

Sommaire

-Introduction générale.....1

-Références

Chapitre I : Propriétés des composées II-VI

I-1. Introduction 3

I-2. Propriétés des matériaux semi-conducteurs II-VI 3

I-2.1. Propriétés structurales 3

a) Structure Zinc-blende 4

b) Structure wurtzite (Hexagonale) 4

I-2.2. Réseau réciproque de zone de Brillouin 5

I-2.3. Propriétés électroniques 6

I-2.3.1. Structure de bande d'énergie électronique 6

I-2.3.2. Gap direct – Gap indirect 7

I-2.4. Propriétés optiques 8

I-3. Propriétés des composés binaires ZnO, ZnS et ZnTe 10

I-4. Conclusion 11

I-4. Références..... 11

Chapitre II : Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT

II-1. Introduction.....13

II-2. Equation de Schrödinger.....	13
II-2.1. Approximation de Born-Oppenheimer.....	15
II-2.2. L'approximation de Hartree et de Hartree-Fock.....	15
II-2.3. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	16
II-3. Théorèmes et Equations de Hohenberg-Kohn.....	17
II-3.1. Les équations de Kohn-Sham.....	18
a) Approximation de la densité locale (LDA).....	19
b.) L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	22
II-4. Le pseudopotentiel.....	22
II-4.1. Méthodes des ondes planes.....	23
II-4.2. Intégration de la zone de Brillouin et points k.....	24
II-5. Le code CASTEP.....	24
II-6. Conclusion.....	25
II-7. Références.....	26

Chapitre III : Résultats de simulation et discussion

III-1. Introduction.....	28
III-2. Propriétés structurales des composés ZnO, ZnS, ZnTe.....	28
III-3. Détails des calculs.....	28
III-3.1. Paramètre d'entrée.....	28
III-3.1.1. Convergence de Cuttoff Énergie NK-point.....	30
 Pour le composé ZnO.....	31

 Pour le composé ZnS.....	32
 Pour le composé ZnTe.....	33
III-3.2.1. Optimisation de la structure.....	34
III-3.2.2.Détermination des paramètres de maille.....	35
✧ Pour tout les compose.....	35
III-3.2.3. Optimisation du volume.....	35
 Pour le composé ZnO.....	36
 Pour le composé ZnS.....	36
 Pour le composé ZnTe.....	37
III-4. Les propriétés électroniques des composés ZnX (X : O, S, Te).....	38
III-4.1. La structure des bandes d'énergie.....	38
III-4.2. La densité d'états électronique.....	41
III-5. Les propriétés optiques.....	42
III-5.1. L'absorption.....	43
III-5.2. La Réflectivité.....	44
III-5.3. La conductivité.....	46
 Pour ZnO.....	46
 Pour ZnS.....	46
 Pour ZnTe.....	47
III-5.4. Fonction diélectrique des composés ZnX (X : O, S, Te).....	47
 Pour ZnO.....	47
 Pour ZnS.....	48
 Pour ZnTe.....	48
III-5.5. L'indice de refraction.....	50

✚ Pour ZnO.....	50
✚ Pour ZnS.....	51
✚ Pour ZnTe.....	51
III-6. Conclusion	52
III-7. Références.....	53

Chapitre IV : Applications aux cellules solaires en couches minces

IV-1. Introduction.....	55
IV-1.1. Principe de fonctionnement de la cellule photovoltaïque	55
IV-2. Présentation du logiciel de simulation numérique SCAPS.....	56
IV-2.1. Introduction.....	56
IV-2.2. Notions de base.....	57
IV-2.3. Définir le point de fonctionnement.....	58
➤ La température T.....	58
➤ Le voltage V.....	58
➤ La fréquence f.....	58
➤ L'illumination.....	58
IV-2.4. Les courbes I-V.....	59
IV-3. Résultats de la simulation en SCAPS.....	60
IV-3.1. Introduction.....	60
IV-3.2. Paramètres de la structure étudiée.....	60

IV-4. Détermination de l'épaisseur optimale de l'absorbeur p-CIGS.....	63
IV-5 Conclusion.....	65
IV-6. Références.....	66
-Conclusion générale.....	67

