

Liste des figures

<i>Chapitre I : Propriétés des composées II-VI</i>		
Figure I-1	la structure cristalline Zinc-blende et projection de la structure sur le plan (001).	4
Figure I-2	La structure Wurtzite et Projection de la maille élémentaire de la structure sur le plan [0001]	5
Figure I-3	zone de Brillouin d'un cristal Zinc blende	6
Figure I-4	Structure de bande d'énergie	7
Figure I-5	Structure de bande d'énergie des semi-conducteurs: A) gap indirect B) gap direct	8
Figure I-6	Bande interdite des semi-conducteurs II-VI en fonction du paramètre de la maille	9
<i>Chapitre II : Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT</i>		
Figure II-1	(a) : système réel constitué de plusieurs électrons en interaction. (b) : système fictif constitué de plusieurs électrons non interagissant de même énergie et de même densité électronique que le système réel.	18
Figure II-2	Processus itératif pour la résolution des équations de Kohn-Sham.	20
Figure II-3	Illustration schématise le potentiel de tout-électron (lignes continues) et pseudo-électron (lignes discontinues) et leurs fonctions d'ondes correspondantes (Illustration tirée de la référence).	23

Chapitre III : Résultats de simulation et discussion		
Figure III-2	les structures cristalline de Zinc-blende des composées: (a) ZnTe, (b) ZnS, (c) ZnO.	30
Figure III-2	Convergence de l'énergie totale de ZnO en fonction de l'énergie de coupure (Ecut) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA	31
Figure III-3	Convergence de l'énergie totale de ZnO en fonction du nombre de point K pour Ecut =800 : (a) LDA (b) GGA.	31
Figure III-4	Convergence de l'énergie totale de ZnS en fonction de l'énergie de coupure (Ecut) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA	32
Figure III-5	Convergence de l'énergie totale de ZnS en fonction du nombre de point K pour Ecut =850 : (a) LDA (b) GGA.	32
Figure III-6	Convergence de l'énergie totale de ZnTe en fonction de l'énergie de coupure (Ecut) pour NK-point (8 8 8) : (a) LDA (b) GGA.	33
Figure III-7	Convergence de l'énergie totale de ZnTe en fonction du nombre de point K pour Ecut =750 : (a) LDA et (b) GGA.	33
Figure III-8	de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnO.	36
Figure III-9	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnS.	37
Figure III-10	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire de ZnTe.	37
Figure III-11	Structure de bande d'énergie et le gap de ZnO.	39
Figure III-12	Structure de bande d'énergie et le gap de ZnS.	40
Figure III-13	Structure de bande d'énergie et le gap de ZnTe.	41
Figure III-14	Profile de DOS totale des composées ZnO, ZnS et ZnTe.	48
Figure III-15	Variation de l'Absorption optique en fonction de l'énergie des composées ZnO, ZnS, ZnTe pour l'approximation GGA et LDA.	43

Figure III-16	Variation de la Réflectivité en fonction de l'énergie pour les composées ZnO, ZnS, ZnTe pour deux approximations GGA et LDA.	45
Figure III-17	Variation de la conductivité de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	46
Figure III-18	Variation de la conductivité de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	46
Figure III-19	Variation de la conductivité de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	47
Figure III-20	Variation du constant diélectrique de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	48
Figure III-21	Variation du constant diélectrique de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	49
Figure III-22	Variation du constant diélectrique de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	49
Figure III-23	Variation de l'indice de réfraction de ZnO en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	51
Figure III-24	Variation de l'indice de réfraction de ZnS en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	51
Figure III-25	Variation de l'indice de réfraction de ZnTe en fonction de l'énergie pour l'approximation GGA et LDA.	51
Chapitre IV : Applications aux cellules solaires en couches minces		
Figure IV-1	Schéma simplifié d'une photopile à base de CIGS sous éclairnement.	57
Figure IV-2	Panneau de démarrage de SCAPS, le panneau d'action ou principal.	58
Figure IV-3	Points de fonctionnement (points de travail).	59

Figure IV-4	Panneau d'affichage des courbes I-V à l'obscurité et sous éclairement.	60
Figure IV-5	Structure de la cellule solaire à hétérojonction (n-ZnO/n-ZnTe/p-CIGS) étudiée.	62
Figure IV-6	Structure de la cellule solaire à hétérojonction (n-ZnO/n-ZnS/p-CIGS) étudiée.	62
Figure IV-7	Performances de la cellule solaire avec la couche tampon ZnTe en fonction de l'épaisseur p-CIGS.	64
Figure IV-8	Performances de la cellule solaire avec la couche tampon ZnS en fonction de l'épaisseur p-CIGS.	65