

Conclusion générale

Notre travail s'est divisé en deux grandes parties. Dans un premier temps, nous avons calculé et étudié les propriétés structurales, électroniques (structure de bandes d'énergie, densité d'états), optiques (l'absorption, la réflectivité, la conductivité, la fonction diélectrique et l'indice de réfraction) des composés ZnX ($X = \text{O}, \text{S}, \text{Te}$) par la technique pseudo-potentielle et la méthode des ondes planes (PP-PW) dans le cadre de la DFT comme implémentée dans le code CASTEP. On les a traités avec deux approximations: La densité locale (LDA) et l'approximation de gradient généralisée (GGA) pour décrire l'énergie d'échange-corrélation.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié par simulation unidimensionnelle les performances photovoltaïques de deux structures de cellules solaires à hétérojonction: ZnO/ZnTe/CIGS et ZnO/ZnS/CIGS . La couche ZnO de type- n est utilisée comme une fenêtre optique qui permet à la lumière de passer vers la zone de charges d'espaces (ZCE) avec un minimum de réflexion, les couches tampons ZnS et ZnTe de type- n permet de créer la jonction PN avec la couche absorbante p-CIGS. Les paramètres physiques caractérisant les différentes couches constituant les deux structures, à savoir les couches ZnO , ZnS et ZnTe , sont retirées des résultats théoriques calculés à la 1^{ère} partie de notre travail. Les paramètres de la couche CIGS ont été retirés de la littérature.

Plusieurs points nous tenons à souligner à la fin de ce travail:

- ✓ Tout d'abord, l'optimisation de la structure des composés II-VI n'est pas toute a fait simple, il faut déterminer le volume optimale qui correspond au minimum de l'énergie total et qui caractérisent l'état fondamental du système considéré. Les valeurs des paramètres de maille obtenue surestime un peu de l'expérience; il est bien connu qu'en général l'approximation GGA surestime les paramètres structuraux, par contre le LDA les sous-estime.
- ✓ Par ailleurs, nous avons déterminé les propriétés électroniques telles que la structure de bandes. Cette dernière montre une transition directe dans tous les composés ZnX ($X = \text{O}, \text{S}, \text{Te}$), elle confirme l'existence d'un gap d'énergie entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction au point Γ .



- ✓ Après l'utilisation du code CASTEP, il s'avère que ce dernier est un code très puissant qui permet un calcul facile et direct des propriétés structurales, électroniques et des propriétés optiques des cristaux.

Tous les résultats obtenus sont en bon accord avec ceux obtenus par d'autres méthodes théoriques et les résultats expérimentaux existant au littérature.

La simulation numérique des cellules solaires CIGS utilisant les couches ZnTe, ZnS et ZnO dans la structure, donne un rendement de conversion comparable au rendement obtenu par d'autre structure à base de CdS. Il s'est avère que les changements apportés aux propriétés des deux couches interfaces avec l'absorbeur p-CIGS, la couche tampon ZnS et/ou la couche ZnTe, ont généralement un effet très significatifs sur les caractéristiques électriques de la cellule en comparaison aux changements effectuées sur les propriétés de la couche absorbante CIGS. De plus, l'épaisseur optimale de la couche absorbante p-CIGS est autour 3 μm dans le cas normal pour pouvoir maximiser la génération des porteurs électron-trou dans la zone de charge d'espace, ce caractéristique est étudiée et analysée sous la variation du paramètre géométrique de l'épaisseur de l'absorbeur (p-CIGS).

Finalement, nous pouvons dire que les caractéristiques de la cellule solaire à base de CIGS dépendent étroitement aux paramètres de la couche absorbante CIGS ainsi que aux propriétés des couches tampons. Les résultats obtenus par le simulateur SCAPS sont satisfaisants et sont en accord avec les résultats publiés.

Ce travail de simulation ouvre la voie à des nouvelles perspectives avec des applications potentielles dans le domaine de la photovoltaïque. Nous suggérons de:

- a) comparer les résultats obtenus par le simulateur unidimensionnel SCAPS par d'autres en utilisant une logicielle deux ou trois dimension, comme SILVACO-Atlas;
- b) Etudier par CASTEP les couches minces $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$ avec différentes concentration de Zn et les caractériser pour déterminer leurs propriétés structurels, électriques et optiques;
- c) Effectuer une étude plus approfondie sur la possibilité de développer des cellules solaires à double ou à multi-jonctions en se basant sur le même couche buffer $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$.

