

Thèse de doctorat ès sciences en Physique Energétique

Auteur: BENSALÉM Salaheddine

Directeur de thèse : Dr CHEGAAR Mohamed "Professeur à l'université de Sétif
1"

Etablissement : Université Sétif 1

Thème :

*Contribution à l'étude des propriétés physiques de matériaux solaires CZTX
(X=S, Se)*

ABSTRACT

In this thesis, we have studied some physical properties of Copper-Zinc-Tin-(Sulfur, Selenium) or Cu_2ZnSnX_4 ($X=S$ and Se) solar materials for the kesterite (KS) and stannite (ST) types by employing first principles calculation approach, using the plane wave pseudo potential calculations (PP-PW) implemented in the CASTEP package within Density Functional Theory (DFT) and the Generalized Gradient Approximation of Wu-Cohen (GGA-WC). The calculated lattice parameters are in good agreement with experimental reported data. The elastic constants are calculated for both types of both compounds using the static finite strain scheme; the pressure dependence of elastic constants is predicted. The bulk modulus, anisotropy factor, shear modulus, Young's modulus, Lamé's coefficient and Poisson's ratio have been estimated from the calculated single crystalline elastic constants. The analysis of B/G ratio shows that these compounds behave as ductile. Through quasi-harmonic approximation, the temperature dependence of some thermodynamic functions and lattice heat capacity of both compounds for both types has been performed.

RÉSUMÉ

Dans cette thèse, nous avons étudié certaines propriétés physiques de matériaux solaires Cuivre-Zinc-Etain-(Soufre, Sélénium) ou Cu_2ZnSnX_4 ($X=S$ et Se) pour les deux types de structure kesterite (KS) et stannite (ST) par l'approche de calcul de premiers principes, en utilisant la méthode de calcul des ondes planes pseudo potentiel (PP-PW) implémentée dans le code CASTEP qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et l'approximation généralisée de gradient de Wu-Cohen (GGA-WC). Les paramètres de maille calculés sont en bon accord avec les données expérimentales disponibles. Les constantes élastiques sont calculées pour les deux types de composés en utilisant la technique des déformations finies statiques; la dépendance en pression hydrostatique des constantes élastiques est aussi prédite. Le module de compressibilité, le facteur d'anisotropie, le module de cisaillement, le module de Young, le coefficient de Lamé et le rapport de Poisson ont été estimés à partir des constantes élastiques calculées du monocristal. L'analyse du rapport B/G montre que les composés CZTX se comportent comme ductile. En employant l'approximation quasi-harmonique, la dépendance en température de certaines fonctions thermodynamiques et la capacité calorifique de deux composés pour les deux types a été étudiée.

ملخص

في هذه الأطروحة، تمت دراسة بعض الخواص الفيزيائية للمركبات الشمسية نحاس-زنك-قصدير- (كبريت، سيلينيوم) أو Cu_2ZnSnX_4 ($X = S, Se$) لكلا النوعين kesterite (KS) و stannite (ST) عن طريق مقارنة حسابية من المبادئ الأولى، باستخدام طريقة الموجة المستوية والكمون الزائف (PP-PW) المدخلة في البرنامج CASTEP الذي يقوم على نظرية دالية الكثافة (DFT)، و تقريب التدرج المعمم (GGA-WC). المعاملات البنوية المحسوبة في اتفاق جيد مع البيانات التجريبية المتوفرة. حساب ثوابت المرونة لكلا النوعين للمركبين المدروسين تم باستخدام تقنية التشوهات المحدودة الساكنة؛ تم أيضا التنبؤ بسلوك ثوابت المرونة بدلالة الضغط الهيدروستاتيكي. معامل الانضغاط، عامل التباين، معامل القص، معامل يونغ، معامل لاميه ومعامل بواسون قدرت من الثوابت المرنة للبلور الأحادي. تحليل النسبة B/G تبين أن المركبات CZTX لها تصرف ميكانيكي لين. باستخدام تقريب شبه التوافقي، تمت دراسة التعلق بدرجة الحرارة لبعض الدوال الترموديناميكية والسعة الحرارية لكلا النوعين للمركبين المدروسين.