

FACULTE DE TECHNOLOGIE
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE
N°:2023/ME/.....



DOMAINE: SCIENCES ET TECHNOLOGIE
FILIERE: ELECTRONIQUE
OPTION: MICROELECTRONIQUE

**Mémoire Présenté pour L'obtention
du Diplôme de Master Académique**

Présenté par :

Zaitar Oussama Nour Eddine

Meterfi Mohamed El Amin

Intitulé

**Etude des propriétés optoélectroniques
pour le double pérovskite Ba_2BiTaS_6**

Soutenu devant le jury composé de:

Dr. HADJAB Moufdi

Université M'sila

Président

Pr. BENNACER Hamza

Université M'sila

Encadreur

Dr. GHELLAB Torkia

Université M'sila

Examineur

Année Universitaire :2022 /2023

Remerciement

Avant d'entamer le détail de notre projet de fin d'études, il nous tient à cœur de remercier toutes les personnes de mérite sans qui ce travail n'aurait jamais abouti.

*Nous exprimons nos vifs remerciements à notre encadreur **Prof. BENNACER Hamza** pour son soutien inconditionnel, sa disponibilité, ses conseils, son apport dans le projet et l'aide permanente qu'il nous a prodiguée.*

Très grands sont les sentiments de gratitude et de considération que j'exprime à l'égard de notre tuteur de stage pour ses orientations, ses conseils et son aide précieuse tout au long de notre période de stage.

*Nous savons gré également aux membres du jury **Dr. HADJAB Moufdi** et **Dr. GHELLAB Torkia** qui ont eu l'obligeance d'accepter d'évaluer ce travail.*

Enfin, nous remercions toutes les personnes qui ont contribué de loin ou de près à la concrétisation de ce travail.

Dédicaces

- *À nos familles aimantes, qui nous ont soutenus tout au long de ce parcours académique et ont été une source inépuisable de motivation et d'encouragement.*
- *À nos amis proches, pour leur soutien indéfectible, leurs encouragements constants et leurs moments de détente précieux qui ont allégé le poids des études.*
- *À nos enseignants et mentors, qui nous ont guidés, inspirés et partagé leur savoir avec générosité, contribuant ainsi à notre développement intellectuel.*
- *À nos collègues et camarades de classe, pour leur collaboration, leur esprit d'équipe et les précieux échanges qui ont enrichi notre expérience universitaire.*
- *À notre université, pour nous avoir offert un environnement propice à l'apprentissage, aux découvertes et à la croissance personnelle.*
- *À tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à notre parcours universitaire, nous vous exprimons notre profonde gratitude et reconnaissance.*

On ne peut pas assez exprimer notre reconnaissance envers vous tous. C'est grâce à votre soutien et à votre présence que nous avons pu atteindre cette étape importante de notre vie académique.

Merci infiniment à chacun d'entre vous.

Résumé :

Ce mémoire de Master aborde le domaine des matériaux photovoltaïques abondants et peu coûteux, avec un focus particulier sur les pérovskites et les Double pérovskites. La partie théorique approfondie a traité où les différentes propriétés des pérovskites ont été étudiées, en plus des critères de sélection des matériaux photovoltaïques. De plus, les méthodes de calcul utilisées dans l'étude sont mentionnées. Et pour la partie pratique, une présentation a été montrée détaillant l'effet du calcul. Ensuite, les résultats obtenus ont été analysés et discutés en termes de propriétés électroniques, de structure de bande, de propriétés optiques, de fonction diélectrique, de coefficient d'absorption, d'indice de réfraction et de réflectivité.

Mots clés : Matériaux photovoltaïques, Pérovskites, Doubles Pérovskites, propriétés électroniques, coefficient d'absorption, indice de réfraction, réflectivité.

Abstract :

This Master's thesis addresses the field of abundant, low-cost photovoltaic materials, with a particular focus on perovskites and Doubleperovskites. The in-depth theoretical part dealt with where the different properties of perovskites were investigated, in addition to the selection criteria for photovoltaic materials. In addition, the calculation methods used in the study are mentioned. And for the practical part, a presentation was shown detailing the effect of the computation. Then the obtained results were analyzed and discussed in terms of electronic properties, band structure, optical properties, dielectric function, absorption coefficient, refractive index, and reflectivity.

Keywords: Photovoltaic materials, Perovskites, Double Perovskites, electronic properties, absorption coefficient, refractive index, reflectivity.

الملخص:

تتناول أطروحة الماجستير هذه مجال المواد الكهروضوئية الوفيرة منخفضة التكلفة ، مع التركيز بشكل خاص على البيروفسكايت . حيث تناول الجزء النظري المتعمق أين تم فحص الخصائص المختلفة للبيروفسكايت ، بالإضافة إلى معايير الاختيار للمواد الكهروضوئية. بالإضافة إلى ذلك ، تم ذكر طرق الحساب المستخدمة في الدراسة. وبالنسبة للجزء العملي ، تم عرض تقديمي يشرح بالتفصيل تأثير الحساب. ثم تم تحليل النتائج التي تم الحصول عليها ومناقشتها من حيث الخصائص الإلكترونية وهيكل النطاق والخصائص البصرية و الفجوة الطاقوية ومعامل الامتصاص ومعامل الانكسار والانعكاسية.

الكلمات الرئيسية

المواد الفوتوفولتائية، البيروفسكايت، البيروفسكايت المزدوجة، الخصائص الإلكترونية، معامل الامتصاص، معامل الانكسار، معامل الانعكاس.

Liste des Figures

Figure I.1. Panneaux photovoltaïques.

Figure. I.2 : La pérovskite Titanate de Calcium (CaTiO_3).

Figure I.3 : Deux différentes façons de représenter La structure pérovskite cubique ABX_3 .

Figure I.4 : Comparaison des phases a) orthorhombiques ; b) tétraogonales et c) pérovskites cubiques obtenues par optimisation structurelle de MAPbI_3 . Rangée supérieure : a-c-plane et rangée inférieure : a-b-plane.

Figure I.5 : Classification de structure de pérovskite.

Figure I.6 : Conditions requises pour la ferroélectricité (polarisation) et le ferromagnétisme (mouvement de spin d'électron non apparié) .

Figure I.7. (a) Structure simple pérovskite ABO_3 (b) Structure double pérovskite $\text{A}_2\text{BB}'\text{O}_6$.

Figure I.8. La variation du rendement de conversion idéal pour une cellule en fonction de la largeur de bande interdite du matériau (à gauche) et les variations spectrales de la sensibilité d'une cellule solaire au (Si) ou à (GaAs) (à droite). RQI : le rendement quantique interne.

Figure I.9 : Schéma décrivant le processus itératif pour la résolution des équations de Kohn-Sham

Figure I.10 : Logo du programme WIEN2k.

Figure I. 11 : Schéma fourni par le WIEN2k.

Figure.II.1. La structure double pérovskite (cubique) étudiée.

Figure. II.2. La structure de bandes électroniques calculée pour le $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$

Figure. II.3. La structure de bandes électroniques calculée pour le $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$

Figure.II.4. : Le Coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

Figure.II.5. : L'indice de réfraction $n(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

Figure.II.6. : La réflectivité $R(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

Liste des Tableaux

Tableau I.1 : Quelques propriétés des oxydes de pérovskite.

Tableau.II.1. Les approximations fonctionnelles semi-locales disponibles dans le code Wien2k.

Tableau.II.2. Les paramètres de convergences utilisées dans le calcul.

Tableau.II.3. Le rayon muffin-tin (RMT en unités atomiques) choisis pour chaque élément chimique du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ dans notre calcul.

Tableau. II. 4. Le paramètre de réseau calculer pour le compose $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$. L'approximation GGAPBESol. l'approximation TB-mBJ.

Tableau.II.5. La valeur de Gap énergétique calculé avec l'approximation TB-mBJ.

Table des matières

Remerciements	I
Dédicaces	II
Résumé/ Abstract	III
Liste des figures	V
Liste des tableaux	VI
Sommaire	VII
Introduction Générale	2

Chapitre I : Partie Theorique

1. Introduction	4
2. Matériaux photovoltaïque abondants à faible coût	5
3. Les Pérovskites	6
3.1. La structure de pérovskites	7
3.2. Classification des pérovskites	9
3.3. Propriétés	11
4. Les types des Pérovskites	16
4.1. Les Pérovskites Pour Les Cellules Photovoltaïques	17
4.2. Doubles Pérovskites	18
4.2.i. Les propriétés de doubles pérovskites	18
4.2.ii. Les applications de doubles-pérovskites	19
4.3. Critères du choix des matériaux photovoltaïques	20
5. Méthodes de Calculs	22

5.1. La théorie fonctionnelle de la densité (DFT)	22
5.2. Méthode d'onde plane augmentée linéaire à plein potentiel (FP-LAPW)	24
5.3. La Méthode Wien2k	25
6. Conclusion	27
- Références Bibliographique	28

Chapitre II : Partie Pratique - Résultats et Discussion -

1. Introduction	33
2. Détails du calcul	33
3. Résultats et discussions	36
3.1. Propriétés électroniques	36
3.2. Propriétés optiques	37
3.3. Coefficient d'absorption	38
3.4. Indice de réfraction	39
3.5. Réflectivité	40
4. Conclusion	41
- Références Bibliographique	42
Conclusion Générale	45

Introduction

Générale

Introduction Générale

L'énergie joue un rôle essentiel dans notre quotidien, tant au niveau individuel que collectif. Sa disponibilité et son utilisation efficace sont devenues des enjeux majeurs pour assurer le développement durable de notre société[1]. Dans ce contexte, les énergies renouvelables ont gagné une importance, offrant une solution prometteuse pour répondre à nos besoins énergétiques tout en préservant l'environnement.

Parmi les différentes formes d'énergies renouvelables, l'énergie solaire photovoltaïque occupe une place prépondérante. Elle est abondante, gratuite et disponible partout dans le monde. Cependant, pour exploiter pleinement le potentiel de l'énergie solaire, il est crucial de développer des cellules solaires efficaces et économiquement viables[2].

Au fil des années, les cellules solaires ont connu une évolution significative grâce au développement de nouveaux matériaux photovoltaïques (PV). L'un de ces matériaux prometteurs on trouve les pérovskites, qui a suscité un vif intérêt dans la communauté scientifique, Les propriétés uniques des pérovskites offrent des opportunités passionnantes pour améliorer les performances des cellules solaires.

Cependant, pour concevoir et optimiser efficacement les cellules solaires à base de pérovskite, il est essentiel de prédire avec précision les propriétés de ces matériaux. C'est là que notre étude intervient[3]. Notre objectif principal est d'approfondir notre compréhension des propriétés optoélectronique d'un matériau double pérovskite de type de A_2BCD_6 c'est le Ba_2BiTaS_6 .

Ce mémoire est structuré en deux chapitres. Le premier chapitre est dédié à une approche théorique, dans laquelle nous explorerons les bases des cellules solaires, les propriétés des pérovskites et le calcul et les méthodes numériques utilisées pour étudier ces propriétés[4]. Le deuxième chapitre sera davantage axé sur une application pratique, présentant les résultats de simulations et de la prédiction et nos commentaires à leur sujet.

En combinant la théorie et la pratique, notre étude vise à contribuer à la compréhension et à l'amélioration des matériaux PV à base de pérovskite. Nous espérons que nos travaux permettront de faire progresser les technologies solaires et de favoriser l'adoption des énergies renouvelables, contribuant ainsi à un avenir énergétique plus durable et respectueux de l'environnement.

Références :

[1] Green, M.A., Ho-Baillie, A., & Snaith, H.J. (2014). L'émergence des cellules solaires à pérovskite. *Photonique de la nature*, 8(7), 506-514.

[2] Laboratoire National des Energies Renouvelables (NREL). (2020). Étude sur l'avenir de l'électricité renouvelable : Volume 1 - Exploration de l'avenir de l'électricité renouvelable à forte pénétration. Extrait de <https://www.nrel.gov/docs/fy12osti/52409-1.pdf>

[3] Yang, W.S., Noh, J.H., Jeon, N.J., Kim, Y.C., Ryu, S., Seo, J. et Seok, S.I. (2015). Couches de pérovskite photovoltaïques hautes performances fabriquées par échange intramoléculaire. *Sciences*, 348(6240), 1234-1237.

[4] Agence internationale de l'énergie (AIE). (2021). Énergies renouvelables 2021 : analyse et prévisions jusqu'en 2026. Extrait de <https://www.iea.org/reports/renewables-2021>

Chapitre I

La Partie Théorique

I. 1. Introduction

L'énergie solaire est une source d'énergie renouvelable prometteuse pour répondre à la demande croissante d'énergie dans le monde. Les cellules photovoltaïques sont des dispositifs qui convertissent la lumière solaire en électricité, et leur efficacité dépend fortement du matériau utilisé. Il est donc crucial de trouver des matériaux photovoltaïques abondants et coûteux pour rendre l'énergie solaire compétitive par rapport aux sources d'énergie conventionnelles telles que le charbon et le pétrole.

Parmi les nouveaux matériaux prometteurs pour les cellules photovoltaïques, on trouve les pérovskites, qui ont attiré l'attention de la communauté scientifique en raison de leurs efficacités élevées et de leurs faibles coûts de production. Les pérovskites sont des cristaux inorganiques qui ont une structure de type ABX_3 , où A et B sont des cations métalliques et X est un anion non-métallique. Les pérovskites ont une grande flexibilité chimique, ce qui leur permet de présenter une large gamme de propriétés électroniques, optiques et de transport.

Les pérovskites ont été utilisées avec succès dans les cellules solaires en raison de leur large plage d'absorption, de leur coefficient d'absorption élevé et de leur faible coût. Les pérovskites ont également des propriétés de transport électronique élevées, ce qui améliore l'efficacité de la cellule solaire. Les doubles pérovskites, qui ont une structure de type $A_2BB'X_6$, sont également une classe de matériaux très prometteurs pour les cellules solaires en raison de leur large gamme de propriétés électroniques et optiques.

La compréhension des propriétés des pérovskites et des doubles pérovskites est essentielle pour améliorer leur efficacité et leur stabilité. La méthode de calcul est un outil essentiel pour étudier les propriétés physiques de ces matériaux. Parmi les méthodes de calcul les plus courantes, on trouve la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), la méthode de l'approximation de potentiel linéaire plein (FPLAPW) et sous le code de calcul Wien2k.

2. Matériaux photovoltaïque abondants à faible coût

Avec la demande croissante de sources d'énergie renouvelables, l'énergie solaire est devenue une source importante d'électricité dans le monde. Les modules photovoltaïques (PV) sont l'un des composants clés des cellules solaires. Ces modules sont constitués de cellules fabriquées à partir de matériaux semi-conducteurs qui convertissent la lumière du soleil en énergie électrique. Le matériau semi-conducteur le plus couramment utilisé dans ces cellules est le silicium [1].

Ces matériaux ont un potentiel pour des applications à grande échelle dans les cellules solaires. Ses coefficients d'absorption sont élevés et moins dépréciés que le silicium, ce qui pourrait réduire les coûts de production des dispositifs photovoltaïques.

Des études ont montré que les modules photovoltaïques fabriqués à partir de ces matériaux peuvent être tout aussi efficaces que ceux fabriqués à partir de silicium. Par exemple, des chercheurs de l'Université de Californie à Berkeley ont mis au point un module photovoltaïque fabriqué à partir de sulfure de cuivre-zinc-étain (CZTS) qui a une efficacité de 14.2% [2]. De même, des chercheurs de la North Carolina State University ont développé un matériau appelé kesterite qui a montré des résultats prometteurs dans les applications de cellules solaires [2].



Figure I.1 : Des panneaux photovoltaïques [3].

L'utilisation de matériaux abondants dans la terre pour les modules photovoltaïques a le potentiel de révolutionner l'industrie des cellules solaires, en la rendant plus durable, accessible et abordable. Cependant, il reste des défis à relever, tels que l'amélioration de l'efficacité et de la stabilité de ces matériaux, l'optimisation des processus de fabrication et la réduction de l'impact environnemental de la production à grande échelle.

L'exploration et le développement de matériaux alternatifs pour les modules photovoltaïques, sont cruciaux pour la croissance et la durabilité de l'industrie des cellules solaires. Alors que le silicium reste le matériau dominant dans l'industrie, le potentiel des matériaux abondants en terre a attiré l'attention des chercheurs et des investisseurs, et de nouvelles innovations et investissements dans ce domaine pourraient aboutir à des cellules solaires plus efficaces, durables et rentables[1].

3. Les Pérovskites

La famille des composés de structure pérovskite est très vaste, elles forment une des principales familles d'oxydes cristallins. Leur nom provient du minéral CaTiO_3 qui présente une structure cristalline analogue. Ce minéral fut décrit pour la première fois en 1839 par le géologue *Gustav Rose* qui l'a nommé en l'honneur d'un grand minéralogiste russe, le comte *Lev Aleksevich Von Perovski* (1792-1856)[4].



Figure I. 2 : La pérovskite Titanate de Calcium (CaTiO_3) [5].

Les pérovskites idéales ont la formule générale ABX_3 où **A** est le plus fréquemment un alcalin, alcalino-terreux ou une terre rare, **B** un métal de transition 3d, 4d ou 5d et **X** un anion, généralement O^{2-} , F^- , S^{2-} ou un halogène. Les nombreuses possibilités de couple cation **A** - cation **B** engendre une grande diversité de composés réalisables et selon leur nature, il est possible d'observer une multitude de propriétés intéressantes comme des propriétés diélectriques, électriques, magnétiques, optiques, catalytiques et supraconductrices, ... etc. Ce qui a poussé les chercheurs à s'intéresser à ce type de structure depuis une vingtaine d'années [6].

Les structures des pérovskites existent en trois types : la première contient des électrons localisés, la seconde contient des états de bande d'énergie délocalisés, tandis que la troisième peut être une transition entre ces deux types[7].

Il existe plusieurs types de structures de pérovskites qui existent sous différentes formes telles que : A_2BO_4 Pérovskite à couches, ABO_3 perovskite, $A_2A B_2B O_9$ Triple pérovskite et $A_2BB O_6$ Double pérovskite, etc. les plus abondantes sont $MgSiO_3$ et $FeSiO_3$ [7].

Dans plusieurs applications, les pérovskites se sont révélées très intéressantes en raison de leurs propriétés utiles dans les dispositifs de traitement des signaux acoustiques de surface, électro chromiques, de commutation, de stockage d'images, de filtrage et photochromiques [8].

Récemment, les pérovskites d'halogénures ont attiré une attention considérable dans les domaines de l'exploration matérielle, en raison de sa grande efficacité du solaire à semi-conducteurs [9].

3.1. La structure de pérovskites

Idéalement, la structure pérovskite est décrite comme cubique. Les atomes A forment les coins des cellules cubiques, les atomes B sont au centre en coordination 6 fois, entourés d'un octaèdre d'anions, les atomes d'oxygène sont situés dans les centres des faces, et le cation A en coordination 12 fois cub-octaèdre [10].

C.à.d., La maille élémentaire d'une pérovskite idéale est cubique dans le groupe de symétries $Pm\bar{3}m$ (#221), avec un paramètre de maille de l'ordre de 3.9 \AA (7.37 Bohr) dans lequel :

- **Les cations A** occupent les sommets des cubes et sont entourés par 12 anions dans une coordination cubo octaédrique.
- **Les cations B** occupent les centres des cubes et sont entourés par 6 anions dans une coordination octaédrique.
- **Les anions X** occupent le centre de chaque face des cubes et sont entourés par 2 cations B et 4 cations A.

On peut également obtenir le même réseau par une répétition de structure cubique où les cations A occupent le centre du cube, les cations B les sommets et les anions X le milieu des arêtes du cube (figure I.3). Dans la suite de ce manuscrit, X correspondra à l'oxygène.

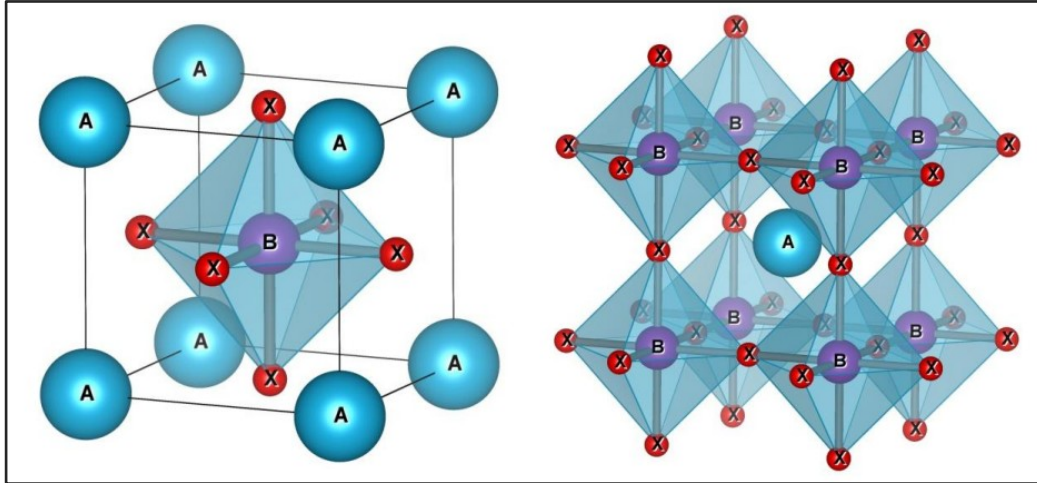


Figure I.3 : Deux différentes façons de représenter la structure pérovskite ABX_3 cubique, **a)** atome B à l'origine (octaèdres BX_6 représentés), **b)** atome A à l'origine de la maille [11].

Les matériaux de pérovskite ont des phases différentes selon leur température. Si la température est inférieure à 100 K, ils ont montré une phase orthorhombique stable (γ).

D'autre part, la phase tétragonale (β) a commencé à apparaître et à remplacer la phase orthorhombique (γ) d'origine [6] lorsque la température a augmenté à 160 K.

La phase cubique stable (α) a remplacé la phase tétragonale (β) phase où la température augmente de 330 K [12].

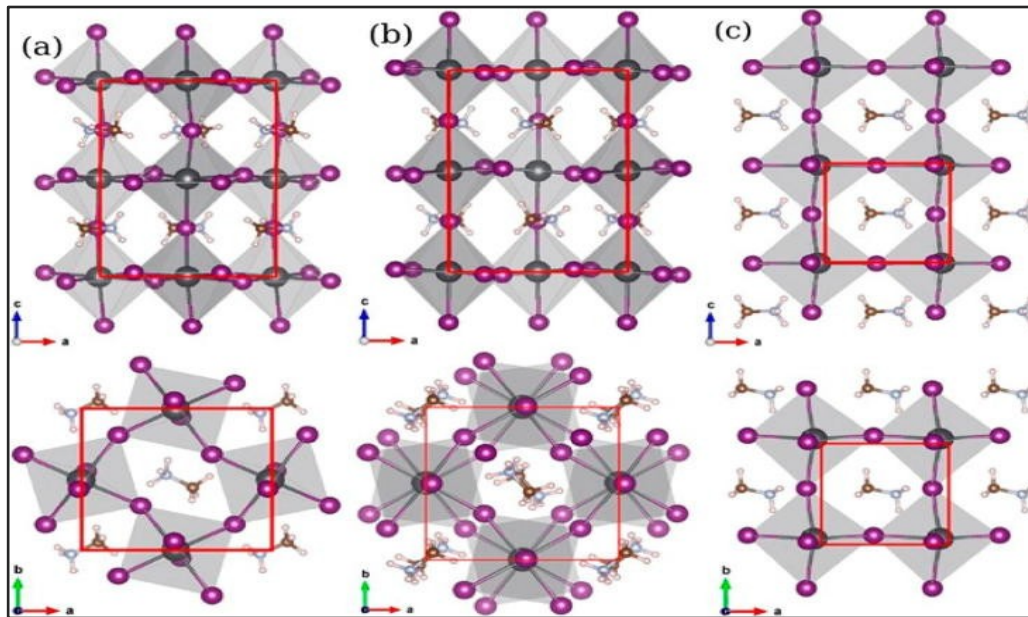


Figure I.4 : Comparaison des phases a) orthorhombiques ; b) tétraogonales et c) pérovskites cubiques obtenues par optimisation structurale de MAPbI₃. Rangée supérieure : a-c-plane et rangée inférieure : a-b-plane [13].

3.2. Classification des pérovskites

Une classification des structures de type pérovskite sur la base des rayons des ions métalliques constituants a été tentée par plusieurs chercheurs [14]. En raison de la flexibilité de la structure cristalline de pérovskite ABO₃ en plus de sa capacité à accueillir un large éventail de cations avec différents états d'oxydation.

La possibilité de plusieurs substitutions à la position des cations est la caractéristique principale des pérovskites [15] qui conduisent à l'apparition de grands groupes de composés avec des cations dissemblables en position B (AB_xB_{1-x}O₃); avec des cations différents en position A (A_xA_{1-x}BO₃) et avec substitution en position cation (A_xA_{1-x}B_xB_{1-x}O₃).

Les valences de cations A et B sont généralement proches de 2⁺ et 4⁺[15]; respectivement, mais dans certains cas leurs valences seront de 3⁺ pour les deux éléments seulement si le cation B³⁺ a une coordination de six. Les phases d'oxyde ont été principalement divisées en deux types [16].

1. Oxydes ternaires de type ABO₃ et leurs solutions solides qui, sur la base des états d'oxydation, peuvent être classés en A¹⁺B⁵⁺O₃, A²⁺B⁴⁺O₃, A³⁺B³⁺O₃ et espèces déficientes en oxygène et en cations.

2. Composés de type complexe plus récent $(AB_x B_y) O_3$ où A et B sont deux éléments différents dans des états d'oxydation différents et $x + y = 1$.

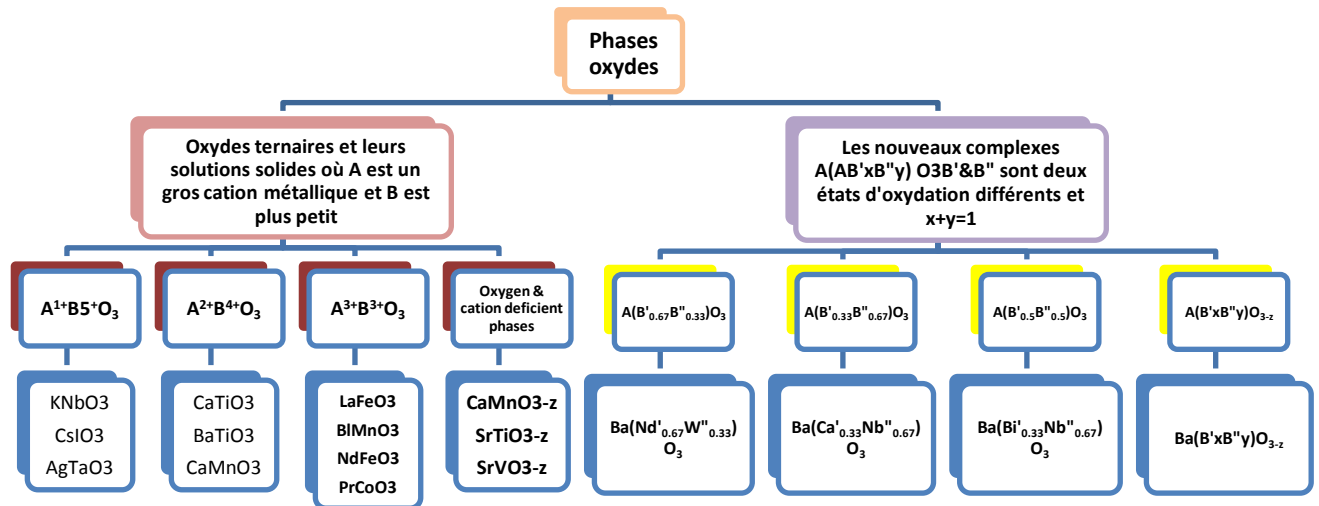


Figure I.5: Classification de structure de pérovskite [17].

Le gauchissement des couches $(AO_3)^{4-}$ dans les structures de pérovskite en raison de la distorsion ou du déplacement du réseau d'anions oxygénés causé par la variation de valence en position A [18].

Ce flambement conduit à une distorsion de l'octaèdre avec des cations B au centre, dans ce cas le cation B doit avoir la flexibilité de tolérer cet effet [19]. Pour remplir la position B cation, les éléments métalliques de transition sont les candidats les plus appropriés en raison de leur polyvalence ou des configurations spéciales d'électrons 3d et 4d. C'est la raison pour laquelle les oxydes métalliques de transition ont des structures de type pérovskite et ils ont habituellement des propriétés physiques extraordinaires[20].

Les composés de type complexe de pérovskites, $A (B_x B_y)O_3$, peuvent être divisés en quatre sous-groupes [21]:

- a) Composés à phase pauvre en oxygène, $A (B_x B_y)O_{3-z}$.
- b) Autres qui contiennent des montants égaux des deux éléments B seulement, $A (B_{0,5}B_{0,5})O_3$.
- c) Ceux qui contiennent l'élément d'état de valence supérieur ont deux fois plus de valeur que l'élément d'état de valence inférieur, $A (B_{0,33}B_{0,67})O_3$.

- d) Ceux qui contiennent l'élément d'état de valence supérieur en deux valeurs autant que l'élément d'état de valence inférieur, $A(B_{0.67}B_{0.33})O_3$.

3.3. Propriétés

Les matériaux de pérovskite présentent de nombreuses propriétés intéressantes en raison de leur nature chimique caractéristique, comme leur non-stichométrie des anions et/ou cations, la structure électronique du mélange de valence, la distorsion de la configuration des cations, et la valence mixte.

La possibilité de Pérovskite à synthétiser des multi composants par substitution partielle de cations dans les positions A et B donne lieu à divers types complexes avec des propriétés particulières telles que; propriétés diélectriques, propriétés optiques, ferroélectricité, supraconductivité, piézoélectricité, multiferroïcité, colossal magnétorésistance (CMR) et activité catalytique[22].

a) Propriétés diélectriques

Les matériaux diélectriques sont les matériaux dans lesquels les champs électrostatiques peuvent persister longtemps [23]. Il a montré une grande résistance au canal de courant électrique au-dessous de l'action de la tension de courant continu appliquée et diverger fortement dans leurs propriétés électriques simples de matériaux conducteurs.

Des couches de ces substances sont généralement insérées dans les condensateurs pour améliorer leur rendement, et le terme diélectrique renvoie à cette application.

Une grande permittivité diélectrique ou des matériaux ferroélectriques sont d'une importance massive pour l'industrie de l'ingénierie et de l'électronique. La ferroélectricité est généralement décrite par un modèle à mode doux [24].

Plusieurs voies ont été suivies pour expliquer les propriétés diélectriques et mécaniques à partir de la structure simple $BaTiO_3$ par le système de solution solide $Pb(Zr,Ti)O_3$ à d'autres familles distinctes de matériaux. Ces voies tiennent compte de la flexibilité de la manipulation chimique et de la soumission des pérovskites [25].

Le relaxer ferroélectrique est l'une des voies qui montrent certains effets en raison des processus de réduction lents des températures au-dessus d'une transition vitreuse telsque les grandes constantes diélectriques, une dispersion de fréquence marquée et la différence de constante diélectrique[26].

Le titanate de lanthane et le niobate de magnésium sont des exemples généraux de ferroélectrique de relaxant. Les ferroélectriques peuvent être considérés comme des cristaux ferroélectriques et les pérovskites sont parmi les meilleurs candidats pour les applications de dispositifs à micro-ondes accordables et de mémoire vive dynamique (DRAM) [27].

b) Propriétés optiques

Les Pérovskites ont fourni une classe très spéciale de matériaux avec d'excellentes propriétés optiques et de photoluminescence. A titre d'exemple, l'étude des propriétés optiques des cristaux à domaine unique de BaTiO_3 à diverses températures a montré que l'indice de réfraction du cristal était presque une valeur constante (2,4 de 20 à 90 °C et atteignait 2,46 à 120 °C) [28].

Le cristal unique de BaTiO_3 , 0,25 mm d'épaisseur a été trouvé pour transmettre de 0,5 μm à 6 μm . Le coefficient optique des monocristaux de titanate de strontium a été obtenu de 0,20 μm à 17 μm en longueur d'onde.

La densité optique de CaTiO_3 présentait des caractéristiques d'absorption très semblables à celles des cristaux de SrTiO_3 , sauf que les absorptions sont décalées sur des longueurs d'onde plus courtes. Ces deux composés ont été envisagés pour les fenêtres infrarouges à haute température. SrTiO_3 est considéré comme un excellent matériau pour une utilisation avec des détecteurs infrarouges immergés optiquement [29].

Certains coefficients électro-optiques de pérovskites de sont presque constants avec la température [30]. Le niobate de tantalate de potassium est l'un des oxydes de pérovskite qui a un grand effet électro-optique à température ambiante et un scanner de faisceau optique rapide à grand angle, donc ce type n'est pas seulement utile pour les communications optiques, mais aussi à divers autres produits qui utilisent des faisceaux optiques, tels que l'application laser.

L'utilisation de matériaux pérovskite est une grande affaire. Les propriétés luminescentes de tous les ions terrestres peu communs dans les oxydes de type pérovskite sont très stables et peuvent fonctionner dans divers environnements [31] en plus d'être les meilleurs candidats dans les dispositifs d'affichage du plasma de campagne (PDP) et d'affichage des émissions (FED) parce qu'ils sont suffisamment conducteurs pour libérer les charges électriques stockées sur les surfaces des particules de phosphore. Les phosphores des

ions des terres rares dopés aux oxydes de type pérovskite [32] pourraient être largement utilisés dans les affichages de phosphore à rayons X.

L'une des photoluminescences respectueuses de l'environnement (PL) est BaZrO_3 qui émet de la lumière dans la région visible et se prépare facilement à faible coût [33].

c) Ferroélectricité

La ferroélectricité est le phénomène qui se produit lorsqu'un champ électrique externe est appliqué à certains matériaux menant à une polarisation électrique spontanée [34]. La découverte de ferroélectricité dans des matériaux à base de pérovskite et d'autres titanate de baryum (BaTiO_3) a ouvert de nouvelles applications différentes pour les matériaux ferroélectriques, ce qui a suscité un intérêt important pour d'autres types de ferroélectricité.

Les matériaux ferroélectriques ont une constante diélectrique deux fois plus importante que les matériaux diélectriques ordinaires. BaTiO_3 est un matériau ferroélectrique bien connu avec un constant diélectrique relatif, son cristal à température ambiante, ne présente aucune polarisation nette, en l'absence d'un champ externe, même si les dipôles des cellules unitaires adjacentes sont alignés [35].

La propriété ferroélectrique est utilisée à plusieurs telles que : dans les appareils d'imagerie par ultrasons, capteurs de feu, caméras infrarouges, capteurs de vibrations, condensateurs accordables, dispositifs de mémoire, cartes RAM et RFID, dispositifs d'entrée en imagerie par ultrasons, et a. faire des capteurs, condensateurs, dispositifs de mémoire, etc.. [36].

d) Supraconductivité

Certains matériaux deviennent supraconducteurs à basse température, avec une résistance électrique nulle et une expulsion des champs magnétiques. Les pérovskites sont une structure qui fournit un excellent cadre pour la supraconductivité [37], en particulier celles qui contiennent du cuivre et agissent comme supraconducteurs à haute température, tels que La-Ba-Cu-O. Les oxydes de pérovskite ont remplacé les composés intermétalliques comme source de nombreux matériaux supraconducteurs tels que les bronzes de tungstène. [38].

« Pérovskites » supraconductrices sont des composés qui ont un rapport spécifique de 2 atomes de métal à 3 atomes d'oxygène. Ce type de supraconducteurs est composé d'alliages et de composés métalliques (à l'exclusion du niobium, du vanadium et du technétium), ils atteignent récemment une température de transition plus élevée que les supraconducteurs de Type I [39].

e) Multiferroïcité

Les matériaux multiferroïques comprennent une classe spéciale de matériaux présentant un ordre ferroélectrique, ferromagnétique et Ferro élastique simultanément. La spécialité de ces matériaux réside dans leur capacité à utiliser simultanément leurs états de magnétisation et de polarisation, un potentiel qui en fait d'excellents candidats pour les dispositifs de mémoire et les capteurs [40].

Les multiferroïques sont des oxydes métalliques de transition à structure cristalline de pérovskite, tels que le manganite et les ferrites de terres rares, qui présentent une multiferroïcité même à température ambiante. Certains composés, tels que la ferrite de bismuth, ont un ordre antiferromagnétique et ferroélectrique pour une gamme de températures supérieures à la température ambiante [40].

Pour qu'un matériau soit ferroélectrique, il doit avoir une distorsion structurale de la phase de symétrie élevée qui supprime le centre d'inversion et permet une polarisation électrique, bien que l'ordre de spin magnétique puisse également produire de la ferroélectricité même en l'absence de distorsion structurale. Les matériaux ferromagnétiques sont généralement des métaux, mais doivent être des isolants pour que des commandes ferromagnétiques et ferroélectriques puissent apparaître simultanément [40].

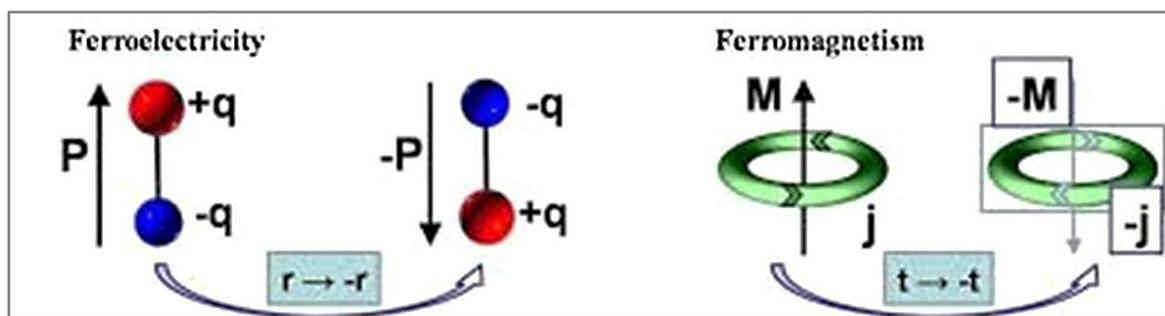


Figure I.6 : Conditions requises pour la ferroélectricité (polarisation) et le ferromagnétisme (mouvement de spin d'électron non apparié) [41].

f) Activité catalytique

Les Pérovskites ont montré une action catalytique exceptionnelle et une grande stabilité chimique pour cela, il comprend dans la catalyse des réactions modifiées. En outre, il peut être défini comme un catalyseur activé par oxydation ou oxygène et comme un modèle de sites actifs [42].

Certains types de pérovskite ont une forte activité catalytique, ce qui les rend utiles pour la préparation de composés à partir d'éléments peu communs ou en l'absence d'oxygène. Ils peuvent également être utilisés comme catalyseurs pour les gaz d'échappement, le nettoyage et les réactions environnementales. Certains types de pérovskite contenant du Cu, Co, Mn ou Fe peuvent être utilisés comme catalyseurs pour la désintégration directe de NO à haute température. [43].

La pérovskite est un excellent catalyseur pour les véhicules, notamment pour l'élimination de CO et NO. Elle a également montré des propriétés redox qui permettent une dispersion de Pd dans la structure de la pérovskite pour une meilleure efficacité. La grande stabilité de la structure de la pérovskite et l'état de propagation illimitée de Pd en font un catalyseur intelligent fiable pour les gaz d'échappement.

Tableau I.1 : Quelques propriétés des oxydes de pérovskite [44].

Propriété typique	Composé typique
Ferromagnétique	BaTiO ₃ , PbTiO ₃
Piézoélectricité	Pb(Zr, Ti)O ₃ , (Bi, Na)TiO ₃
Conductivité électrique	ReO ₃ , SrTiO ₃ , LaCoO ₃ , LaCoO ₃ , LaNiO ₃
Supraconductivité	La _{0,9} Sr _{0,1} CuO ₃ , YBa ₂ Cu ₃ O ₇ , HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₂ O ₈ :
Conductivité ionique	La(Ca)AlO ₃ BaZrO ₃ , CaTiO ₃ , SrZrO ₃ , BaCeO ₃ , La(Sr)Ga(Mg)O ₃ ,
Propriété magnétique	LaMnO ₃ , LaFeO ₃ , La ₂ NiMnO ₆
Propriété catalytique	LaCoO ₃ , LaMnO ₃ , BaCuO ₃
Électrode	La _{0,6} Sr _{0,4} CO ₃ , La _{0,8} Ca _{0,2} MnO ₃

4. Les types des Pérovskites

Les pérovskites sont un groupe de minéraux qui ont une structure cristalline particulière de forme cubique. Ils ont gagné en popularité ces dernières années en tant que matériau pour les cellules solaires en raison de leurs propriétés remarquables. Les pérovskites ont une structure de type ABX_3 , où A et B peuvent être des cations différents et X peut être un anion.

Il existe différents types de pérovskites, en fonction de la nature des atomes dans leur structure. Les deux types principaux sont l'oxyde de pérovskite et le **composé d'halogénure de pérovskite**. Les oxydes de pérovskite ont été étudiés pour leur utilisation dans des dispositifs électroniques tels que les diodes électroluminescentes, les transistors, et les capteurs. Les composés d'halogénure de pérovskite, en revanche, ont été utilisés dans les cellules solaires en raison de leur efficacité élevée[45].

Les cellules solaires à base de pérovskite ont maintenant une efficacité de conversion de l'énergie solaire supérieure à 23%, dépassant la limite théorique pour le silicium [45]. De plus, les pérovskites sont faciles et peu coûteuses à produire, offrant de grands espoirs pour réaliser des cellules solaires abordables et efficaces à grande échelle.

Un autre type de pérovskite qui est actuellement étudié est appelé les pérovskites organiques. Les matériaux organiques présentent des avantages importants tels que leur faible coût, leur flexibilité et leur légèreté, ce qui en fait une alternative attrayante aux cellules solaires traditionnelles [46].

Les pérovskites sont une classe de matériaux prometteurs pour les applications en photovoltaïque et en électronique. Cependant, des recherches continues sont nécessaires pour améliorer leur stabilité et leur durabilité, et réduire leur coût de fabrication, afin de réaliser leur potentiel pour des applications commerciales à grande échelle.

Suivant l'occupation des sites A et B on distingue :

- **Les pérovskites simples** dont les sites A et B sont occupés respectivement par un seul type de cation ($BaTiO_3$, $SrZrO_3$, $NaTaO_3$, $PbTiO_3$, $CaTiO_3$, ...)

- **Les pérovskites complexes** dont l'un des deux sites A ou B est occupé par deux cations distincts de valences différentes. Leur formule peut être schématisée par $A(B'_x B''_y)O_3$ (ex. $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$) ou $(A'_x A''_y)BO_3$ (ex. $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$), où $x+y=1$.
- **Les superstructures** dont les deux sites A et B sont simultanément occupés par différents types de cations (ex. $(PbLa)(ZrTi)O_3$, $La_{0.8}Sr_{0.2}Ga_{0.8}Mg_{0.15}Co_{0.05}O_{2.8}$).
- **Les doubles pérovskites**, dénommées parce que le volume de la maille est le double de celui de la pérovskite (ex. Sr_2FeMoO_6 , $NdBaCo_2O_6$). [46]

4.1. Les Pérovskites Pour Les Cellules Photovoltaïques

Les cellules solaires à base de pérovskites ont montré des rendements élevés, dépassant 25,8% [47], ce qui rivalise avec les cellules PV conventionnelles. Cette efficacité est due à la capacité d'absorption de la lumière solaire dans un spectre large et utilisable. Les pérovskites permettent une transmission élevée de la lumière, ont une faible couche active pour la conversion de l'énergie solaire et permettent une efficacité élevée de collecte des charges.

L'un des avantages notables des pérovskites est leur durabilité. Les cellules solaires à base de pérovskites peuvent être produites à un coût relativement bas et à une grande échelle. L'un des moyens les plus efficaces pour produire des cellules PV à base de pérovskites est la solution d'enduction de films minces à basse température.

Malgré tous ces avantages, les pérovskites sont encore confrontés à des défis à surmonter. La stabilité des matériaux à long terme est une préoccupation majeure et un obstacle majeur à la mise en œuvre commerciale de la technologie des pérovskites. La durabilité et la stabilité des pérovskites sont affectées par l'humidité, la lumière et la chaleur. Les fabricants cherchent donc à élaborer des solutions pour résoudre ces problèmes afin de produire une technologie PV plus stable et plus fiable [47].

En conclusion, les pérovskites offrent une alternative prometteuse et viable aux cellules PV conventionnelles. Si les défis liés à la stabilité à long terme peuvent être surmontés, les pérovskites pourraient jouer un rôle important dans la transition de l'énergie solaire vers une source d'énergie plus durable et plus économique. En continuant à explorer les avantages et les opportunités offerts par les pérovskites, les chercheurs et les fabricants

pourraient contribuer à améliorer la technologie des cellules PV et à soutenir la transition vers une société plus respectueuse de l'environnement [47].

4.2. Doubles Pérovskites

I.4.2. Les propriétés de doubles pérovskites

Les doubles pérovskites sont des matériaux cristallins intéressants qui présentent des propriétés électriques et magnétiques remarquables. Ils ont une formule chimique de type $A_2BB'O_6$ dans laquelle les atomes B et B' sont différents et les atomes A peuvent être différents ou les mêmes. La structure cristalline des doubles pérovskites est similaire à celle des pérovskites conventionnelles, mais la taille plus importante des anions dans la structure cristalline permet une plus grande flexibilité dans le choix des cations et la création de dopages [48].

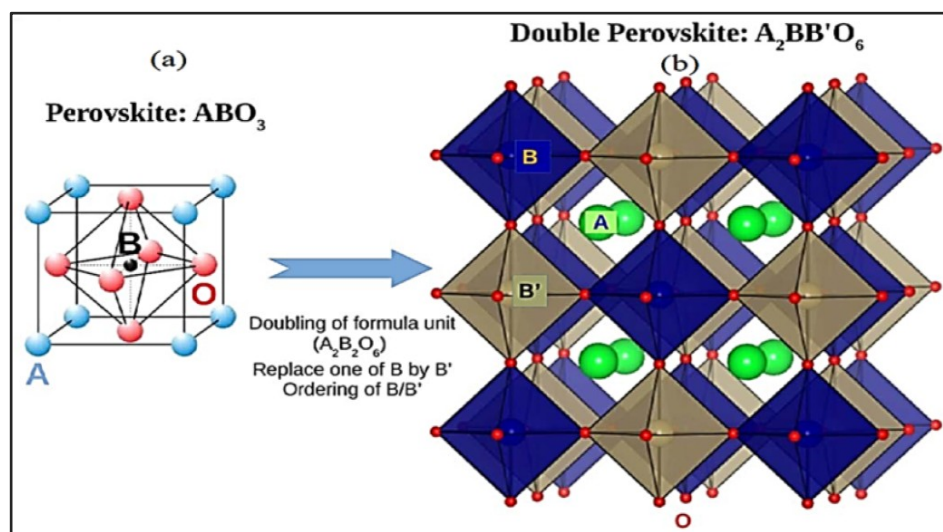


Figure I.7. (a) Structure pérovskite simple ABO_3 (b) Structure pérovskite double $A_2BB'O_6$ [49].

Les doubles pérovskites ont une grande variété de propriétés physiques, y compris des propriétés électriques, magnétiques et optiques intéressantes.

Par exemple, certaines doubles pérovskites sont des matériaux semi-conducteurs avec des bandes interdites proches de la bande de conduction ou de la bande de valence, tandis que d'autres présentent des propriétés magnétiques telles que des moments magnétiques ordonnés[50].

Les doubles pérovskites ont également une grande diversité de propriétés optiques, en particulier dans le domaine de la photovoltaïque. Les doubles pérovskites ont une large plage d'absorption de la lumière solaire, ce qui les rend utiles pour la production de cellules solaires à haut rendement.

De plus, les doubles pérovskites préservent leur propriété de surcharge lorsque la température augmente, ce qui est important pour la production de cellules solaires résistantes à la chaleur[51].

Bien que les doubles pérovskites soient encore à être explorés et compris pleinement, il est évident que leur potentiel dans les domaines de la technologie électronique, magnétique et optique est important.

Ces matériaux sont prometteurs pour les applications de cellules solaires, les dispositifs de stockage de l'énergie, les dispositifs électroniques et de nombreux autres domaines de recherche. Les chercheurs continuent d'explorer les avantages et les opportunités offerts par les doubles pérovskites et travaillent sur la conception de nouveaux systèmes à double pérovskite pour une application industrielle future.

II.4.2. Les applications de doubles-pérovskites

Les doubles-pérovskites sont des matériaux cristallins qui présentent de nombreuses propriétés intéressantes et attractives dans divers domaines. Ces propriétés font des doubles-pérovskites des candidats prometteurs pour de nombreuses applications telles que les cellules photovoltaïques, les cellules à combustible, les transistors à effet de champ, les diodes luminescentes et les catalyseurs.

En ce qui concerne les cellules photovoltaïques, les doubles-pérovskites ont un grand potentiel. Ils ont une plage d'absorption de la lumière beaucoup plus large que les cellules PV conventionnelles, ce qui les rend utiles pour la production de cellules solaires à haut rendement. De plus, les doubles-pérovskites sont faciles à produire à grande échelle, ce qui les rend économiquement avantageux.

Dans le domaine des cellules à combustible, les doubles-pérovskites peuvent être utilisés comme électrolyte solide pour améliorer les performances et la stabilité des cellules.

Leurs propriétés de conductivité ionique élevée et leur bonne stabilité chimique font des doubles-pérovskites des matériaux prometteurs pour les électrolytes solides.

Les doubles-pérovskites sont également utiles dans la production de transistors à effet de champ à haute mobilité électronique, qui peuvent être utilisés dans les dispositifs électroniques à haute performance. Les doubles-pérovskites ont également des applications potentielles dans la production de diodes luminescentes à haute efficacité.

Enfin, les doubles-pérovskites peuvent être utilisés comme catalyseurs dans les réactions chimiques. Ils ont montré des performances prometteuses dans des réactions telles que la réduction catalytique sélective du NO_x, l'oxydation du méthane et la réaction de déshydrogénation.

Dans l'ensemble, les doubles-pérovskites ont un grand potentiel pour de nombreuses applications technologiques. Les recherches futures sur les doubles-pérovskites devraient se concentrer sur l'optimisation de leurs propriétés et sur leur intégration dans diverses applications technologiques pour exploiter pleinement leur potentiel.

Les applications prometteuses des doubles-pérovskites comprennent les cellules photovoltaïques à haut rendement, les cellules à combustible, les transistors à effet de champ à haute mobilité électronique, les diodes luminescentes et les catalyseurs.

Les doubles-pérovskites peuvent également être utilisés dans la production d'appareils électroniques haute performance, dans le stockage d'énergie et dans la chimie verte. Avec davantage de recherche et d'exploration, les doubles-pérovskites ont le potentiel de devenir des matériaux clés pour la prochaine génération de technologies énergie propre et d'autres applications avancées.

4.3. Critères du choix des matériaux photovoltaïques

Sous ce titre, nous présentons une brève vue d'ensemble des propriétés des matériaux, en particulier les semi-conducteurs, qui sont importantes pour le fonctionnement des cellules solaires. Plusieurs propriétés sont nécessaires pour les matériaux photovoltaïques (PVS) et la structure des cellules solaires, les plus essentielles étant liées aux conditions photoniques (optoélectroniques et électriques).

1. En raison de la condition quantique $h\nu > E_g$, le choix des matériaux dépend principalement de la largeur de la bande interdite E_g . Plus E_g est réduit, plus le nombre de photons utilisables sera élevé, mais la photo tension sera également plus faible. Les calculs démontrent que les rendements de conversion les plus élevés η (équation 6) seront obtenus lorsque E_g se situe entre 1 et 1,7 eV, comme illustré dans la figure X.

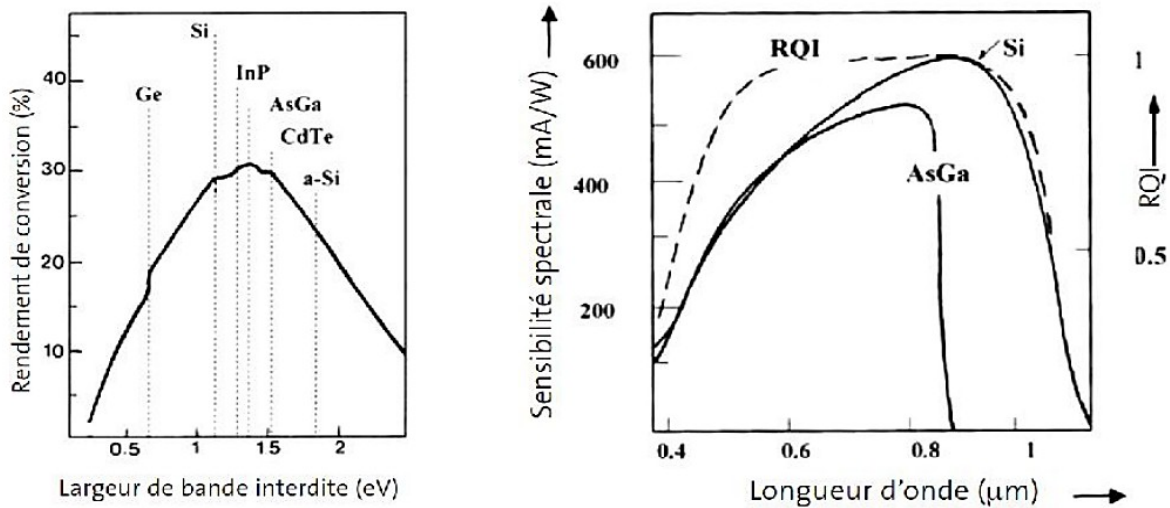


Figure I. 8. La variation du rendement de conversion idéal pour une cellule en fonction de la largeur de bande interdite du matériau (à gauche) et les variations spectrales de la sensibilité d'une cellule solaire au (Si) ou à (GaAs) (à droite). RQI : le rendement quantique interne [52].

2. Une absorption lumineuse intense sur une large gamme spectrale, en particulier dans la plage visible du spectre solaire (voir Figure I. 5). Cette caractéristique implique la présence d'un écart d'énergie optimal (réglable et souhaitable). En général, le pic d'absorption doit se situer entre [1,4 et 1,5] eV pour une efficacité maximale.

3. Une réflectance faible.

4. Pour produire des cellules solaires performantes, les matériaux utilisés doivent présenter d'excellentes capacités de collecte pour les porteurs majoritaires et les porteurs minoritaires.

5. Une réduction minimale de la recombinaison des porteurs.

6. Abondant et disponible en quantités suffisantes pour une production à grande échelle.

7. Peu coûteux, non toxique et respectueux de l'environnement.

8. Stabilité à long terme et résistance aux conditions environnementales (par exemple, résistance à la corrosion).

5. Méthodes De Calculs

5.1. La théorie fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie fonctionnelle de la densité (DFT) est une méthode de modélisation informatique utilisée pour étudier la structure électronique et nucléaire des systèmes à plusieurs corps. Elle est populaire en physique de la matière condensée, en physique computationnelle et en chimie computationnelle. Elle a été formalisée par les théorèmes de Hohenberg-Kohn, qui ont lié la densité électronique d'un système à son potentiel externe [53].

L'origine de la DFT remonte au modèle de Thomas-Fermi pour la structure électronique des matériaux. Cependant, DFT a été mis sur une base théorique plus solide par Walter Kohn et Pierre Hohenberg dans le cadre des deux théorèmes de Hohenberg-Kohn (HK)[53]. Ces théorèmes ont formalisé le lien entre la densité électronique d'un système et son potentiel externe, permettant des prédictions précises sur le comportement du système.

En DFT, les noyaux des molécules ou clusters traités sont fixes, générant un potentiel externe statique dans lequel les électrons se déplacent. Le problème majeur avec DFT est que les fonctionnelles exactes pour l'échange et la corrélation ne sont pas connues, sauf pour le gaz d'électrons libres. En conséquence, des approximations pour ces fonctions ont été développées, ce qui a considérablement amélioré la précision des calculs DFT [53].

L'une des applications les plus importantes de la DFT est la prédiction du comportement des matériaux sur la base de considérations de mécanique quantique, sans nécessiter de paramètres d'ordre supérieur tels que les propriétés fondamentales des matériaux. La DFT trouve une application croissante en chimie et en science des matériaux pour l'interprétation et la prédiction du comportement de systèmes complexes à l'échelle atomique.

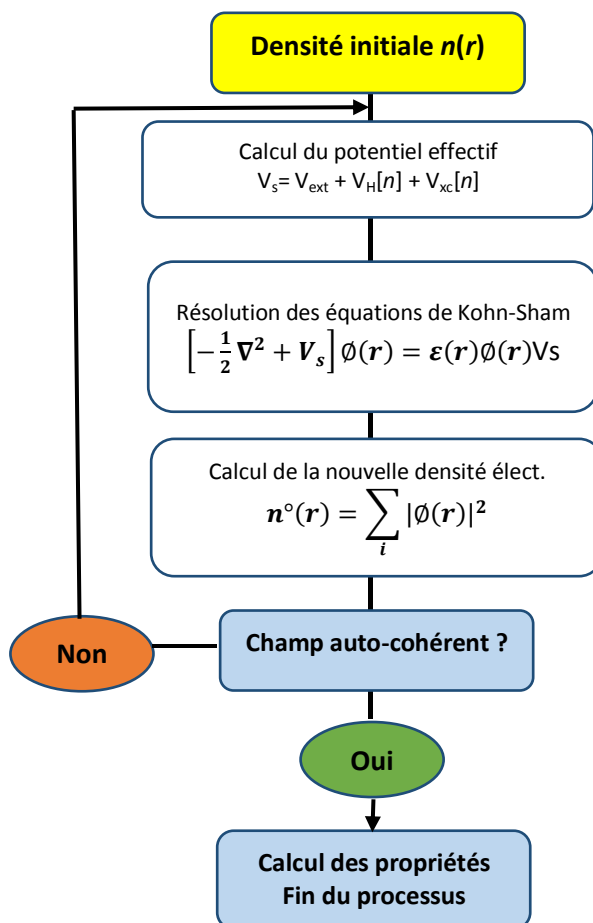


Figure I.9 : Schéma décrivant le processus itératif pour la résolution des équations de Kohn-Sham [54].

Malgré les progrès récents, il existe encore des difficultés à utiliser la DFT pour décrire les interactions intermoléculaires, en particulier les forces de van der Waals, les excitations de transfert de charge, les états de transition, les surfaces d'énergie potentielle globale, les interactions de dopant et certains systèmes fortement corrélés. De plus, le traitement incomplet de la dispersion peut affecter la précision de la DFT, en particulier pour les systèmes dominés par la dispersion ou lorsque la dispersion est en concurrence significative avec d'autres effets. Le développement de nouvelles méthodes DFT conçues pour surmonter ces problèmes est un sujet de recherche actuel. [53]

La DFT a fait partie intégrante de la chimie théorique, permettant la prédiction de structures précises et de l'énergétique des clusters, et l'utilisation de méthodes théoriques basées sur la DFT est devenue de plus en plus populaire dans le domaine. La DFT est également utilisée dans les méthodes de spectroscopie nucléaire, telles que la spectroscopie

Mössbauer ou la corrélation angulaire perturbée, comme moyen de comprendre l'origine de gradients de champ électrique spécifiques dans les cristaux.

5.2. Méthode d'onde plane augmentée linéaire à plein potentiel (FP-LAPW)

La méthode FP-LAPW combine la théorie fonctionnelle de la densité avec une expansion d'onde plane pour calculer les structures électroniques et les propriétés des matériaux. Elle peut être utilisée pour différents types d'atomes, y compris avec des effets relativistes [55].

La méthode FP-LAPW est considérée comme l'une des méthodes théoriques les plus précises pour le calcul des structures électroniques et des propriétés des solides. L'ensemble de base comprend des ondes planes qui s'étendent à l'extérieur des sphères muffin-tin, ce qui permet de décrire la fonction d'onde dans la région interstitielle entre les atomes. Ceci est important pour les matériaux à faible densité électronique ou ceux avec un système faiblement lié [55].

La méthode FP-LAPW est utilisée pour calculer l'énergie totale, les structures de bande, la densité d'états et les propriétés magnétiques d'un système, ainsi que les constantes élastiques, les fréquences de phonons et les propriétés thermodynamiques. Elle est souvent combinée avec la DFT pour étudier la structure électronique et les propriétés magnétiques des matériaux tels que les semi-conducteurs, les métaux, les alliages et les isolants.

Elle utilise un potentiel muffin-étain pour modéliser les noyaux atomiques et leurs électrons internes, et divise la cellule unitaire du matériau en sphères muffin-tin non superposées. Elle est souvent utilisée en combinaison avec la DFT pour étudier les propriétés électroniques et magnétiques de divers matériaux [56].

La méthode FP-LAPW peut être implémentée dans différents codes tels que Wien2k, Elk, Abinit et VASP. Cependant, le temps de calcul requis pour la méthode dépend de la taille du système, du nombre d'atomes et du nombre de points k nécessaires pour échantillonner la zone de Brillouin.

5.3. Code De Calcul Wien2k :

WIEN2k est un programme informatique développé par Peter Blaha et Karlheinz Schwarz de l'Institut de chimie des matériaux de l'Université de technologie de Vienne, qui est utilisé pour les calculs de mécanique quantique sur des solides périodiques [57]. Il est conçu pour utiliser la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) pour calculer la structure électronique des matériaux en utilisant l'ensemble de base des ondes planes augmentées à plein potentiel (linéarisé) et des orbitales locales [FP-(L)APW+lo]. Le programme est écrit en Fortran et il a été autorisé par plus de 3 400 groupes d'utilisateurs depuis sa première version publique en 1990, avec environ 16 000 citations sur Google Scholar [57].

WIEN2k utilise la méthode LAPW+lo pour calculer la structure de la liaison, offrant une grande précision. Il permet de calculer diverses propriétés des solides, telles que l'énergie totale, la densité d'états et la structure d'équilibre. Le programme peut également calculer les propriétés optiques et les effets des champs électriques et magnétiques externes. Il peut gérer à la fois des réseaux centrosymétriques et non centrosymétriques, avec 230 groupes d'espace intégrés.



Figure I.10 : Code De Calcul WIEN2k [56].

L'une des caractéristiques uniques de WIEN2k est sa capacité à utiliser différents niveaux d'approximation pour la fonctionnelle d'échange-corrélation. Il comprend des options pour utiliser l'approximation de densité locale (LDA), l'approximation de gradient généralisée (GGA), LDA+U et les fonctionnelles méta-GGA. Il peut également gérer des effets relativistes, y compris le couplage spin-orbite, et il peut être utilisé pour étudier les propriétés de matériaux contenant différents types d'atomes [58].

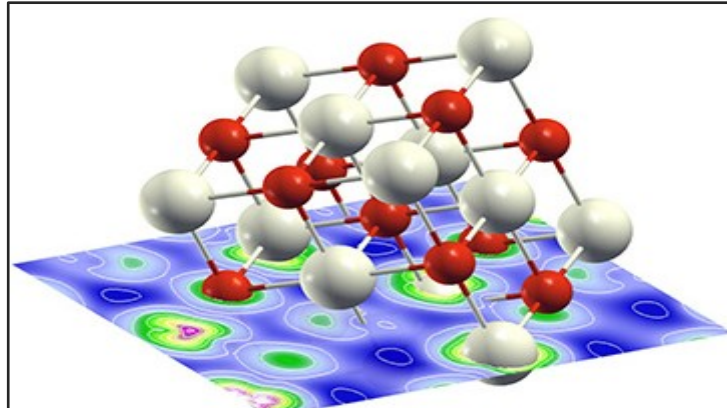


Figure I.11 : Schéma fourni par le WIEN2k [59].

WIEN2k propose également une interface graphique conviviale appelée W2web, qui permet aux utilisateurs de générer et de modifier facilement des fichiers d'entrée pour les calculs. De plus, le guide de l'utilisateur de WIEN2k fournit des instructions détaillées pour utiliser le programme et interpréter les résultats des calculs.

I.6. Conclusion :

Les pérovskites et les doubles pérovskites représentent une classe de matériaux photovoltaïques très prometteurs en raison de leur efficacité élevée et de leur faible coût de production. Cependant, leur utilisation dans les cellules solaires reste limitée en raison de leur instabilité et de leur durabilité limitée. Par conséquent, une compréhension approfondie de leurs propriétés électroniques, optiques et de transport est essentielle pour améliorer leur efficacité et leur stabilité à long terme.

La méthode de calcul joue un rôle crucial dans la compréhension des propriétés des pérovskites et des doubles pérovskites. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est une méthode de calcul couramment utilisée pour calculer les propriétés électroniques et optiques des matériaux. La DFT est une approche *ab initio* qui utilise la densité électronique pour calculer les propriétés électroniques des matériaux à partir des premiers principes.

La méthode de l'approximation de potentiel linéaire plein (FP-LAPW) est une autre méthode de calcul largement utilisée pour étudier les propriétés électroniques et optiques des matériaux. Cette méthode est basée sur une approche d'approximation de potentiel et permet une meilleure description de la structure électronique des matériaux.

En outre, la méthode de Wien2k est une méthode de calcul basée sur la théorie des bandes qui permet de calculer les propriétés électroniques des matériaux. Cette méthode est particulièrement utile pour étudier les matériaux présentant des propriétés électroniques complexes et pour prédire les propriétés de transport des matériaux.

En somme, l'utilisation des pérovskites et des doubles pérovskites dans les cellules solaires est un domaine de recherche en constante évolution. La compréhension des propriétés électroniques et optiques de ces matériaux est essentielle pour améliorer leur efficacité et leur durabilité à long terme. Les méthodes de calcul telles que la DFT, la FP-LAPW et Wien2k sont des outils précieux pour étudier les propriétés de ces matériaux et pour prédire leur comportement dans les cellules solaires.

Références :

- [1] M. Yashima, and al., Chemical physics letters, 380: p. 391-396 (2003).
- [2] Meftah Tablaoui. Développement de matériaux massifs appartenant au système chalcopyrite pour des applications photovoltaïques. Cristallographie. Université Claude Bernard - Lyon I, 2015. Français.
- [3] V-LAM Energies, Histoire des panneaux photovoltaïques, Lien : <https://vlamenergies.fr/histoire-des-panneaux-photovoltaïques/>
- [4] A.S. Bhalla, Ruyan Guo & Rustum Roy (2000) The perovskite structure—a review of its role in ceramic science and technology, Materials Research Innovations, 4:1, 3-26, DOI: 10.1007/s100190000062
- [5] Contributeurs de Wikipédia, "Pérovskite, Wikipédia, l'encyclopédie libre, <https://fr.wikipedia.org/w/index.php?title=P%C3%A9rovskite&oldid=201986088>(Page consultée le mars 4, 2023).
- [6] ARAR Rabie, Etude des propriétés structurales, électroniques et mécaniques des composés fluoro-pérovskites à base de sodium NaXF₃ (X=Mg, Zn) par la méthode FP-LAPW, Université Djillali Liabes - Sidi Bel Abbes, 2018
- [7] Florent MARLEC , Nouveaux Matériaux Perovskites Ferroelectriques These De Doctorat De L'universite De Rennes 1 - Comue Université Bretagne Loire , 2018
- [8] Nishihata Y., Mizuki J., Tanaka H., Uenishi M., Kimura M. Self-regeneration of palladium-perovskite catalysts in modern automobiles. J. Phys. Chem. Solids. 2005;66(2):274–282.
- [9] Roni Peleg. first ed. Metalgrass LTD; 2018. The Perovskite Handbook; p. 108.
- [10] Kittel C. eighth ed. John Wiley & Sons Inc.; 2005. Introduction to Solid State Physics; p. 675.
- [11] Mugnier, Yannick. (2014). De la synthèse de nanocristaux non-centrosymétriques, aux nanocomposites et à la nanomédecine. 10.13140/2.1.4577.9203.
- [12] Cava Robert J. Oxide superconductors. Am. Ceram. Soc. 2008;83(14):5–58.
- [13] Korshunova, Ksenia & Winterfeld, Lars & Beenken, Wichard & Runge, Erich. (2016). Thermodynamic stability of mixed Pb:Sn methyl-ammonium halide perovskites. physica status solidi (b). 253. 10.1002/pssb.201600136.
- [14] Ishihara T. Perovskite Oxide for Solid Oxide Fuel Cells, Fuel Cells and Hydrogen Energy. Springer Science Business Media, LLC; 2009. pp. 1–16. (chapter 1)
- [15] Spaldin N.A., Cheong S.W., Ramesh R. Multiferroics: past, present, and future. Phys. Today. 2010;63:38–43.
- [16] Dhahri Kh, Bejar M., Dhahri E., Soares M.J., Graça M.F.P., Sousa M.A., Valente M.A. Chemical physics letters blue-green photoluminescence in BaZrO₃–*x* powders. Chem. Phys. Lett. 2014;610:341–344.
- [17] Assirey, Eman. (2019). Perovskite synthesis, Properties and their related biochemical and industrial application. Saudi Pharmaceutical Journal. 27. 10.1016/j.jsps.2019.05.003.
- [18] Sayyadi-Shahraki Ahmad, Taheri-Nassaj Ehsan, Sharifi Hassan, Gonzales Justin, Kolodiazhnyi Taras, Newman Nathan. Origin of dielectric loss in Ba(Co_{1/3}Nb_{2/3})O₃ microwave ceramics. J. Am. Ceram. Soc. 2017;101(4):1665–1676.

- [19] Retot H., Bessiere A., Kahn-Harari A., Viana B. Synthesis and optical characterization of SrHfO₃: Ce and SrZrO₃: Ce nanoparticles. *Opt. Mater.* 2008;30:1109–1114.
- [20] Xu Y. Elsevier Publisher; 2011. *Ferroelectric Materials and Their Applications*; p. 379.
- [21] Raghavan V. PHL Learnt private Limited; Delhi, India: 2015. *Material Sciences and Engineering*; p. 463.
- [22] Zhang Yuqiao, Feng Bin, Hayashi Hiroyuki, Tohei Tetsuya, Tanaka Isao, Ikuhara Yuichi, Ohta Hiromichi. Thermolectric phase diagram of the SrTiO₃–SrNbO₃ solid solution system. *J. Appl. Phys.* 2017;121
- [23] Jia Weiyi, Xu W., Rivera I., Pérez A., Fernández F. Effects of compositional phase transitions on luminescence of Sr_{1-x}Ca_xTiO₃: Pr³⁺ Solid State Commun. 2003;126:153–157.
- [24] Pinel E., Boutinaud P., Mahiou R. What makes the luminescence of Pr³⁺-different in CaTiO₃ and CaZrO₃? *J. Alloy. Compd.* 2004;380:225–229.
- [25] Wang Y., Sun Y., Zhang J., Ci Z., Zhang Z., Wang L. New red Y_{0.85}Bi_{0.1}Eu_{0.05}V_{1-y}MyO₄ (M= Nb, P) phosphors for light-emitting diodes. *Physica B.* 2008;403:2071–2075
- [26] Niu Guangda, Guo Xudong, Wang Liduo. Review of recent progress in chemical stability of perovskite solar cells. *J. Mater. Chem. A.* 2015;3:8970–8980.
- [27] Hoefler Sebastian F., Trimmel Gregor, Rath Thomas. Progress on lead-free metal halide perovskites for photovoltaic applications: a review. *Monatshefte für Chemie – Chem. Month.*, 9. 2017;148(5):795–826.
- [28] Bhatti Humaira Safdar, Hussain Syed Tajammul, Khan Feroz Alam, Hussain Shahzad. Synthesis and induced multiferroicity of perovskite PbTiO₃. *Appl. Surf. Sci.* 2016;367:291–306.
- [29] Kim Jae-Sun, Yoon Soon-Gil. High dielectric constant (Ba_{0.65}Sr_{0.35}) (Ti_{0.41}Zr_{0.59})O₃ capacitors for gbit-scale dynamic random access memory devices. *J. Vac. Sci. Technol., B.* 2000;18:216–220.
- [30] Dongling Sun, Dongcai Li, Zhiwen Zhu, Jin Xiao, Zetian Tao, Wei Liu. Photoluminescence properties of europium and titanium co-doped BaZrO₃ phosphors powders synthesized by the solid state reaction method. *Opt. Mater.* 2012;34:1890–1896.
- [31] Huang He, Polavarapu Lakshminarayana, Sichert Jasmina A., Susha Andrei S., Urban Alexander S., Rogach Andrey L. Colloidal lead halide perovskite nanocrystals: synthesis, optical properties and applications. *NPG Asia Mater.* 2016;8(e328):1–15
- [32] Niu Guangda, Guo Xudong, Wang Liduo. Review of recent progress in chemical stability of perovskite solar cells. *J. Mater. Chem. A.* 2015;3:8970–8980
- [33] Modeshia D.R., Walton R.I. Solvothermal synthesis of perovskites and pyrochlores: crystallisation of functional oxides under mild conditions. *Chem. Soc. Rev.* 2010;39:4303–4325
- [34] Kim J.K., Kim S.S., Kim W.-J. Sol–gel synthesis and properties of multiferroic BiFeO₃. *Mater. Lett.* 2005;59:4006–4009
- [35] Galasso F.S. vol. 7. Elsevier; 2013. *Structure, propriétés and preparation of perovskite-type compounds*; p. 220. (International Series of Monographs Solid State Physics)
- [36] Pengfei Fu, Shan Qingsong, Shang Yuequn, Song Jizhong, Zeng Haibo, Ning Zhijun, Gong Jinkang. Perovskite nanocrystals: synthesis, properties and applications. *Sci. Bull.* 2017;62:369–380

- [37] Kuzmanovski I., Dimitrovska-Lazova S., Aleksovska S. Classification des perovskites avec des cartes auto-organisées supervisées. *Anal. Chim. Acta.* 2007;595:182-189
- [38] Dimitrovska Sandra, Aleksovska Slobotka, Kuzmanovski Igor. Prediction of the unit cell edge length of cubic $A_2B_2O_6$ perovskites by multiple linear regression and artificial neural networks. *Cent. Eur. J. Chem.* 2005;3(1):198–215
- [39] Bischak C.G., Hetherington C.L., Wu H., Aloni S., Ogletree D.F., Limmer D.T., Ginsberg N.S. Origin of reversible photoinduced phase separation in hybrid perovskites. *Nano Lett.* 2017;17:1028–1033.
- [40] Atta N.F., Galal Ahmed, El-Ads Ekram H. Perovskite nanomaterials – synthesis, characterization, and applications. *Tech. Chapter.* 2016;4 : Page 108–151.
- [41] Assirey, Eman A.. "Perovskite synthesis, properties and their related biochemical and industrial application." *Saudi Pharmaceutical Journal* : SPJ 27 (2019): 817 - 829.
- [42] Pengfei Fu, Shan Qingsong, Shang Yuequn, Song Jizhong, Zeng Haibo, Ning Zhijun, Gong Jinkang. Perovskite nanocrystals : synthesis, properties and applications. *Sci. Bull.* 2017;62 : Page 369–380.
- [43] R. H. Mitchell, Almaz Press Inc., Ontario, Canada (2002).
- [44] Djani, Fayssal. (2017). Synthèse, Caractérisation et Propriétés Photocatalytiques d'un Oxyde Mixte de type Pérovskite $SrFeO_3$.
- [45] Szuromi Phillip, Grocholski Brent. Natural and engineered perovskites. *Science.* 2017;358(6364) : Page 732–733
- [46] Thomas Mambrini, Caractérisation de panneaux solaires photovoltaïques en conditions réelles d'implantation et en fonction des différentes technologies, THÈSE DE DOCTORAT , UNIVERSITE PARIS-SUD, 2014
- [47] Stoddart, A. Purely organic perovskites. *Nat Rev Mater* 3, 226 (2018). <https://doi.org/10.1038/s41578-018-0043-6>
- [48] Chloé Gauvin-Ndiaye , Étude des propriétés électroniques, magnétiques et magnétocaloriques des matériaux La_2MnBO_6 ($B = Ni, Ru, Co, Fe$) et $LaAMnFeO_6$ ($A = Ba, Sr, Ca$) et de leur potentiel pour la réfrigération magnétique, Université de Sherbrooke, Québec, Canada, juillet 2019
- [49] Vlad Alexandru Dragomir , Étude de la dynamique vibrationnelle de pérovskites 2D hybrides organiques-inorganiques par spectroscopie Raman, Université de Montréal, Août, 2018
- [50] Rehman, Mehtab Ur, Qun Wang, and Yunfei Yu. 2022. "Electronic, Magnetic and Optical Properties of Double Perovskite Compounds: A First Principle Approach" *Crystals* 12, no. 11: 1597. <https://doi.org/10.3390/cryst12111597>
- [51] *J. Phys. Chem. C* 2020, 124, 17, 9203–9214 Publication Date : April 2, 2020. Lien : <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c01336>
- [52] Contributeurs de Wikipédia, « Théorie fonctionnelle de la densité », Wikipédia, The Free Encyclopedia, Lien : https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Density_functional_theory&oldid=1148003979(consulté le 9 avril 2023).
- [53] Rai, D P et al. "Electronic properties and low lattice thermal conductivity (κ_l) of mono-layer (ML) MoS_2 : FP-LAPW incorporated with spin-orbit coupling (SOC)." *RSC advances* vol. 10,32 18830-18840. 19 May. 2020, doi:10.1039/d0ra02585b

[54] Y. Liu, SK Bose et J. Kudrnovský, Études théoriques sur les premiers principes du ferromagnétisme semi-métallique en CrTe , Phys. Rév. B 82, 094435 – Publié le 20 septembre 2010

[55] Contributeurs de Wikipédia, "Théorie de la fonctionnelle de la densité," Wikipédia, l'encyclopédie libre, https://fr.wikipedia.org/w/index.php?title=Th%C3%A9orie_de_la_fonctionnelle_de_la_densit%C3%A9&oldid=201787906 (Page consultée le février 26, 2023).

[56] J. Chem. Phys., WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids editors-pick 152, 074101 (2020); <https://doi.org/10.1063/1.5143061>

[57] Contributeurs de Wikipédia, "WIEN2k," Wikipédia, l'encyclopédie libre, <https://fr.wikipedia.org/w/index.php?title=WIEN2k&oldid=185593540>(Page consultée le août 18, 2021)

[58] Karlheinz Schwarz, Peter Blaha & S.B. Trickey ,Structure électronique des solides avec WIEN2k , Publié le 27 août 2010 ; Lien : <https://doi.org/10.1080/00268976.2010.506451>

[59] Simulations DFT de solides avec le code WIEN2k , 32nd European | Crystallographic Meeting . Lien : <https://ecm2019.univie.ac.at/satellites/wien2k/>

Chapitre II

Résultats et Discussion

II.1. Introduction

Avec le développement récent dans la physique de la matière condensée, de nombreux efforts ont été déployés pour mieux comprendre le comportement des matériaux. En effet, la connaissance fondamentale des diverses propriétés physico-chimiques est cruciale pour comprendre la physique des matériaux et par conséquent pour bien sélectionner les applications technologiques des matériaux ciblés. Pour cela, il est nécessaire d'utiliser des techniques de caractérisations et d'investigations expérimentales et théoriques [1].

Dans ce contexte, la simulation joue un rôle crucial dans la détermination de ces propriétés, car elle permet de minimiser les coûts liés aux expériences, qui peuvent être coûteuses, dangereuses, voire même inaccessibles en laboratoire [2]. Parmi les méthodes de simulation, la méthode FP-LAPW [3] implémentée dans le code Wien2k [4] a pris une place importante.

Notre étude s'est concentrée sur l'extraction des propriétés optoélectroniques du matériau double pérovskite $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ (figure II.1) afin de mieux comprendre comment exploiter ces propriétés pour des applications technologiques, et notamment en photovoltaïque [2].

2. Détails du calcul

Notre calcul est basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) [5], une méthode théorique permettant de décrire l'énergie d'un système à partir de la densité d'électrons présents. Nous avons utilisé la méthode FP-LAPW (Full-Potential Linearized Augmented Plane-Wave) [3], qui est basée sur les ondes planes linéarisées. Cette méthode est implémentée dans le code de calcul Wien2k [4]. Dans cette étude, nous avons examiné de manière approfondie le composé double pérovskite $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$. Ce composé est constitué d'atomes de baryum, de bismuth, de tantale et de soufre disposés dans une structure cristalline de type pérovskite. Pour calculer les propriétés électroniques on a utilisé les deux approximations GGA-PBESol [4] et le potentiel modifié de Becke – Johnson de Tran et Blaha (TB-mBj) [4] (tableau II.1) pour le potentiel d'échange-corrélation,

alors que pour les propriétés optiques on a utilisé l'approximation GGA-PBESol. En outre, les paramètres de convergences utilisés dans ce calcul sont résumés dans les tableaux (II.2 et II.3).

Tableau.II.1. Les approximations fonctionnelles semi-locales disponibles dans le code Wien2k [5].

Fonction	Auteur	Année
LDA	Dirac,Slater, ...	1930
GGA	/	/
PBE	Perdew et al	1996
WC	Wu,Cohen	2005
PBESol	Perdew et al.	2007
HTBS	<i>Haas et al</i>	2011
TB-mBJ	Tran,Blaha	2009
meta-GGA :	/	/
revTPSS	Perdew et al	2009

Tableau.II.2. Les paramètres de convergence utilisées dans le calcul.

RMT*max	7
k-point	1000

Le rayon muffin-tin (RMT) est une approximation du rayon atomique utilisée dans les calculs de la théorie de la fonctionnelle de la densité. Les valeurs de RMT pour chaque élément dans la ternaire $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ peuvent varier selon la méthode de calcul utilisée et les paramètres choisis. Cependant, des valeurs typiques peuvent être données.

Tableau.II.3. Le rayon muffin-tin (RMT en unités atomiques) choisis pour chaque élément chimique du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ dans notre calcul.

RMT (Ba)	2
RMT(Bi)	2
RMT (Ta)	2
RMT (S)	1,7

Cette structure est déterminée par le paramètre de maille cubique a (Å), qui décrit la taille de la cellule unitaire. Afin d'examiner les propriétés optoélectroniques de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ nous avons utilisé la méthode FP-LAPW qui représente une méthode de calcul permet de résoudre l'équation de Schrödinger pour des systèmes complexes. Les résultats obtenus ont montré que ce composé $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ a des propriétés intéressantes pour les applications optoélectroniques en raison de sa bande interdite appropriée et de son coefficient d'absorption intéressant. Le paramètre de maille cubique a décrit la taille de la cellule unitaire de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ dans les directions x , y et z . La valeur obtenue du a pour $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ est de 8,342 Å.

Tableau. II. 4. Le paramètre de réseau calculé pour le composé $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

Le paramètre de réseau	$\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$
a	8,342 Å

L'étude approfondie des paramètres structuraux de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ est essentielle pour comprendre ses propriétés physiques et pour son utilisation dans diverses applications telles que l'électronique et les dispositifs électroniques. En particulier, la connaissance précise des paramètres de maille et des positions atomiques permet de prédire les propriétés physiques de ce matériau et de concevoir des dispositifs électroniques basés sur $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ avec des performances optimales.

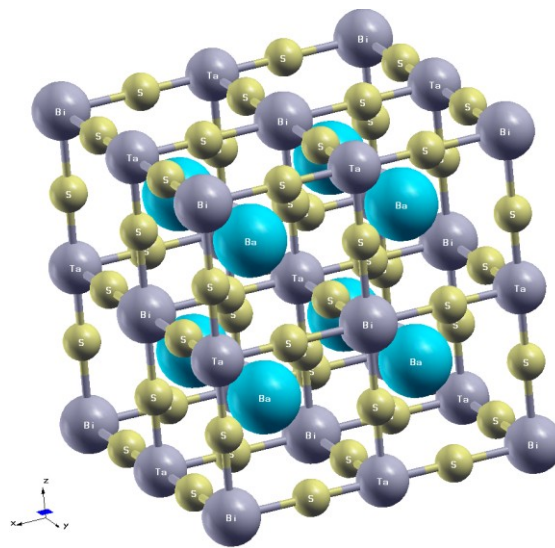


Figure.II.1. La structure double pérovskite (cubique) étudiée.

3. Résultats et discussions

3.1. Propriétés électroniques

Les propriétés électroniques de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ ont été étudiées par le code Wien2k. Ce matériau possède des propriétés de bandes interdites qui peuvent être adaptées pour une utilisation dans des dispositifs électroniques, optoélectroniques et des cellules solaires. La structure de bande de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$, également appelée structure électronique est représenté dans les figures (II.2) et (II.3) respectivement pour les deux approximation GGASolet TB-mBJ. Les résultats obtenus montrent que la bande interdite de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ est de 0,97 eV et de 1,67 eV respectivement, ce qui la rend appropriée pour les applications technologiques en optoélectronique.

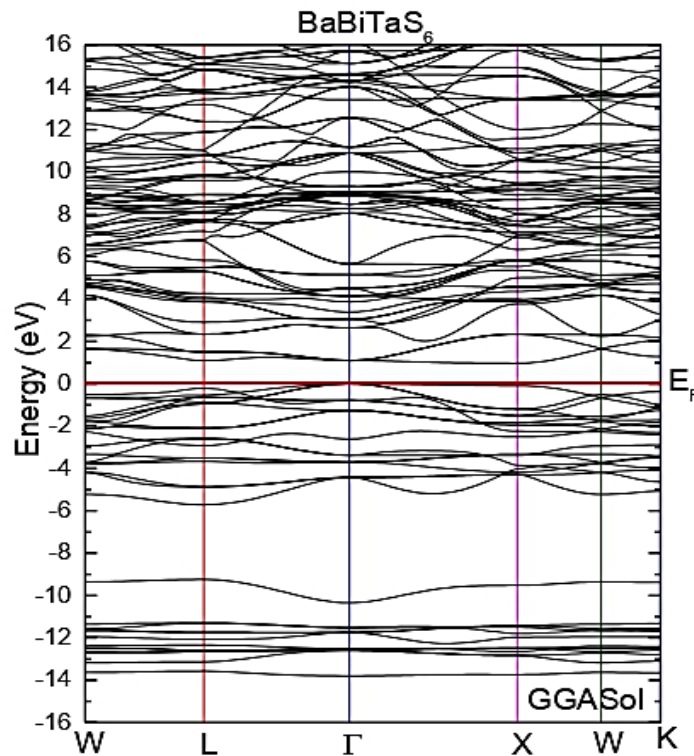


Figure. II.2. La structure de bandes électroniques calculée pour le $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ avec l'approximation GGASol.

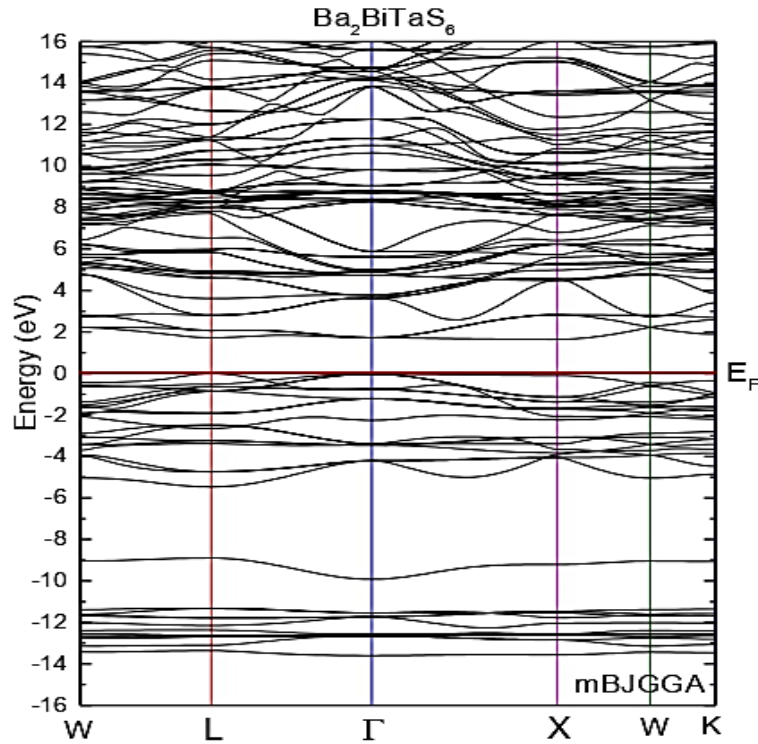


Figure. II.3. La structure de bandes électroniques calculée pour le $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ avec l'approximation TB-mBJ.

Tableau.II.5. La valeur de Gap énergétique calculé avec l'approximation mBJ-LDA.

Matériau	Approximation	L'énergie de gap (eV)
Ba ₂ BiTaS ₆	GGA-PBESol	0,97 (indirect)
	TB-mBJ	1,67 (indirect)

Les Figures (II.2) et (II.3) illustrent la structure des bandes électroniques selon les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin. À partir de graphe de la structure des bandes, On peut dire que le gap du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ est un gap indirect de nature Γ -X.

3.2. Propriétés optiques

L'importance de La physique des matériaux de l'état solide à basée sur les propriétés optiques, tels que l'absorption, la transmission, la réflexion, la diffusion et l'émission. L'étude des propriétés optiques être un puissant outil dans notre compréhension des propriétés électroniques des matériaux. Les propriétés optiques linéaires d'un matériau peuvent être décrites par la fonction diélectrique $\epsilon(\omega)$ donnée par [8] :

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

La fonction diélectrique $\varepsilon(\omega)$ est indispensable pour l'identification des diverses transitions inter bandes dans les semi-conducteurs [9, 10].

3.3. Coefficient d'absorption

Le coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ et l'énergie de gap optique E_g sont deux paramètres essentiels pour évaluer les propriétés optoélectroniques d'un matériau tel que $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$. Lorsqu'un photon est absorbé par le matériau, cela peut provoquer un saut d'électron d'un état occupé dans la bande de valence vers un état vide de la bande de conduction, ce qui entraîne une absorption.

La relation entre E_g et $\alpha(\omega)$ sous l'équation (2)[11,12] peut être utilisée pour quantifier la capacité du matériau à absorber la lumière et pour en comprendre les propriétés optiques dans différentes plages de fréquences. Il est important de noter que cette relation dépend également de facteurs tels que la qualité du matériau et la température. Notre étude sur le $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ cherche à mieux comprendre la corrélation entre ce paramètre pour optimiser les applications photovoltaïques et autres applications optiques potentielles.

$$\alpha = \frac{A(E-E_g)^{\frac{1}{2}}}{hv} \quad (2)$$

Avec:

A : représente la constante de proportionnalité qui dépend de la densité des états liés avec l'absorption de photon.

E : C'est l'énergie d'irradiation en eV.

h : La constante de Planck, elle est égale à $6,626 \times 10^{-34}$ J.s ($\hbar = h/2\pi$).

v : est la fréquence d'irradiation

La Figure (II.4) représente la variation du coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ en fonction de l'énergie du gap, et montre que le composé $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ a une bonne absorption dans l'intervalle de [0,97 eV–18 eV].

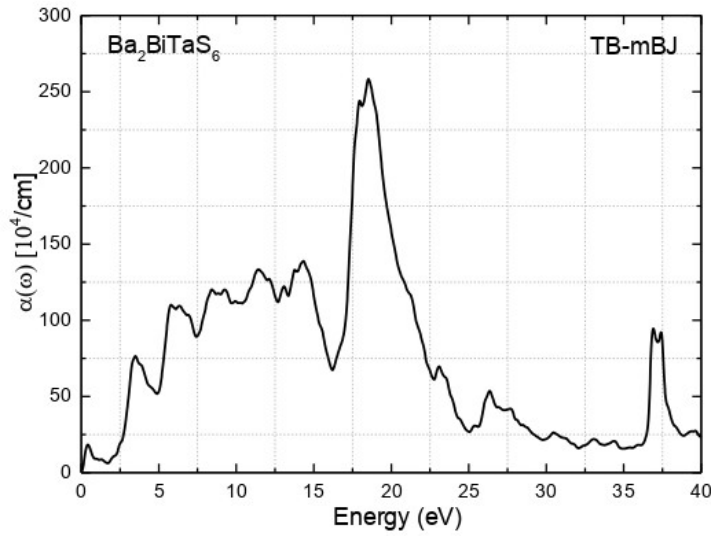


Figure.II.4.: Le Coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

3.4. Indice de réfraction

L'indice de réfraction $n(\omega)$ est un paramètre physique important dans l'interaction atomique. L'interaction de la lumière avec le milieu est exprimée par l'indice de réfraction complexe.

Cette quantité $\mathbf{n}^*(\omega) = \mathbf{n}(\omega) + i\mathbf{K}(\omega)$ peut être obtenue facilement car on connaît la partie réelle et imaginaire de la fonction diélectrique.

L'indice de réfraction $n(\omega)$ déterminé par [13]:

$$\mathbf{n}(\omega) = \left[\frac{\varepsilon_1(\omega)}{2} + \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)}{2}} \right]^{1/2} \quad (3)$$

La Figure (II.5) illustre l'indice de réfraction calculé par l'approximation TB-mBJ. La valeur statique de l'indice de réfraction est de $n(0) = 9.5$.

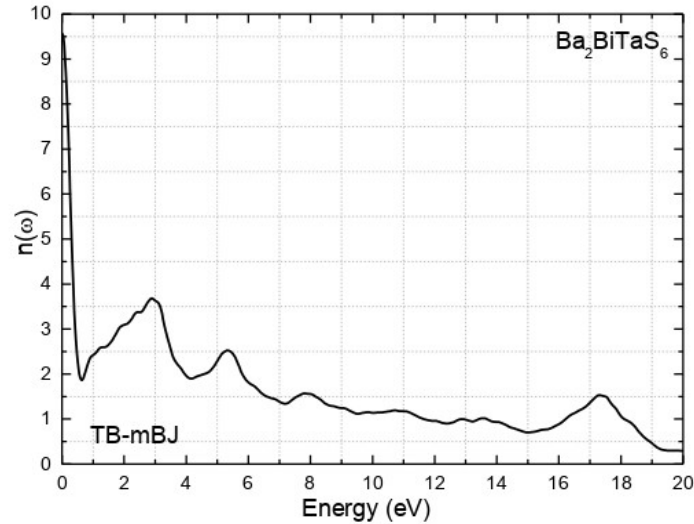


Figure.II.5.: L'indice de réfraction $n(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

3.5. Réflectivité

La connaissance des deux parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique permet de calculer une fonction optique importante comme la réflectivité $R(\omega)$ donnée par [5,20] :

$$R(\omega) = \frac{n+iK-1}{n+iK+1} \quad (4)$$

La Figure (II.6) illustre la réflectivité calculée par l'approximation TB-mBJ. La valeur statique est trouvée $R(0) = 0,67$, donc c'est l'équivalence d'une 67% qui représente une limitation aux applications photovoltaïques.

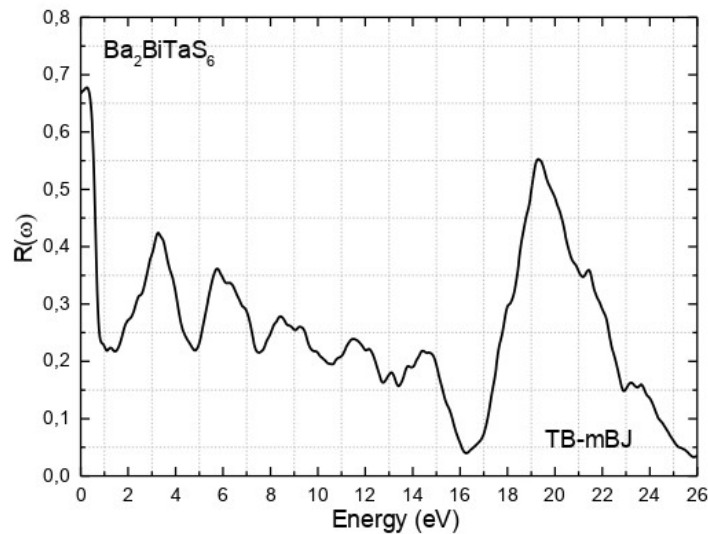


Figure.II.6.: La réflectivité $R(\omega)$ du $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$.

II.4. Conclusion

Selon les résultats obtenus, il est évident que le matériau $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ présente des caractéristiques prometteuses pour être utilisé dans les domaines de l'optoélectronique, notamment dans les cellules solaires.

Les propriétés observées de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ indiquent qu'il présente une capacité significative à absorber la lumière dans le spectre optique, ce qui est essentiel pour la conversion efficace de l'énergie solaire en électricité. L'évaluation des performances optoélectroniques de $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ a montré qu'il possède une bande interdite appropriée et un coefficient d'absorption $\alpha(\omega)$ favorable, ce qui lui permet de capter efficacement les photons.

Ces résultats préliminaires suggèrent que le matériau $\text{Ba}_2\text{BiTaS}_6$ pourrait jouer un rôle important dans le domaine de l'énergie solaire, contribuant ainsi à l'avancement des technologies optoélectroniques et à la recherche de solutions durables pour répondre aux besoins énergétiques futurs.

Références :

- [1] D. DJAMEL « Etude des propriétés électronique et optique linéaire pour la chalcopyrite CuAlTe_2 » mémoire de master (2015), Université Mohamed Boudiaf - M'sila.
- [2] Ouled Ali Mohammed, « Propriétés optoélectroniques du semi-conducteur Cu (In, Ga) Se_2 Appliquée aux cellules photovoltaïques », Mémoire de Magister en physique, école Normale supérieure de l'enseignement technologique d'Oran, (Algérie), (2010/2011).
- [3] P.Blaha,K. Schwartz,G. K. H. Madsen,D.Kvasnicka and J. Luitz,Wien2k,«an Augmented Plane wave plus orbital's program for calculating crystal proprieties»,Vienna University Of Technology,(Austria) (2001).
- [4] Durand, M. (2016). Approximations GGA-PBESol dans le calcul des propriétés électroniques des matériaux ferroélectriques. Revue des Energies Renouvelables, 19(2), 177-183
- [5] Wien2k. (n.d.). Wien2k. Retrieved from <http://www.wien2k.at>
- [6] P.Blaha,K. Schwartz,G. K. H. Madsen,D.Kvasnicka and J. Luitz,Wien2k,« an Augmented Plane wave plus orbital's program for calculating crystal proprieties»,Vienna University Of Technology,(Austria) (2001).
- [7] Reguieg Soumia,«Etude et modélisation du composé CuInS_2 pour son utilisation Comme Couche absorbante dans la cellule solaire»,Mémoire de Magister en physique,université Abou-Bekr belkaid-Tlemcen,(Algérie),(2012).
- [8] V. L. Shaposhnikov, A. V. Krivosheeva, and V. E. Borisenko, Phys. Rev. B85 (2012) 205201.
- [9] Chami Sabah,«Etude théorique des propriétés électroniques,structurales et élastiques Des Semi-conducteurs et leurs super-réseaux»,Mémoire de Magister en physique, Université de M'sila,(Algérie),(2009)
- [10] K. Djamel Eddine,«Etude des propriété structurales,électroniques,élastiques et optiques Des Chalcopyrites CuInX_2 (X=S,Se,Te)»,Mémoire de Magister en physique, Université Des Sciences et de la technologie Mohamed Boudiaf-Oran,(Algérie),(2013).

- [11] Badr-Eddine Nabil Brahmi, « Etude ab-initio des propriétés structurales et électroniques Des alliages ternaires des semi-conducteurs II-VI à base de zinc », Thèse de Doctorat en Physique, université de Abou-Bekr belkaid-Tlemcen, (Algérie), (2013).
- [12] M. Flrez, J. M. Recio, E. Francisco, M. A. Blanco and A. Martin Pend_s, Phys. Rev. B 66, (2002) 144112.
- [13] J. I. Pankove, « Optical processing semiconductors », Dover, New York (1971).
- [14] Omar Meglali, « Etude de L'influence des Conditions de Dépôt sur les Propriétés PhysicoChimiques des Couches Minces $CuXY_2$ (X: Al, In; Y: Se, Te) », Thèse de doctorat En Physique, université de Constantine 1, (Algérie), (2014).
- [15] T. Peng and J. Piprek, Electronics, letters 32, 24 (1996).

Conclusion

Générale

Dans ce mémoire, nous avons examiné les matériaux photovoltaïques, avec une attention particulière portée sur les pérovskites. Les pérovskites sont des matériaux prometteurs en raison de leurs propriétés uniques et de leur potentiel d'application dans les dispositifs photovoltaïques. Au cours de cette étude, nous avons exploré les caractéristiques générales des pérovskites, leurs propriétés spécifiques, ainsi que les critères importants dans le choix des matériaux photovoltaïques.

Dans la première partie théorique, nous avons abordé les bases des matériaux photovoltaïques, mettant l'accent sur les pérovskites. Nous avons présenté une vue d'ensemble des pérovskites, en soulignant leurs propriétés uniques et leur structure cristalline. De plus, nous avons examiné les doubles pérovskites, qui offrent des opportunités passionnantes pour améliorer les performances des dispositifs photovoltaïques.

Nous avons également discuté des critères essentiels dans le choix des matériaux photovoltaïques, en tenant compte de facteurs tels que l'efficacité énergétique, la stabilité et le coût. Ces critères jouent un rôle crucial dans le développement de dispositifs photovoltaïques rentables et durables.

Dans la deuxième partie pratique, nous avons décrit en détail la méthodologie de calcul utilisée pour évaluer les propriétés électroniques, la structure de bande, les propriétés optiques, la fonction diélectrique, le coefficient d'absorption, l'indice de réfraction et la réflectivité des pérovskites. Nous avons présenté les résultats obtenus et les avons discutés en relation avec les objectifs de notre étude.

Les résultats ont montré que les pérovskites présentent des propriétés électroniques et optiques prometteuses, ce qui les rend intéressantes pour les applications photovoltaïques. La structure de bande des pérovskites offre des niveaux d'énergie favorables à la séparation efficace des charges et à la génération de courant électrique. De plus, les propriétés optiques, telles que le coefficient d'absorption et l'indice de réfraction, sont favorables à la collecte maximale de la lumière solaire.

Cependant, des défis subsistent, notamment en termes de stabilité à long terme des pérovskites et de leur évolution dans des environnements variés. Des efforts de recherche supplémentaires sont nécessaires pour améliorer la stabilité et la durabilité des pérovskites, ainsi que pour optimiser leur efficacité énergétique.

En conclusion, ce mémoire de master a permis de mieux comprendre les matériaux photovoltaïques abondants à faible coût, en mettant l'accent sur les pérovskites. Les résultats obtenus dans cette étude ont mis en évidence le potentiel des pérovskites dans les applications photovoltaïques. Cependant, des travaux supplémentaires sont nécessaires pour surmonter les défis liés à la stabilité et à la durabilité des pérovskites.

Enfin, ce mémoire ouvre des perspectives pour de futures recherches visant à améliorer les performances des dispositifs photovoltaïques en exploitant pleinement le potentiel des pérovskites et en explorant d'autres matériaux innovants.