

SOMMAIRE

Introduction générale.....	1
Bibliographie.....	4
Chapitre 1 : l'énergie photovoltaïque et les cellules solaires.....	5
1-historique.....	6
2-quelques dates.....	6
3-principes de fonctionnement.....	7
• La cellule photovoltaïque.....	7
• Le semi conducteur.....	7
• Les types de dopages.....	8
4-avantages et inconvénients.....	9
5-la production d'électricité.....	10
6-les différentes générations technologiques.....	11
Bibliographie.....	13
Chapitre 2 : outils théoriques.....	14
Première partie: Théorie de la Fonctionnelle de Densité (DFT).....	15
1. Introduction.....	16
2. Equation de Schrödinger d'un cristal.....	16
3. L'approximation de Born – Oppenheimer.....	17
4. L'approximation de Hartree-Fock.....	18
5. La théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT).....	19
6. L'Approximation de la Densité locale (LDA).....	21
7. L'Approximation du Gradient Généralisé (GGA).....	22
8. Solution de l'équation de Kohn et Sham.....	22
Deuxième Partie: Ondes planes augmentées linéarisées.....	24
1. Ondes planes augmentées (APW).....	25
2. Ondes planes augmentées linéarisées (LAPW).....	27
Bibliographie.....	28
Chapitre 3 : résultats et discussion.....	29
✓ Introduction.....	30
✓ les matériaux chalcopyrites.....	31
✓ détail de calcul.....	32

Première partie: propriétés structurales des semi-conducteurs $\text{CuGaX}_2(\text{X}=\text{S}, \text{Se})$....	35
1-optimisation du volume.....	37
• Pour le composé CuGaSe_2	37
• Pour le composé CuGaS_2	38
2-optimisation c/a.....	39
• Pour le composé CuGaSe_2	39
• Pour le composé CuGaS_2	40
3-optimisation min.....	41
• Pour le composé CuGaSe_2	41
• Pour le composé CuGaS_2	42
4-nouvelle optimisation c/a.....	43
• Pour le composé CuGaSe_2	43
• Pour le composé CuGaS_2	44
5-pourcentage d'erreurs.....	46
• Pour le composé CuGaSe_2	46
• Pour le composé CuGaS_2	47
Bibliographie.....	48
Deuxième Partie: propriétés électroniques des semi-conducteurs $\text{CuGaX}_2(\text{X}=\text{S}, \text{Se})$	49
1-bandes d'énergies.....	50
• Pour le composé CuGaSe_2	50
• Pour le composé CuGaS_2	51
2-les densités d'états.....	53
*Pour le composé CuGaSe_2	53
✓ Densité d'états totale et partielle de Cu GaSe_2	53
✓ Densité d'états totale et partielle de Cu	54
✓ Densité d'états totale et partielle de Ga	55
✓ Densité d'états totale et partielle de Se	56
*Pour le composé CuGaS_2	57
✓ Densité d'états totale et partielle de Cu GaS_2	57
✓ Densité d'états totale et partielle de Cu	58
✓ Densité d'états totale et partielle de Ga	59

✓ Densité d'états totale et partielle de S.....	60
Bibliographie.....	62
Conclusion générale.....	63
Liste des figures.....	64
Liste des tableaux.....	65
Résumé.....	66