

Modélisation 2D de la courbure de bandes de l'interface Platine/Silicium/Electrolyte : vers une meilleure compréhension des mécanismes de gravure chimique du Silicium assistée par des nanoparticules de Platine.

S. Le Gall¹, R. Lachaume¹, E. Torralba-Penalver², M. Halbwx³, V. Magnin³, J. Harari³, J-P. Vilcot³
C. Cachet-Vivier² et S. Bastide².

¹GeePs, UMR-CNRS 8507, Centralesupelec, Univ. Paris-Sud XI, UPMC, 11 rue Joliot Curie, Plateau de Moulon, Gif-sur-Yvette, France

²ICMPE, UMR-CNRS 7182, Univ. Paris-Est, 2-8 rue H. Dunant, 94320 Thiais, France

³IEMN, UMR-CNRS 8520, Univ. Lille 1, Villeneuve d'Ascq, France

La structuration de surface de Silicium est une étape essentielle à la réalisation de dispositifs optronique et photovoltaïque, notamment pour la texturisation des cellules solaires. La gravure chimique assistée par des métaux nobles (MACE*) est une méthode qui permet d'obtenir une dissolution ultra-localisée avec la réalisation de structures adaptées aux problématiques du photovoltaïque [1]. Elle est basée sur la mise en contact à l'échelle nanométrique de Si avec des métaux nobles nanostructurés (Au, Ag, Pt...), en présence de HF et d'un agent oxydant (H₂O₂) [2], le métal jouant le rôle d'un catalyseur.

Des études récentes ont montré l'intérêt de la nanostructuration par MACE avec des nanoparticules de Ag ou Cu pour la formation de surfaces très peu réfléchissantes (*black Silicon*) compatibles avec des rendements de plus de 18 % [3]. Il serait aussi intéressant de pouvoir graver avec cette technique des macrostructures pour avoir un meilleur piégeage de la lumière (e. g. pyramides inversées). Dans le cadre du projet collaboratif ANR PATTERN réunissant 3 partenaires académiques, l'ICMPE, l'IEMN et le GeePs [4], nous avons étudié l'attaque MACE du Silicium de type p (p-Si) avec des nanoparticules de Pt (NPs-Pt). Nous avons montré que ces NPs créent des macropores de forme conique à grand facteur de forme, très efficaces pour diminuer la réflectivité jusqu'à 3-4 % sur l'ensemble du spectre visible (contre ~10 % avec des pyramides inversées) [5].

Lors des expérimentations, il a été mis en évidence le caractère délocalisé de la gravure avec formation de Si poreux dans l'ensemble du substrat [5]. Jusqu'à présent, le niveau de compréhension du mécanisme MACE [2] était insuffisant et ne nous permettait pas d'expliquer cette délocalisation. Pour y remédier, nous avons donc modélisé en 2D la modulation de la courbure de bandes à l'interface NP-Pt/p-Si/Electrolyte à l'aide d'un logiciel TCAD. Ces simulations ont été réalisées dans des conditions les plus proches possibles de la gravure MACE, c'est-à-dire pour une NP enterrée à une profondeur de 1 µm dans le substrat et polarisée positivement afin de reproduire l'effet de l'agent oxydant H₂O₂. Nous montrons (i) une forte accumulation de trous sous la NP-Pt (contact ohmique) et (ii) une courbure de bande dans le p-Si en volume qui suit la polarisation appliquée. Ceci entraîne une diminution de la barrière de potentiel p-Si/Electrolyte se traduisant par un afflux important de trous vers l'électrolyte et formation de Si poreux à toutes les interfaces Si/Electrolyte même très distante des NPs-Pt [6].

* *Metal Assisted Chemical Etching*

[1] X. Li, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **16** (2012) 71–81.

[2] Z. Huang, N. Geyer, P. Werner, J. de Boor, U. Gösele, *Adv. Mater.* **23** (2011) 285–308.

[3] J. Oh, H.-C. Yuan, H.M. Branz, *Nat. Nanotechnol.* **7** (2012) 743–748.

[4] Défi « Stimuler le renouveau industriel, PATTERN ANR-14-CE07-005-03, 2015.

[5] S. Bastide *et al.*, Oral à conf. « Porous Semicond Sci & Tech », March 2016, Tarragone, Espagne

[6] E. Torralba-Penalver, S. Le Gall *et al.*, acceptée à *Applied Materials & Interfaces* (2016)