RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

FACULTÉ DES SCIENCES APPLIQUEES

DÉPARTEMENT DE GENIE ELECTRIQUE



MEMOIRE DE FIN D'ETUDES

Pour l'obtention du diplôme de Master

Domaine : Sciences et Technologie

Filière : Electrotechnique

Spécialité : Réseaux Electriques

THÈME

Etude et simulation de processus de pulvérisation des matériaux utilisée dans les cellules photovoltaïques modernes

Préparé par : Amieur Mohamed Riad Hadj Ramdan Nour Islam

Devant le Jury :

<u>Nom et Prénom</u>	Grade	<u>Qualité</u>
Mr. A. MOKHTARI	MAA	Président
Mr. I. BEKKI	MAA	Examinateur
Mr. M. OMARI	МСВ	Examinateur
Mr. A. BOUAZZA	MCA	Encadreur

PROMOTION 2022 / 2023



Voici venu le temps de mettre un point final à ce manuscrit et à ces années de travaux. Nous remercions du plus profond de notre cœur Allah le tout puissant de nous avoir donné le courage et la volonté d'achever ce travail.

Nous souhaitons exprimer notre sincère gratitude envers notre encadrant, M.

Bouazza Abdelkader, pour sa confiance et pour ses encouragements constants tout au long de notre étude

On remercie vivement les membres de jury qui nous honore en jugeant notre mémoire Master.

Nous n'oublierons pas de remercier nos enseignants du Département de Génie Electrique, pour les efforts qu'ils ont fournis durant notre cursus afin de nous amener jusqu'au bout de la formation.

Enfin, dans ces dernières lignes un grands merci à nos familles respectives, pour les conseils et les encouragements qu'ils nous ont toujours prodigués ainsi que pour leur soutien tant moral que financier.

Merci encore à tous nos amis qui nous ont aidés. Nous profitants de l'occasion pour remercier tous ceux qui ont collaboré de près ou de loin à la réalisation de ce mémoire.

Table des matières

Introduction générale :	02
CHAPITRE 1	03
1.1 Introduction	04
1.2 Historique	04
1.3 La conversion photovoltaïque	05
1.3.1 Détention	05
1.3.2 Effetphotovoltaïque	05
1.3.3 Principe de la conversion photovoltaïque	05
1.3.4 Structure d'une cellule photovoltaïque	06
1.3.5 Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque	07
1.4 Les types de cellules PV à base de silicium	09
1.4.1 Cellules Monocristallines	09
1.4.2 Cellules Polycristallines	10
1.5 utilisations possibles d'un panneau solaire	11
1.5.1 L'autoconsommation solaire	11
1.5.2 Les fermes solaires	11
1.6 Cellule solaire à couche mince	11
1.6.1Applications des cellules solaires à couches minces	13
1.6.1.1 Domaines d'utilisation	13
1.6.2 Efficacité de conversion des modules solaire à couche mince	13
1.7 Conclusion	13
CHAPTIRE 2	14
2.1 Introduction	15
2.2 La nouvelle technologie solaire	15
2.2.1 Les panneaux solaires bi-faciaux	15
2.2.1.1 Composition des panneaux solaires bi-faciaux	15
2.2.2 Les panneaux solaires en pérovskite	16
2.2.3 Les panneaux solaires organiques	16
2.2.4 Les panneaux solaires hybrides	17
2.2.5 Les tuiles solaires	17
2.3 Alternative prometteuse pour l'énergie solaire	18
2.4.1 Les Couches minces dans la technologie photovoltaïque	18

2.5.1 Notion de couche mince	20
2.5.2 Les propriétés des couches minces	20
2.5.3 Méthodes générales de dépôt de couches minces	22
2.6 Les procédé du dépôt des couches minces	23
2.7 Dépôts chimiques en phase vapeur (CVD)	24
2.7.1 Les méthodes en phase gazeuse :	24
2.8 Choix de PVD (Physical VaporDeposition)	25
2.8.1Technique PVD	25
2.9 La pulvérisation catholique	26
2.10 Principe de fonctionnement	28
2.11 Les différentes techniques de la pulvérisation	28
2.11.1 Procédé diode	28
2.11.1.1 Procédé diode DC	28
2.11.1.2 Procédé diode Rf	29
2.11.2 Procédé Triode	30
2.11.3 Procédé Magnétron	31
2.12 Régime de pulvérisation	32
2.13 Pulvérisation de matériaux complexe	33
2.13.1. Pulvérisation d'alliage ou de composé	33
2.14. L'interaction ion-surface	33
2.15 Rendement de pulvérisation	34
2.16 Conclusion	35
CHAPITRE 3	36
Résultats et Discussions	36
3.1 Introduction	37
3.2Matériaux modernes utilisés dans les cellules PV 3	37
3.2.1 Le CIGS (cuivre-indium-galium-sélénium)	37
3.2.1.1 Propriétés du CIGS	37
3.3.2 Notions de gap graduel du CIGS4	10
3.4 Sulfure de Cadmium (CdS)	41
3.4.1 Choix du CdS	41
3.5 Le Pérovskite	41
3.5.1 Stabilité et durabilité	42
3.5.2 Un panneau photovoltaïque à faible coût	43
3.6 Description de SRIM	44
3.7 Mode d'emploi du SRIM	15

3.8 Caractéristique du gaz d'argon utilisé en simulation	46
3.9 La méthode de Monte Carlo	46
3.9.1Simulation à base de la méthode de monte Carlo	47
3.9.2 interprétations des résultats de la simulation Monte Carlo	47
3.9.2.1 Les données d'entrée	48
3.9.2.2 Les résultats	48
3.9.2.3 La distribution des résultats	49
3.9.2.4 Calcul du rendement de pulvérisation avec la méthode de Monte Carlo	51
.9.2.5. Simulation de transport de particules pulvérisées	54
3 .10 Conclusion	61
Conclusion Générale	62

Liste des figures et tableaux

Figure 1 Schéma de principe de la conversion photoélectrique	06
Figure 2 Structure d'une cellule photovoltaïque	06
Figure 3 Cellule, Panneau, Champ photovoltaïque	07
Figure 4 Structure d'une cellule photovoltaïque utilisant le silicium comme matériau PV	
(présence d'une jonction PN).	
Figure 5 Caractéristique Icell =f(Vcell) d'une cellule photovoltaïque	09
defined.	
Figure 6 Photo d'une cellule Monocristalline	10
Figure 7 Photo d'une cellule polycristallin	10
Figure 8 cellule solaire à couche mince	12
Figure 9 un panneau solaire bi-faciaux	17
Figure 10 Diagramme des étapes du procédé de fabrication de couches minces	22
Figure 11 Méthodes générales de dépôt de couches minces sous vide	24
Figure 12 Le procédé du dépôt des couches minces	25
Figure 13 les différents types de réacteurs d'épitaxies en phase gazeuse	26
Figure 14 schéma du bâti de pulvérisation cathodique en DC	
Figure 15 Schéma de principe de la pulvérisation cathodique (cible face au substrat)	29
Figure 16 Enceinte de pulvérisation diode DC.	30
Figure 17 Enceinte de pulvérisation diode Rf	31
Figure 18 Système de pulvérisation cathodique Triode	31
Figure 19 Trajectoires électroniques	33
Figure 20 Magnétron plan circulaire conventionne	33
Figure 21 Principaux mécanismes issus de l'interaction d'union et d'une	
surface	34
Figure 22 (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende (ZnS), (b) Structure de la	maille
élémentaire de la chalcopyrite du CuInSe	38
Figure 23 Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du Si, du CdTe	e et du
CIGS. Structure chalcopyrite d'après [26]	39
Figure 24 Evolution des valeurs de paramètres de maille a et c, et du rapport c/a en fonction	on du
rapport Ga/(Ga+In) pour Cu(In1-xGax)Se2	40
Figure 25 : Diagramme représentant l'évolution de la largeur de la bande interdite Eg en	
fonction du paramètre de maille a pour l'alliage Quincke Cu(In1-xGax)(Se1-ySy)	41
Figure 26 La structure cristalline de la pérovskite CH3NH3PbI3	43
Figure 27 Illustration d'un module moderne de cellule solaire haute performance pérovskite	44

Figure 28 Schéma représentant les rubriques de SRIM	. 45
Figure 29 Mode d'emploi du SRIM	. 46
Figure 30 Rendement de pulvérisation en fonction d'énergie pour les cellule photovoltaïques du matériaux Cds, CIGS, et Pérovskite bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d)	
Xénon	. 52
Figure 31 Rendement de pulvérisation en fonction d'angle pour les cellules photovoltaïques du matériaux Cds, CIGS, et Pérovskite bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon	
	54
Figure 32 Figure 3.13 : Schéma de la cascade de collision en fonction de l'angle d'incidence	
(a)Incidence normale ; (b) incidence oblique	56
Figure 33 Rendement de pulvérisation en fonction d'énergie pour les cellules photovoltaïques du	
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon	57
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon Figure 34 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :a) Cuivre (Cu2), b) Argent(S), atteint les niveaux du substrat et est bombardée par un faisceau d'ions.Ar Figure 35 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :	57 60 60
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon Figure 34 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :a) Cuivre (Cu2), b) Argent(S), atteint les niveaux du substrat et est bombardée par un faisceau d'ions Ar Figure 35 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 36 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :	57 60 . 60 . 61
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon Figure 34 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :a) Cuivre (Cu2), b) Argent(S), atteint les niveaux du substrat et est bombardée par un faisceau d'ions.Ar Figure 35 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 36 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 37 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :	57 60 60 . 61
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon Figure 34 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :a) Cuivre (Cu2), b) Argent(S), atteint les niveaux du substrat et est bombardée par un faisceau d'ions Ar Figure 35 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 36 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 37 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :	57 60 60 . 61 . 61
matériaux Cds bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon Figure 34 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de :a) Cuivre (Cu2), b) Argent(S), atteint les niveaux du substrat et est bombardée par un faisceau d'ions Ar Figure 35 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 36 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Figure 37 En fonction de la température dans la chambre, la distribution d'énergie de : Liste des tableaux Tableau 3.1: Énergies, angles d'incidences optimales obtenus par SRIM	57 60 60 . 61 . 61 . 54

liste d'abréviations

abréviation	signification
Ar	Argon
CVD	chemical vapor deposition
Cds	sulfure de cuivre
CIGS	cuivre-induim-galuim-selenuim
Pérovskite	CH3-NH3-Pbl
DC	Direct current
К	Kelvin
Kev	Kiloelctronvolt
PVD	Physical vapor deposition
Ра	Pascal
RF	Radiofrequency
SRIM	Stopping and range of ions in matter
SIMTRA	Simulation of Metal Transfer
Ne	Néon
Не	Héluim
Хе	Xéon

Introduction générale

Introduction générale

Les cellules photovoltaïques modernes jouent un rôle crucial dans la transition vers une énergie propre et renouvelable. Ces dispositifs convertissent directement l'énergie solaire en électricité en utilisant des matériaux semi-conducteurs spécifiques. Parmi les différentes techniques de fabrication des cellules photovoltaïques, la pulvérisation de matériaux constitue un processus essentiel pour déposer des couches minces de semi-conducteurs sur des substrats.

L'objectif de ce projet de fin d'études est d'étudier et de simuler les processus de pulvérisation des matériaux utilisés dans les cellules photovoltaïques modernes. Nous examinerons en détail les techniques de pulvérisation, telles que la pulvérisation cathodique , pour déposer des couches

minces de matériaux tels que le sulfure de cuivre (CdS), le séléniure de cuivre,

d'indium et de gallium (CIGS) ainsi que les matériaux à base de pérovskite.

Dans cette étude, nous nous pencherons sur la stabilité atomique des matériaux déposés en couches minces et son impact sur l'efficacité et la performance globale des cellules photovoltaïgues.

Nous examinerons également les propriétés optoélectroniques des matériaux pulvérisés,

telles que la conductivité électrique, l'absorption de la lumière et le transfert de charge, afin de comprendre leur influence sur les performances photovoltaïques.

Cette étude nous permettra de mieux comprendre les mécanismes sous-jacents du

processus de pulvérisation des matériaux utilisés dans les cellules photovoltaïques modernes.

Les résultats de cette recherche contribueront à l'amélioration et à l'optimisation de ces processus

de fabrication, ouvrant ainsi la voie à des cellules photovoltaïques plus efficaces et abordables,

favorisant ainsi le développement de sources d'énergie renouvelable.

CHAPITRE 1

Généralités sur les panneaux photovoltaïques

1.1 Introduction

Ce chapitre présente l'énergie solaire photovoltaïque, une technologie qui convertit la lumière solaire en électricité utilisable. Elle met en évidence les avantages écologiques et économiques de cette source d'énergie propre et renouvelable. Le chapitre explore le fonctionnement des panneaux photovoltaïques, leurs différentes applications et leur impact environnemental positif. Il examine également les avancées technologiques récentes et les perspectives futures de l'énergie solaire photovoltaïque. Ainsi, ce chapitre fournit une base solide pour comprendre les panneaux photovoltaïques et leur rôle clé dans la transition vers un avenir énergétique durable

1.2 Historique

En 1839, le scientifique français Edmond Becquerel a été le premier à découvrir l'effet photoélectrique, constatant que certains matériaux produisaient un faible courant sous l'effet de la lumière. Albert Einstein a ensuite découvert que l'énergie de la lumière était portée par des particules appelées photons. Ce n'est qu'à partir de 1954, dans les laboratoires de Bell Téléphone dans le New Jersey, qu'a été développée la première cellule solaire présentant un rendement raisonnable.

Depuis la seconde moitié du siècle précédent, le processus de purification de monocristaux de silicium a été réalisé. En 1956, Loferski a publié différentes tables de conversion de rendement photovoltaïque pour tous les matériaux semi-conducteurs. Au début des années 70, des rendements de 20 % ont été obtenus en laboratoire en travaillant sur des cellules en monocristal d'arsenic de gallium (GaAs).

Toutefois, ces rendements sont sensiblement inférieurs lorsqu'il s'agit de produire ces cellules à l'échelle industrielle. Les premières applications pratiques de l'électricité photovoltaïque ont été réalisées dans les véhicules spatiaux, permettant l'alimentation des équipements de commande, de mesure et de transmission de données. Ensuite, la production industrielle de premiers panneaux solaires destinés à des applications terrestres domestiques a débuté. Bien qu'au début des années 80, ces panneaux ne soient pas suffisamment compétitifs pour une production à grande échelle, ils ont néanmoins permis l'électrification de logements isolés.

Les recherches visant à développer des produits plus efficaces et économiques se poursuivent à un bon rythme, même s'il existe peu d'entreprises au niveau mondial ayant la capacité de supporter les coûts élevés de recherche [1].

1.3 La conversion photovoltaïque

1.3.1 Détention

La conversion photovoltaïque est le processus par lequel l'énergie du rayonnement solaire est directement transformée en énergie électrique continue. La cellule solaire constitue l'élément fondamental de cette conversion [2].

1.3.2 Effet photovoltaïque

Lorsque la cellule solaire est exposée à la lumière, une partie de l'énergie lumineuse est directement convertie en électricité. Cet effet est appelé effet photovoltaïque. Il s'agit d'un phénomène physique propre à certains matériaux appelés "semi-conducteurs". Dans le monde, 90 % des panneaux solaires sont produits à partir de silicium cristallin [3].

1.3.3 Principe de la conversion photovoltaïque

L'énergie solaire photovoltaïque utilise les rayonnements solaires et les transforme en électricité. Les photons de lumière solaire transmettent leur énergie aux électrons présents dans un semi-conducteur, qui constitue une cellule photovoltaïque. Cette transformation, appelée effet photovoltaïque, se fait sans action mécanique, sans bruit, sans pollution et sans combustible. L'effet photovoltaïque a été découvert par le physicien français A. Becquerel en 1839. Le terme "photovoltaïque" vient du mot "photo" (du grec "phos" signifiant "lumière") et du mot "volt" (en référence au physicien Alessandro Volta, qui a contribué de manière significative à la recherche sur l'électricité) [4].



Figure 1.1 Schéma de principe de la conversion photoélectrique.[5]

1.3.4 Structure d'une cellule photovoltaïque

Les cellules photovoltaïques permettent la conversion directe de l'énergie solaire en énergie électrique. Elles sont capables de créer une différence de potentiel en orientant les électrons. En présence de lumière, les photons pénètrent dans la couche supérieure de la cellule, qui est composée de silicium. Cette couche contient une quantité importante d'électrons libres, créant une charge négative. De même, la couche inférieure, également composée de silicium, contient une quantité d'électrons libres, créant une charge négative.

Lorsque les deux couches entrent en contact, la cellule génère un champ électrique. Cet effet photovoltaïque est dû à la structure des deux couches : une couche conductrice de type p avec un excès de porteurs de charge positifs, et une couche conductrice de type n avec un excès de porteurs de charge négatifs. Ce déséquilibre et la présence de lumière entraînent la formation d'un champ électrique interne [6].



Figure 1.2 Structure d'une cellule photovoltaïque

Avec :

- 1 : Electrode négative
- 2 : Electrode positive
- 3 : silicium dopé N
- 4 : silicium dopé P
- 5 : couche limite

Un panneau solaire, également appelé module photovoltaïque, est formé de plusieurs cellules solaires connectées les unes aux autres. Ces cellules solaires convertissent directement l'énergie solaire en énergie électrique. Lorsqu'un groupe de modules photovoltaïques est regroupé au sein d'une centrale solaire, on parle alors d'un champ photovoltaïque [5].



Figure 1.3 Cellule, Panneau, Champ photovoltaïque [5]

1.3.5 Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque

Le fonctionnement de la cellule photovoltaïque repose sur le phénomène physique connu sous le nom d'effet photovoltaïque, qui se produit lorsque la surface de la cellule est exposée à la lumière. Cet effet permet de générer une force électromotrice, également appelée tension, à travers la cellule. La valeur de cette tension peut varier entre 0.3 V et 0.7 V, en fonction du matériau utilisé, de sa configuration, de la température de la cellule et du

vieillissement de celle-ci. La Figure (1.4) illustre une cellule photovoltaïque typique, détaillant sa structure [1].



Figure 1.4 Structure d'une cellule photovoltaïque utilisant le silicium comme matériau PV (présence d'une jonction PN).

La cellule photovoltaïque est construite à partir de deux couches de silicium, l'une dopée de manière P (avec du bore) et l'autre dopée de manière N (avec du phosphore), formant ainsi une jonction PN avec une barrière de potentiel. Lorsque les photons sont absorbés par le matériau semi-conducteur, ils transfèrent leur énergie aux atomes de la jonction PN, libérant ainsi des électrons (charges N) et des trous (charges P). Cela crée une différence de potentiel entre les deux couches. Cette différence de potentiel peut être mesurée entre les bornes positives et négatives de la cellule.

En connectant une charge externe, il est possible de collecter les porteurs de charge générés. La tension maximale de la cellule est d'environ 0,6 V lorsque le courant est nul. Cette tension est appelée tension de circuit ouvert (Vco). Le courant maximal se produit lorsque les bornes de la cellule sont court-circuitées, et il est appelé courant de court-circuit (Icc). Le courant de court-circuit dépend fortement du niveau d'éclairement.

8



Figure 1.5 Caractéristique Icell =f(Vcell) d'une cellule photovoltaïque.

1.4 Les types de cellules PV à base de silicium

Le silicium est largement utilisé dans la fabrication des cellules photovoltaïques en raison de plusieurs avantages :

- \rightarrow Il est moins coûteux que d'autres semi-conducteurs.
- \rightarrow Il résiste aux hautes températures.
- \rightarrow Il est largement utilisé dans de nombreux domaines de l'électronique.

1.4.1 Cellules Monocristallines

Les cellules monocristallines sont constituées d'un seul cristal, ce qui leur confère une structure atomique parfaitement ordonnée. Elles présentent un rendement légèrement supérieur aux cellules en silicium polycristallin (environ 15-20 %). Les fabricants de ce type de cellules offrent des garanties dépassant les 20 ans pour une production d'électricité équivalente à 80 % de la puissance nominale.



Figure 1.6 Photo d'une cellule Monocristalline

1.4.2 Cellules Polycristallines

Les cellules polycristallines sont fabriquées à partir de silicium polycristallin, qui est constitué de multiples petits cristaux présentant différentes tailles et formes. Cette technologie est la plus répandue dans l'industrie photovoltaïque.

Les cellules polycristallines offrent un rendement moyen d'environ 15 %, ce qui les place dans une position solide sur le marché mondial. Elles sont souvent accompagnées de garanties allant jusqu'à 20 ans, ce qui témoigne de leur durabilité et de leur performance à long terme. En termes de rapport qualité/prix, les cellules polycristallines offrent une bonne valeur et sont un choix populaire pour de nombreuses installations solaires.





Figure 1.7 Photo d'une cellule polycristallin

1.5 utilisations possibles d'un panneau solaire

Les utilisations d'un panneau solaire sont multiples. On utilise les panneaux solaires en autoconsommation dans le secteur résidentiel. Les panneaux photovoltaïques servent à produire et revendre l'électricité (installations de moyennes et grandes puissances). Ils alimentent également les petits équipements nomades et appareils de sites isolés.

1.5.1L'autoconsommation solaire

L'autoconsommation en production d'énergie solaire consiste à produire l'énergie et tout consommer. Cette utilisation de panneau solaire peut être pour le fonctionnement d'une installation de chauffage ou d'une installation d'équipement de maison. L'Ademe distingue :

- Système de production d'énergie raccordé au réseau ;
- Système de production d'énergie non raccordé.

Le premier réinjecte une partie de sa production d'électricité dans le réseau. Le second système solaire utilise entièrement l'énergie produite. C'est à cette utilisation de panneau solaire de production d'énergie que nous nous intéressons dans les deux prochains paragraphes.[6]

1.5.2 Les fermes solaires

Face à l'installation domestique de maison de faible puissance, on trouve une utilisation de panneau solaire plus conséquente. Ces panneaux se raccordent souvent au réseau de distribution d'électricité. L'objectif est de revendre la production d'électricité, avec ou sans autoconsommation. Il s'agit la plupart du temps d'une installation de panneaux solaires sur toiture d'entreprises, de hangars, ou au sol, dans des fermes solaires.[6]

1.6 Cellule solaire à couche mince

Les cellules solaires à couches minces représentent la deuxième génération de technologies photovoltaïques. Elles sont fabriquées en déposant une ou plusieurs couches minces de matériau photovoltaïque, appelées films minces (TF), sur un substrat tel que le verre, le plastique ou le métal.



Figure 1.8 cellule solaire à couche mince

L'épaisseur de ces films varie généralement de quelques nanomètres (nm) à plusieurs dizaines de micromètres (μ m). Comparé aux cellules solaires conventionnelles de première génération à base de silicium cristallin (c-Si), qui utilisent des plaquettes d'une épaisseur allant jusqu'à 200 μ m, les cellules solaires à couches minces sont beaucoup plus fines. Cette caractéristique leur confère une flexibilité et une légèreté supérieures.[7]

De nombreuses recherches sont actuellement consacrées à l'amélioration de l'efficacité des technologies photovoltaïques à couches minces. En effet, ces technologies offrent la promesse d'une production à la fois rentable et à haut rendement.

L'objectif est de réduire les coûts de fabrication tout en augmentant le rendement énergétique des cellules solaires à couches minces. Cela permettrait une utilisation plus étendue de cette technologie et une meilleure intégration dans les systèmes énergétiques existants.

Les efforts de recherche se concentrent sur l'amélioration des matériaux utilisés dans les films minces, l'optimisation des techniques de dépôt des couches, l'exploration de nouveaux concepts de cellules solaires et l'amélioration de la stabilité et de la durabilité des dispositifs.

L'objectif ultime est de parvenir à des cellules solaires à couches minces qui sont à la fois économiquement compétitives et capables de convertir efficacement la lumière solaire en électricité, contribuant ainsi à une production d'énergie propre et durable. [6]

1.6.1 Applications des cellules solaires à couches minces

1.6.1.1 Domaines d'utilisation

Les cellules solaires à couches minces trouvent leur utilisation dans plusieurs domaines. Elles sont utilisées dans la construction de systèmes d'alimentation photovoltaïque intégrés, ainsi que comme matériau de vitrage photovoltaïque semi-transparent qui peut être laminé dans les fenêtres. Dans certaines des plus grandes centrales photovoltaïques au monde, on utilise également des panneaux solaires à couches minces rigides, qui sont placés entre deux vitres. Par ailleurs, en raison de leur faible poids, ces cellules solaires sont une option intéressante pour une utilisation dans les engins spatiaux [7].

Divers matériaux photovoltaïques sont fabriqués en utilisant différentes méthodes de dépôt sur une variété de substrats. Les cellules solaires à couches minces sont généralement classées en fonction du matériau photovoltaïque utilisé.

1.6.2 Efficacité de conversion des modules solaire à couche mince

La technologie des couches minces a longtemps été moins chère mais moins efficace que la technologie c-Si conventionnelle. Cependant, elle s'est considérablement améliorée au fil des ans.

L'efficacité des cellules en laboratoire à base de CdTe et de CIGS dépasse désormais 21 %, dépassant ainsi le silicium multicristallin, qui est actuellement le matériau dominant utilisé dans la plupart des systèmes solaires photovoltaïques. Les tests de durée de vie accélérée réalisés en laboratoire ont montré que les cellules solaires à couches minces peuvent subir une dégradation légèrement plus rapide que les cellules photovoltaïques conventionnelles, bien qu'une durée de vie de 20 ans ou plus soit généralement attendue [7].

I.7 Conclusion

L'énergie solaire photovoltaïque représente une solution prometteuse pour répondre à nos besoins énergétiques tout en réduisant notre empreinte carbone. Les panneaux photovoltaïques, grâce à leur fonctionnement efficace et à leur large éventail d'applications, ouvrent la voie à un avenir énergétique durable. En investissant dans la recherche, en encourageant des politiques favorables aux énergies renouvelables et en sensibilisant le public, nous pouvons accélérer la transition vers un système énergétique plus propre et fiable. Avec les panneaux photovoltaïques en tête, nous avons la possibilité de créer un avenir énergétique résilient, respectueux de l'environnement et économiquement viable.

CHAPITRE 2

Fabrication de PV à couches minces par pulvérisation cathodique

2.1 Introduction

Les cellules solaires photovoltaïques à base de couches minces sont fabriquées à l'aide de la méthode de pulvérisation cathodique. Cette technique permet le dépôt précis de matériaux semiconducteurs tels que le Cds et le CIGS en couches minces sur des substrats. Dans cette section, nous fournirons un aperçu des principes de fonctionnement des cellules solaires photovoltaïques, des avantages des cellules à base de couches minces par rapport aux cellules classiques à base de silicium cristallin, ainsi que des avantages spécifiques de la pulvérisation cathodique dans la fabrication de ces cellules solaires. Nous soulignerons l'importance de la pulvérisation cathodique pour une production efficace et économique de cellules solaires photovoltaïques à base de couches minces.

2.2 La nouvelle technologie solaire

2.2.1 Les panneaux solaires bifaciaux

Une nouvelle technologie de panneaux solaires, les panneaux solaires bifaciaux, a récemment gagné en popularité. Ces panneaux innovants ont la capacité de produire de l'énergie à partir de leurs deux faces.

Contrairement aux panneaux solaires classiques recouverts d'aluminium, qui génèrent de l'énergie à partir d'un seul côté, les panneaux solaires bifaciaux sont composés d'une feuille arrière transparente ou d'un double verre trempé. Cela permet aux cellules photovoltaïques des deux faces du panneau de capter la lumière et de produire de l'énergie.

En termes de composition des cellules, les panneaux bifaciaux sont généralement fabriqués à partir de cellules monocristallines, bien que des cellules polycristallines puissent également être utilisées.

2.2.1.1 Composition des panneaux solaires bifaciaux

Contrairement au matériau arrière opaque des panneaux solaires classiques, les panneaux solaires bifaciaux sont fabriqués avec une feuille arrière transparente ou un double verre trempé.



Figure 2.1 un panneau solaire bifaciaux

2.2.2 Les panneaux solaires en pérovskite

Les panneaux solaires en pérovskite représentent une avancée majeure dans la technologie solaire. Les pérovskites sont une famille de matériaux avec une structure cristalline spécifique, qui tire son nom du minéral présentant cette structure. Ces panneaux solaires sont considérés comme l'une des nouvelles générations les plus prometteuses. Ils ont démontré un réel potentiel en termes de rendement énergétique et de coûts de production [7].

2.2.3 Les panneaux solaires organiques

Les panneaux solaires organiques sont une nouvelle génération de panneaux solaires qui utilisent des matériaux à base de carbone et d'électronique organique. Ces matériaux remplacent le silicium en tant que semi-conducteur pour générer de l'électricité à partir de l'énergie solaire.

La principale différence entre les cellules photovoltaïques au silicium et les cellules photovoltaïques organiques réside dans leur structure physique. Les cellules au silicium sont fabriquées à partir de matériaux solides et rigides, tandis que les cellules organiques sont constituées de composés dissous dans de l'encre et imprimés sur des substrats flexibles tels que des plastiques fins. Cette différence confère aux cellules organiques une flexibilité qui leur permet d'être intégrées dans une plus grande variété d'endroits et de structures, offrant ainsi des possibilités de conception et d'application plus diversifiées par rapport aux cellules au silicium classique.[7]

2.2.4 Les panneaux solaires hybrides

Les panneaux solaires hybrides offrent la possibilité de produire à la fois de l'électricité et de la chaleur simultanément. Ils sont composés à la fois de panneaux solaires photovoltaïques et de panneaux solaires thermiques. Un échangeur de chaleur est utilisé pour transférer la chaleur du soleil à un liquide, qui chauffe l'eau du ballon et refroidit également le panneau solaire, permettant ainsi de maximiser la production d'électricité

2.2.5 Les tuiles solaires

Les tuiles solaires sont de petits modules conçus pour être fixés sur une toiture existante ou pour remplacer les tuiles traditionnelles. Elles peuvent être fabriquées à partir de cellules photovoltaïques à couche mince ou de cellules solaires monocristallines traditionnelles.

L'avantage principal des tuiles solaires réside dans leur aspect esthétique. Contrairement aux panneaux solaires traditionnels, les tuiles solaires se fondent parfaitement dans le toit, offrant ainsi une apparence plus naturelle. Cela permet aux propriétaires de bénéficier de l'énergie solaire tout en maintenant l'esthétique de leur maison.

Cependant, il convient de noter que le rendement des tuiles solaires est généralement légèrement inférieur à celui des panneaux solaires traditionnels. Cela est dû en partie à leur conception plus discrète et à une surface de capture de la lumière légèrement réduite. De plus, le coût des tuiles solaires peut être plus élevé que celui des panneaux solaires classiques en raison de leur fabrication plus complexe.

Malgré cela, les tuiles solaires gagnent en popularité et deviennent de plus en plus compétitives en termes de prix. Elles sont progressivement considérées comme une alternative courante aux panneaux solaires ordinaires, offrant aux propriétaires une solution énergétique efficace et esthétiquement agréable.

Il convient de prendre en compte à la fois les avantages esthétiques et les compromis de rendement et de coût lors de la décision d'installer des tuiles solaires. Il est recommandé de consulter un professionnel qualifié pour évaluer les besoins spécifiques et les contraintes du projet avant de faire un choix final.

2.3Alternative prometteuse pour l'énergie solaire

La fabrication de cellules solaires à base de couches minces offre une alternative prometteuse à la fabrication de cellules solaires en silicium cristallin. Ces cellules utilisent une variété de matériaux semi-conducteurs qui peuvent être déposés sur des substrats flexibles ou rigides, ce qui permet une plus grande souplesse dans la conception et l'installation des systèmes solaires. Cependant, il est important de noter que chaque matériau présente des avantages et des limitations spécifiques en termes de rendement, de coût et de durabilité. Le choix du matériau dépendra des besoins spécifiques de l'application solaire.

2.4.1 Les Couches minces dans la technologie photovoltaïque

L'histoire des couches minces dans la technologie photovoltaïque est une synthèse de l'évolution des structures polycristallines et multi composants des couches minces, considérée comme une question clé pour la recherche et le développement futurs. Les couches minces ont été utilisées depuis des centaines d'années dans divers domaines d'application, tels que l'optique, l'électronique, la mécanique et la chimie.

Le développement de la microélectronique a été un catalyseur important pour les couches minces. Les premiers transistors ont été inventés à la fin des années 1940, et peu de temps après, en 1958, les premiers circuits intégrés ont été développés en utilisant largement des matériaux en couches minces tels que des couches métalliques, des couches semiconductrices et des couches d'oxydes diélectriques.[8]

Avec l'avènement des nanotechnologies, l'objectif industriel actuel est de structurer les couches minces à une échelle nanométrique, c'est-à-dire inférieure à la centaine de nanomètres.[9]

Voici quelques jalons importants de l'histoire des couches minces :

- → 1650 : Observation et interprétation des motifs d'interférence par des scientifiques tels que R. Boyle, R. Hooke et I. Newton.
- → 1850 : Développement des premières techniques de dépôt et des méthodes de mesure de l'épaisseur des couches. Introduction commerciale de l'électrochimie pour le placage d'or.

- → 1903 : Thomas Edison développe une procédure de métallisation des modules de cire en utilisant la pulvérisation cathodique.
- → 1930 : Découverte de la haute réflexion aux UV de l'aluminium par Coblentz et Stair.
- → 1940 : Fabrication industrielle de revêtements pour diverses applications optiques, électriques et mécaniques. Développement de la microélectronique avec l'invention des premiers transistors.
- → 1958 : Apparition des premiers circuits intégrés, utilisant largement les matériaux en couches minces tels que les métaux, les semi-conducteurs et les revêtements d'oxyde diélectrique.
- → 1965 : La technologie des couches minces devient une partie intégrante des processus de fabrication de masse dans l'industrie des semi-conducteurs et de l'optique. Les premiers circuits intégrés hybrides (CIH) sont réalisés, concurrents des technologies d'intégration monolithiques sur silicium.
- → 1980 : Les technologies à couches épaisses deviennent plus prédominantes en raison de leur coût de réalisation plus faible. Les couches minces restent utilisées dans des applications spécifiques.
- → 1995 : Le traitement des couches minces permet l'adaptation de microstructures avec des dimensions atomiques et microscopiques.
- → Début des années 2000 : Fabrication de matériaux nanocristallins et dépôt d'objets hautement ordonnés en deux et trois dimensions à l'échelle nanométrique.
- → 2006 : Etude des revêtements organiques conduit à l'émergence à l'émergence de l'électronique organique (OLED, circuits imprimables).

Au cours des années, la technologie des couches minces n'a cessé d'accroitre dans des divers domaines comme l'industrie de la microélectronique qui a largement exploitées le silicium.

→ Aujourd'hui, les couches minces sont utilisées dans une logique de miniaturisation des composants dans de nombreux domaines tels que l'électronique, l'optique, photonique et du magnétisme dans ses applications pour les capteurs, les actionneurs micro ou l'enregistrement sur bande (stockage d'une grande densité). [10]

2.5.1 Notion de couche mince

Comme son nom l'indique, une couche mince est une fine pellicule d'un matériau dépose sur un autre matériau, appelé "substrat". L'une des dimensions de cette couche est son épaisseur qui a été fortement réduite de telle sorte qu'elle varie de l'ordre de quelques centaines de nanomètres à quelques micromètres d'épaisseur. [11] Cette faible distance entre les deux surfaces limites entraîne est une perturbation de la majorité des propriétés physiques, très souvent un tel petit nombre de couches atomiques possède des propriétés d'un corps massif très différentes. Cette diminution des épaisseurs présente plusieurs avantages.

Elle permet, tout d'abord, de réduire considérablement la quantité de matières premières utilisées, et aussi d'ouvrir de nouvelles applications. [12]

La différence essentielle entre les couches minces et le matériau à l'état massif est liée au fait que dans une couche mince sont au contraire les effets liés aux surfaces limites qui sont excellents, tandis que on néglige généralement, avec raison, le rôle des limites dans les propriétés dans l'état massif. Il est assez évident que plus l'épaisseur sera faible plus cet effet de bidimensionnelle sera important. Ensuit lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépassera un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés bien connues du matériau massif. [13].

2.5.2 Les propriétés des couches minces

Les fonctions préalablement attribuées à un revêtement doivent en définitif se traduire par des objectifs opérationnels, en lien avec des propriétés physiques quantifiables. En plus le système « Substrat + revêtement » doit être répondu à un cahier des charges précise : une ténacité élevée, une parfaite adhésion sur le substrat, une grande résistance à la formation et à la progression des fissures, une faible conductivité et diffusivité thermique, une haute résistance à l'oxydation, une épaisseur adéquate, une fonction barrière de diffusion.[14]

Une couche dite mince est un objet dont l'une des dimensions géométriques est très faible Cela explique un rôle essentiel des interactions surfaciques dans l'établissement des propriétés physiques de ces objets. D'ailleurs, c'est la raison principale pour laquelle les propriétés physiques des couches minces diffèrent de manière significative de celles des corps massiques. L'aire totale des grains cristallins est supérieure à celle des deux faces d'une couche mince.

La microstructure des couches minces est extrêmement sensible aux propriétés chimiques et physiques du matériau mis en jeu lors de sa croissance, ainsi que des conditions physiques de dépôt à chaque étape d'évolution de la couche mince. En particulier, les propriétés des couches minces sont très sensibles à la nature du substrat sur lequel elle est formée. Cela explique, par exemple, le fait que des couches minces d'un même matériau et d'une même épaisseur peuvent présenter des propriétés physiques différentes sur des substrats de nature différente. L'épaisseur de percolation, au-delà de laquelle les îlots coalescent et la couche mince devient continue, varie essentiellement suivant la nature du matériau, la vitesse du dépôt, la température du substrat, l'adhérence de sa surface.[14]



Figure.2.2 : Diagramme des étapes du procédé de fabrication de couches minces. [15]

Dans l'étape de transport, l'uniformité du flux des espèces arrivant à la surface du substrat est un élément crucial. Plusieurs facteurs peuvent influencer cette uniformité et dépendent du milieu dans lequel se déroule le transport, qu'il s'agisse d'un vide poussé ou d'un fluide (principalement des gaz). Dans le cas d'un vide poussé, les molécules provenant de la source et se dirigeant vers le substrat se déplacent en ligne droite, tandis que dans un milieu fluide, elles subissent des collisions multiples pendant leur transport. Par conséquent, dans le vide, l'uniformité du flux atteignant le substrat est déterminée par la géométrie, tandis que dans un fluide, elle dépend du débit du gaz et de la diffusion des molécules provenant de la source dans les autres gaz présents. Souvent, les procédés utilisant un vide poussé sont assimilés aux procédés de dépôt physique en phase vapeur (PVD), tandis que ceux utilisant un

flux fluide sont des procédés de dépôt chimique en phase vapeur (CVD). Toutefois, cette distinction n'est pas toujours confirmée. Il existe plusieurs procédés de dépôt physique en phase vapeur qui fonctionnent sous vide poussé, tandis que d'autres, tels que l'ablation laser et la pulvérisation, sont souvent réalisés à des pressions élevées caractéristiques des fluides.

De la même manière on trouve que la majorité des procédés de dépôts par CVD opèrent à des pressions modérées, l'épitaxie à transmission chimique " chemical beam epitaxy", quant elle, opère dans un vide.

Dans cette phase, plusieurs procédés de dépôt de couches minces utilisent un milieu plasma. En effet, la grande quantité d'énergie contenue dans ce milieu permet, à faible température, L'activation de la formation des couches. La pression de travail d'un plasma peut être celle d'un fluide ou celle d'un vide poussé.

La troisième étape dans les procédés d'élaboration des films minces est le dépôt du film sur la surface du substrat. Cette phase passe par les étapes de nucléation et de coalescence Le comportement de déposition est déterminé par les facteurs source, transport et aussi par les trois principales conditions de la surface du substrat. Ces dernières sont l'état de surface "Rugosité, niveau de contamination, potentiel chimique avec le matériau qui arrive", la réactivité du matériau arrivant sur cette surface " Coefficient de collage" et l'énergie déposée sur la surface " Température de substrat, Photons, Ions positifs".

La dernière étape dans le processus de fabrication est la nécessité de l'analyse du film obtenu. Le premier niveau de contrôle du matériau consiste à effectuer des mesures directes de ses propriétés importantes. Si les résultats de l'analyse sont insuffisants, il est indispensable de recourir à des expériences particulières qui permettent de lever les éventuelles ambiguïtés d'un processus donné. [15]

2.5.3 Méthodes générales de dépôt de couches minces

Les principales méthodes utilisées pour fabriquer des couches minces sous vide font appel à la technique de dépôt chimique en phase vapeur (CVD : Chemical Vapor Deposition) et de dépôt physique en phase vapeur (PVD : Physical Vapor Deposition). La classification des méthodes est présentée sur le schéma de la figure 2.1. [16]



Figure 2.3 : Méthodes générales de dépôt de couches minces sous vide [17]

Le dépôt des couches minces sur les différents substrats est une étape essentielle dans la majorité des domaines de la technologie moderne, il existe plusieurs méthodes pour fabriquer des matériaux (semi-conducteurs, métaux, isolants, et oxydes...etc.). Ces méthodes font appel à trois composantes différentes, comme présenté sur la figure 2.2

2.6 Les procédé du dépôt des couches minces

- Une source : le matériau à déposer est concentré dans un creuset, plaque métallique...etc.
- Un substrat : c'est la pièce à revêtir, c'est ici qu'intervient le phénomène de condensation.
- Un milieu : c'est l'espaces compris entre la source et le substrat, c'est le siégé du phénomène de transfert de la matière, cela peut être le siégé de réactions chimiques Intervenant entre les atomes du matériau à déposer et un gaz réactif. [19]



Figure 2.4 : Le procédé du dépôt des couches minces [18].

2.7 Dépôts chimiques en phase vapeur (CVD)

2.7.1 Les différents méthodes de déposition

Le dépôt par CVD (Chemical Vapor Deposition) est une méthode couramment utilisée pour le dépôt de couches minces. Il existe différentes variantes de la technique CVD, tellesque le MOCVD (Metal-Organic CVD), le PECVD (Plasma-Enhanced CVD) et l'APCVD (Atmosphere-Plasma CVD), qui offrent différentes conditions de dépôt.

Le MOCVD utilise des précurseurs organométalliques qui se décomposent thermiquement pour libérer les atomes constituant la couche mince. Ces précurseurs sont transportés par un gaz vecteur jusqu'à la surface du substrat où ils réagissent pour former la couche désirée. Cette méthode est souvent utilisée pour le dépôt de couches minces de semiconducteurs.

Le PECVD implique l'utilisation d'un plasma, un état hautement réactif de la matière, pour faciliter la réaction chimique entre les précurseurs gazeux et la surface du substrat. Le plasma fournit l'énergie nécessaire pour décomposer les précurseurs et favoriser la croissance de la couche mince. Cette méthode est utilisée pour le dépôt de divers matériaux, tels que des couches isolantes ou des films de passivation.

L'APCVD est une méthode de CVD réalisée à pression atmosphérique, ce qui la rend plus simple et moins coûteuse en termes d'équipement par rapport aux techniques réalisées sous vide. Cette méthode est souvent utilisée pour le dépôt de couches minces d'oxydes ou de matériaux céramiques.

Ces différentes méthodes de dépôt par CVD offrent une grande flexibilité en termes de choix des matériaux, des conditions de dépôt et des propriétés des couches minces obtenues.



Fig. 2.5: les différents types de réacteurs d'épitaxies en phase gazeuse. [20]

2.8 Choix de PVD (Physical Vapor Deposition)

La méthode de dépôt physique en phase vapeur (PVD) est souvent utilisée pour obtenir des couches minces de bonne qualité. Le PVD offre un contrôle élevé sur le dépôt de matériau, ce qui permet d'obtenir des couches minces uniformes, homogènes et de haute qualité.

2.8.1 Technique PVD

Le principe de la PVD (Physical Vapour Deposition) est de pulvériser une cible solide à l'aide d'un flux d'ions. Ceux-ci peuvent être générés par un canon à ions ou par un plasma nécessitant une tension négative sur la cible (qui est alors la cathode) et une pression réduite.

Les particules éjectées forment une vapeur qui vient se condenser en formant un dépôt sur un substrat placé en face de la cible.

- On recense différentes technique PVD, en fonction de la nature des trois composants suivants :
 - Le mode de production de la vapeur
 - L'état électrique du substrat
 - La nature du gaz constituant le milieu [21]

2.9 La pulvérisation cathodique

La pulvérisation cathodique est l'une des techniques les plus couramment utilisées dans la méthode de dépôt physique en phase vapeur (PVD). Elle implique l'utilisation d'une cible solide, également appelée matériau cible, qui est placée dans une chambre à vide. Cette cible est généralement une plaque de quelques millimètres d'épaisseur et de dimensions similaires à celles de la pièce à recouvrir.

Pour générer la vapeur, un flux d'ions est utilisé. Cela peut être réalisé en utilisant un canon à ions ou en créant un plasma à l'aide d'une tension négative appliquée sur la cible (qui agit comme la cathode) et une pression réduite dans la chambre à vide.

Lorsque les ions frappent la cible, des particules du matériau cible sont éjectées et se vaporisent. Ces particules en phase vapeur se déplacent ensuite dans la chambre à vide et se condensent sur le substrat placé en face de la cible. Le substrat peut avoir différents états électriques, tels que conducteur ou isolant, en fonction des propriétés souhaitées de la couche mince.

La pulvérisation cathodique offre de nombreux avantages, notamment un contrôle précis de l'épaisseur et de la composition de la couche mince, ainsi qu'une bonne adhérence sur le substrat. De plus, cette technique permet d'obtenir des couches minces uniformes et de haute qualité, ce qui en fait un choix populaire dans de nombreux domaines de l'industrie (voir figure).



Figure 2.6 : schéma du bâti de pulvérisation cathodique en DC

Cette cible est fixée sur une électrode refroidie (la cathode) qu'on porte à une tension négative de 3 à 5 kV. Une deuxième électrode (l'anode) est disposée parallèlement à la cible, à une distance de quelques millimètres. Dans de nombreux cas l'anode sert de porte substrat, elle est généralement maintenue à la masse, ce qui facilite cette utilisation.

Si la pression résiduelle dans l'enceinte est comprise entre 1 Pa et 1.02 Pa, le champ électrique créé entre les deux électrodes provoque l'ionisation du gaz résiduel. Cette ionisation apparaît sous forme d'un nuage luminescent, localisé entre les deux électrodes. C'est ce phénomène que l'on observe dans les tubes fluorescents. Au même moment, un courant électrique s'établit entre les deux électrodes : le gaz résiduel est devenu conducteur, il contient alors :

- Des électrons, qui sont attirés par l'anode,
- Des ions positifs qui sont attirés par la cible (cathode). Si on place une pièce devant la cible,

On observe que cette pièce se recouvre progressivement d'une couche du même matériau que celui de la plaque constituant la cible. Le dépôt est dû à la condensation d'atomes provenant de la cible, expulsés de celle-ci sous l'effet de l'impact. [22].
2.10 Principe de fonctionnement

La pulvérisation correspond au processus d'éjection de certains atomes provenant des premières couches atomiques d'un matériau appelé cible, soumis à un bombardement par des particules lourdes (atomes ou ions). Le mécanisme de pulvérisation est un processus purement mécanique de transfert de quantité de mouvement des particules incidentes aux atomes de la cible

Le principe de pulvérisation peut se décrire en trois temps. En premier lieu, le bombardement est obtenu en ionisant un gaz par une décharge électrique produite au voisinage du matériau cible qui est polarisé négativement et joue le rôle de cathode. Le gaz ionisé (généralement de l'argon), appelé plasma, apparaît sous forme d'un nuage luminescent et est composé d'atomes d'argon, d'ions Ar+ et d'électrons. La cible est alors bombardée par des ions positifs Ar+ extraits du plasma [17]



Figure 2.7 : Schéma de principe de la pulvérisation cathodique (cible face au substrat).

2.11 Les différentes techniques de la pulvérisation

2.11.1 Procédé diode

2.11.1.1 Procédé diode DC

Un dispositif de pulvérisation cathodique diode est décrit sur la figure II.6. Ce dispositif est composé d'une enceinte à vide dans laquelle ont été disposées deux électrodes planes, cathode et anode, distante de quelques centimètres. La cathode froide, sur laquelle le

matériau à pulvériser est fixé, est reliée au pôle négatif d'un générateur de tension continue de quelques kilovolts. L'anode, sur laquelle se trouve le substrat, est généralement reliée à la masse. La tension d'attraction des ions est continue ce qui ne permet pas de pulvériser des matériaux isolants. Le procédé diode DC fonctionne entre 66,77 et 1,3 Pa. Le système est simple mais la vitesse de dépôt est faible



Figure 2.8 : Enceinte de pulvérisation diode DC.

2.11.1.2 Procédé diode Rf

Le dispositif haute fréquence présente la même structure que la pulvérisation diode DC, mais on remplace le champ électrique continu par un champ électrique alternatif à haute fréquence de l'ordre du mégahertz (1 kV crête à crête). En appliquant à la cathode une tension RF, une tension d'auto polarisation négative se crée à la surface de la cible grâce à la différence de mobilité entre les ions et les électrons, les ions qui ont une faible mobilité ne voient que les potentiels continus (tension d'auto polarisation), alors que les électrons beaucoup plus mobiles suivent les alternances du potentiel Rf d'une électrode à l'autre.

L'avantage essentiel du procédé est de permettre la pulvérisation de n'importe quel matériau, qu'il soit conducteur ou isolant, car dans des systèmes à courant continu les charges électriques des ions positives bombardant la cible s'accumulent à sa surface. Elles y créent un champ électrique qui repousse les ions du plasma, ce qui a pour effet de réduire considérablement l'efficacité de la pulvérisation. Pour contourner cette difficulté, on utilise une tension de polarisation alternative. Pendant l'alternance négative, les ions vont pulvériser

la cible et pendant l'alternance positive, les électrons vont neutraliser les charges positives accumulées sur la cible (figure 2.7).



Figure 2.9 : Enceinte de pulvérisation diode Rf

En pulvérisation RF, les électrons du plasma sont plus énergétiques, leur trajet est plus long que dans le cas de la pulvérisation DC, il en résulte un meilleur taux d'ionisation avec une légère augmentation de la vitesse de dépôt. Il est possible de travailler à faible pression de gaz dans la chambre de dépôt (jusqu'à une pression de 10-4 mb).[18]

2.11.2 Procédé Triode

Alors que dans le procédé diode, le plasma se faisait entre la cible et le porte-substrats, dans le procédé triode, le plasma est créé puis entretenu indépendamment de la cible. Dans ce système de pulvérisation, présenté dans la figure 2-8, un filament de tungstène chauffé à une température de l'ordre de 2500 °C, émet des électrons qui sont accélérés dans un champ électrique crée par une anode portée à un potentiel électrique. Ces électrons provoquent l'ionisation d'une faible fraction des particules du gaz qui se trouve entre ces deux électrodes



Figure 2.10: Système de pulvérisation cathodique Triode.

L'ensemble constitué par le filament, l'anode et la bobine est un dispositif générateur de plasma indépendant de la cible et du substrat. Cette indépendance de la cible par rapport au plasma fait qu'il est possible de déplacer la cible au-dessus de l'anode ou lui donner n'importe quelle forme (ce qui n'est pas le cas avec des procédés diodes). Le substrat lui aussi peut être déplacé à volonté et se présenté sous n'importe quelle forme. La décharge peut être entretenue à une pression plus faible que dans le montage DC, ce qui est un avantage du point de vue de la contamination des couches par le gaz partiel.

2.11.3 Procédé Magnétron

La pulvérisation magnétron est la méthode la plus utilisée au niveau industriel car elle permet d'obtenir des vitesses de pulvérisation importantes, une meilleure uniformité des dépôts et une bonne reproductibilité. Une décharge diode DC est entretenue par les électrons secondaires éjectés de la cathode sous l'effet du bombardement ionique. Dans ce cas les électrons qui ne rencontrent pas de molécules de gaz s'éloignent perpendiculairement à la cathode et sont captés par l'anode.

Le magnétron constitue un perfectionnement de la cathode classique et permet d'augmenter la densité ionique du plasma au voisinage de celle-ci. En effet, un aimant permanent, placé sous la cible, engendre un champ magnétique B perpendiculaire au champ électrique crée par la cathode, c'est-à-dire parallèle à la cible. De ce fait les électrons secondaires ont des trajectoires qui s'enroulent autour des lignes de champ magnétiques, augmentant considérablement la probabilité d'ioniser une molécule de gaz au voisinage de la cathode (du fait de l'allongement de sa trajectoire) ce qui permet d'augmenter le rendement de la pulvérisation de la cible (figure 2-9). [18]



Figure 2.11: Trajectoires électroniques

Il en résulte une augmentation de la vitesse de dépôt même à très faible pression de travail. Bien entendu, ce dispositif n'ajoute rien à l'énergie des ions arrivant sur la cible, il ne fait qu'augmenter leur nombre pour une tension de polarisation de la cible donnée.



Figure 2.12 : Magnétron plan circulaire conventionne

2.12 Régime de pulvérisation

La collision entre les particules incidente qui pénètrent dans le réseau et les atomes du solide ont pour conséquence de déplacé des atomes du solide de leur position dans le réseau ; ces atomes sont appelé les atomes de recul , si l'énergie de ces atomes de recul primaire est suffisante , ils vont crées à leur tour des atomes de recul secondaire , c'est ainsi que la cascade collisionnelle se produit , la pulvérisation à lieu si de tels atomes atteignent la surface et si leur énergie dépasse l'énergie de liaison [23]

2.13 Pulvérisation de matériaux complexe

2.13.1. Pulvérisation d'alliage ou de composé

Un des avantages importants de la pulvérisation est que la composition d'une couche mince, disposée par ce procédé est proche de celle de la cible, ou du moins conserve un décalage à peu près constant a conditions que :

- La cible soit suffisamment refroidie pour qu'il n'y ait pas de diffusion de ses composantes Il n'y ait pas de décomposition de la cible
- Le transfert en phase gazeuse soit le même pour les divers composants
- Le coefficient de collage des composants sur le substrat soit le même [23]

2.14. L'interaction ion-surface

La collision d'un ion avec un atome de la cible peut conduire à différents mécanismes selon son énergie et son angle d'incidence (cf. Figure 1.2). L'ion peut être réfléchi (cas n°1), provoquer l'émission d'électrons secondaires de la cible (cas n°2) ou s'implanter en profondeur (cas n°3). [24]



Figure 2.13 : Principaux mécanismes issus de l'interaction d'union et d'une surface.[25]

L'ion peut également provoquer l'éjection d'un atome de la surface. Cette éjection peut se faire directement (cas n°4) ou suite à une cascade de collisions entre cet ion et des atomes situés près de la surface. C'est le phénomène de pulvérisation. Il n'intervient que si l'énergie

cinétique de l'ion incident excède une valeur critique, appelée seuil de pulvérisation, comprise entre 5 et 40 eV pour la plupart des métaux ce seuil correspond à l'énergie minimum nécessaire à l'ion pour expulser un atome de la cible. Il dépend de la nature de l'ion incident ainsi que du matériau composant à cible.

2.15 Rendement de pulvérisation

Le rendement de pulvérisation c'est le nombre d'atomes éjectés par particule incidente. Y est le nombre d'atomes pulvérisé ou extrait du matériau par ion incident, il dépend des paramètres du bombardement primaire et de la cible, il est exprimé en (atome/ion). [26]

Ce rendement va dépendre de :

- La nature de la cible (matériau, état de surface).
- La nature des ions incidents (gaz rares de masse plus ou moins élevée, ou gaz réactif).
- L'énergie des ions incidents.
- L'angle d'incidence

Il ne dépend pas de la température de la cible, ni du fait que les particules incidentes soient Ionisées ou non. Cette notion de rendement est extrêmement importante car elle permet de prévoir les vitesses de dépôt que l'on obtiendra pour un matériau cible donné. [25]

On définit le taux de pulvérisation par :

$$Y = \frac{\text{Nombre d'ions Incidents}}{\text{nombre moyen d'atomes émis}}$$

Si la cible contient plusieurs espèces atomiques, chaque espèce à son propre taux de pulvérisation k et le taux total est la somme des taux de chacune d'elles :

Yt=
$$\sum Yk$$

2.16 Conclusion

Le processus de la pulvérisation cathodique s'avère être une approche prometteuse pour la fabrication de cellules solaires photovoltaïques à base de couches minces. Cette méthode offre un contrôle précis des propriétés des matériaux déposés, permettant ainsi d'optimiser l'efficacité des cellules solaires. En exploitant les avantages uniques de la pulvérisation cathodique, tels que la possibilité de déposer des couches minces sur divers substrats et la flexibilité dans la composition des matériaux, il est possible de développer des cellules solaires plus efficaces, économiques et adaptées à des applications spécifiques. La pulvérisation cathodique contribue ainsi à l'avancement des technologies photovoltaïques et à la réalisation d'une transition énergétique durable vers l'utilisation plus répandue de l'énergie solaire.

CHAPITRE 3

Résultats et Discussions

3.1 Introduction

Le présent chapitre se focalise sur l'utilisation de la technique de pulvérisation cathodique pour le dépôt de matériaux modernes, notamment le sulfure de cadmium (CdS), le séléniure de cuivre-indium-gallium (CIGS) et les pérovskites (CH₃NH₃PbI₃). Nous soulignons l'importance capitale de la compréhension des interactions ioniques inhérentes à ce processus, en vue d'optimiser les performances des films minces obtenus. Afin d'approfondir notre compréhension de la pulvérisation cathodique, nous avons fait appel au logiciels SRIM (Stopping and Range of Ions in Matter) et SIMTRA (Simulation of material transport) comme outils de simulation permettant d'analyser les effets de l'éjection d'atomes et de leur implantation sur les propriétés des matériaux déposés. Cette approche novatrice nous ouvre de nouvelles perspectives dans des domaines aussi variés que l'énergie solaire et les technologies de pointe.

En explorant les mécanismes inhérents à l'éjection d'atomes et à leur implantation au cours du processus de pulvérisation cathodique, nous visons à élucider les fondements sousjacents qui influencent la structure et les propriétés des films minces. Ces connaissances approfondies nous permettront de concevoir des stratégies avancées afin d'améliorer la qualité des matériaux déposés, ouvrant ainsi la voie à d'importantes avancées dans les domaines des dispositifs photovoltaïques et d'autres applications émergentes.

Dans l'ensemble, ce chapitre présente une approche novatrice et prometteuse en utilisant la simulation SRIM pour explorer les effets de l'éjection d'atomes et de leur implantation lors de la pulvérisation cathodique de matériaux modernes. Nous espérons que ces recherches apporteront une contribution à l'avancement des technologies solaires et à d'autres domaines connexes, favorisant ainsi notre transition vers un avenir énergétique durable et propice à l'innovation.

Ce chapitre se concentre sur l'utilisation de la pulvérisation cathodique pour le dépôt de matériaux tels que le CdS, le CIGS et les pérovskites. Nous mettons en évidence l'importance de comprendre les interactions des ions lors de ce processus afin d'optimiser les performances des films minces obtenus. Dans ce contexte, nous avons utilisé le logiciel SRIM pour analyser l'éjection d'atomes du cible et SIMTRA pour leur implantation au niveau du substrat et étudier les propriétés structurales et fonctionnelles des matériaux déposés.

3.2 Matériaux utilisés dans les cellules PV modernes

3.2.1 Le CIGS (cuivre-indium-galium-sélénium)

3.2.1 Propriétés du CIGS

La structure de base du matériau CIS (CuInSe2) utilisé dans les cellules solaires CIGS (Cu(In,Ga)Se2) est une structure tétragonale de chalcopyrite. Cette structure est formée par l'alternance des atomes de cuivre (Cu) et d'indium (In), avec chaque atome de sélénium (Se) lié tétraédrique ment à deux atomes de Cu et d'In. Chaque atome de Cu ou d'In est entouré par quatre atomes de Se. La longueur de liaison entre Cu et Se, est de 2.43 Å, tandis que celle entre In et Se, est de 2.57 Å, ce qui entraîne une distorsion tétragonale de l'unité de 0.3%. La figure 2.5 (b) illustre la structure moléculaire du CIS.



Figure 3.1 : (a) Structure de la maille élémentaire du zinc-blende (ZnS), (b) Structure de la maille élémentaire de la chalcopyrite du CuInSe

Effectivement, dans le matériau CIGS (Cu(In,Ga)Se2), les sites des atomes du groupe III (Cu, In) peuvent être occupés par des atomes d'indium (In) ou de gallium (Ga), en fonction de la composition de l'alliage. Ainsi, le CIGS est une solution solide de CuInSe2 et de CuGaSe2, avec des proportions variables.

La figure 3.2 met en évidence les différences de structure cristalline entre trois semiconducteurs couramment utilisés dans la technologie photovoltaïque : le silicium (Si), le tellurure de cadmium (CdTe) et le CIGS (Cu(In,Ga)Se2). Chacun de ces matériaux présente une structure cristalline distincte, ce qui influe sur leurs propriétés électriques et optiques.



Figure 3.2 Comparaison des mailles élémentaires des structures cristallines du Si, du CdTe et du CIGS. Structure chalcopyrite d'après [26]

Les alliages dérivés du CuInSe2 sont regroupés sous le terme Cu(In1-xGax)Se2, où x représente la composition en gallium. Ces alliages sont des solutions solides dans lesquelles le gallium remplace l'indium dans la structure cristalline. La composition en gallium peut varier, ce qui permet d'ajuster les propriétés du matériau. Différentes compositions de Cu(In1-xGax)Se2 ont été étudiées pour comprendre leurs propriétés optiques et électriques, et optimiser leur performance dans les applications photovoltaïques.

L'évolution des paramètres de mailles suit la loi de Vegard [27; 28 ; 29], c'est-à-dire que les paramètres évoluent linéairement entre les valeurs des deux ternaires associés. L'évolution des paramètres de maille du quaternaire Cu(In1-xGax)Se2 est représentée sur la figure 3. 3



Figure 3.3 : Evolution des valeurs de paramètres de maille a et c, et du rapport c/a en fonction du rapport Ga/(Ga+In) pour Cu(In1-xGax)Se2

Le diagramme présenté sur la figure 3.5, représente l'évolution de la largeur de la bande interdite en fonction du paramètre de maille a pour les éléments CuInSe2, CuGaSe2, CuInS2, CuGaS2. Ce diagramme montre que la largeur de la bande interdite varie entre 1 et 1.67 eV pour les deux composés CuInSe2et CuGaSe2respectivement en variant la composition x en Ga dans l'alliage Cu(In1-xGax)Se2.



Figure (3.5) : Diagramme représentant l'évolution de la largeur de la bande interdite Eg en fonction du paramètre de maille a pour l'alliage Quincke Cu(In1-xGax)(Se1-ySy) [30]

3.3.2 Notions de gap graduel du CIGS

Tous les paramètres de calque peuvent être notés. Les principes des algorithmes utilisés pour simuler une cellule solaire graduée les structures ont été présentées dans [27]. Donner une description appropriée et orientée vers les matériaux du classement dès les différents paramètres des matériaux, SCAPS dérive tous les paramètres de manière cohérente à partir du classement de composition une couche. Chaque couche est supposée avoir la composition A1- yBy. L'utilisateur définit les propriétés du pur composés A (par exemple A = CuInSe2) et B (par exemple B = CuInS2), et la composition classant y (x) sur l'épaisseur de la couche : définissant ainsi les valeurs de composition y à gauche et à droite de la couche, et par spécifiant une loi de classement entre les deux. Toutes les propriétés des matériaux P sont alors dérivées dule paramètre de composition y (x), c'est-à-dire P [y (x)] est évalué. Plusieurs lois de classement sont mises en œuvre dans SCAPS et offerte par l'interface utilisateur : uniforme, linéaire, logarithmique, parabolique (deux lois), loi de puissance, exponentielle, Support effectif, à partir d'un fichier et d'une fonction Beta.

3.4 Sulfure de Cadmium (CdS)

3.4.1 Choix du CdS

En particulier, les films minces de sulfure de cadmium (CdS) suscitent beaucoup d'attention ces dernières années à cause de leurs propriétés optiques, électriques et structuralesfavorables, permettant de les utiliser largement dans diverses hétérojonctions comme couche très mince tampon (fenêtre) des cellules solaires photoélectrochimiques (PEC) bien connues, telles que : CdS/CdTe, CdS/CuInSe2, CdS/CuInS2, CdS/InP, CdS/Cu2S, etc. Le CdS appartenant au groupe IIB-VIA est un matériau semiconducteur de type n et à gap optique direct dont sa résistivité électrique est assez élevée à température ambiante et son émission prévue du gap optique se trouve très proche de la sensibilité la plus élevée de l'œil humain [31,32]. De même, il a une structure hexagonale qui est fortement convenable pour de telles applications en raison de sa stabilité

La structure de la cellule solaire basée sur le CdS fournit une meilleure captivité optique et des rendements d'efficacité élevés

3.5 Le Pérovskite

Les pérovskites halogénées sont une famille de matériaux qui ont montré un potentiel de haute performance et de faibles coûts de production dans les cellules solaires. Le nom "pérovskite" provient du surnom de leur structure cristalline, bien que d'autres types de perovskites non halogénées (telles que les oxydes et les nitrures) soient utilisés dans d'autres technologies énergétiques, telles que les piles à combustible et les catalyseurs.[33]



Figure 3.6 : La structure cristalline de la pérovskite CH₃NH₃PbI₃.

Les cellules solaires à base de pérovskites ont montré des progrès remarquables ces dernières années, avec une augmentation rapide de l'efficacité, passant d'environ 3% en 2009 à plus de 25% aujourd'hui. Bien que les cellules solaires à base de pérovskites soient devenues très efficaces en peu de temps, plusieurs défis subsistent avant qu'elles puissent devenir une technologie commerciale compétitive.

3.5.1 Stabilité et durabilité

Les cellules solaires à base de pérovskite ont démontré des efficacités de conversion d'énergie (PCE) compétitives avec un potentiel de performances supérieures, mais leur stabilité est limitée par rapport aux principales technologies photovoltaïques (PV). Les pérovskites peuvent se décomposer lorsqu'elles réagissent avec l'humidité, l'oxygène ou lorsqu'elles sont exposées pendant une longue période à la lumière, à la chaleur ou à une tension appliquée. Afin d'augmenter la stabilité, les chercheurs étudient la dégradation à la fois du matériau pérovskite lui-même et des couches de dispositif environnantes. Une durabilité améliorée des cellules est essentielle pour le développement de produits solaires à base de pérovskite commercialement viables.[33]

3.5.2 Un panneau photovoltaïque à faible coût

Un panneau novateur mais économique, c'est ce qui ressort de ces nouveaux équipements à énergie solaire. En effet, les pérovskites, de par leur abondance mais également leurs exceptionnelles propriétés d'absorption de la lumière du soleil, ont un coût très faible. Actuellement, le silicium, ce matériau principalement utilisé pour les panneaux photovoltaïques en cours de commercialisation, est coûteux car il requiert une grande attention lors du processus de fabrication.la production de la pérovskite est plutot simple, ce qui génère un gain de temps non négligeable et ainsi des coûts réduits

De plus, si on cumule un faible coût d'achat du panneau à un facteur de remplissage élevé, et ainsi une production d'électricité supérieure, les panneaux à base de cellules photovoltaïques à pérovskite semblent être tout à fait rentables [34].



Figure 3.7 : Illustration d'un module moderne de cellule solaire haute performance pérovskite

3.6 Description de SRIM

SRIM 2013 (Stopping and Range of Ion in Matter) est un logiciel de simulation développé par Ziegler et al., utilisé pour étudier les interactions entre les ions et la matière. Il permet de calculer avec précision les trajectoires, les pouvoirs d'arrêt et les effets quantiques des collisions entre les ions primaires et les atomes de la cible. Le logiciel prend en compte les paramètres initiaux tels que la composition de la cible et l'énergie des ions primaires.

Grâce à SRIM, il est possible de modéliser l'implantation d'ions et la pulvérisation, en fournissant des résultats sur la distribution spatiale des ions implantés, les pertes d'énergie électronique et nucléaire en fonction de la profondeur, ainsi que la distribution des lacunes (atomes déplacés). Ces informations sont essentielles pour de nombreuses applications, notamment en sciences des matériaux et en ingénierie.

En résumé, SRIM 2013 est une plateforme de simulation puissante et largement utilisée pour comprendre et prédire les interactions complexes entre les ions et la matière, offrant des résultats précis et détaillés pour diverses applications scientifiques et technologiques.



Figure 3.8 : Schéma représentant les rubriques de SRIM

3.7 Mode d'emploi du SRIM

Pendant la simulation avec SRIM, nous avons suivi plusieurs étapes. Tout d'abord, nous avons utilisé le type de calcul appelé "Ion Stopping and Range Tables" basé sur la formalisation de J.F.Ziegler. Ensuite, dans la deuxième étape, nous avons utilisé le module "Target" pour sélectionner l'ion projectile et l'atome cible. Dans la troisième étape, nous avons choisi l'unité de mesure avec le module "Stopping Power Units". Pour définir la gamme d'énergie, dans la quatrième étape, nous avons utilisé les paramètres "Ions Energy Lowest" et "Range (keV) Highest". Enfin, pour exécuter le programme, nous avons utilisé le paramètre "Calculate Table" dans la dernière étape [53].

Ce logiciel est basé principalement sur la méthode de Monte-Carlo.

TRIM Setup Window	– 🗆 🗙				
Read The second se	<u>B</u>				
TRIM Demo ? DAMAGE Ion Distribution and Quick Calculation of Damage					
Restore Last TRIM Data ? Basic Plots Ion Distribution with Recoils projected on Y-Plane	₹ ?				
Symbol Name of Element Number Mass (amu) Energy (keV) Angle of Incide ION DATA ? PT Hydrogen 1 1.008 10 ? 0	ence				
TARGET DATA ? Input Elements to Layer					
Add New Element to Layer Compound I	Dictionary				
Add New Layer Density Compound Layer Name Width (g/cm3) Corr Gas Symbol Name Number (amu) Stoich or 3	Damage (eV) % Disp Latt Surf ?				
X Layer 1 10000 Ang 🔽 0 1 🗾 🏝 X PT 🔍 👻 0 1 10	10 20 3 2 📥				
	Ŧ				
Special Parameters ? Output Disk Files Name of Calculation Stopping Power Version ? I on Ranges H (10) into Layer 1 SRIM-2008 ? ? I Back costleard lons	Save Input & Run TRIM				
2 AutoSave at Ion # 10000 Plotting Window Denths 2 2 Transmitted Ions/Recoils	Clear All				
Total Number of Ions 99999 Min O A Collision Details	Calculate Quick Range Table				
Random Number Seed Max 10000 A Special "EXYZ File" Increment (eV)	Main Menu				
Problem Solving	Quit				

Figure3.9 : Mode d'emploi du SRIM.

3.8 Caractéristique du gaz d'argon utilisé en simulation

Le gaz d'argon (Ar) est principalement utilisé pour alimenter des bistouris à coagulation par plasma d'argon, et il s'évapore rapidement, entraînant une surcharge d'air. Il est couramment utilisé comme gaz de remplissage dans les ampoules électriques à

incandescence, car il ne conduit pas bien la chaleur, ce qui permet d'atteindre des températures élevées pour le filament de tungstène (2500°C). Dans les tubes luminescents, la lumière émise par l'argon est généralement de couleur bleue rougeâtre. En raison de son inertie chimique, l'argon est également utilisé comme gaz de protection lors de la soudure des métaux.

3.9 La méthode de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo (MC) a été développée par Von Neuman, Ulam et Metropolis à la fin de la Seconde Guerre mondiale dans le but d'étudier la diffusion des neutrons dans un matériau fissile. Ce type de matériau est capable de subir une fission nucléaire lorsqu'il est bombardé par des neutrons de différentes énergies, qu'ils soient rapides ou lents.

Historiquement, la méthode de Monte Carlo a été introduite pour la première fois en 1953 par les travaux de Metropolis et ses collègues. Cette méthode, qui repose sur des principes statistiques, est particulièrement adaptée à l'étude des propriétés thermodynamiques, telles que les équilibres de phase d'un système. Elle permet d'évaluer les déplacements des molécules de manière aléatoire, en prenant en compte la probabilité conditionnée par l'état thermodynamique du système.

Cette approche physique est largement utilisée pour le développement et l'amélioration des potentiels d'interaction interatomique et intermoléculaire. Elle permet d'affiner ces potentiels en suivant une approche itérative basée sur des simulations Monte Carlo. Ce processus permet d'obtenir des résultats précis et de mieux comprendre les propriétés des systèmes complexes [35].

3.9.1Simulation à base de la méthode de monte Carlo

La simulation de Monte Carlo est une méthode statistique utilisée pour étudier le transport des atomes pulvérisés et optimiser les installations de dépôt. Elle repose sur des simulations numériques indépendantes qui permettent de lier une valeur physique à un nombre aléatoire. Cette approche est particulièrement adaptée aux situations complexes où une solution analytique précise est difficile à obtenir.

Grâce à la simulation de Monte Carlo, les ingénieurs peuvent évaluer différentes configurations et conditions de dépôt, afin de trouver les paramètres optimaux pour leurs installations. Les résultats finaux sont obtenus en prenant la moyenne des simulations, ce qui permet d'obtenir une estimation réaliste des performances attendues.

3.9.2 interprétations des résultats de la simulation Monte Carlo

La simulation Monte Carlo est une méthode utilisée pour modéliser la probabilité de différents résultats dans un processus qui ne peut pas être facilement prédit en raison de l'intervention de variables aléatoires.

Dans un contexte de trading financier, la simulation Monte Carlo peut être utilisée pour modéliser les rendements futurs potentiels d'un portefeuille, compte tenu d'un ensemble d'hypothèses sur les rendements des actifs, la volatilité et la corrélation.

L'interprétation des résultats d'une simulation de Monte Carlo dans un contexte de trading financier nécessite la compréhension des éléments clés suivants :

3.9.2.1 Les données d'entrée

Les données d'entrée d'une simulation de Monte Carlo comprennent des hypothèses sur les rendements, la volatilité et la corrélation des actifs.

Ces hypothèses peuvent être basées sur des données historiques, des avis d'experts ou une combinaison des deux.

Il est important de comprendre comment ces données ont été choisies et si elles sont raisonnables.

3.9.2.2 Les résultats

Les résultats d'une simulation de Monte Carlo comprennent une série de résultats potentiels, tels que :

- Le rendement attendu
- Le risque (mesuré par l'écart-type ou la volatilité), et
- La probabilité des différents résultats

3.9.2.3 La distribution des résultats

Les résultats d'une simulation de Monte Carlo sont généralement présentés sous la forme d'une distribution de résultats, telle qu'un histogramme ou une fonction de distribution cumulative (FDC)

Cela peut vous donner une idée de l'éventail des résultats potentiels et de la probabilité des différents résultats.

3.9.2.4 Calcul du rendement de pulvérisation par la méthode de Monte Carlo

Lorsque l'énergie de l'ion est supérieure à l'énergie seuil du solide, elle est suffisamment grande pour éjecter des atomes à partir de la cible qui va après vers le substrat, dans ce cas, un rendement de pulvérisation (Y) est défini comme le moyen nombre d'atomes éjectés du solide sous vide par impact d'ions primaires. Par exemple, quand un primaire ion éjecte en moyenne un atome de la cible, on dit que Y est égal à un. En général, Y est le rapport des nombres de particules émises par rapport au nombre de projectiles

$$Y = \frac{\text{nombre d'atomes émis}}{\text{nombre de projectiles}}$$

Le rendement de pulvérisation est une caractéristique du couple entre l'ion et la cible.

Cela dépend de nombreux paramètres :

Il change avec l'énergie et la nature de l'ion incident, l'orientation de sa trajectoire par rapport à la cible, la nature et l'état cristallographique de la cible, sa température, le champ magnétique et la pression. La formule théorique la plus régulièrement utilisée est mentionnée dans des travaux antérieurs basés sur P. Sigmund travaillé dans le régime de cascade linéaire. Celui-ci a été développé pour un angle de faisceau proche de la normale sur la surface de la cible. Pour cette étude, la méthode Monte Carlo (MC) a été configurée pour traiter avec précision la pulvérisation d'une cible et aussi pour paramétrer l'énergie de surface Us, l'énergie de déplacement Ud, ainsi que l'énergie de liaison interne Uint des atomes cibles ; ce dernier paramètre correspond à la perte d'énergie de l'atome lorsqu'il quitte sa position dans le matériau. Si l'énergie est supérieure à l'énergie de liaison de surface de la cible, l'atome est pulvérisé. Le rendement de pulvérisation est le nombre moyen d'atomes pulvérisés par incident ion.[36]

a) Influence de l'énergie de bombardement





Figure 3.10 : Rendement de pulvérisation en fonction d'énergie pour les cellules photovoltaïques du matériaux Cds, CIGS, et Pérovskite bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium, (c) Néon, (d) Xénon

Les gaz qui offrent le meilleur rendement en termes de solidité atomique et qui éjectent un nombre acceptable d'atomes de la cible sont l'argon et le xénon.Ces gaz sont particulièrement efficaces dans la pulvérisation cathodique . Grâce à leurs propriétés atomiques stables, l'argon et le xénon permettent de minimiser les effets indésirables tout en optimisant l'efficacité de ces ces procédés industriels, Effectivement, l'hélium et le néon présentent des rendements plus faibles en raison de leur faiblesse atomique. Ces gaz ont des atomes légers avec une faible capacité d'éjection d'atomes de la cible lorsqu'ils sont utilisés dans la pulvérisation cathodique Leur manque de stabilité atomique peut entraîner une moindre précision et efficacité dans ces applications industrielles. En revanche, l'argon et le xénon, grâce à leurs atomes plus lourds et plus stables, s'avèrent être des choix plus appropriés pour obtenir des résultats de pulvérisation plus satisfaisants et fiables.

b) Influence de l'angle d'incidence

La figure suivante illustre les deux cascades de collision basées sur l'angle d'incidence utilisées pour l'éjection des atomes de la cible :



Figure 3.11 : Schéma de la cascade de collision en fonction de l'angle d'incidence (a)Incidence normale ; (b) incidence oblique

Chaque cascade de collision met en évidence les interactions des particules incidentes avec la surface de la cible, montrant les trajectoires et les collisions subséquentes qui se produisent.

Ces cascades de collision sont essentielles pour comprendre les processus d'éjection des atomes lors de la pulvérisation cathodique. Elles permettent de visualiser comment les particules énergétiques interagissent avec la cible, conduisant à l'éjection des atomes de la surface.

En utilisant ces cascades de collision basées sur des angles d'incidence spécifiques, il est possible de mieux appréhender les mécanismes impliqués dans l'éjection des atomes lors de la pulvérisation cathodique, contribuant ainsi à l'optimisation du processus et à l'amélioration des performances des films minces obtenus.







Figure 3.12 : Rendement de pulvérisation en fonction d'angle pour les cellules photovoltaïques du matériaux Cds, CIGS, et Pérovskite bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium, (c) Néon

La variation des angles joue également un rôle dans la détermination de la qualité du rendement. Selon les résultats obtenus à partir du logiciel SRIM, l'angle optimal pour obtenir le meilleur rendement est de 75 degrés (argon, hélium, néon) et 85 degrés (Xénon).

Effectivement, l'énergie et l'angle sont les deux facteurs clés qui influencent la production d'un rendement de pulvérisation optimal d'âpres les résultats de SRIM

Le tableau ci-dessous présente les valeurs d'énergie et d'angle d'incidence nécessaires pour obtenir l'éjection maximale des atomes à partir de la cible :

	Cds	CIGS	Pérovskite
Argon	10Kev	10Kev	10Kev
	75 degré	75 degré	75 degré
Hélium	10Kev	10Kev	10Kev
	75 degré	75 degré	75 degré
Néon	10Kev	10Kev	10Kev
	75 degré	75 degré	75 degré
Xénon	1000 Kev	1000 Kev	1000 Kev
	85degré	85degré	85degré

Tableau 3.1: Énergies, angles d'incidences optimales obtenus par SRIM

c) Comparaison des différents gaz utilisés en fonction des l'énergies





Figure 3.13 Rendement de pulvérisation en fonction d'énergie pour les matériaux Cds, CIGS et CH₃NH₃PbI₃ bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon



d) Comparaison des différents gaz en fonction des angles d'incidences



Figure 3.14 Rendement de pulvérisation en fonction des angles d'incidences pour les matériaux Cds, CIGS et CH₃NH₃PbI₃ bombardée par les gaz (a) Argon, (b) hélium , (c) Néon,(d) Xénon

Effectivement, l'éjection de couches minces de sulfure de cuivre (CdS) et de séléniure de cuivre, d'indium, de gallium (CIGS) est généralement plus facile par rapport aux matériaux à base de pérovskite en raison de la stabilité de leurs liaisons chimiques. Les CdS et CIGS ont des liaisons relativement fortes entre leurs atomes constitutifs, ce qui facilite leur retrait en couches minces lors de divers procédés de dépôt

3.9.2.5. Simulation de transport de particules pulvérisées

Durant le transport les particules pulvérisées éjectés de la cible peuvent entrer en collision avec les atomes de gaz présentent dans la chambre a vide pendant le transport vers le substrat. Les chemins d'atomes pulvérisés de la cible jusqu'au dépôt sur le substrat à travers le gaz sont déterminés par les collisions et le dépôt de film dépend du transport collisionnel.

Simulation of the Metal Transport (SIMTRA), est un programme Monte Carlo de collision binaire qui permet à l'utilisateur de simuler le transport de particules pulvérisées à travers le flux de phase gazeuse pendant la pulvérisation. L'utilisateur est capable de définir la configuration simulée, et donc d'imiter sa propre configuration expérimentale. Non seulement le profil et la vitesse de dépôt mais aussi les propriétés du flux métallique (énergie, direction,.....) sont une sortie du code. Le code a été développé par Koen Van Aeken, où la nouvelle interface graphique a été construite par Francis Boydens.

a) Principe de fonctionnement

SIMTRA est basé sur quelques hypothèses concernant le transport des particules pulvérisées dans le gaz : les particules pulvérisées et rétrodiffusées sont des atomes neutres dans leur état fondamental, elles subissent des collisions uniquement avec les atomes de gaz neutre. Cette condition est acceptable puisque le degré d'ionisation typique du plasma en pulvérisation cathodique est de 10-3 à 10-4 et que par ailleurs, aux vitesses de dépôt de l'ordre de 0,1 nm/s, la densité d'atomes pulvérisés est très basse comparée à celle du gaz sous une pression de 0,1 - 1 Pa- Comme le gaz rare dans la chambre est considéré en équilibre thermique à une température de 300 K, sa distribution des vitesses suit donc une loi de Maxwell. Les effets de réchauffement du gaz ainsi que l'effet de sa raréfaction près de la cathode ne sont pas pris en compte.

b) Distribution énergétique des atomes arrivés au niveau du substrat

Grâce à nos recherches approfondies, nous avons réussi à déterminer une valeur optimale de pression et à ajuster la température pour trouver les paramètres appropriés pour le dépôt de films minces. De plus, nous avons utilisé de l'argon, qui est le gaz le plus couramment utilisé dans les applications de pulvérisation cathodique en raison de ses propriétés inertes et de sa compatibilité avec divers matériaux cibles.

Les figures 3.15 (a, b et c) présentent les résultats de simulations des atomes de métaux pulvérisés (CdS, CIGS et CH3NH3PbI3) atteignant la surface du substrat en fonction de leur énergie. Ces simulations nous permettent de visualiser et d'analyser les trajectoires des atomes pulvérisés et de comprendre comment leur énergie affecte leur comportement lorsqu'ils atteignent le substrat. Ces informations sont cruciales pour optimiser les conditions de pulvérisation cathodique et obtenir des films minces de haute qualité avec des caractéristiques structurales et fonctionnelles optimales.





Figure 3.15 la distribution énergétique des atomes bombardée par un faisceau d'ions Ar de: a) Cds, b) CIGS et la Pérovskite atteint le niveaux du substrat.

Cds	CIGS	Pérovskite
80559	7833	11025
12606	13803	14148
13143	14258	14222

Tableau 3.2 : Nombre d'atome déposé au niveau du substrat

Les courbes et le tableau extraits de la simulation mettent en évidence une observation significative : le nombre d'atomes atteignant le niveau du substrat est plus élevé pour le CdS que pour le CIGS et la pérovskite.

Malgré son rendement faible par rapport aux autres matériaux, la pérovskite est considérée comme l'un des meilleurs choix pour le dépôt de films minces en raison de ses performances/coûts avantageux. Cela en fait un candidat prometteur pour les applications photovoltaïques. De plus, la facilité de fabrication de la pérovskite en fait un élément essentiel de notre étude, permettant d'évaluer son potentiel et d'explorer des solutions innovantes dans le domaine des cellules solaires.

En incluant la pérovskite dans notre étude, nous sommes en mesure d'élargir notre compréhension des matériaux modernes utilisés dans les cellules photovoltaïques. Cela nous permet également de rechercher des approches novatrices pour améliorer les performances des dispositifs solaires en exploitant les avantages spécifiques de la pérovskite, tels que sa facilité de fabrication et son potentiel de réduction des coûts.

3.10 Conclusion

En conclusion, notre étude a mis en évidence l'utilisation des logiciels SRIM et SIMTRA pour analyser les interactions ioniques, l'éjection d'atomes et l'implantation lors du processus de pulvérisation cathodique de matériaux modernes tels que le CdS, le CIGS et les pérovskites. Ces outils de modélisation ont joué un rôle essentiel dans notre compréhension des mécanismes sous-jacents à la formation de films minces et de leurs qualités.

Les résultats obtenus ont permis d'approfondir notre connaissance des processus d'éjection d'atomes et de leur transport, ainsi que de leur impact sur la qualité des films minces déposés. Grace a ces résultats obtenus, nous avons pu identifier des conditions optimales de dépôt, pour obtenir des films minces de haute qualité.

Cette approche a fourni des informations supplémentaires pour orienter nos recherches futures dans le domaine de la pulvérisation cathodique et de ses applications, en particulier dans le développement de cellules solaires à couche mince et d'autres technologies émergentes.

Conclusion Générale

Conclusion Générale

En conclusion, cette étude et simulation des processus de pulvérisation des matériaux dans les cellules photovoltaïques modernes ont permis de mettre en évidence l'importance cruciale de ces techniques dans le domaine de l'énergie solaire renouvelable. Nous avons examiné en détail les différentes méthodes de pulvérisation, notamment la pulvérisation cathodique, pour déposer des couches minces de semi-conducteurs sur des substrats.

Les résultats obtenus ont souligné l'impact significatif de la stabilité atomique des matériaux déposés

sur les performances globales des cellules photovoltaïques. Nous avons constaté que l'utilisation de gaz tels que l'argon et le xénon peut conduire à des rendements supérieurs en raison de leur stabilité atomique, tandis que des gaz comme l'hélium et le néon peuvent présenter des limitations en raison de leur faiblesse atomique.

En approfondissant notre compréhension des propriétés optoélectroniques des matériaux pulvérisés, nous avons pu mieux appréhender les mécanismes influençant la conductivité électrique, l'absorption de la lumière et le transfert de charge dans les cellules photovoltaïques.

Les connaissances acquises grâce à cette étude aideront à optimiser les processus de pulvérisation des matériaux, contribuant ainsi à l'amélioration de l'efficacité et de la performance des cellules photovoltaïques modernes. Avec des avancées continues dans ce domaine, les cellules photovoltaïques deviendront plus abordables et plus compétitives, favorisant ainsi l'adoption généralisée de l'énergie solaire et contribuant à la transition vers un avenir énergétique durable et respectueux de l'environnement.
Bibliographie

[1] SaidChikha, « Optimisation de la puissance dans les systèmes photovoltaïques », thèse de Magister option Commande, UNIVERSITE LARBI BEN M'HIDI OUM EL BOUAGHI, 2011/2012

[2] SALAHEDDINE BENSALEM, « Effets de la température sur les paramètres caractéristiques des cellules solaires », Pour l'obtention du diplôme de Magister, UNIVERSITE FERHAT ABBAS – SETIF, 06/01/2011

[3] Ayache Khedidja, « Modélisation et Simulation d'un Générateur Photovoltaïque Couplé à un Réseau Électrique », Mémoire de Magister, Université Mohamed Chérif Messaâdia de Souk-Ahras, 30/09/2014.

[4] HELALI KAMELIA, Mémoire de Magister en génie électrotechnique, Université MOULOUD MAMMERI De TIZI-OUZOU, 25/06/2012.

[5] MOUHAMED MEZIANI Zahra, « MODELISATION DE MODULES PHOTOVOLTAIQUES », Mémoire de Magister, UNIVERSITE DE BATNA, 2012.

[6] <u>Oriol Planas</u> - Ingénieur Technique Industriel, spécialité mécanique

[7] <u>https://lenergie-solaire.net/energie-solaire-photovoltaique/elements/panneau-photovoltaique/cellule-photovoltaique/cellule-solaire-a-couche-mince</u>

[8] H. Berkane,« Élaboration et caractérisation de revêtements durs Ti-Al, Ti-Al-N et Al-Cr-N » thèse de magister, Université Mentouri de Constantine, 2013

[9] F. Mimounin, « Elaboration et caractérisation des couches minces de CuInS2 par pulvérisation chimique réactive SPRAY -Couche absorbante pour les cellules solaires » Université des Sciences et de la Technologie d'Oran (Mohamed Boudiaf), 2009

[10] A. Bouazza et A.Settaouti, « étude et simulation de l'influence De divers paramètres sur le processeur de pulvérisation d'atome dans un plasma », université - Usto Oran 2017

[11] O. Daranfed , « Elaboration et caractérisation de couches absorbantes des cellules solaires en couches minces à base de Cu2ZnSnS4 » , thèse de Doctorat en Sciences en Physique, université Mentouri de Constantine 1, 2013

[12] A. Adaine, « Optimisation numérique de cellules solaires à très haut rendement à base d'InGaN. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci] ». Université de Lorraine, 2018

[13] Fassi Ramzi « Elaboration et Caractérisation de Couche Absorbante Des Cellules Solaires en Couches Minces à Base de Cu2ZnSnS4 », Mémoire de Magister ,UniversitéMentouri Constantine, 2012

[14] Z. Oulad Elhmaidi « Élaboration de couches minces de Cu2ZnSnS4 par ablation laser pulsée et leur intégration en cellules solaires à haut rendement de photo conversion » thèse de doctorat Université du Québec, 2020 [15] A.Bouazza et A.Settaouti , Study and simulation of the sputtering process of material layers in plasma, DOI: 10.1515/ Monte carlo methods and applications -2016-0106

[16] S.Lalouni Cours Energie Solaire Photovoltaïque université A.Mira de Bejaia 2014/2015

[17] www. dépôt physiques en phase vapeur 7 juillet 2020

[18] Yunfang GUI thèse « Mise au point par pulvérisation cathodique magnétron en condition réactive et caractérisations mécaniques et tribologiques de revêtements de phases Magnéli de titane (TinO2n-1) » université de technologie de Belfort-Montbéliard en Matériaux le 02 juillet 2014

[19] H.Berkane « Elaboration et caractérisation de revêtements d'URS Ti-Al, Ti-Al-N et AlCr-N \gg

[20] Fatima. Abdo, Croissance de couches minces de silicium par epatxie en phase liquide à basse température pour applications photovoltaiques. These doctorat, Université de Lyon (2007).

[21] M. Khechba « Caractérisation de la réaction interfaciale entre une couche mince de tungstène et un substrat d'acier »université de Constantine des frères Mentouri 2008

[22] Audrey Chapelle « Elaboration et caractérisation de films minces nano composites obtenus par pulvérisation cathodique radiofréquence en vue de leur application dans le domaine des capteurs de CO2 » université de Toulouse Le 26 Mars 2012

[23] H. Karmed « Caractérisation de couches minces douche siliciures de métaux réfractaire » l'université de Ferhat Abbas Sétif 2007

[24] L. Si mohammed « Simulation d'interaction du faisceau d'ions énergétiques avec le fer massif par le logiciel SRIM » université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou 12/07/2018.

[25] A. Aziz, K. Kassmi, F. Olivié, G. Sarrabayrouse, A. Martinez,"Synthèses bibliographiques sur les chaînes photovoltarques. 1-générateur photovoltarque (PV) "',Rapport LAAS N°04348,27p, Juin 2004

[26] Anne Labouret et Michel Villoz, "'Energiesolairephotovoltarque: Le manuel duprofessionnel", Collection EEA Série Electrotechnique, Paris : Dunod, 2003

[27] A. Bouloufa, K. Djessas, A. Zegadi, Thin Solid Films 515 (2007) 6285–6287.

[28] M. Mezghache, B. Hadjoudja, (2013) IEEE

[29] :3rd World Conference on PhotovolraicEnerby Conversion May 11-18.2003 Osoka. Japan

[30] S. H. Song, K. Nagaich, E. S. Aydil, R. Feist, R. Haley, and S. A. Campbell, (2010) IEEE

[31] M. Richter, C. Schubbert, P. Eraerds, I. Riedel, J. Keller, J. Parisi, T. Dalibor, A. Avellán-Hampe, Thin Solid Films 535 (2013) 331–3.

[32] R. Pedrola, 'Réalisation de convertisseurs statiques DC/DC avec MPPT de haut rendement et faible puissance spécifique d'énergie PV', Rapport interne LAAS-CNRS., 2002

[33] L. Protin, S. Astier, "Convertisseurs photovoltaïques", Techniques de l'ingénieur, Ref D3360 – Vol DAB, <u>http://ti.idm.fr</u>

[34] https://www.energy.gov/eere/solar/perovskite-solar-cells

[35]https://www.gre-enr.fr/les-panneaux-solaires-en-perovskite-interets-cout-et-rendement/https://www.gre-enr.fr/les-panneaux-solaires-en-perovskite-interets-cout-et-rendement/

[36] L. Si mohammed « Simulation d'interaction du faisceau d'ions énergétiques avec le fer massif par le logiciel SRIM » université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou 12/07/2018.

[37] A. SAID, 'Etude numérique et expérimentale de la croissance de couches minces déposées par pulvérisation réactive', thèse de doctorat, École doctorale : Sciences des Métiers de l'ingénieur Paris,2016

Résumé

L'étude approfondie de la pulvérisation cathodique des matériaux modernes utilisés dans le domaine du photovoltaïque. En combinant des recherches théoriques, des simulations, cette étude vise à mieux comprendre les mécanismes sous-jacents de la pulvérisation cathodique et à optimiser les propriétés des couches minces déposées. Les simulations informatiques permettent de modéliser les interactions entre les espèces du plasma et les cibles, ce qui permet d'explorer différents paramètres et configurations. Les résultats obtenus fournissent des informations précieuses sur les conditions de dépôt optimales, les profils de croissance des couches minces et les propriétés structurales et électroniques des matériaux obtenus. Ces recherches et simulations contribuent à l'avancement des connaissances dans le domaine de la pulvérisation cathodique pour le photovoltaïque et ouvrent de nouvelles perspectives pour le développement de cellules solaires plus performantes et efficaces.

Abstract

In-depth study of cathodic sputtering of modern materials used in the field of photovoltaics. By combining theoretical research and simulations, this study aims to better understand the underlying mechanisms of cathodic sputtering and optimize the properties of the deposited thin films. Computer simulations allow for modeling the interactions between plasma species and targets, enabling exploration of different parameters and configurations. The obtained results provide valuable insights into the optimal deposition conditions, growth profiles of thin films, and the structural and electronic properties of the resulting materials. These research and simulations contribute to advancing knowledge in the field of cathodic sputtering for photovoltaics and open new perspectives for the development of more efficient and highperforming solar cells.

الملخص

دراسة معمقة للترذيذ الكاثودي للمواد الحديثة المستخدمة في مجال الطاقة الشمسية. من خلال مزج الأبحاث النظرية والمحاكاة، تهدف هذه الدراسة إلى فهم أفضل للآليات الأساسية للترذيذ الكاثودي وتحسين خصائص الأغشية الرقيقة المرسبة. تتيح المحاكاة الحاسوبية نمذجة التفاعلات بين ذرات البلازما والمستهدفات، مما يسمح باستكشاف مختلف المعلمات والتكوينات. تقدم النتائج الحاصلة نظرة ثاقبة حول الظروف المثلى للترسيب، وملامح نمو الأغشية الرقيقة، والخواص البنية والإلكترونية للمواد المحصلة. تساهم هذه الأبحاث والمحاكاة في تقدم المعرفة في مجال الترذيذ الكاثودي . للطاقة الشمسية وتفتح آفاق جديدة لتطوير خلايا شمسية أكثر كفاءة وأداءً عاليًا