



Modélisation et optimisation du processus de purification du silicium photovoltaïque par solidification dirigée

(Coopération universitaire PHC-MAGHREB-2017)

Chef de projet coté tunisien : Professeur Slim Kaddeche

Laboratoire Matériaux, Mesures et Applications, LR-11-ES-25,
Institut National des Sciences Appliquées et de Technologie,
Centre Urbain Nord,
BP 676, 1080 Tunis, Tunisie.

Chef de projet côté marocain : Professeur Ahmed Mezrhab

Laboratoire de Mécanique et Énergétique,
Faculté des Sciences, Département de Physique,
Université Mohamed Premier, 6000 Oujda, Maroc.

Chef de projet côté algérien : Professeur Ahcene Bouabdallah

Laboratoire de Thermodynamique et Systèmes Énergétiques,
Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene,
BP 32 El Alia, Bab Ezzouar, 16111, Alger, Algérie.

Chef de projet côté français : M. Daniel Henry, Directeur de Recherche DR1 au CNRS

Laboratoire de Mécanique des Fluides et d'Acoustique,
École Centrale de Lyon,
36, Avenue Guy de Collongue, 69131 Ecully Cedex, France.

Contexte de la situation du projet

A l'heure actuelle, les principales sources d'énergie recensées dans le monde, et notamment au niveau du bassin méditerranéen, sont de nature fossile (pétrole, gaz, charbon) ou liées aux matériaux fissiles nucléaires. Tenant compte du fait que ces ressources ont tendance à se raréfier et qu'elles peuvent aussi être dangereuses pour la santé et l'environnement, il est indispensable de penser à leur substituer des sources d'énergie alternatives, plus propres et pérennes dans le cadre d'un développement durable.

En effet, ce projet s'inscrit dans le cadre des recommandations de la 21^{ème} Conférence Internationale sur le Climat (COP21, Paris-Décembre 2015) en vue de participer à la réduction des émissions de gaz à effet de serre et pour lutter contre le dérèglement climatique. En d'autres termes, il s'agit d'apporter notre contribution afin d'accélérer la transition vers des sociétés et des économies sobres en carbone, tout en rendant disponibles des sources d'énergie telles que les énergies renouvelables. En particulier, le recours à l'énergie solaire va contribuer prioritairement à faciliter la production énergétique à une échelle moyenne ou

petite et qui sera plus accessible localement aux populations de la rive sud de la Méditerranée et dans le Sahel.

Dans ce cadre, des équipes du pourtour ouest méditerranéen (France, Algérie, Tunisie, Maroc) se sont organisées de façon à fédérer leurs compétences et moyens dans les domaines de la convection et du contrôle des écoulements, la solidification et la ségrégation, processus physiques fondamentaux qui seront combinés adéquatement aux méthodes numériques et expérimentales dans le but d'améliorer la qualité d'élaboration du silicium photovoltaïque (Si PV) que l'on utilise dans la fabrication de panneaux solaires photovoltaïques.

Dès lors, on observe que la majorité des cellules photovoltaïques produites dans le monde sont réalisées à partir de fines tranches de lingots de silicium polycristallin lesquels sont obtenus par solidification dirigée. Le développement de l'industrie photovoltaïque induit alors des tensions sur le marché du silicium, rendant nécessaire l'utilisation d'un matériau de base de moins bonne pureté, appelé « silicium métallurgique ». Cependant des séquences de purification de ce matériau - qui sont des étapes de solidification préliminaires - s'avèrent indispensables avant la solidification finale permettant d'obtenir le lingot de silicium polycristallin prêt à l'usinage. Un des problèmes principaux limitant la qualité des échantillons obtenus est lié à la distribution non uniforme des impuretés dans le lingot. Ces variations relatives de concentration en impuretés, connues sous le nom de ségrégations, sont initiées dans le bain fondu liquide : elles sont inhérentes au processus de solidification (phénomène de rejet des impuretés à l'interface de croissance), mais sont aussi fortement influencées par les mouvements de convection, souvent complexes et de nature non-linéaire, qui y prennent naissance. Ces variations de concentration en impuretés sont ensuite piégées dans la phase solide tout au long du processus de solidification.

Afin d'approcher au mieux le phénomène de ségrégation, il est important de pouvoir, d'une part, bien caractériser les mouvements de convection naturelle présents dans le bain fondu et, d'autre part, de trouver des méthodes intéressantes permettant le contrôle des écoulements et leur pilotage en vue d'obtenir de meilleurs résultats. Parmi les meilleures manières permettant d'appréhender le phénomène de ségrégation, il s'agit de rendre la concentration en impuretés la plus uniforme possible sur tout le domaine de l'échantillon, en favorisant efficacement les effets de mélange au sein du bain fondu. Dans ce contexte, de nombreuses études se sont intéressées au contrôle de la convection par l'application d'une force extérieure, le plus souvent un champ magnétique. Celui-ci agit sur le bain fondu qui a la propriété d'être un bon conducteur électrique, induisant la création de forces électromagnétiques. On peut, par conséquent, réaliser le ralentissement des écoulements, de même que l'atténuation des oscillations qui peuvent s'y produire, à partir de l'application d'un champ statique. En outre, la génération d'écoulements peut également être obtenue par l'utilisation d'un champ magnétique variable, champ alternatif, glissant ou tournant. L'utilisation d'une technique mécanique de brassage est aussi envisagée dans les études actuellement menées, par exemple, à l'Institut National de l'Energie Solaire (INES). Par ailleurs, il y a lieu de noter que la modélisation numérique de ce type de problème est rendue particulièrement difficile du fait de l'existence de phénomènes non-linéaires dans l'écoulement, de la problématique du suivi du front mobile constituant l'interface solide/liquide, de la nature multi-échelles des processus (la plus petite échelle, celle de la couche limite solutale, est de l'ordre du micron, la plus grande, celle du creuset, voire du four, se mesure en dizaines de centimètres) qui mettent aussi en jeu de nombreux couplages. C'est dans ce contexte que nos équipes se proposent de rassembler leur expertise et d'apporter leur contribution sur la modélisation et le contrôle des écoulements de convection ainsi que la solidification en vue de l'amélioration de la production du silicium photovoltaïque.

Objectif scientifique et/ou technologique de la collaboration

Précédemment, nous avons donné un bref aperçu sur la production du silicium photovoltaïque qui passe par des étapes de solidification du matériau liquide dans lequel des mouvements de convection peuvent s'initier et se développer. Ces mouvements, de nature non-linéaire, sont en général complexes et peuvent influencer considérablement la répartition des différentes impuretés au sein du bain fondu et, in fine, au sein du matériau solide. Dans ces conditions, la caractérisation des écoulements en situation de croissance apparaît donc comme une étape décisive. Aussi, nous souhaitons mener une analyse approfondie de ces écoulements selon les différentes techniques de croissance dites de solidification dirigée où l'échantillon et le gradient thermique

qui provoque la solidification sont en déplacement relatif l'un par rapport à l'autre. On s'intéressera plus particulièrement aux techniques de croissance de type Bridgman horizontales (gradient thermique et déplacement horizontal) et Bridgman verticales (gradient thermique et déplacement vertical). Ces caractérisations d'écoulement se feront en majeure partie par voie de simulation numérique et la coopération escomptée permettra de créer une synergie dans l'utilisation et l'adaptation des codes de calcul employés par chacune des différentes équipes du projet. Une investigation particulière sera dédiée aux codes de type Boltzmann sur réseau qui sont développés à la fois par les équipes marocaine et française. L'autre voie d'investigation intéressante consiste à trouver des méthodes pour contrôler ces écoulements et les piloter en vue d'obtenir de meilleurs résultats au niveau de la ségrégation. La problématique du contrôle des écoulements a déjà permis d'effectuer des améliorations importantes dans les technologies où le mouvement particulier du fluide joue un rôle important. Nous proposons donc dans ce projet d'utiliser ces méthodes de contrôle dans la production du silicium photovoltaïque. On suggère donc d'approfondir ce qui peut être obtenu par l'utilisation de champs magnétiques. Les équipes française, tunisienne et algérienne ont déjà travaillé dans le domaine de la magnéto-hydrodynamique et leur collaboration dans cette spécialité devrait conduire à des enrichissements réciproques et des avancées nouvelles. Nous voulons aussi développer une nouvelle technique de mélange basée sur l'utilisation d'ultrasons. En effet, une source ultrasonique est capable de générer des écoulements quasi stationnaires dans le bain fondu, connus sous le nom d'« acoustic-streaming ». Ces écoulements d'acoustic streaming se développent dans un fluide en raison de la présence des ondes acoustiques. Ces écoulements peuvent apparaître le long des parois solides dans les couches limites acoustiques et l'on parle alors de Schlichting streaming ou de Rayleigh streaming. Ils peuvent aussi se produire au sein du liquide et correspondent à de l'Eckart streaming. Dans l'optique d'une utilisation pour provoquer un mélange efficace, nous prévoyons d'utiliser l'Eckart streaming qui semble plus adapté. Celui-ci est le résultat de la dissipation d'une onde acoustique progressive au sein d'un fluide. Cet écoulement est créé au sein du faisceau acoustique et orienté dans la direction de propagation de l'onde. Cet effet peut formellement être interprété de façon analogue aux tensions de Reynolds dans un écoulement turbulent, les fluctuations de la vitesse turbulente étant remplacées par les variations de la vitesse acoustique. Cette technique permet d'établir une modélisation de ce phénomène en utilisant un calcul incompressible dans lequel l'effet de l'onde acoustique est pris en compte à travers une force de volume déduite de ces « tensions de Reynolds ». Quelques études ont caractérisé l'Eckart streaming dans différentes configurations utilisant l'eau, mais très peu de choses ont été faites sur les écoulements générés dans les bains fondus correspondant aux métaux liquides. C'est l'équipe française, qui a bien avancé ces dernières années sur cette problématique de l'acoustic streaming, qui mènera les activités dans ce domaine et familiarisera les autres équipes (Moudjed et al. 2010a). Enfin, l'impact sur la ségrégation des écoulements obtenus au sein des bains fondus n'est pas bien connu et doit être examiné à la

lumière de la possibilité d'utiliser ces moyens de contrôle dans les procédés de solidification. Cet effet sur la ségrégation peut être analysé numériquement, mais l'existence de couches limites très fines près de l'interface de croissance rend cette approche très difficile. Garandet et al. (2012) a récemment proposé un modèle obtenu par analyse en ordres de grandeur qui permet de relier la ségrégation au niveau de l'interface solide/liquide aux contraintes de cisaillement existant à cette interface. Ce modèle a déjà été utilisé dans le cadre d'une collaboration entre les équipes française et tunisienne pour obtenir, à partir de contraintes de cisaillement déterminées numériquement, la ségrégation moyenne à l'interface dans différentes situations de croissance Bridgman horizontale, conduisant à des résultats qui sont en bon accord avec des travaux expérimentaux et de simulation (Kaddeche et al. 2015). Ce modèle pourra servir à faciliter les calculs de simulation, mais pourra aussi être utilisé expérimentalement lors des expériences modèles en eau pour déduire la ségrégation à partir de mesures électrochimiques du transfert de masse à la paroi (polarographie), ce qui contribuera à la validation des modèles numériques. Le développement de ces mesures électrochimiques sera mené en collaboration entre l'équipe française et l'équipe algérienne qui a déjà réalisé de telles mesures dans un autre contexte. Comme nous venons de le voir, pour atteindre les objectifs envisagés, nous avons besoin de l'implication et de la collaboration des différentes équipes qui apportent chacune une contribution particulière. Cette collaboration nécessite des échanges entre les différentes équipes, en tout premier lieu pour assurer le suivi des étudiants en codirection ou cotutelle de thèse entre deux des équipes. Cela concerne en particulier A. Medelfef et I. Hamzaoui en thèse en Algérie dans le cadre d'une collaboration avec l'équipe française.