

## **Introduction générale :**

Aujourd'hui, plus de 85% [1] d'énergie utilisée dans le monde provient de gisement de combustible fossile (charbon, pétrole, gaz) ou d'uranium, constitués au fil des âges et de l'évolution géologique [2].

La limitation de la quantité de ces réserves, la crise successive du pétrole en 1973 et l'accroissement de la demande d'énergie dans tous les pays du monde ont conduit les pays industrialisés à chercher et à développer de nouvelles sources d'approvisionnement. La filière nucléaire était déjà lancée, mais son choix à grande échelle peut amener des conséquences graves, surtout à l'environnement, à cause de la pollution et aussi les accidents nucléaires [3].

Les chercheurs ont développé une autre forme d'énergie dite « *énergie renouvelable* ». Ces énergies renouvelables ont toutes l'immense avantage d'être d'origines naturelles, inépuisables et non polluantes puisqu'elles n'émettent pas de gaz favorisant l'effet de serre, CO<sub>2</sub>.

Parmi ces énergies renouvelables, on peut citer la production d'électricité d'origine solaire par l'effet photovoltaïque (cellules solaires ou photopiles). La conversion de la lumière en électricité (conversion photovoltaïque) se produit dans des matériaux semi-conducteurs. Le photovoltaïque peut jouer un rôle important dans la transition vers un système d'approvisionnement énergétique durable pour le XXI<sup>ème</sup> siècle et est susceptible de couvrir une part importante des besoins en électricité de plusieurs pays.

L'Algérie avec sa situation géographique, occupe une position privilégiée dans l'exploitation d'énergie solaire avec une durée d'ensoleillement qui varie de 2650 heures /an dans le nord à 3500 heures/an dans le sud, l'une des plus élevées au monde.

Elle reçoit le maximum d'énergie lors du solstice d'été (21 ou 22 juin) et le minimum lors du solstice d'hiver (21 ou 22 décembre).

Dans ces dernières années, la production d'électricité à partir de la conversion photovoltaïque augmente dans le monde d'une façon remarquable. Cependant, la part de cette conversion en électricité reste faible comparativement à celle des autres énergies renouvelables, telles que l'énergie éolienne ou biomasse. Le principal obstacle à la pénétration du marché par le photovoltaïque est le coût de cette technologie qui rend l'électricité produite trop chère pour de nombreuses applications. En effet, la plupart des cellules solaires (~99%) sont fabriquées à partir

du silicium et malgré leur bon rendement, le coût des cellules reste élevé. L'industrie du photovoltaïque doit devenir plus concurrentielle et mettre au point des procédés de fabrication et des systèmes de conversion plus rentables. On a donc besoin de trouver d'autres matériaux possédant de bon rendement, parmi ces derniers les matériaux chalcopyrites qui sont considérés comme de bon alternatif au silicium.

Les matériaux  $CuGaX_2$  ( $X=S, Se$ ) sont des matériaux semi-conducteurs prometteurs dans le photovoltaïque choisis comme une couche absorbante dans la fabrication des cellules solaires, l'optique non linéaire à cause de leurs propriétés intéressantes [3].

Les propriétés physiques d'un solide sont étroitement liées au comportement des électrons qui le constituent. Le principal but est de résoudre le problème de la structure électronique des solides. La théorie de la structure électronique est utile à la fois pour comprendre et interpréter les résultats expérimentaux, et pour servir comme moyen de prédiction.

Pour une compréhension fondamentale de la structure électronique et par conséquent des propriétés des matériaux, les théoriciens ont développé des méthodes basées sur des modèles dits : semi-empiriques. De tels modèles comportent souvent de nombreux paramètres ajustables aux données expérimentales. D'autres méthodes de calcul plus rigoureuses et plus sophistiquées dites ab-initio, basées sur la théorie quantique fondamentale, utilisent seulement les constantes atomiques comme paramètres d'entrées pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces méthodes sont devenues aujourd'hui un outil de base pour l'étude des propriétés structurales, électroniques, mécaniques, optiques,... des molécules et des matériaux. Elles sont aussi un outil de choix pour l'étude de certains effets difficiles ou impossibles de déterminer par voie expérimentale et pour la prédiction de nouveaux matériaux, et elles ont parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire.

La puissance des calculs ab-initio a pour origine le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et ses deux approximations de l'énergie d'échange et de corrélation : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA). Le formalisme de base de la DFT est basé sur le théorème de Hohenberg et Kohn (1964) [4], qui repose sur la considération que l'énergie totale d'un système est une fonctionnelle de la densité électronique.

Parmi les méthodes ab-initio, la méthode FP-(L) APW+ (full potential – (Linearized) augmented plane wave) est l'une des plus précises, actuellement, pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Le but de ce travail est d'étudier les propriétés structurales, électroniques des composés  $CuGaS_2$  et  $CuGaSe_2$  et de tester l'efficacité et la précision de la méthode utilisée et cela en comparant nos résultats aux données expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature.

Le travail que nous présentons dans ce mémoire comprend trois chapitres. Dans le premier chapitre, nous exposons un aperçu général sur le photovoltaïque et les cellules solaires. Le second chapitre comprend deux parties, dans la première partie, nous exposons un rappel sur les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et l'approximation de la densité locale (LDA) et la densité du gradient généralisé (GGA), dans la seconde partie, nous rappelons le principe de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW). Dans le troisième chapitre. Nous présentons les résultats principaux obtenus telles que les propriétés structurales (paramètre de réseau, paramètre interne, positions d'équilibre, module de compressibilité et sa dérivée), les propriétés électroniques (structure des bandes, densité d'états électronique) des composés  $CuGaX_2$  ( $X=S, Se$ ) dans la phase chalcopyrites.

Finalement, on termine par une conclusion générale qui regroupe tous les principaux résultats de ce travail et des perspectives.

**Bibliographie :**

[1] Laboratoires de Systèmes Energétiques, [www.fifel.ch/includes/asp](http://www.fifel.ch/includes/asp), (2001).

[2] A. PAGES, L'utilisation des énergies renouvelables pour l'électrification rurale décentralisée des pays en développement, Octobre (2000).

[3] S-H. Wei, S.Chen and X.G .Gong, Phys. Rev B 75, 205209 (2007).

[4] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864.