Résumé

Actuellement, l'intérêt est porté sur les semi-conducteurs à base chalcopyrite, principalement le groupe d'alliages *$CuInX_2$(X=S, Se, Te)*, dans les applications photovoltaïques. Ils ont un rôle primordial dans les piles solaires en couches minces, vu l'importance de leurs propriétés électroniques et optiques.
Notre travail consiste, de ce fait, à étudier la structure électronique et déduire en même temps les propriétés optiques de ces composés en utilisant les différentes approximations incluses dans le calcul de premier principe (*ab initio*) de la théorie de fonctionnelle de la densité (*DFT*).
Ainsi, les structures de bandes, les énergies de gap et les densités d'états sont bien déterminées et améliorées par l'utilisation d'une nouvelle approximation EV-GGA.
On montre aussi que ces composés ont des propriétés optiques très importantes (coefficient d'absorption, indice de réfraction, coefficient d'extinction …etc.).

Mots clés: calculs *ab initio*, propriétés électroniques et optiques des *$CuInX_2$(X=S, Se, Te).*

Abstract

Again, the interest is related to the semiconductors at base chalcopyrite mainly the groups alloys $CuInX_2$ (X=S, Se ,Te) in the application photovoltaic, and their principal roles in the solar cells in layers thin; because of importance's of their electronic and optical properties .
Our work consists, of this fact to study the electronic structure and to deduce at the same time the optical properties as of the components by using the various approximations included in calculation from first principle (*ab initio*) of the theory from functional calculus's from density (DFT).
Thus the structures of band, energies of gap and the densities of states well defined and are improved by use new an approximation EV- GGA.
It is also shown that these compensating have properties optics very significant which (coefficient d' absorption, l' index of refraction, coefficient d' extinction…..).

Keys words: calculations *ab inito*, electronic and optical properties of $CuInX_2$ (X=S, Se, Te)

ملخص

توجه مجددا اهتمام الباحثين حول المواد "النصف الناقلة" ذات قاعدة نحاسية-حديدية و تم التركيز على وجه الخصوص على الخلائط **($CuInX_2$; X=S, Se, Te)**
و ذلك على مستوى التطبيقات في التركيبات الضوئية الكهربائية و أهم أدوارها في البطاريات الشمسية عل شكل طبقات رقيقة 'نظر ا لأهمية خصائصها الالكترونية البصرية .
يهدف عملنا إلى دراسة الهيكلة الالكترونية واستخلاص الخصائص البصرية للمكونات باستعمال مختلف الحسابات التقريبية "DFT لموجودة ضمن حسابات المبدأ الأول من النظرية الوظيفيةِ للكثافة"

وعليه فهيكلة شرائط ا لطاقة وطاقة PAG و الكثافة تكون قد حددت بدقة و تم تحسينها بالاستعانة بحسابات تقريبية جديدة **GGA-EV**
سنبرهن أيضا أن لهذه المكونات خصائص بصرية جد هامة (معامل الاستيعاب, مؤشر الانعكاس, معامل الخمول…

الكلمات المفتاحية : حسابات المبدأ الأول, خصائص الكترونية و بصرية لــ **$CuInX_2$(X=S, Se, Te)**