'abord l'existence d'un optimum qui est donné ici, de la même façon que pour le modèle de Drude, par un compromis entre les pulsations des phonons qui déterminent la position du pic de la densité spectrale de flux¹, et le coefficient d'amortissement qui définit la hauteur et la largeur du pic, et par conséquent le flux échangé². On observe, pour $\epsilon_\infty = 1$ par exemple, une densité surfacique de flux maximale de $\Phi_{max} = 54529 \text{ W.m}^{-2}$ ³ à $(\frac{\omega_{LO}}{\omega_0} = 1,42, \frac{\Gamma}{\omega_0} = 1,9 \times 10^{-1})$. On remarque également une sensibilité de cette valeur maximale par rapport à ω_{LO} , beaucoup plus forte que par rapport à Γ . Ainsi, on maintient des valeurs de flux relativement élevées ($\Phi > 0,9 \times \Phi_{max}$) avec une variation relative de ω_{LO} autour de $\pm 12\%$ ($\omega_{LO}/\omega_0 \in [1,25; 1,67]$) contre une variation relative admissible pour Γ pouvant aller jusqu'à $+200\%$ ($\Gamma/\omega_0 \in [7 \times 10^{-2}; 5,9 \times 10^{-1}]$).

Méthode	ϵ_∞	$\frac{\omega_{LO}}{\omega_0}$	$\frac{\Gamma}{\omega_0}$	$\Phi_{max} \text{ (W.m}^{-2}\text{)}$	N_1	N_2	$t \text{ (s)}$
D	1	1,42	$1,9 \times 10^{-1}$	56896	2000	100	$2,8 \times 10^5$
A	1	1,42	$1,9 \times 10^{-1}$	56905	10000	100	$2,51 \times 10^2$
D	$\epsilon_{SiC} = 6,7$	1,24	$4,78 \times 10^{-2}$	14874	4000	100	$1,09 \times 10^6$
A	$\epsilon_{SiC} = 6,7$	1,24	$4,78 \times 10^{-2}$	14849	10000	100	$1,25 \times 10^2$
D	10	1,22	$3,31 \times 10^{-2}$	10415	3000	100	$6,17 \times 10^5$
A	10	1,22	$3,31 \times 10^{-2}$	10391	10000	100	$2,5 \times 10^2$

TABLE 6.3: Paramètres du modèle de Lorentz maximisant l'échange radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis identiques dont les fonctions diélectriques sont modélisées par ce modèle. Les valeurs sont obtenues par calcul direct (D) et par calcul approché (A). ω_0 est un paramètre bloqué et est pris égal à $\omega_0 = \omega_{0,SiC} = 1,49 \times 10^{14}$. t figure le temps de calcul, N_1 le nombre de pas de la discrétisation spectrale, (*i.e.* des variables ω et q pour le calcul direct et u pour le calcul approché) et N_2 le nombre de pas de la discrétisation de paramètres de contrôle Γ/ω_0 et ω_{LO}/ω_0 .

Effet de la limite hautes fréquences de la permittivité diélectrique De la même façon que pour le modèle de Drude, et pour les mêmes raisons, on remarque que la valeur maximale du flux décroît avec une augmentation de la limite hautes fréquences de la permittivité

1. L'échange entre deux milieux dépend du caractère dissipatif de ceux-ci. C'est ainsi qu'un milieu transparent ne peut pas absorber de rayonnement. Or, la dissipation est gouvernée par la partie imaginaire de la permittivité diélectrique ϵ . Dans le modèle de Lorentz, $\text{Im}(\epsilon)$ présente un pic à $\omega_0 = \omega_{TO}$ ce qui implique un pic d'absorption et par conséquent un pic de la densité spectrale du flux échangé à cette pulsation.

2. Le flux échangé étant donné par l'intégrale sur toutes les pulsations de la densité spectrale du flux, *i.e.* l'aire de la surface au-dessous de la courbe de la densité spectrale du flux, il est clair que le flux total est directement affecté par la largeur et la hauteur du pic de la densité spectrale.

3. Cette valeur est largement inférieure à la valeur maximale pour un modèle de Drude avec $\epsilon_\infty = 1$ ($\Phi_{max} = 229336 \text{ W.m}^{-2}$). En effet, le modèle de Drude est la limite du modèle de Lorentz lorsque ω_0 tend vers zéro. On remarque alors, bien que l'étude détaillée n'en soit pas présentée ici, une augmentation du flux maximal avec le modèle de Lorentz lorsque ω_0 diminue, toutes choses égales par ailleurs.

diélectrique ϵ_∞ ainsi qu'un décalage de la position du maximum vers les plus faibles valeurs de ω_{LO}/ω_0 et de Γ/ω_0 .

Calcul direct et calcul approché A la différence des calculs pour le modèle de Drude, le calcul asymptotique donne ici des résultats d'une précision remarquable, que ce soit pour la position du flux maximal ou pour sa valeur. Si l'erreur sur la position reste inférieure à 10^{-3} , il en est de même pour la valeur maximale du flux sauf pour $\epsilon_\infty = 10$ où elle atteint $2,3 \times 10^{-3}$. L'erreur relative sur Φ_{max} augmente avec ϵ_∞ , *i.e.* lorsque Φ_{max} diminue. En effet, une partie de cette erreur relative est due au fait que le calcul approché omet la contribution évanescence en polarisation s et la contribution propagative. Cette dernière est quasiment constante pour les différentes valeurs de ϵ_∞ .

Malgré ces précisions comparables, le calcul asymptotique est au moins 1000 plus rapide que le calcul direct avec souvent, une meilleure convergence. En effet, on peut observer sur la figure 6.7c des irrégularités vers les faibles valeurs de flux dues à une convergence trop lente. Il s'agit de valeurs très différentes de flux pour des valeurs voisines des paramètres. Les écarts sont relativement plus grands pour les faibles valeurs de flux et c'est pour cela que les oscillations sont observées loin du maximum. Des calculs avec des maillages différents montrent que l'amplitude des oscillations décroît faiblement avec l'augmentation du nombre de pas N_1 du maillage de l'espace (ω, \mathbf{q}) . On remarque, par exemple, que ces oscillations disparaissent presque complètement sur la figure 6.8 obtenue par calcul direct, où $N_1 = 4000$ et où le temps de calcul est un ordre de grandeur plus grand que pour les cas précédents.

Cas du SiC à 300 K On s'intéresse finalement au cas bien pratique du carbure de Silicium (SiC), abondamment étudié dans la littérature sur le transfert en champ proche, notamment pour les résonances de ses phonons-polaritons autour de $\omega = 10^{14}$ rad.s⁻¹. On présente sur la figure 6.8 le flux adimensionné échangé entre deux milieux plans semi-infinis modélisés par un modèle de Lorentz avec $\epsilon_\infty = \epsilon_{\infty, SiC} = 6, 7$. On remarque alors, qu'à la différence du silicium dopé pour le modèle de Drude, le SiC est loin d'approcher les performances maximales qu'on pourrait atteindre avec un modèle de Lorentz similaire. Le flux obtenu avec du SiC est en effet de l'ordre de $0,6 \times \Phi_{max}$.

Matériaux distincts

On s'intéresse à présent au cas de matériaux distincts afin de vérifier la validité de l'hypothèse de transfert optimal entre deux matériaux identiques. On considère pour cela deux cas : Celui du SiC avec un matériau différent (Figure 6.9a), et celui du matériau maximisant l'échange pour $\epsilon_\infty = \epsilon_{\infty, SiC} = 6, 7$, soit d'après le tableau 6.3, le matériau qu'on notera 1 vérifiant $(\omega_{LO,1}/\omega_0; \Gamma_1/\omega_0) = (1,24; 4,78 \times 10^{-2})$ (Figure 6.9b). La pulsation des phonons optiques transverses étant dans les deux cas fixée à $\omega_0 = \omega_{0, SiC} = 1,49 \times 10^{14}$, elle n'est pas considérée comme paramètre d'étude. Ces paramètres sont alors $\omega_{LO}/\omega_{LO, SiC}$ et Γ/Γ_{SiC} dans le premier et $\omega_{LO}/\omega_{LO,1}$ et Γ/Γ_1 dans le deuxième. On observe effectivement un optimum en $(1; 1)$,

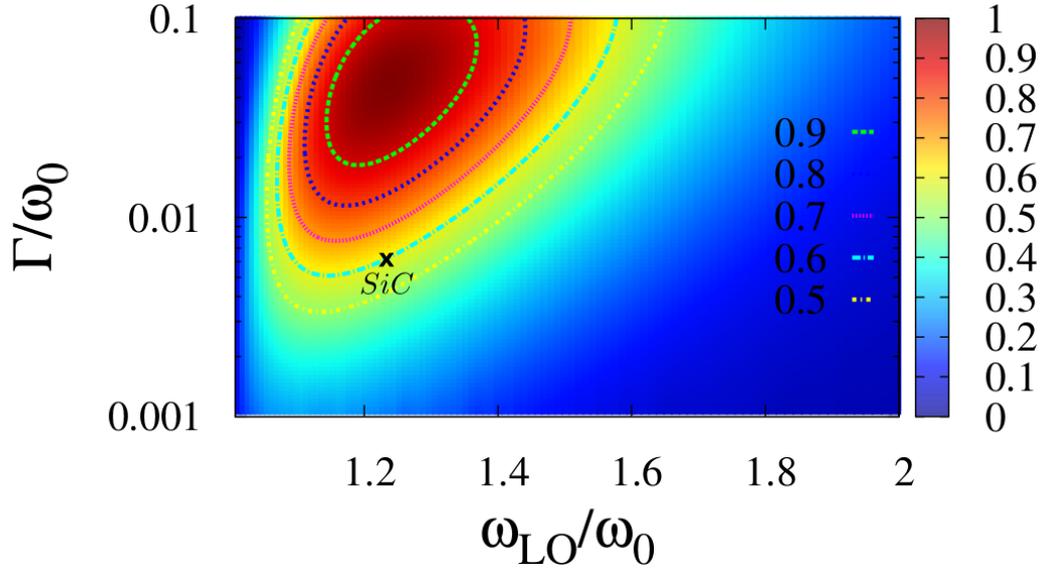


FIGURE 6.8: Flux échangé entre deux plans semi-infinis en fonction de $\frac{\omega_{LO}}{\omega_0}$ et $\frac{\Gamma}{\omega_0}$ pour $\epsilon_\infty = \epsilon_{\infty, SiC} = 6,7$. On rappelle que les paramètres du modèle de Lorentz pour le SiC correspondent au point $(\frac{\omega_{LO}}{\omega_0}; \frac{\Gamma}{\omega_0}) = (1,22; 6 \times 10^{-3})$ représenté ici par \times .

i.e. que l'échange est maximal pour des matériaux identiques. On retrouve également la forte sensibilité du flux échangé à la pulsation des phonons optiques longitudinaux, sensibilité encore plus marquée pour le SiC que pour le matériau 1. En effet, une variation relative de l'ordre de 10^{-4} sur ω_{LO} au point (1;1) fait baisser le flux échangé en dessous de $0,9 \times \Phi_{max}$ alors qu'une variation de l'ordre de 8×10^{-3} le fait baisser de moitié. Ceci est dû à la valeur particulièrement faible de Γ pour le SiC qui implique un pic d'absorption à la résonance très étroit. Ainsi, le moindre décalage de la position du pic d'émission (qui se situe à la même position que le pic d'absorption) du deuxième matériau en face implique une forte non-superposition des deux pics. Les mêmes modes ne sont alors plus présents sur les deux matériaux d'où l'impossibilité d'un couplage. En revanche, Il n'en est pas de même pour la sensibilité par rapport au coefficient d'amortissement. En effet, le coefficient du matériau échangeant avec le SiC admet une variation relative allant de 8% en baisse à 582% en hausse tout en se maintenant à $\Phi > 0,9 \times \Phi_{max}$. Cette forte dissymétrie par rapport au point (1,1) est directement liée au fait que Γ contrôle la largeur et la hauteur du pic. Une plus faible valeur de Γ induit un pic plus haut mais plus étroit que celui du SiC, ce qui réduit les modes différents susceptibles de participer à l'échange. Une plus grande valeur de Γ conduit en revanche à un un pic plus large bien que moins haut. Tous les modes du SiC contribuent alors à l'échange en nombre plus réduit ce qui explique la variation plus lente du flux lorsque le coefficient d'amortissement augmente.

Les mêmes considérations permettent d'expliquer des observations similaires qu'on peut faire concernant l'évolution de l'échange représenté sur la figure 6.9b. L'écart entre la sensibilité du flux à ω_{LO} et sa sensibilité à Γ est ici plus faible que dans le cas du SiC. Cette différence est essentiellement due à une valeur du coefficient d'amortissement plus faible pour le SiC que pour le matériau 1. Pour ce dernier, et afin de maintenir des valeurs de flux au dessus de $0,9 \times \Phi_{max}$,

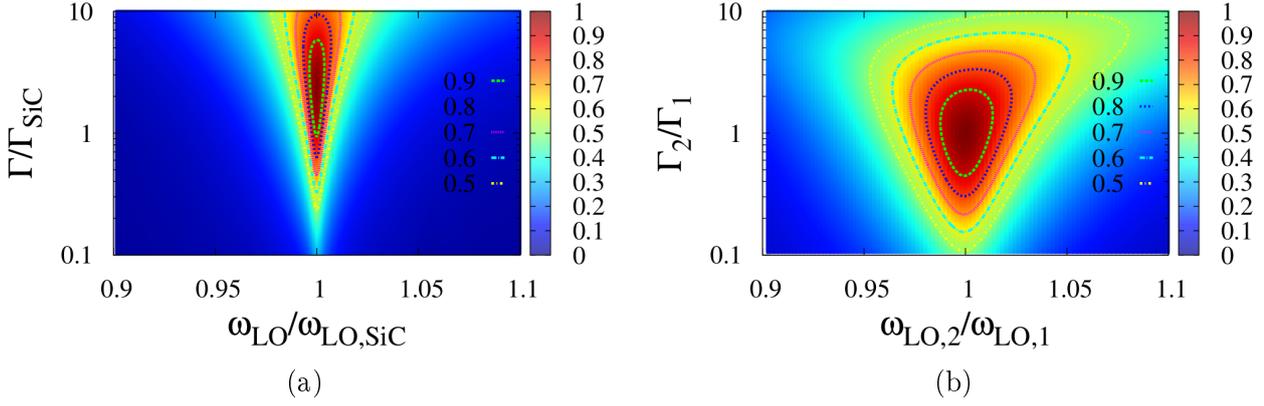


FIGURE 6.9: Flux radiatif en champ proche entre deux plans semi-infinis de matériaux différents dont les permittivités diélectriques sont modélisées par un modèle de Lorentz, en fonction du rapport des pulsations de phonons optiques longitudinaux et des coefficients d'amortissement. On considère successivement l'échange entre le SiC et un matériau différent (a), et le matériau optimisant l'échange à $\epsilon_\infty = 6.7$ et un matériau différent.

Γ_2 admet une variation relative dans $[-44\%, 226\%]$ contre une variation relative admissible de $\pm 1,2\%$ pour ω_{LO} . Bien qu'en augmentation par rapport au cas du SiC, cette dernière valeur reste très faible et elle est à prendre en compte avec la plus grande prudence lors de réalisations pratiques, étant donné que des écarts de cet ordre, voire d'ordre supérieur, peuvent être observés d'un échantillon à un autre avec certains procédés de dépôt.

6.4 Conclusion

On a procédé dans ce chapitre à une étude systématique de l'influence de différents paramètres des modèles usuels (Drude et Lorentz) des fonctions diélectriques des matériaux sur l'échange radiatif en champ proche entre deux milieux plans-semi-infinis à température ambiante. On a calculé pour cela les différentes contributions (propagatives et évanescentes) données par l'expression (doublement) intégrale du flux (Polder and Van Hove [1971]). On a également procédé aux mêmes calculs, notamment pour la contribution évanescente en polarisation p , à l'aide de l'expression asymptotique en champ proche extrême donnée par Rousseau et al. [2009a]. On a alors montré que cette formulation permet d'obtenir des résultats d'une grande précision, du moins pour le modèle de Lorentz, avec un rapport en temps de calcul d'au plus 10^{-3} par rapport au calcul exact. On a également considéré deux cas particuliers largement utilisés avec les deux modèles considérés : le silicium dopé et le carbure du silicium. On a alors montré que le premier est très efficace en matière d'optimisation puisqu'il permet d'atteindre les performances maximales prévues par un modèle de Drude pour $\epsilon_\infty = 11,8$. Il est toutefois possible de dépasser ces valeurs en considérant un méta-matériau avec une valeur beaucoup plus faible de la limite hautes fréquences de la permittivité diélectrique. En comparaison, le SiC quant à lui, n'est pas nécessairement un très bon candidat, comme tout matériau modélisé par un modèle de Lorentz en général, du moins à température ambiante. D'un point de vue pratique, le SiC

est d'autant plus pénalisant que l'efficacité de l'échange entre deux milieux plans semi-infinis de SiC est très sensible à la qualité des matériaux utilisés. De très faibles écarts, de l'ordre de 10^{-3} sur la pulsation des phonons optiques longitudinaux induisent ainsi une baisse de plus de 50% du flux maximal échangeable. De ce point de vue, le flux obtenu avec le modèle de Drude est plus robuste par rapport à de faibles variations des paramètres optimaux. Pour les deux cas, on a vérifié que le flux maximal est obtenu pour des matériaux identiques. Cette identité des matériaux en jeu doit être comprise dans un sens très stricte, notamment pour le SiC.

Enfin, il est utile avant de clore ce chapitre concernant l'optimisation des transferts en champ proche, de dire un mot sur la description mésoscopique récemment développée (Ben-Abdallah and Joulain [2010]; Biehs et al. [2010]) et qui renouvelle la compréhension de ces transferts : l'énergie transmise est portée par des modes à chacun desquels est associée une probabilité de transmission (donnée par un coefficient de transmission modal). L'énergie totale est alors la somme de l'énergie de chaque mode pondérée par les probabilités de transmission. Maximiser le flux reviendrait alors à maximiser les probabilités de transmission des différents modes présents. Partant de ce principe, sans toutefois faire une étude d'optimisation exhaustive, Ben-Abdallah and Joulain [2010] aboutissent avec un calcul variationnel à une condition simple sur les facteurs de réflexions de Fresnel qui permet de déterminer, connaissant un milieu 1, les coefficients de Fresnel du milieu 2 qui maximiserait l'échange. Il est ensuite possible de retrouver par méthodes inverses la permittivité diélectrique optimale correspondante. Il serait utile, dans un futur travail, d'implémenter cette description et de la comparer aux deux approches abordées dans ce chapitre.

Bibliographie

- M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions : With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publ., 1965. [139](#)
- S. Basu and Z. M. Zhang. Maximum energy transfer in near-field thermal radiation at nanometer distances. *J. Appl. Phys.*, 105(9) :093535, 2009. [140](#), [144](#)
- S. Basu, B. J. Lee, and Z. M. Zhang. Near-field radiation calculated with an improved dielectric function model for doped silicon. *ASME Conference Proceedings*, 2008(48715) :765–772, 2008. [139](#)
- S. Basu, Z. M. Zhang, and C. J. Fu. Review of near-field thermal radiation and its application to energy conversion. *Int. J. Energy Res.*, 33(13) :1203–1232, 2009. [134](#), [141](#)
- S. Basu, B. J. Lee, and Z. M. Zhang. Near-field radiation calculated with an improved dielectric function model for doped silicon. *J. Heat Trans.*, 132(2) :023302, 2010. [134](#), [142](#), [143](#), [144](#), [145](#), [147](#)
- Ph. Ben-Abdallah and K. Joulain. Fundamental limits for noncontact transfers between two bodies. *Phys. Rev. B*, 82 :121419, 2010. [136](#), [153](#)
- S.-A. Biehs, E. Rousseau, and J.-J. Greffet. Mesoscopic description of radiative heat transfer at the nanoscale. *Phys. Rev. Lett.*, 105 :234301, 2010. [136](#), [153](#)
- A. Borghesi, C. Chen-Jia, G. Guizzetti, F. Marabelli, L. Nosenzo, E. Reguzzoni, A. Stella, and P. Ostoja. Infra-red properties of bulk heavily doped silicon. *Il Nuovo Cimento D*, 5 :292–303, 1985. [143](#)
- P-O. Chapuis, S. Volz, C. Henkel, K. Joulain, and J-J. Greffet. Effects of spatial dispersion in near-field radiative heat transfer between two parallel metallic surfaces. *Phys. Rev. B*, 77 :035431, 2008. [138](#), [142](#)
- E. G. Cravalho, C. L. Tien, and R. P. Caren. Effect of small spacings on radiative transfer between two dielectrics. *J. Heat Transfer*, 89(4) :351–358, 1967. [133](#)
- Y. Ezzahri, F. Singer, and K. Joulain. Saturation of near field radiative heat transfer between two polar materials. In *Proceedings of the 7th International Symposium on Radiative Transfer, RAD-13 (submitted)*. [142](#)

- M. Francoeur, M. P. Mengüç, and R. Vaillon. Spectral tuning of near-field radiative heat flux between two thin silicon carbide films. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 43(7) :075501, 2010. [134](#)
- M. Francoeur, R. Vaillon, and M.P. Mengüç and. Thermal impacts on the performance of nanoscale-gap thermophotovoltaic power generators. *Energy Conversion, IEEE Transactions on*, 26(2) :686–698, june 2011. [134](#), [141](#)
- B. Guha, C. Otey, C. B. Poitras, S. Fan, and M. Lipson. Near-field radiative cooling of nanostructures. *Nano Lett.*, 12(9) :4546–4550, 2012. [134](#)
- O. Ilic, M. Jablan, J. D. Joannopoulos, I. Celanovic, and M. Soljagic. Overcoming the black body limit in plasmonic and graphene near-field thermophotovoltaic systems. *Opt. Express*, 20(S3) :A366–A384, 2012. [141](#)
- C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 2005. [134](#)
- M. Laroche, R. Carminati, and J.-J. Greffet. Near-field thermophotovoltaic energy conversion. *J. Appl. Phys.*, 100(6) :063704, 2006. [134](#), [141](#)
- R. Messina and Ph. Ben-Abdallah. Graphene-based photovoltaic cells for near-field thermal energy conversion. *eprint arXiv :1207.1476*, 2012. [141](#)
- R. Messina, J-P. Hugonin, J-J. Greffet, F. Marquier, Y. De Wilde, A. Belarouci, L. Frechette, Y. Cordier, and Ph. Ben-Abdallah. Tuning the local density of states in graphene-covered systems via strong coupling with graphene plasmons. *eprint arXiv :1211.3145*, 2012. [141](#)
- J-Ph. Mulet, K. Joulain, R. Carminati, and J-J. Greffet. Enhanced radiative heat transfer at nanometric distances. *Nanoscale Microscale Thermophys. Eng.*, 6(3) :209–222, 2002. [134](#)
- A. Narayanaswamy, S. Shen, and G. Chen. Near-field radiative heat transfer between a sphere and a substrate. *Phys. Rev. B*, 78 :115303, 2008. [134](#)
- D. Polder and M. Van Hove. Theory of radiative heat transfer between closely spaced bodies. *Phys. Rev. B*, 4 :3303–3314, 1971. [133](#), [135](#), [152](#)
- E. Rousseau, M. Laroche, and J.-J. Greffet. Radiative heat transfer at nanoscale mediated by surface plasmons for highly doped silicon. *Appl. Phys. Lett.*, 95(23) :231913, 2009a. [134](#), [136](#), [139](#), [140](#), [142](#), [145](#), [146](#), [152](#)
- E. Rousseau, A. Siria, G. Jourdan, S. Voltz, F. Comin, J. Chevrier, and J.-J. Greffet. Infra-red properties of bulk heavily doped silicon. *Nat. Photon.*, 3 :514, 2009b. [134](#)
- E. Rousseau, M. Laroche, and J.-J. Greffet. Radiative heat transfer at nanoscale : Closed-form expression for silicon at different doping levels. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 111 (7–8) :1005 – 1014, 2010. [139](#)

- E. Rousseau, M. Laroche, and J-J. Greffet. Asymptotic expressions describing radiative heat transfer between polar materials from the far-field regime to the nanoscale regime. *J. Appl. Phys.*, 111(1) :014311, 2012. [134](#), [136](#), [137](#), [139](#)
- V. B. Svetovoy, P. J. van Zwol, and J. Chevrier. Plasmon enhanced near-field radiative heat transfer for graphene covered dielectrics. *Phys. Rev. B*, 85 :155418, 2012. [140](#)
- A. I. Volokitin and B. N. J. Persson. Near-field radiative heat transfer and noncontact friction. *Rev. Mod. Phys.*, 79 :1291–1329, 2007. [135](#)
- X. J. Wang, S. Basu, and Z. M. Zhang. Parametric optimization of dielectric functions for maximizing nanoscale radiative transfer. *J. Phys. D : Appl. Phys.*, 42(24) :245403, 2009. [136](#), [140](#), [147](#)

Chapitre 7

Conclusions

L'objectif de ce travail était de concevoir des sources thermiques cohérentes simples et optimisées pour des applications thermo-photovoltaïques. Pour cela, on a utilisé une méthode d'optimisation stochastique, qui a récemment été appliquée avec succès à divers problèmes difficiles d'ingénierie, en l'occurrence la méthode d'optimisation par essaims de particules. Cette procédure d'optimisation aboutit à deux catégories d'émetteurs : des émetteurs à anti-reflet composés de deux couches de diélectriques émettant dans le moyen infrarouge et des émetteurs à cavité composés de quatre couches métalliques ou de silicium dopé et de diélectriques émettant dans le proche infrarouge. Cette dernière catégorie s'avère toutefois plus pertinente pour les fins d'optimisation considérées¹ essentiellement pour deux raisons :

- Ces sources émettent dans le proche infrarouge. Il s'avère que c'est également le domaine du spectre électromagnétique concerné par le rayonnement thermique de corps chauffés à plus de 1000 K, températures typiques des sources thermo-photovoltaïques. C'est aussi le domaine spectral de conversion optimale de la plupart des semi-conducteurs utilisés dans la conversion photovoltaïque.
- Les propriétés radiatives de ces sources, notamment la position du pic d'émission et sa largeur, peuvent être facilement contrôlées à l'aide de paramètres simples comme les épaisseurs des couches et la concentration de dopage et adaptées à différents convertisseurs. Ceci n'est pas le cas des émetteurs bi-couche.

Cette flexibilité des émetteurs à quatre couches permettrait alors pour un convertisseur donné, en fixant la longueur d'onde du pic d'émission et la largeur du pic, d'obtenir un système TPV avec le rendement et la puissance électrique de sortie recherchés.

Or, on a également montré pour des systèmes TPV à émetteurs sélectifs en champ lointain et à une température donnée, que les objectifs de puissance et de rendement élevés sont deux objectifs contradictoires. Une solution possible à cette contradiction résiderait dans l'utilisation de systèmes TPV en champ proche afin d'exploiter des densités de flux thermique supérieures de plusieurs ordres de grandeurs à celles en champ lointain. Pour cette raison, on clôt ce

1. L'optimisation s'entend ici par rapport aux objectifs de l'application thermo-photovoltaïque et comprends deux paramètres essentiels : la longueur d'onde d'émission qui doit être ajusté à la longueur d'onde de la bande interdite du convertisseur, et la largeur du pic d'émission qui doit correspondre aux objectifs de rendement et de puissance prédéfinis par l'opérateur.

rapport sur une étude paramétrique des modèles usuels (modèles de Drude et de Lorentz) des fonctions diélectriques des matériaux, à la recherche des propriétés optiques maximisant le transfert radiatif en champ proche dans un système de deux plans semi-infinis séparés par une distance nanométrique, configuration la plus vraisemblable pour un système TPV en champ proche. Étant donné la lourdeur des calculs en champ proche, on se propose alors d'utiliser une expression approchée du flux récemment proposée par E. Rousseau et ses collaborateurs. On aboutit alors à un certain nombre de conclusions, dont on rapporte ici les principales :

- Le modèle de Drude permet d'atteindre des valeurs de flux plus importantes que le modèle de Lorentz.
- Le carbure de silicium (SiC), largement utilisé dans des travaux sur le rayonnement en champ proche n'est pas le meilleur candidat pour cet objectif. On pourrait lui préférer le silicium dopé (modélisé d'ailleurs par un modèle de Drude) ou encore un méta-matériau judicieusement dimensionné.
- Pour les deux modèles, le flux est maximal lorsque les matériaux des deux plans sont strictement identiques. En effet, de faibles écarts dans la propriétés optiques des deux milieux, induisent des baisses de flux non négligeables. Ceci est particulièrement remarquable pour le modèle de Lorentz, et plus particulièrement pour le SiC. Cette contrainte nécessitera une attention particulière lors d'éventuelles réalisations expérimentales.

On montre également que le calcul approché donne des résultats d'une précision satisfaisante (de l'ordre de 10^{-3}) pour le modèle de Lorentz uniquement. Il est donc à utiliser avec précaution. Finalement, aucun calcul de rendement de système TPV en champ proche n'est effectué. En effet, le modèle simple d'une cellule PV présenté au chapitre 3 n'est plus adapté à cette situation. Bien que quelques modèles sommaires existent dans la littérature, un modèle adapté est à développer et devrait considérer les particularités du champ proche, notamment :

- Les densités de flux en champ proche sont très importantes, s'approchant de celles qu'on trouve dans le photovoltaïque à concentration. Les effets thermiques sont alors à traiter avec une attention particulière. La forte proximité de l'émetteur fortement chauffé et de la cellule accentue les effets thermiques qui devront nécessairement être pris en compte, même dans l'hypothèse de l'utilisation d'un dispositif de refroidissement efficace.
- A de très faibles séparations, nanométriques notamment, le fort champ électromagnétique de l'émetteur affecte les propriétés électroniques et optiques de la cellule.

La prise en compte de ces particularités nécessitera un modèle qui procédera à une résolution des équations de transport des porteurs de charge dans la cellule couplées aux effets du champ EM de l'émetteur ainsi qu'aux effets thermiques. Ceci permettrait alors d'avoir une évaluation plus précise du réel potentiel de la conversion thermo-photovoltaïque en champ proche.

Annexes

A. Coefficients de Fresnel pour la polarisation s

On rappelle dans cette annexe les expressions des coefficients de Fresnel pour la réflexion et la transmission en polarisation s . On procède de façon similaire qu'au paragraphe 2.5.5.5 tout en prenant en compte que, pour cette polarisation, le champ électrique est orthogonal au plan d'incidence. Ceci implique une composante du champ électrique normale à l'interface nulle. Afin d'obtenir les coefficients de Fresnel, il suffit alors d'écrire le rapport du champ réfléchi par le champ incident et celui du champ transmis par le champ incident, tout en prenant en compte la condition de continuité des composantes tangentielles à l'interface. Il vient alors, avec un calcul relativement simple :

$$r_{12}^s = \frac{E^r}{E^i} = \frac{n_1 \cos(i) - n_2 \cos(t)}{n_1 \cos(i) + n_2 \cos(t)} \quad (1)$$

ou encore, exprimé en fonction des permittivités diélectriques et des composantes normales des vecteurs d'onde :

$$r_{12}^s = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (2)$$

et

$$t_{12}^s = \frac{E^t}{E^i} = \frac{2n_1 \cos(i)}{n_1 \cos(i) + n_2 \cos(t)} \quad (3)$$

ou encore

$$t_{12}^s = \frac{2\gamma_1}{\gamma_1 + \gamma_2} \quad (4)$$

B. Propriétés optiques des matériaux à haute température

Sommaire

.1	Modèle de Drude : exemple du silicium dopé	165
.2	Modèle de Lorentz : exemple du SiC	169
.3	Modèles empiriques	171
.3.1	Germanium	171
.3.2	Silicium	172

.1 Modèle de Drude : exemple du silicium dopé

La permittivité diélectrique de l'or et de l'argent ont été modélisées par un modèle de Drude (Blaber et al. [2009]; Zeman and Schatz [1987]) :

$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)} \quad (1)$$

où $\omega = 2\pi c/\lambda$ est la fréquence angulaire, ω_p est la fréquence plasma et Γ est le coefficient d'amortissement. Les valeurs de Blaber (Blaber et al. [2009]) ont été adoptées dans nos calculs. Elles sont rapportées dans le tableau 1. Elles diffèrent de celles de Zeman (Zeman and Schatz

Métal	ω_p (eV)	Γ (meV)
Ag	9.6	22.8
Au	9.04	21.25

TABLE 1: Pulsation plasma et coefficient d'amortissement de l'argent et de l'or.

[1987]) de moins de 10%. La permittivité diélectrique du silicium peut également être modélisée

par un modèle de Drude (Basu et al. [2010a]; Marquier et al. [2004a]) :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\Gamma)} \right) \quad (2)$$

où $\epsilon_{\infty} = 11.7$ est la constante diélectrique pour les hautes fréquences et ω_p^2 est le carré de la fréquence plasma non écrantée défini par :

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{(m^*\epsilon_0)} \quad (3)$$

et Γ est le coefficient d'amortissement donné par :

$$\Gamma = \frac{1}{\tau} = \frac{e}{m^*\mu} \quad (4)$$

où τ , μ et m^* sont le temps de relaxation, la mobilité et la masse effective de l'électron / trou respectivement et dépendent de la concentration de porteurs de charge N et de la température (Arora et al. [1982]; Auslender and Hava [1995]; Basu et al. [2010a]; Chapman et al. [1963]; Green [1990]; Jacoboni et al. [1977]; Marquier et al. [2004a]).

Pour représenter la dépendance au taux de dopage, Marquier (Marquier et al. [2004a]) a utilisé des valeurs tabulées de la résistivité du silicium dopé (Sze and Irvin [1968]) dans la gamme de concentration de dopage allant de $3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ et $5 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ qui permet, connaissant la masse effective, de déterminer le temps de relaxation de l'électron / trou avec la relation :

$$\tau = \frac{m^*}{Ne^2\rho} \quad (5)$$

Cette approche ne permet toutefois pas d'apprécier la dépendance en température à moins de disposer de tables plus exhaustives (pour chaque température). Basu (Basu et al. [2010b]) a proposé un modèle amélioré valable uniquement pour la température ambiante. Ce modèle fait appel à différents modèles pour calculer la mobilité des électrons et des trous. Or, plusieurs expressions ont été proposées pour évaluer la mobilité en fonction de la concentration des porteurs et de la température pour une gamme de dopage assez large, entre 10^{17} cm^{-3} et $5.10^{20} \text{ cm}^{-3}$ (Arora et al. [1982]; Jacoboni et al. [1977]). Une expression phénoménologique du type «min-max», donne la mobilité pour une concentration de porteurs N inférieur à 10^{21} cm^{-3} (Arora et al. [1982]; Jacoboni et al. [1977]) :

$$\mu = \mu_{min} + \frac{\mu_{max} - \mu_{min}}{1 + (N/N_{ref})^\alpha} \quad (6)$$

Les paramètres du modèle 6 sont donnés dans le tableau 2. A ce niveau de dopage, on peut

	Électrons	Trous	Unité	Référence
μ_{min}	92	47,7	$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Jacoboni et al. [1977]
μ_{max}	1360	495	$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Jacoboni et al. [1977]
N_{ref}	$1,3 \times 10^{17}$	$6,3 \times 10^{16}$	cm^{-3}	Jacoboni et al. [1977]
α	0,91	0,76	—	Jacoboni et al. [1977]
μ_{min}	88,3	54,3	$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Arora et al. [1982]
μ_{max}	1241,8	406,9	$\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Arora et al. [1982]
N_{ref}	$2,46 \times 10^{17}$	$2,35 \times 10^{17}$	cm^{-3}	Arora et al. [1982]
α	0,823	0,88	—	Arora et al. [1982]

TABLE 2: Paramètres d'un modèle «min-max» (expression 6) pour la mobilité du silicium dopé en fonction de la concentration de porteurs de charge.

considérer que les impuretés sont totalement ionisées (Kuźmicz [1986]). On confondra donc degré de dopage et concentration de porteurs de charge. Masetti et al. [1983] ont proposé un modèle empirique à un nombre de paramètres légèrement plus élevé mais qui permet de représenter fidèlement les résultats expérimentaux sur une gamme de dopage plus large entre 10^{13} cm^{-3} et $4 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$. Pour le silicium dopé n :

$$\mu = \mu_1 + \frac{\mu_{max} - \mu_1}{1 + (N_e/C_r)^\alpha} - \frac{\mu_2}{1 + (C_s/N_e)^\beta} \quad (7)$$

Et pour le silicium dopé p :

$$\mu = \mu_1 \exp(-p_c/N_h) + \frac{\mu_{max}}{1 + (N_h/C_r)^\alpha} - \frac{\mu_2}{1 + (C_s/N_h)^\beta} \quad (8)$$

Les paramètres de ces modèles sont donnés dans le tableau 3. Par ailleurs, la mobilité diminue

	Arsenic	Phosphore	Bore
μ_0	52,2	68,5	44,9
μ_{max}	1417	1414	470,5
μ_1	43,4	56,1	29,0
C_r	$9,68 \times 10^{16}$	$9,20 \times 10^{16}$	$2,23 \times 10^{17}$
C_s	$3,43 \times 10^{20}$	$3,41 \times 10^{20}$	$6,10 \times 10^{20}$
α	0,680	0,711	0,719
β	2,00	1,98	2,00
P_c	—	—	$9,23 \times 10^{16}$

TABLE 3: Paramètres des modèles 7 et 8 pour du silicium dopé par de l'arsenic, du bore et du phosphore (Masetti et al. [1983]).

avec la température et est usuellement exprimée par une relation de la forme (Arora et al.

[1982]; [Jacoboni et al. \[1977\]](#)) :

$$\mu = AT^{-\gamma} \quad (9)$$

D'autre part, [Arora et al. \[1982\]](#) ont proposé une relation empirique relativement compacte

	Électrons	Trous	Unité	Référence
A	$1,43 \times 10^9$	$1,35 \times 10^8$	$\text{cm}^2\text{K}^\gamma\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$	Jacoboni et al. [1977]
γ	2,42	2,20	—	Jacoboni et al. [1977]

TABLE 4: Paramètres du modèle de dépendance à la température de la mobilité des électrons et des trous (expression 9) pour du silicium hautement pur ($N \leq 10^{12}$).

qui exprime au même temps la dépendance de la mobilité des électrons et des trous à la concentration des porteurs de charge et à la température pour du silicium dopé au phosphore. Pour les électrons on a :

$$\mu_e = 88 T_n^{-0,57} + \frac{7,4 \times 10^8 T^{-2,33}}{1 + [N/(1,26 \times 10^{17} T_n^{2,4})]0,88 T_n^{-0,146}} \quad (10)$$

Et pour les trous il vient :

$$\mu_h = 54,3 T_n^{-0,57} + \frac{1,36 \times 10^8 T^{-2,23}}{1 + [N/(2,35 \times 10^{17} T_n^{2,4})]0,88 T_n^{-0,146}} \quad (11)$$

où $T_n = T/300$ figure la température adimensionnée. Ces expressions ne sont valables que jusqu'à $N = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$.

De plus, [Marquier et al. \[2004b\]](#) ont considéré la masse effective de l'électron constante : $m^* = 0,27m_0$ pour le silicium dopé n et $m^* = 0,34m_0$ pour le silicium dopé p où $m_0 = 9,1 \times 10^{-31} \text{ kg}$ figure la masse de l'électron libre. On adopte les mêmes valeurs ici. On considère une concentration de dopant jusqu'à $5.10^{20} \text{ cm}^{-3}$. Au delà, m^* et τ manifestent des changements de comportement relativement importants : m^* augmente fortement jusqu'à doubler à très fort dopage et haute température, alors que τ devient quasi-constant ([Auslender and Hava \[1995\]](#); [Riffe \[2002\]](#); [Slaoui and Siffert \[1985\]](#); [van Driel \[1984\]](#)). Les données concernant la dépendance à la température de la masse effective du silicium fortement dopé sont très rares dans la littérature. Une valeur constante $m^* = 0,28m_0$ a été rapportée pour du silicium intrinsèque à 300 K et 500 K ([Green \[1990\]](#)). Ici, on fera l'hypothèse d'une masse effective indépendante de la température et on utilisera sa valeur à 300 K. Il s'en suivra d'après les expressions 3 et 5 que la fréquence plasma reste inchangée alors que l'augmentation du coefficient d'amortissement est inversement proportionnelle à la variation de la mobilité donc proportionnelle au carré de la température. On adopte ici le modèle de [Marquier et al. \[2004b\]](#) amélioré par la prise en compte de la dépendance de la mobilité à la température selon le modèle de [Arora et al. \[1982\]](#) (Expression 11). Pour

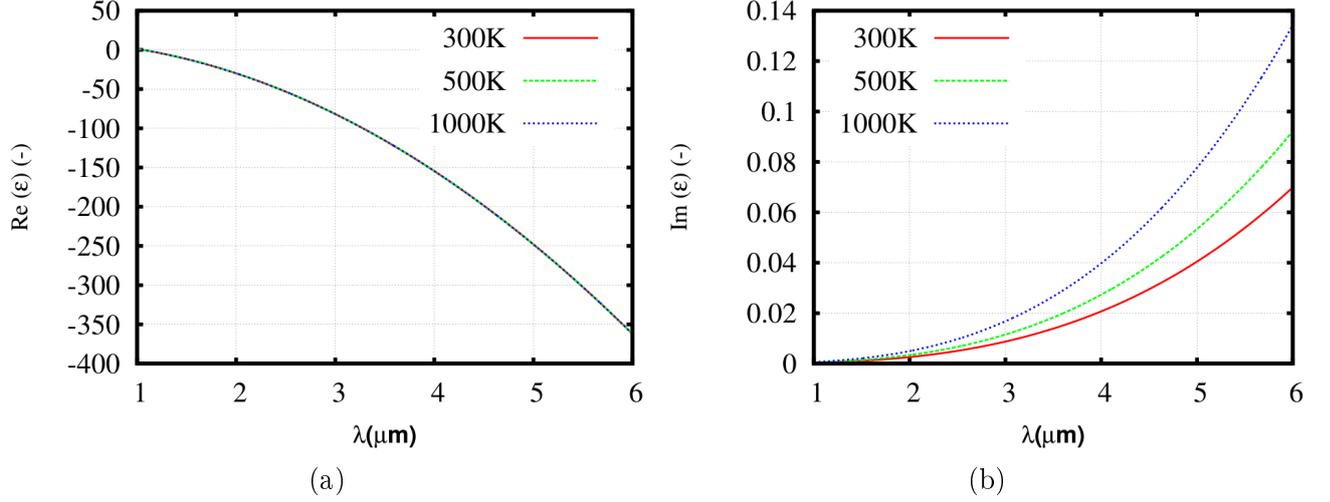


FIGURE 1: Partie réelle (1a) et imaginaire (1b) de la permittivité diélectrique du silicium dopé p à 10^{20} cm^{-3} pour des températures de 300 K, 500 K et 1000 K.

du silicium dopé p avec une concentration de dopage de 10^{20} cm^{-3} , on obtient les résultats présentés sur la figure 1. L'augmentation de température n'implique pas de variation notable de la partie réelle de la permittivité diélectrique du silicium dopé. Pour la partie imaginaire, des variations très faibles sont observées pour les courtes longueurs d'onde ($\lambda \leq 2$ μm) qui augmentent avec la longueur d'onde pour dépasser les 100% pour $\lambda \simeq 6$ μm (cette grandeur à 1000 K dépasse le double de sa valeur à 300 K).

.2 Modèle de Lorentz : exemple du SiC

La permittivité diélectrique du SiC peut être modélisée par un modèle de Lorentz (Palik [1985]) :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2 - \omega_{TO}^2}{\omega_{TO}^2 - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right) \quad (12)$$

Il convient d'évaluer la dépendance des paramètres de ce modèle ω_{TO} , ω_{LO} et Γ à la température. Concernant les phonons optiques, l'essentiel du changement de fréquence étant dû à l'expansion de la maille (Blanc et al. [2004]). Il suffit alors de quantifier l'effet de cette expansion sur ω_{TO} et ω_{LO} . Le paramètre de Grüneisen (Ashcroft and Mermin [1976]) relie la variation de la fréquence de pulsation d'un mode \mathbf{k} à la variation du volume V de la maille comme suit :

$$\gamma = - \left(\frac{\partial \text{Log}(\omega(\mathbf{k}))}{\partial \text{Log}(V)} \right) \quad (13)$$

Pour des diélectriques usuels tels que Si ou Ge, γ est positif. Intuitivement, une augmentation du volume de la maille donc de la distance entre deux ions du réseau diminue la force d'interaction et par la suite la pulsation propre des phonons, d'où le signe négatif dans la définition (13).

Pour le SiC, γ est de l'ordre de l'unité. Quelques valeurs à température ambiante en sont rapportées dans le tableau 5. Pour une augmentation de température de 500 K (entre 300 K et

Matériau	γ_{TO}	γ_{LO}	Ref.
3C-SiC	1,56	1,55	Olego et al. [1982]
6H-SiC	1,14	1,09	Salvador and Sherman [1991]

TABLE 5: Quelques valeurs du paramètre de Grüneisen pour le 3C-SiC et le 6H-SiC à température ambiante.

800 K), $\frac{\Delta V}{V} \simeq 2,25 \times 10^{-3}$ ce qui mène à une variation de ω_{TO} et ω_{LO} inférieure à 1%. Ceci est du même ordre que les mesures présentées dans la littérature (Marquier et al. [2004b]) : dans le domaine de température [300 K-800 K], une variation de moins de 2%. Les valeurs légèrement inférieures ici pourraient être dues à la sous-estimation de γ lorsqu'on utilise sa valeur à 300 K. Les pulsations ω_{TO} et ω_{LO} seront considérées constantes pour toute température par la suite. Quant au coefficient d'amortissement, il est dû aux collisions particulières et est proportionnel à l'inverse de la durée de vie des phonons. Il traduit la dissipation d'énergie dans le cristal. Il augmenterait avec la température puisque l'excitation thermique de ces derniers augmente les interactions électron-électron et les interactions électron-phonon. (Mutschke et al. [1999]; Plendl [1971]).

La relation suivante a été proposée par Marquier et al. [2004b] pour retrouver des mesures expérimentales pour le SiC pour le domaine de température [450 K-770 K] :

$$\Gamma = 4,8329 + 0,0183(T - 300) \quad (14)$$

Cette relation donne $\Gamma = 13.434 \times 10^{11} \text{ rad.s}^{-1}$ pour $T = 770 \text{ K}$ soit une augmentation de près de 50% par rapport à la température ambiante. On présente sur la figure 2 la permittivité diélectrique du SiC à 300 K et 770 K. On remarque alors que l'augmentation de la température induit une baisse de l'intensité de la résonance des vibrations du réseau à travers l'augmentation du coefficient d'amortissement Γ . Les pics de la partie imaginaire sont caractérisés dans le tableau 6. La position du pic reste inchangée puisqu'elle dépend des fréquences des phonons optiques qui ne varient pas alors que la largeur du pic et son intensité augmentent et diminuent de plus de 50% respectivement.

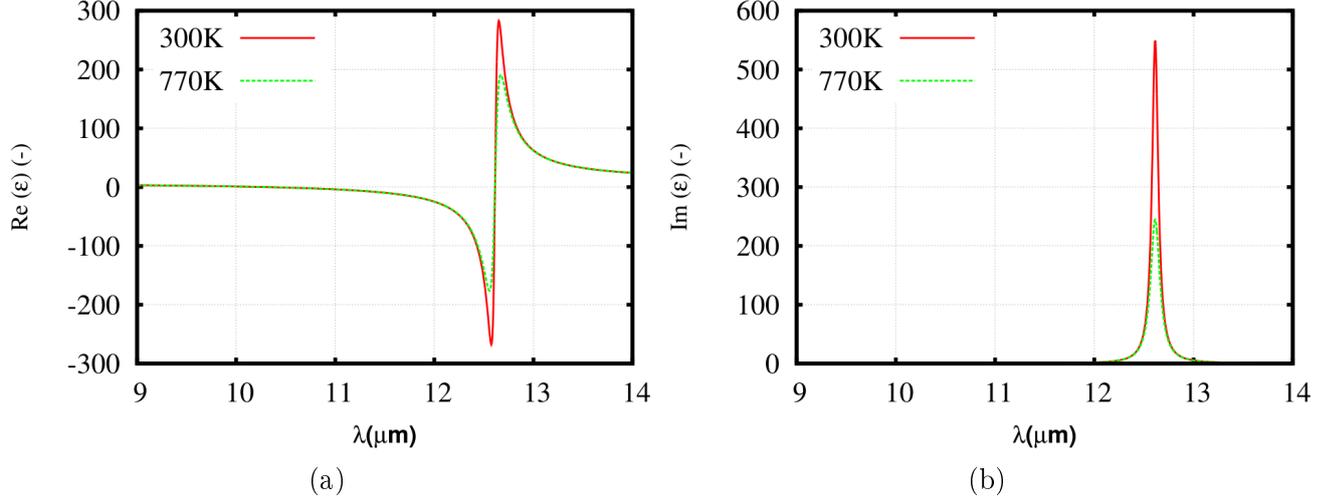


FIGURE 2: Partie réelle (2a) et imaginaire (2b) de la permittivité diélectrique du SiC à 300 K et à 770 K.

T (K)	300	770	$\frac{dx}{x}$
$\lambda_p(\mu\text{m})$	12,615	12,615	0
$LMH(\mu\text{m})$	$7,5 \times 10^{-2}$	$1,15 \times 10^{-1}$	$-55,4 \times 10^{-2}$
max. (-)	549	245	$53,3 \times 10^{-2}$

TABLE 6: Caractéristiques des pics de la partie imaginaire de la permittivité diélectrique du SiC à 300 K et 700 K. $\frac{dx}{x}$ figure la variation relative d'une quantité x ($x \in \{\lambda_p, LMH, \dots\}$) entre les deux températures.

.3 Modèles empiriques

.3.1 Germanium

La dépendance de l'indice de réfraction du germanium à la température a été abondamment commentée dans la littérature étant donnée l'importance de ce matériau dans les applications technologiques (Gillen et al. [2008]; Li [1980]; Palik [1985]). On adoptera l'expression rapportée par Palik [1985] qui reste relativement commode à utiliser puisque donnant une seule expression (expression 15) pour le calcul de l'indice de réfraction en fonction de la température et de la longueur :

$$n^2 = A + B \frac{\lambda^2}{(\lambda^2 - C)} + D \frac{\lambda^2}{\lambda^2 - E} \quad (15)$$

Afin de retrouver les valeurs expérimentales de n , les différents coefficients s'écrivent :

$$\begin{aligned} A &= -6,040 \times 10^{-3}T + 11,05128 \\ B &= 9,295 \times 10^{-3}T + 4,00536 \\ C &= -5,392 \times 10^{-4}T + 0,5999034 \\ D &= 4,151 \times 10^{-4}T + 0,09145 \\ E &= 1,51408T + 3426,5 \end{aligned}$$

Les valeurs de l'indice de réfraction du germanium pour la température ambiante et $T = 770$ K entre $9 \mu\text{m}$ et $14 \mu\text{m}$ sont rapportées dans le tableau 7. On observe une augmentation relative de la permittivité diélectrique de 10%.

λ (μm)	T (K)	
	300	770
9	4,03	4,24
10	4,03	4,24
11	4,03	4,24
12	4,03	4,24
13	4,03	4,24
14	4,03	4,24

TABLE 7: Quelques valeurs de l'indice de réfraction du germanium à différentes longueurs d'onde à $T = 300$ K et $T = 770$ K.

.3.2 Silicium

Ravindra et al. [1998] présentent des valeurs de l'indice de réfraction du silicium légèrement dopé p dans le moyen et proche infrarouge à des températures variant entre 300 K et 1235 K (Figure 3a). Ces valeurs sont calculées à partir d'émissométrie indirecte par un spectromètre infrarouge à transformée de Fourier. En effet, l'émissivité est déduite de mesures en transmission et en réflexion. Ces valeurs sont comparées à des valeurs déduites des mesures d'émissivité antérieures de Satō [1967] pour le silicium de type n (Figure 3b). Quelques valeurs sont rapportées dans le tableau 8. On considérera que l'indice de réfraction est constant sur le domaine de longueur d'onde $[1,6] \mu\text{m}$, ce qui est souvent vrai pour des longueurs d'onde supérieures à $2 \mu\text{m}$ et l'est un peu moins en deçà, avec des écarts de l'ordre du pour-cent qui augmentent avec la température pour atteindre les 3% aux alentours de 1000 K. Quelques valeurs sont rapportées dans le tableau 8. L'indice de réfraction augmente effectivement de quelques pour-cents (on reste en deçà des 10%) quand on passe de la température ambiante aux alentours de 1000 K peu importe le type de dopage.

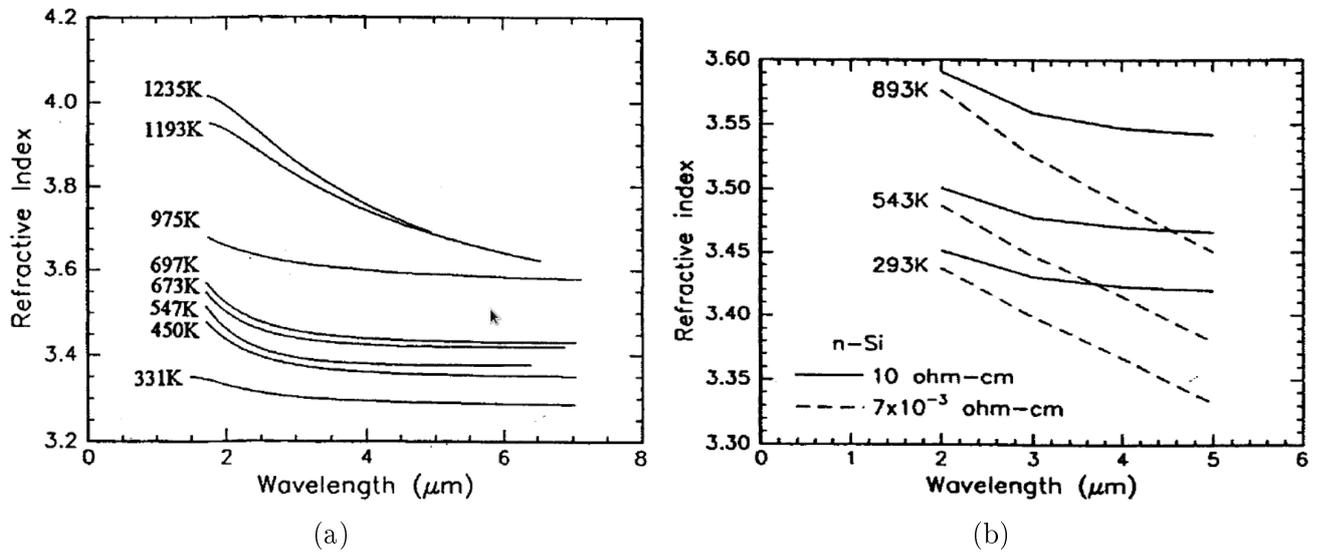


FIGURE 3: Indice de réfraction du silicium légèrement dopé p (a) et n (b) pour des températures allant de la température ambiante aux alentours de 1000 K (source : Ravindra et al. [1998]).

dopage	T (K)	n	Ref.
p	331	3,3	Ravindra et al. [1998]
p	547	3,4	Ravindra et al. [1998]
p	975	3,6	Ravindra et al. [1998]
n	293	3,43	Satō [1967]
n	543	3,48	Satō [1967]
n	893	3,56	Satō [1967]

TABLE 8: Quelques valeurs moyennes de l'indice de réfraction du silicium légèrement dopé p et n sur le domaine de longueur d'onde $[1, 6] \mu\text{m}$ à des températures allant de la température ambiante à 1000 K.

Bibliographie

- N. D. Arora, J. R. Hauser, and D. J. Roulston. Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 29(2) : 292 – 295, 1982. [166](#), [167](#), [168](#)
- N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. *Solid State Physics*. Science : Physics. Saunders College, 1976. [169](#)
- M. Auslender and S. Hava. Zero infrared reflectance anomaly in doped silicon lamellar gratings. i. from antireflection to total absorption. *Infrared Phys. Tech.*, 36(7) :1077 – 1088, 1995. [166](#), [168](#)
- S. Basu, B. J. Lee, and Z. M. Zhang. Near-field radiation calculated with an improved dielectric function model for doped silicon. *J. Heat Trans.*, 132(2) :023302, 2010a. [166](#)
- S. Basu, B. J. Lee, and Z. M. Zhang. Infrared radiative properties of heavily doped silicon at room temperature. *J. Heat Trans.*, 132(2) :023301, 2010b. [166](#)
- M. G. Blaber, M. D. Arnold, and M. J. Ford. Search for the ideal plasmonic nanoshell : The effects of surface scattering and alternatives to gold and silver. *J. Phys. Chem. C*, 113(8) : 3041–3045, 2009. [165](#)
- C. Blanc, J. Pernot, and J. Camassel. Temperature-dependence of zone-center phonon modes in 4h-sic. *Mater. Sci. Forum*, 457-460 :649–652, 2004. [169](#)
- P. W. Chapman, O. N. Tufte, J. D. Zook, and D. Long. Electrical properties of heavily doped silicon. *J. Appl. Phys.*, 34(11) :3291–3295, 1963. [166](#)
- G. D. Gillen, C. DiRocco, P. Powers, and S. Guha. Temperature-dependent refractive index measurements of wafer-shaped inas and insb. *Appl. Opt.*, 47(2) :164–168, 2008. [171](#)
- M. A. Green. Intrinsic concentration, effective densities of states, and effective mass in silicon. *J. Appl. Phys.*, 67(6) :2944–2954, 1990. [166](#), [168](#)
- C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani, and A. Alberigi Quaranta. A review of some charge transport properties of silicon. *Solid State Electron.*, 20(2) :77 – 89, 1977. [166](#), [167](#), [168](#)

- W. Kuźmicz. Ionization of impurities in silicon. *Solid-State Electron.*, 29(12) :1223 – 1227, 1986. [167](#)
- H. H. Li. Refractive index of silicon and germanium and its wavelength and temperature derivatives. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 9(3) :561–658, 1980. [171](#)
- F. Marquier, K. Joulain, J.-P. Mulet, R. Carminati, and J.-J. Greffet. Engineering infrared emission properties of silicon in the near field and the far field. *Opt. Commun.*, 237(4-6) : 379 – 388, 2004a. [166](#)
- F. Marquier, K. Joulain, J.-P. Mulet, R. Carminati, J.-J. Greffet, and Y. Chen. Coherent spontaneous emission of light by thermal sources. *Phys. Rev. B*, 69(15) :155412, 2004b. [168](#), [170](#)
- G. Masetti, M. Severi, and S. Solmi. Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic-, phosphorus-, and boron-doped silicon. *IEEE Transactions on Electron Devices*, 30(7) :764 – 769, 1983. [167](#)
- H. Mutschke, A.C. Andersen, D. Clement, Th. Henning, and G. Peiter. Temperature-dependence of zone-center phonon modes in 4h-sic. *arXiv :astro-ph/9903031v1*, 1999. [170](#)
- D. Olego, M. Cardona, and P. Vogl. Pressure dependence of the optical phonons and transverse effective charge in 3c-sic. *Phys. Rev. B*, 25 :3878–3888, 1982. [170](#)
- E. D. Palik. *Handbook of Optical Constants of Solids*. Academic Press, Boston, 1985. [169](#), [171](#)
- J. N. Plendl. Damping of lattice vibrations in solids. *Appl. Opt.*, 10(1) :87–97, 1971. [170](#)
- N. M. Ravindra, S. Abedrabbo, W. Chen, F.M. Tong, A.K. Nanda, and A.C. Speranza. Temperature-dependent emissivity of silicon-related materials and structures. volume 11, pages 30–39. AIP, 1998. [172](#), [173](#)
- D. M. Riffe. Temperature dependence of silicon carrier effective masses with application to femtosecond reflectivity measurements. *J. Opt. Soc. Am. B*, 19(5) :1092–1100, 2002. [168](#)
- G. Salvador and W. F. Sherman. Pressure dependence of the raman phonon spectrum in 6h-silicon carbide. *J. Mol. Struct.*, 247 :373 – 384, 1991. [170](#)
- T. Satō. Spectral emissivity of silicon. *Jpn. J. Appl. Phys.*, 6(3) :339–347, 1967. [172](#), [173](#)
- A. Slaoui and P. Siffert. Determination of the electron effective mass and relaxation time in heavily doped silicon. *Phys. Status Solidi A*, 89(2) :617–622, 1985. [168](#)
- S. M. Sze and J. C. Irvin. Resistivity, mobility and impurity levels in GaAs, Ge, and Si at 300 K. *Solid State Electron.*, 11(6) :599 – 602, 1968. [166](#)

-
- H. M. van Driel. Optical effective mass of high density carriers in silicon. *Appl. Phys. Lett.*, 44 (6) :617–619, 1984. [168](#)
- E. J. Zeman and G. C. Schatz. An accurate electromagnetic theory study of surface enhancement factors for silver, gold, copper, lithium, sodium, aluminum, gallium, indium, zinc, and cadmium. *J. Phys. Chem.*, 91(3) :634–643, 1987. [165](#)

C. Cacul numérique du dilogarithme (Li_2)

Le dilogarithme est une fonction qui apparaît dans plusieurs domaines de la physique, en mécanique céleste ou en électromagnétisme par exemple, notamment en tant que primitive de la distribution de Fermi-Dirac. Son évaluation numérique est donc très utile lorsque l'on s'intéresse à des solutions analytiques ou semi-analytiques qui remplacent le calcul fastidieux d'intégrale par une seule évaluation de primitive. C'est en l'occurrence le cas pour l'intégrale du flux radiatif en champ proche par rapport à la composante parallèle du vecteur d'onde. Le problème est que très peu de bibliothèques usuelles proposent des routines de calcul du dilogarithme. A notre connaissance, seul le logiciel de calcul Mathematica propose une routine de calcul fiable pour le dilogarithme complexe. Mathematica n'est cependant pas nécessairement approprié pour des calculs lourds. Par ailleurs, c'est un logiciel propriétaire et on n'a pas accès aux algorithmes de ses différentes routines, celle du dilogarithme en l'occurrence. Par ailleurs, pour les programmeurs en Fortran ou en langage C, il existe la GNU Scientific Library (GSL) qui propose dans le module de fonctions spéciales plusieurs procédures pour le calcul du dilogarithme réel et complexe (Galassi et al. [2009]). Alors que l'évaluation du dilogarithme des variables réelles fonctionne parfaitement, celle des variables complexes n'est pas complètement opérationnelle, du moins sous certaines machines et/ou certaines plate-formes. C'était notre cas avec un Processeur huit-cœur 64 bits, Intel(R) Xeon(R), E5620 @ 2.40GHz, avec 12 Mo de mémoire Cache L2, 4 Go de RAM, sous Linux Ubuntu 11.10 (oneiric). C'est notamment pour cette raison qu'on propose ici un algorithme pour l'évaluation du dilogarithme, en espérant qu'il pourra épargner à d'autres les déboires qu'on a connu en essayant d'utiliser la procédure très peu documentée de GSL et une perte de temps inutile. Cet algorithme est fortement inspiré du papier de Osácar et al. [1995]. Il en est presque une version simplifiée qui omet toutes les optimisations proposées par les auteurs ainsi que par Ginsberg and Zaborowski [1973] pour accélérer la convergence de la série. En effet, l'évolution des capacités de calcul depuis les années 1990 rend les simplifications proposées en 1995 en vue d'économiser la consommation de ressources complètement caduques.

.1 Définition

Pour tout z dans \mathbb{C} , la fonction dilogarithme est définie par (Abramowitz and Stegun [1965]; Weisstein [2012]) :

$$Li_2(z) = \int_0^z \frac{\text{Log}(1-t)}{t} dt \quad (1)$$

Elle peut également être donnée sous forme de série par :

$$Li_2(z) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{z^k}{k^2} \quad (2)$$

Il est clair que cette série converge pour le disque fermé $\mathcal{C} = \{z \in \mathbb{C}, |z| \leq 1\}$. Elle converge même relativement rapidement puisqu'une somme jusqu'au seizième terme assure une erreur relative de l'ordre de 10^{-19} (Osácar et al. [1995]). Il en est tout autrement pour \mathbb{C}/\mathcal{C} et c'est ce qu'on propose de résoudre dans ce qui suit.

.2 Algorithme

La fonction dilogarithme vérifie un bon nombre d'identités remarquables dont une, très pratique pour notre problème d'intégration (Abramowitz and Stegun [1965]; Weisstein [2012]) :

$$Li_2\left(\frac{1}{z}\right) = -Li_2(z) - \frac{1}{2} \log^2(-z) - \frac{\pi^2}{6} \quad \text{si } z \neq 0 \quad (3)$$

Cette propriété ramène le dilogarithme d'un nombre complexe tel que $|z| > 1$ au dilogarithme d'un nombre du disque \mathcal{C} . Il suffit alors d'utiliser l'expression 2 ainsi que la fonction logarithme complexe d'une librairie standard (GSL par exemple) pour évaluer le dilogarithme de tout nombre complexe tel que $|z| > 1$.

Bibliographie

- M. Abramowitz and I.A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions : With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publ., 1965. [180](#)
- M. Galassi, J. Davies, J. Theiler, B. Gough, G. Jungman, P. Alken, M. Booth, and F. Ro. *GNU Scientific Library Reference Manual (3rd Revised edition)*. 2009. ISBN 0954612078. [179](#)
- E. S. Ginsberg and D. Zaborowski. The dilogarithm function of a real argument. *Collected Algorithms from CACM*, 490 :1–0, 1973. [179](#)
- C. Osácar, J. Palacián, and M. Palacios. Numerical evaluation of the dilogarithm of complex argument. *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, 62 :93–98, 1995. [179](#), [180](#)
- E. W. Weisstein. "dilogarithm." From Mathworld—A Wolfram Web Resource, nov 2012. URL <http://mathworld.wolfram.com/Dilogarithm.html>. [180](#)

Table des figures

2.1	Convection en écoulement de plaque plane.	9
2.2	Luminance d'un corps noir.	10
2.3	Facteurs de forme	14
2.4	Comparaison des coefficients d'échange radiatif, convectif et conductif.	15
2.5	Spectre électromagnétique et longueurs caractéristiques.	16
2.6	Polarisation elliptique d'une onde électromagnétique.	19
2.7	Cohérence temporelle : interféromètre de Michelson.	20
2.8	Cohérence spatiale : expérience des fentes de Young.	21
2.9	Absorption d'un photon par un système électronique à deux niveaux.	23
2.10	Système à une interface : réflexion et réfraction d'une onde EM.	27
2.11	Film mince : réflexion et transmission d'un champ EM.	31
2.12	Structure multi-couche : réflexion et transmission d'un champ EM.	32
2.13	Structure bi-couche : réflexion et transmission d'un champ EM.	32
2.14	Interface dans la méthode des matrices de transfert : décomposition du champ électrique.	33
2.15	Film mince dans la méthode des matrices de transfert : décomposition du champ électrique	34
2.16	Milieu semi-infini à surface plane avec une permittivité diélectrique ϵ et à une température T	39
2.17	Deux milieux plans semi-infinis séparés d'une distance nanométrique.	40
2.18	Coefficient de transfert radiatif en champ proche entre deux milieux semi-infinis.	41
3.1	Jonction $p-n$ soumise à un rayonnement incident.	49
3.2	Création de porteurs majoritaires et de la ZCE dans une jonction $p-n$	50
3.3	Système TPV.	52
3.4	Densité de flux reçue par une cellule de deux corps noirs à 1000 K et 5800 K.	53
3.5	Rendement et coût de différentes générations de cellules PV.	59
3.6	Meilleurs rendements de laboratoire de différentes technologies de cellules PV.	60
3.7	Cellule tandem triple jonction.	61
3.8	Système TPV avec un émetteur corps noir filtré.	63

3.9	Système TPV avec un émetteur sélectif.	64
3.10	Efficacité d'un système TPV avec un émetteur CN et un ES.	65
3.11	Puissance et efficacité d'un système TPV à émetteur sélectif.	66
3.12	Température et efficacité d'une cellule en silicium sous « rayonnement solaire ».	67
3.13	Température et efficacité d'une cellule PV en silicium avec un CN et un ES.	69
4.1	Différents facteurs de difficulté pour la minimisation d'une fonctionnelle.	80
4.2	Diagramme simplifié d'un algorithme génétique	82
4.3	Croisement et mutation en algorithmes génétiques.	84
4.4	Diagramme d'un algorithme d'optimisation par essaims de particules.	88
4.5	Équations du mouvement en OEP.	90
5.1	Réseau de surface sur un substrat de carbure de silicium	101
5.2	Cristaux photoniques 1D, 2D et 3D.	102
5.3	Miroir de Bragg avec un défaut	103
5.4	Structure multi-couche aléatoire.	104
5.5	Structure antireflet à trois couches.	104
5.6	Cavité Fabry-Pérot asymétrique.	105
5.7	Structures bi-couches.	108
5.8	Principe de fonctionnement de l'ES bi-couche.	109
5.9	Propriétés optiques d'un ES bi-couche.	110
5.10	Émissivité directionnelle de l'ES bi-couche de la figure 5.9.	111
5.11	Émissivité et réflectivité spectrale et directionnelle de l'ES de la figure 5.9.	112
5.12	Émissivité spectrale normale de différents ES bi-couches.	113
5.13	Structure d'un ES quatre-couche.	113
5.14	Émissivité et réflectivité spectrale et directionnelle d'un ES quatre-couche.	114
5.15	Émissivité cible et l'émissivité d'un ES quatre-couche.	115
5.16	Variation directionnelle de l'émissivité d'un ES quatre-couches.	116
5.17	Émittance hémisphérique d'un CN et d'un ES quatre-couche.	117
5.18	Sensibilité de l'émittance hémisphérique d'un ES bi-couche aux dimensions des couches.	119
5.19	Sensibilité de l'émittance hémisphérique d'un ES quatre-couche aux dimensions des couches.	120
5.20	Sensibilité de la permittivité diélectrique du silicium au dopage.	122
5.21	Sensibilité de l'émittance d'un ES quatre-couche aux propriétés optiques des couches.	123
5.22	Sensibilité de l'émittance d'un ES bi-couche à la température.	126
5.23	Sensibilité de l'émittance d'un ES quatre-couche à la température.	127
6.2	Coefficient d'échange radiatif en champ proche entre deux milieux semi-infinis en SiC.	137

6.3	Transfert maximal en champ proche entre deux semi-plans infinis : modèle de Drude	143
6.4	Flux radiatif en champ proche entre deux plans identiques : modèle de Drude avec $\epsilon_\infty = 1, 5$ et 10	145
6.5	Flux radiatif en champ proche entre deux plans identiques : modèle de Drude contre silicium dopé.	146
6.6	Flux radiatif en champ proche entre deux plans de matériaux distincts : modèle de Drude	147
6.7	Flux radiatif en champ proche entre deux plans identiques : modèle de Lorentz avec $\epsilon_\infty = 1$ et $\epsilon_\infty = 10$	148
6.8	Flux radiatif en champ proche entre deux plans identiques : modèle de Lorentz contre SiC	151
6.9	Flux radiatif en champ proche entre deux plans de matériaux distincts : modèle de Lorentz	152
1	Variation de la permittivité diélectrique du silicium dopé avec la température.	169
2	Variation de la permittivité diélectrique du SiC avec la température.	171
3	Variation de l'indice de réfraction du silicium avec la température.	173

Liste des tableaux

2.1	Quelques ordres de grandeur de conductivités thermiques.	8
2.2	Quelques ordres de grandeur de coefficient d'échange convectif.	9
2.3	Quelques ordres de grandeur de coefficient d'échange convectif.	13
3.1	Quelques ordres de grandeur de résistances thermiques de système PV.	57
3.2	Coefficient de température pour différents types de cellules PV.	58
5.1	Structure de différents ES bi-couches.	111
5.2	Caractérisation des pics d'émissivité d'un ES quatre-couche (fig. 5.16).	114
5.3	Structure de différents ES quatre-couche.	116
5.4	Caractérisation des pics d'émittance hémisphérique des ES quatre-couche (tab. 5.3).	117
5.5	Sensibilité des propriétés radiatives d'un ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) aux dimensions des couches.	119
5.6	Sensibilité des propriétés radiatives d'un ES quatre-couche (Tableau 5.3, $n^{\circ}1$) aux dimensions des couches.	121
5.8	Sensibilité des propriétés radiatives d'un ES bi-couche (Tableau 5.1, $n^{\circ}1$) aux propriétés optiques des matériaux.	123
5.9	Coefficient d'expansion thermique de différents semi-conducteurs.	124
5.10	Variation des dimensions de différents semi-conducteurs dues à l'expansion thermique.	125
5.11	Sensibilité des pics d'émittance d'ES bi-couche à la température.	126
5.12	Dépendance à la température de la mobilité et de la résistivité des trous du silicium dopé.	127
6.1	Ordres de grandeur des paramètres du modèle de Drude.	143
6.2	Maximum d'échange avec le modèle de Drude : matériaux identiques	144
6.3	Maximum d'échange avec le modèle de Lorentz : matériaux identiques	149
1	Pulsation plasma et coefficient d'amortissement de l'argent et de l'or.	165
2	Modèle de mobilité en fonction de la concentration des porteurs dans le silicium dopé.	167

3	Modèle de mobilité pour le silicium dopé à l'arsenic, au bore et au phosphore. . .	167
4	Modèle de dépendance à la température de la mobilité pour du silicium pur. . .	168
5	Paramètre de Grüneisen du SiC.	170
6	Dépendance à la température de la permittivité diélectrique du SiC.	171
7	Dépendance à la température de l'indice de réfraction du Germanium.	172
8	Dépendance à la température de l'indice de réfraction du silicium dopé.	173