

إن أنصاف النواقل (II-VI) ذات الأساس الزنكي مثل : ZnX ($X = O, S, Te$) تتميز بخصائص جد مهمة عند استخدامها في الأجهزة الإلكترونية و في تطبيقات أخرى. لكن صناعة هذه المركبات ليس أمرا سهلا نتيجة الصعوبات أثناء تصنيعها و من ثم تصبح المعرفة الجيدة لخواصها أمر حتمي و لازم.

في الشطر الأول من هذا العمل، قمنا بحساب الخصائص البنيوية، الإلكترونية والضوئية للمركبات ZnX ($X = O, S, Te$) باستعمال برنامج CASTEP الذي يستخدم طريقة شبه الكمون والتي تركز على نظرية الكثافة الدالية (DFT) ولقد استعملنا تقريب التدرج المعمم وتقريب الكثافة الموضعية. في الشطر الثاني، قمنا باستخدام برنامج فعال ومتكيف للغاية مع نوعية خليتنا الشمسية، المسمى SCAPS-1D. أظهرت نتائج المحاكاة للبنيوتين المقترحتين أن مردود الخلايا الشمسية $ZnO/ZnTe/CIGS$ و $ZnO/ZnS/CIGS$ ذات الأغشية الرقيقة، أنها جد ممتازة مقارنة مع مثيلاتها في مختلف الأبحاث.

الكلمات المفتاحية: حساب ab-initio, شبه الكمون, CASTEP, ZnX , DFT, الطبقة الرقيقة CIGS, SCAPS-1D.

Résumé :

Les semi-conducteurs (II-VI) à base de Zinc, tels que: ZnX ($X = O, S, Te$), présentent des propriétés exceptionnelles lorsqu'ils sont utilisés dans les dispositifs optoélectroniques et/ou pour d'autres applications. Cependant, la fabrication de ces composés n'est pas facile, en raison des difficultés de synthèse. D'où, la bonne connaissance de leurs propriétés physiques est indispensable. De nos jours, les méthodes de type ab-initio se révèlent de plus en plus comme étant un outil de choix pour interprétés à l'échelle microscopique les observations expérimentales et guider efficacement le choix des expérimentales.

Dans la première partie de ce travail, les propriétés structurales, électroniques et optiques des composés ZnX ($X = O, S, Te$) ont été calculées par deux approximations (LDA et GGA) utilisant la méthode pseudo-potentiels et cela dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Le code CASTEP a été utilisé pour l'optimisation structurale et pour la détermination des propriétés physiques des composés. Dans la deuxième partie, on a utiliser un logiciel très puissant et très adapté (SCAPS-1D) pour simuler les performances de deux structures des cellules solaires à base de $Cu(In,Ga)Se_2$ (CIGS). Les deux structures proposées utilisent les composés ZnO et ($ZnTe$ ou ZnS) comme une couche fenêtre et une couche tampon, respectivement. Les paramètres des trois couches ont été retirées directement des propriétés obtenus par les calculs ab-initio. Les performances photovoltaïques obtenues pour les deux structures $ZnO/ZnTe/CIGS$ et $ZnO/ZnS/CIGS$ sont meilleures et comparables aux celles de la littérature.

Mots clés : calcul ab-initio, DFT, pseudo-potentiels, CASTEP, ZnX , couche mince CIGS, SCAPS-1D.

Abstract:

The semiconductors (II-VI) based on Zinc, such as: ZnX ($X = O, S, Te$), exhibit exceptional properties when used in optoelectronic devices and other applications. However, the growth of these compounds is not easy due to the difficulties involving in their synthesis. Therefore, a good knowledge of their properties is indispensable. Nowadays, ab-initio methods are helpful for a microscopic scale interpretation of experimental observation and effectively guide the design of experiments.

In the first part of this work, the structural, electronic and optical properties of the ZnX ($X = O, S, Te$) compounds, were calculated by means of Density Functional Theory (DFT), using the method of pseudo-potential and with two approximations (LDA) and (GGA). The CASTEP code was used for structural optimization and for determining the physical properties of this compounds. In the second part, we use very powerful and highly adapted software (SCAPS-1D) to simulate the performance of two structures based on $Cu(In,Ga)Se_2$ (CIGS) solar cells. The two proposed structures use the ZnO and ($ZnTe$ or ZnS) compounds as a window layer and a buffer layer, respectively. The parameters of the these layers were removed directly from the obtained properties using ab-initio calculations. The obtained photovoltaic performances for two structures $ZnO/ZnTe/CIGS$ and $ZnO/ZnS/CIGS$ are better and comparable to those of the literature.

Keywords: calcul ab-initio, DFT, pseudo-potentiels, CASTEP, ZnX , thin layer CIGS, SCAPS-1D.