

CALCUL DES CONSTANTES OPTIQUES ET INTERPRETATION

Le modèle d'Adachi nous a permis d'avoir les expressions de la fonction diélectrique et des constantes optiques en fonction de l'énergie avec la contribution de toutes les transitions dues aux effets excitoniques. Nous tenterons d'étudier dans ce chapitre leur évolution dans une gamme d'énergie qui couvre de l'ultra violet au proche infrarouge et interpréter l'effet des exciton sur le coefficient d'absorption du matériau.

Le calcul des constantes optiques se fera sur le modèle proposé par H. Yoshikawa et S.Adachi [10] à l'aide des paramètres relevés dans le tableau ci – dessous [10] :

Tableau III- 1: Paramètres utilisés dans le calcul des constantes optiques de l'oxyde de zinc

Table I. Parameters used in the calculation of optical constants for ZnO.

Parameter	Polarization	
	$E \perp c$	$E // c$
E_{0A} (eV)	3.450	3.450
E_{0B} (eV)	3.453	
E_{0C} (eV)	3.484	3.484
$G_{0\alpha}^{3D}$ (meV)	59	59
A_{0A} (eV ^{1.5})	12.45	0.10
A_{0B} (eV ^{1.5})	12.50	
A_{0C} (eV ^{1.5})	0.05	24.90
A_{0x}^{1A} (eV)	0.13	0.001
A_{0x}^{1B} (eV)	0.13	
A_{0x}^{1C} (eV)	0.001	0.259
A_{0x}^{CA} (eV ²)	0.165	0.001
A_{0x}^{CB} (eV ²)	0.164	
A_{0x}^{CC} (eV ²)	0.006	0.329
$\Gamma(E_{0A})$ (eV)	0.145	0.145
$\Gamma(E_{0B})$ (eV)	0.145	
$\Gamma(E_{0C})$ (eV)	0.145	0.145
$\varepsilon_{1\infty}$	2.09	2.18

Ces constantes ont été calculées en utilisant les données du tableau relatives à l'oxyde de zinc. Les calculs se limiteront dans le cas d'une polarisation perpendiculaire à l'axe optique c du cristal.

Les constantes optiques telles que l'indice de réfraction, le coefficient d'extinction, le coefficient d'absorption et le coefficient de réflexion sous incidence normale sont calculées à partir de la fonction diélectrique $\varepsilon(E)$

III.1. La fonction diélectrique

La fonction diélectrique est obtenue en faisant la somme de toutes les contributions et 2,09 qui est un terme additionnel, constant et pouvant générer d'autres couches de noyau d'exciton. On a :

$$\varepsilon(E) = \varepsilon_0(E) + \varepsilon_{0x}(E) + \varepsilon_{0xc}(E) + 2,09$$

La contribution des transitions au niveau du gap E_0 à la fonction diélectrique est donnée par la relation (II-28).

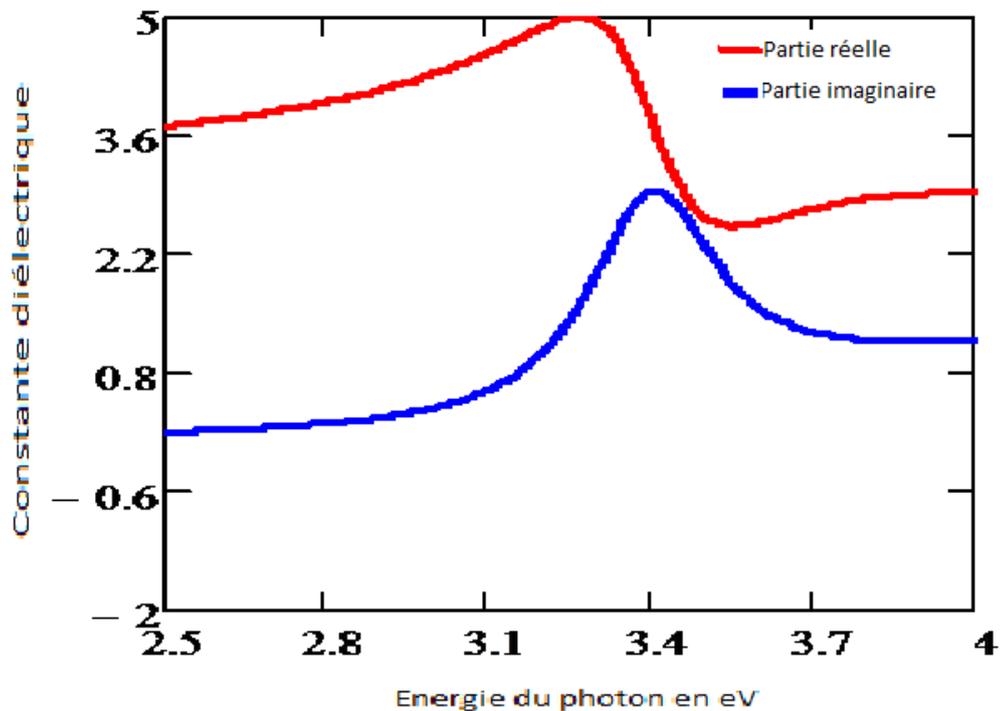


Figure III- 1: Spectre de contribution des transitions au niveau du gap E_0 à la fonction diélectrique de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie.

On observe sur cette figure une faible variation des parties réelle et imaginaire de la constante diélectrique pour des énergies inférieures à 3 eV où le matériau est transparent. Entre 3 et 3,6 eV on a la zone d'absorption représentée par un pic à 3,3 eV de la partie réelle et un pic à 3,4 eV de la partie imaginaire. Pour de des énergies supérieures à 3,4 eV les deux parties réelle et imaginaire diminuent et tendent vers une constante. On note que sur toute la gamme d'énergie une prépondérance de la partie réelle sur la partie imaginaire de la constante diélectrique ce qui signifie que les pertes sont négligeables. Par ailleurs, sur toute la gamme d'énergies utilisées la contribution des transitions au niveau du gap à la fonction diélectrique est très importante.

La contribution des interactions des excitons dans le voisinage de E_0 est donnée par relation(II-31).

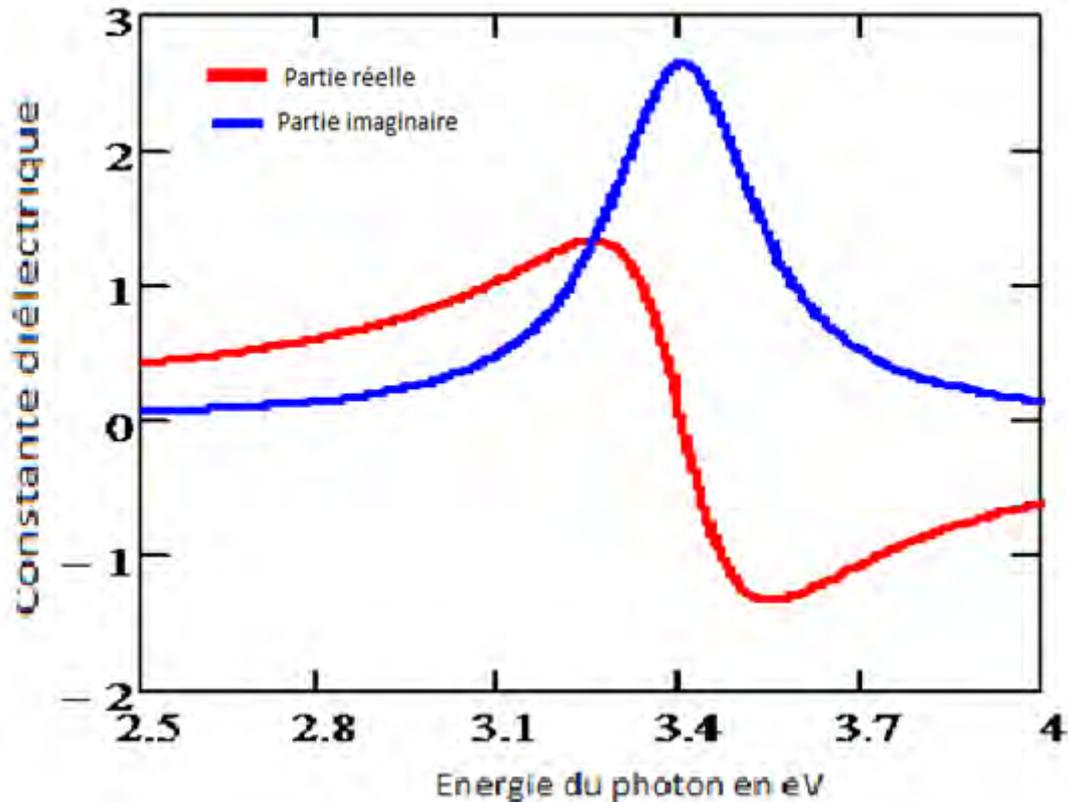


Figure III- 2: Spectre de contribution des interactions des excitons dans le voisinage de E_0 à la fonction diélectrique de l'oxyde de zinc.

Sur cette figure, on observe une zone de transparence dans la gamme des énergies inférieures à 3,1 eV où les parties réelle et imaginaire de la constante diélectrique augmentent faiblement et une prédominance de la partie réelle expliquant les faibles pertes dans le matériau. La zone d'absorption est marquée par le pic à 3,4 eV de la partie imaginaire. Après l'absorption le matériau redevient transparent avec une diminution des parties réelle et imaginaire accompagnée par des pertes considérables dans le matériau. La contribution des interactions des excitons à la fonction diélectrique est peu importante dans la gamme d'énergies inférieures au seuil d'absorption et faible vers les énergies supérieures au seuil.

La contribution des excitons du continuum à la fonction diélectrique est donnée par la relation (II-32).

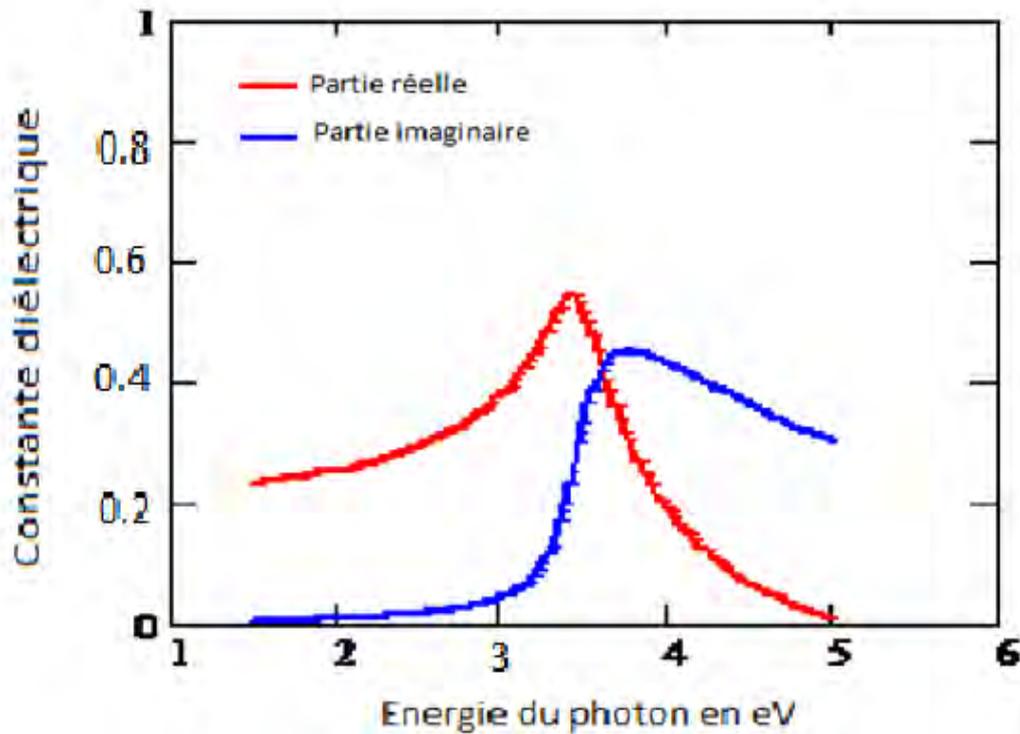


Figure III- 3: Spectre de contribution des excitons du continuum à la fonction diélectrique de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie.

Sur cette figure, la partie réelle de la fonction diélectrique prédomine dans la zone de transparence des énergies inférieures au seuil d'absorption mais cette prédominance est pour la partie imaginaire dans la zone de transparence des énergies supérieures au gap. Cette alternance s'explique par le fait que les pertes dans le matériau n'apparaissent qu'après l'absorption du matériau.

Toutefois, on peut dire que la contribution des excitons du continuum est peu importante sur toute l'étendue de la gamme d'énergies utilisée.

Les parties réelle et imaginaire de la fonction diélectrique de la somme des contributions ϵ_0 , ϵ_{0xc} et ϵ_{0x} sont illustrées sur la figure ci-dessous.

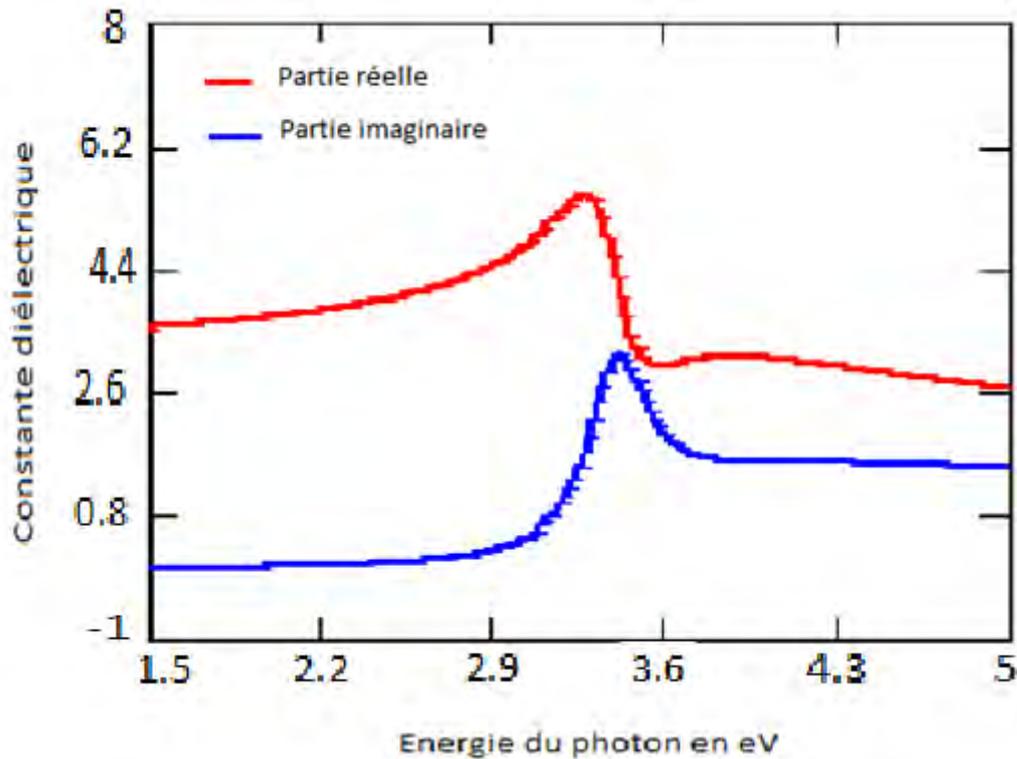


Figure III- 4: contribution totale à la fonction diélectrique en fonction de l'énergie

La figure III- 4 illustre l'évolution de la fonction diélectrique totale en fonction de l'énergie. Elle montre la prédominance de la partie réelle sur toute la largeur de la gamme d'énergie. Nous pouvons dire que l'effet des excitons amoindrit les pertes dans le matériau. Les deux zones de transparence sont séparées par la zone d'absorption qui va de 3 à 3,6 eV.

On remarque l'augmentation de la fonction diélectrique due aux différentes contributions des transitions excitoniques.

III.2. L'indice de réfraction et le coefficient d'extinction

L'indice de réfraction du matériau $n^*(E) = n(E) + ik(E)$ est une fonction complexe de l'indice de réfraction $n(E)$ et du coefficient d'extinction ou d'atténuation $k(E)$.

Ces constantes peuvent être calculées à partir des parties réelle $\varepsilon_1(E)$ et imaginaire $\varepsilon_2(E)$ de la fonction diélectrique.

$$\varepsilon_1(E) = n^2(E) - k^2(E)$$

$$\varepsilon_2(E) = 2n(E)k(E)$$

A partir des équations on tire l'indice de réfraction et le coefficient d'extinction.

L'indice de réfraction est donné par la relation ci-dessous :

$$n(E) = \left[\frac{(\varepsilon_1^2(E) + \varepsilon_2^2(E))^{1/2} + \varepsilon_1(E)}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III-33})$$

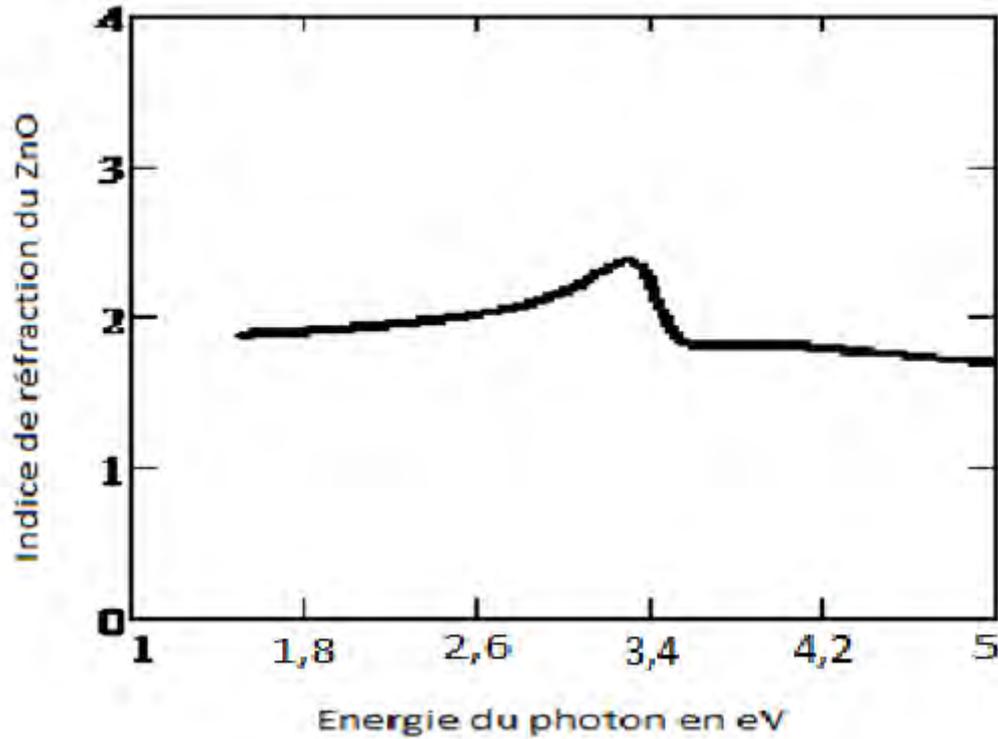


Figure III- 5 : L'indice de réfraction de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie

La figure III- 5 illustre la variation de l'indice de réfraction en fonction de l'énergie. Elle montre que l'indice de réfraction n'existe qu'à partir de la gamme des énergies supérieures à 1,6 eV. On note une faible augmentation de cet indice de 1,7 à 2,4 eV. Cette variation laisse apparaître un pic aux environs de 3,4 eV correspondant au gap de l'oxyde de zinc. Pour des énergies supérieures au gap, l'indice de réfraction diminue faiblement. Sur toute la largeur de la gamme d'énergies utilisée l'indice de réfraction de l'oxyde zinc est compris entre 1,8 et 2,2.

Le coefficient d'extinction de l'oxyde de zinc est donné par la relation ci-dessous :

$$k(E) = \left[\frac{(\varepsilon_1^2(E) + \varepsilon_2^2(E))^{1/2} - \varepsilon_1(E)}{2} \right]^{1/2} \quad (\text{III-34})$$

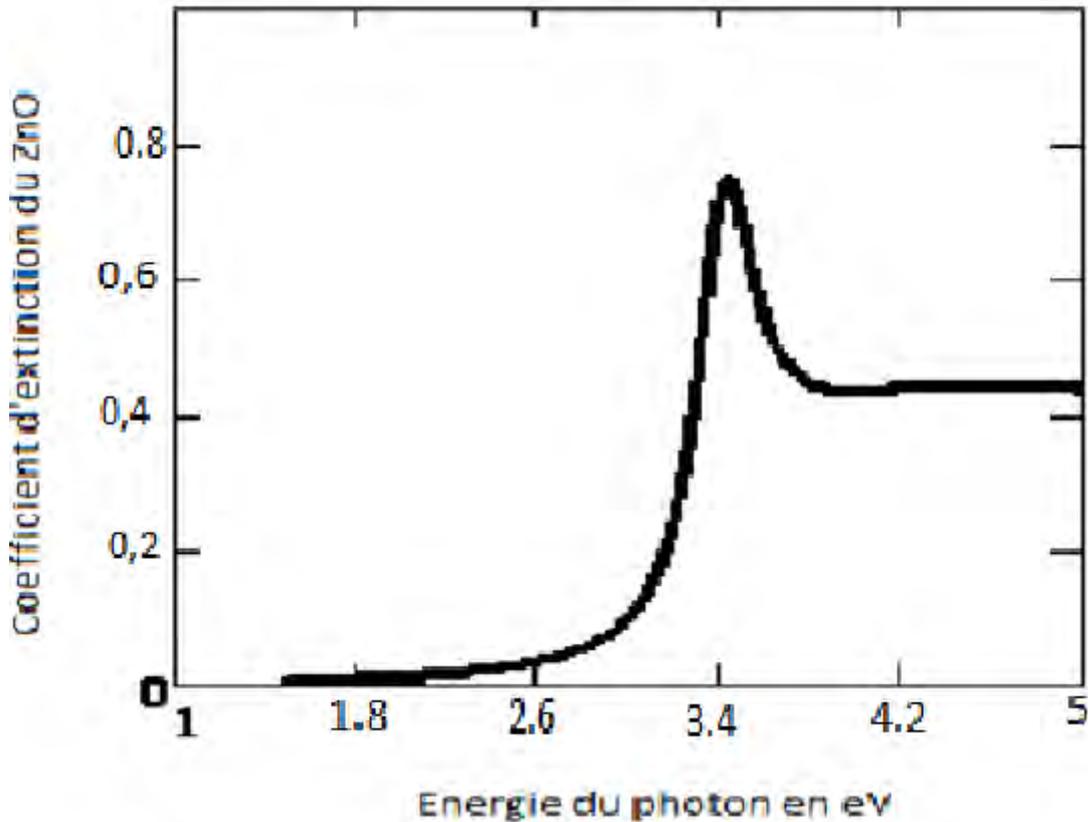


Figure III- 6: Coefficient d’extinction de l’oxyde de zinc en fonction de l’énergie.

La figure III- 6 montre l’évolution du coefficient d’extinction en fonction de l’énergie et on voit que dans la zone de transparence des énergies inférieures à 3 eV, ce coefficient est très faible ce qui prouve le rôle de fenêtre que joue l’oxyde de zinc dans les hétérojonctions. Ce coefficient connaît une augmentation dans la gamme des énergies supérieures au seuil car dans cette zone de transparence le matériau est productif c'est-à-dire qu’il y a création de porteurs dans le matériau entraînant des pertes de rayonnement électromagnétique. Entre les deux zones de transparence on observe un pic correspondant au seuil d’absorption de l’oxyde de zinc.

III.3. Le coefficient de réflexion :

Le coefficient de réflexion $R(E)$ se déduit facilement de l’indice de réfraction $n(E)$ et du coefficient d’extinction $k(E)$ à partir de la relation :

$$R(E) = \frac{[n(E) - 1]^2 + k^2(E)}{[n(E) + 1]^2 + k^2(E)} \quad \text{(III-35)}$$

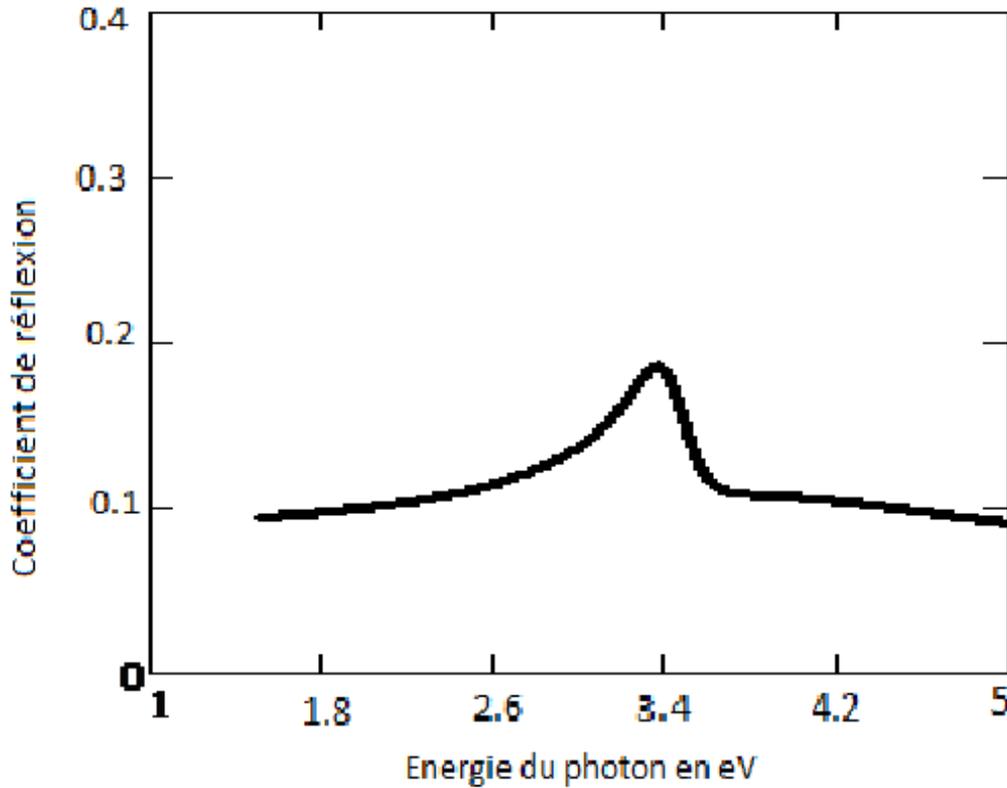


Figure III- 7: Coefficient de réflexion de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie du photon

La figure III- 7 montre la variation du coefficient de réflexion de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie du photon. Ce coefficient de réflexion varie entre 9% et 19% sur toute l'étendue de la gamme d'énergie. Il renseigne indirectement sur l'absorption du matériau car les deux varient inversement ; ce qui prouve l'intérêt que suscite l'oxyde de zinc dans le domaine photovoltaïque.

III.4. Le coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption de l'oxyde de zinc est le paramètre essentiel de notre étude et son expression est donnée par :

$$\alpha(E) = \frac{4\pi}{\lambda} k(E) \tag{III-36}$$

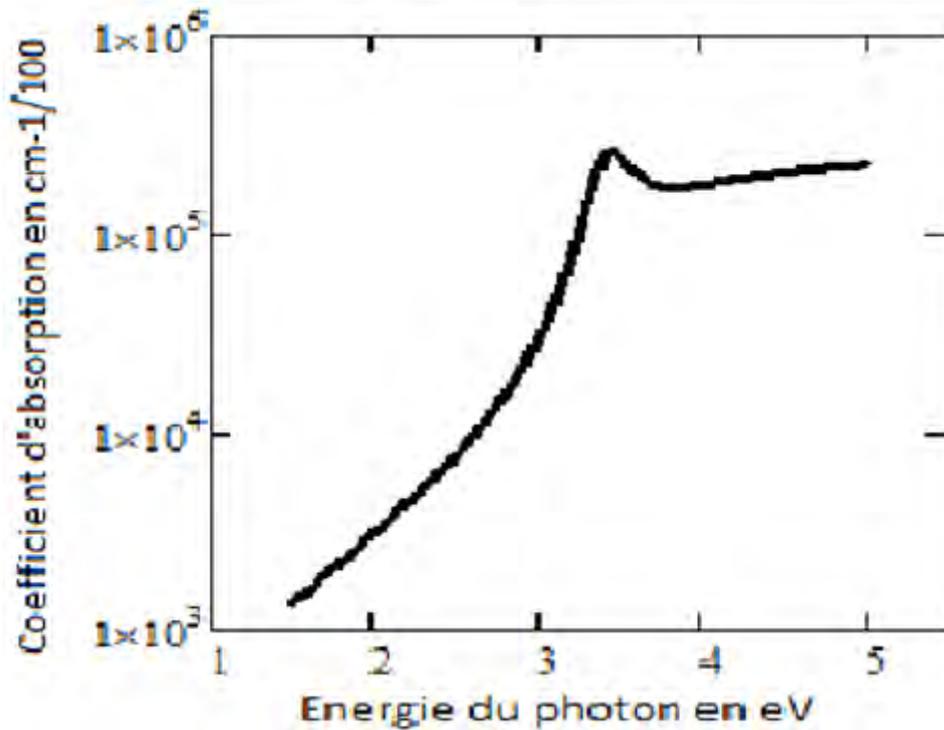


Figure III- 8: Coefficient d'absorption de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie

La figure III- 8 donne la représentation graphique du coefficient d'absorption de l'oxyde de zinc en fonction de l'énergie où le spectre montre l'évolution rapide de ce coefficient dans la zone de transparence des énergies inférieures au seuil. Dans la zone de transparence des énergies supérieures au seuil, on note une faible augmentation du coefficient d'absorption qui peut être justifiée par le fait que le matériau commence à créer des porteurs. L'oxyde de zinc possède un fort coefficient d'absorption de l'ordre de 10^5 à 5.10^7 cm^{-1} . Ce fort coefficient d'absorption confère au matériau une propriété de convertisseur de lumière solaire en énergie électrique.

Pour faire apparaître l'effet des excitons sur le pouvoir d'absorption de l'oxyde de zinc, le coefficient d'absorption sera calculé en ne considérant que les transitions électroniques fondamentales représentées par $\varepsilon_0(E)$; on obtient l'allure ci-dessous.

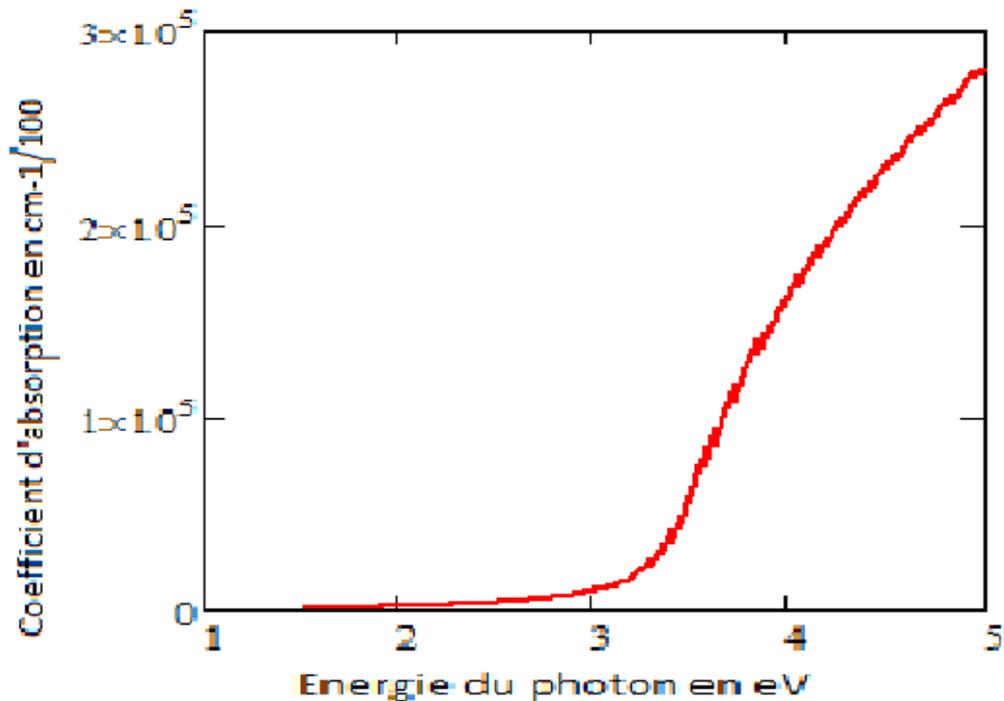


Figure III- 9: Coefficient d'absorption du ZnO en fonction de l'énergie obtenu sans l'effet des excitons

On observe que l'absorption est quasiment nulle dans la gamme des énergies inférieures au seuil et augmente progressivement à partir de ce seuil pour atteindre presque $2,6 \cdot 10^7 \text{ cm}^{-1}$. Le pic observé dans la figure 13 à $E_0 = 3,4 \text{ eV}$ est dû aux transitions des excitons au voisinage du seuil d'absorption du ZnO. Ces transitions sont aussi à l'origine de l'augmentation du coefficient d'absorption sur toute l'étendue de la gamme d'énergie.

Le modèle de la fonction diélectrique nous a permis de calculer les constantes optiques du matériau ZnO particulièrement son coefficient d'absorption et nous semble très approprié dans la mesure où il nous a permis de constater que les excitons ont une forte influence sur les phénomènes d'absorption dans le ZnO. De ce fait, nous pouvons dire que cette influence peut modifier les propriétés optiques du matériau.