



République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche  
Scientifique



**Université Amar Telidji- Laghouat**

**FACULTE: TECHNOLOGIE**

**DEPARTEMENT: GÉNIE DES PROCÉDÉS**

## **MEMOIRE DE MASTER**

Présenté par: **SOUDANI Fatima Ezahraa**

**NOURREDDINE Aicha**

**DOMAINE: Sciences et Technologies**

**FILIERE: Génie des Procédés**

**OPTION: Génie des Procédés des Matériaux**

### **Thème**

**Etude par DFT et DFT+U des propriétés structurales,  
électroniques et optiques du composé  $\text{CdBr}_2$  par  
l'approximation WC-GGA et le potentiel TB-mBJ**

#### **Jury de soutenance:**

<b>Nom et Prénom</b>	<b>Grade</b>	<b>Qualité</b>
BOUTASSOUNA Nassima	MAA	Présidente
AMEUR Kheira	MAA	Examinatrice
BELHADJ Soraya	MCB	Rapporteuse
GHOZLANE Amira	Doctorante	Co-rapporteuse

**Année Universitaire: 2022-2023**

## *Dédicaces*

Tout d'abord, je remercie Dieu Tout-Puissant qui m'a donné la force et la volonté de pouvoir accomplir ce travail.

Je tiens à exprimer ici mes sincères remerciements et mes sentiments les plus chaleureux :

Ma mère a la lumière de mes yeux et le symbole de la tendresse

À mon père, mon soutien qui m'a soutenu dans mes études pendant de nombreuses années, et qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir.

À mes frères (Djamal, Hamid) et sœurs,

(Wafaa, Soumia, Zineb) à toute ma famille SOUDANI

A tous mes amis (Aicha Khadidja, Widad, Kaouthar, Farah)

Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé

Tu as toujours été à mes côtés et pour tous ceux qui m'ont accompagné

Pendant mes études à tous mes camarades de classe

A tous ceux qui ont suivi notre formation: GHOZLANE Amira et SIGA Khaoula

À tous les lecteurs mon mémoire.

Fatima Ezahraa

## *Dédicaces*

*Je dédie ce mémoire:*

*A ma très chère mère, vous êtes l'exemple de dévouement qui n'a pas cessé de m'encourager et de prier pour moi. Puisse Dieu, le tout puissant, préserver la santé, et te donner une longue vie pleine bonheur.*

*A mon père, ce travail et le fruit de longues années de labeur fournis jour et nuit pour mon éducation ainsi qu'a mon bien être. Merci "Papa".*

*A Mes frères: Ahmed, Salah, et Bachir*

*A mes chères sœur: Meriem, Fatima*

*A mon fiançailles Abdel EL Nacer*

*A tous mes amies : Fatima, Widad, Khadidja, Ferial ,*

*A toute la famille: NOUREDDINE*

*A tous ceux qui ont suivi notre éducation: Amira GHOZLANE SIGA Khaoula.*

AICHA

## *Remerciements*

*Tout d'abord, je remercie Dieu qui m'a aidé à réaliser ce travail.*

*Nous remercions notre encadrante: **Dr. Soraya BELHADJ**, l'enseignante, et toute notre gratitude à elle pour sa patience, ses encouragements, son aide, son dévouement au travail et sa présence lors de la préparation de ce mémoire.*

*Et co-encadrante: Amira GHOZLANE*

*Ce travail a été réalisé en collaboration avec le Département des Méthodes d'Ingénierie et la Faculté des Sciences et Techniques d'Ammar Thelidji, l'Université de Laghouat et le Laboratoire de Recherche LPCM.*

*Nous tenons également à remercier tous les membres du jury:*

*Nos sincères remerciements à Mme **BOUTASSOUNA Nassima** pour son approbation présidence du jury.*

*Toute notre reconnaissance. Nous voudrions remercier aussi Mme **AMEUR Kheira** pour approbation d'examiner notre travail*

*Je remercie également tous mes collègues et amis pour leur soutien, leur présence et leurs encouragements.*

# SOMMAIRE

## Liste des abréviations

**DFT** : Théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory)

**DOS**: Densité d'états (Density of states)

**GGA** : Approximation du gradient généralisé (Generalized Gradient Approximation)

**WC-GGA** : Wu- Cohen Generalized Gradient Approximation .

**PDOS** : Densité d'états partielle (Partial density of states)

**DOS: Densité** d'états total (Total density of states)

**FP- LAPW** : Full Potentiel Linéarise Augmente Plane Waes.

**TB-mBJ** : Becke-Jonson modifiée.

**MT** : Muffin-Tin

**Eg** : Energie de gap

**CdBr<sub>2</sub>** : Bromure de cadmium

**Ri** : Région interstitielle

**Bc** : Bande de conduction

**Bv** : Bande de valence

## Liste de figure :

<b>Chapitre I : généralité sur les matériaux et présentation</b>	
<b>Figure I.1 :</b> Structure hexagonale(compact)	<b>03</b>
<b>Figure I.2 :</b> Structure de CdBr <sub>2</sub> .	<b>04</b>
<b>Figure I.3.:</b> Une maille hexagonale tridimensionnelle	<b>04</b>
<b>Figure I.4 :</b> Les transitions optiques directes et indirectes	<b>05</b>
<b>Figure I.5:</b> Rayon Le potentiel muffin-tin	<b>06</b>
<b>Chapitre II : Résultats et discussion</b>	
<b>Figure II-1 :</b> Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le volume de CdBr <sub>2</sub>	<b>13</b>
<b>Figure II-2 :</b> Variation de volume en fonction de l'énergie de c /a par l'approximation WC-GGA... .	<b>14</b>
<b>Figure II-3:</b> densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd avec et sans TB-mBJ.	<b>15</b>
<b>Figure II-4 :</b> densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd avec TB-mBJ	<b>17</b>
<b>Figure II-5 :</b> densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd sans TB-mBJ.	<b>17</b>
<b>Figure II-6 :</b> structure de bande électronique avec et sans TB-mBj	<b>18</b>
<b>Figure II-7:</b> Fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident avec et sans TB-mBJ..	<b>20</b>
<b>Figure II-8 .</b> Propriétés optiques en fonction de l'énergie du photon incident: le coefficient d'absorption, la réflectivité , la perte d'énergie et l'indice de réfraction avec et sans TB-mBJ	<b>21</b>
<b>Figure II-9:</b> Variation de volume en fonction de l'énergie de c /a par l'approximation WC-GGA	<b>22</b>
<b>gure II-10 :</b> Variation de volume en fonction de l'énergie de c /a par l'approximation WFiC-GGA	<b>23</b>
<b>Figure II-11 :</b> Densité des états totale et partielle Up et Down avec TB-mbJ	<b>24</b>
<b>Figure II-12 .:</b> Densité des états totale et partielle DOS Up et DN sans TB-mbJ	<b>25</b>
<b>Figure II-13 :</b> densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd avec TB-mBJ	<b>26</b>
<b>Figure II-14 :</b> densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd Sans TB-mBJ	<b>26</b>
<b>Figure II-15 :</b> Structure de bande UP et DOWN avec TB-m BJ	<b>27</b>
<b>Figure II-16 :</b> Structure de bande UP et DOWN sansTB-m BJ	<b>28</b>
<b>Figure II-17 :</b> Fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident avec et sans TB-mB	<b>30</b>
<b>FigureII.18:</b> Propriétés optiques en fonction de l'énergie du photon incident: le coefficient d'absorption, la réflectivité , la perte d'énergie et l'indice de réfraction avec et sans TB-Mbj	<b>31</b>

## Liste des tableaux :

<b>Tableau II.1 :</b> Détails de calcul	<b>12</b>
<b>Tableau.II.2:</b> Valeurs fondamentales calculés de l'optimisation du volume	<b>14</b>
<b>Tableau II.3:</b> Variation du gap avec et sans TB-mBJ	<b>18</b>
<b>Tableau II.4:</b> Propriétés optiques calculés pour CdBr <sub>2</sub> avec et sans TB-mBJ par DFT	<b>22</b>
<b>Tableau II.5:</b> Valeurs fondamentales calculés de l'optimisation du volume avec DFT+U	<b>23</b>
<b>Tableau II.6:</b> Résultats de calculs des structures de bandes de Cd Br par WC-GGA avec TB-mBJ	<b>29</b>
<b>Tableau II.7:</b> Résultats de calculs des structures de bandes de Cd Br par WC-GGA sans TB-mBJ	<b>29</b>
<b>Tableau II.8:</b> Propriétés optiques calculés pour CdBr <sub>2</sub> avec et sans TB-mBJ par DFT+U	<b>32</b>
<b>Tableau</b> Erreur ! Il n'y a pas de texte répondant à ce style dans ce document.. <b>9</b> :Valeurs de la bande interdite (gap) calculées par les deux méthodes DFT et DFT+U sans et avec TB-mBJ	<b>32</b>

## Sommaire :

Liste d'abréviations : .....	I
Liste des figures : .....	II
Liste des tableaux : .....	III
Table Des matièrs : .....	IV
Introduction générale : .....	1

### Chapitre I :

#### Généralité sur les matériaux et présentation

I.1. Introduction : .....	3
I.2 Généralité sur le matériau CdBr <sub>2</sub> : .....	3
I.2.1. La structure cristalline de CdBr <sub>2</sub> : .....	3
I.2.2 les applications de CdBr <sub>2</sub> . .....	4
I. 3. L'énergie de gap : .....	4
I.3.1 Les semi-conducteurs à gap direct : .....	5
I.3.2 Les semi-conducteurs à gap indirect : .....	5
I.3.2 semi-conducteur a gap inderect .....	5
I. 4 La théorie de la Fonctionnelle de la Densité DFT : .....	5
I. 4.1 La méthode de calcul FP-LAPW: .....	6
I.5 les approximations : .....	6
I.5.1. L'approximation du gradient généralisé (GGA) : .....	6
I.5.2. l'approximation WC-GGA : .....	7
I.5.3. L'approximation (TB-mBJ) : .....	7
I.6. La Méthode DFT+U : .....	7
I.7. Le code de calcul Wien2k : .....	8

### Chapitre II :

#### Calcul et résultat

II.1.Introduction : .....	12
II.2. Détaillès des calculs : .....	12
II.3. prprietes structurale : .....	12
II.4 proprietes électronique: .....	15
II.4.1. Densité d'état DOS : .....	15
II.4.2 Densité d'états de charge électronique : .....	16
II.4.3. Structure de bande électronique : .....	17
II.5 Propriétés optique : .....	19
II.5 1 Fonction diélectrique.: .....	19
II.5.2 Autres propriétés optiques : .....	20
II.6. Calculs des propriétés par la méthode DFT+U : .....	22
II.6.1 . Proprietes structurale : .....	22
II.6.2 . Propriétés électroniques : .....	23
II.7.: Densité d'états de charge électronique : .....	26
II.7. 1 Structure De Bande Electronique : .....	27
II.8 Propriétés optique : .....	29
II.8.1 Fonction diélectrique : .....	29
II.8.2 Autres propriétés optiques : .....	31
II.9 Comparaison Entre DFT et DFT +U : .....	32
II.10 Conclusion : .....	32
II.11 conclusion Générale : .....	34

# **Introduction générale**

## Introduction générale

La science et l'ingénierie des matériaux est une branche de la science moderne concernée par l'étude des structures et des propriétés fonctionnelles des matériaux et des minéraux, et joue un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, dans de nombreux domaines. [1].

Avant d'utiliser des matériaux (durs) dans l'industrie, il est nécessaire de s'assurer de la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques et optiques.

L'étude des matériaux en termes de la structure aux propriétés ; transitions de phase, physique du solide; structures et propriétés et physique des semi-conducteurs, modélisation des matériaux [2].

Le but de cette étude est de contribuer à la détermination des propriétés structurales (paramètre de réseau), électroniques (structure de bande, densité d'états DOS) et optiques (Constante diélectrique, indice de réfraction, réflectivité) [3].

Étude des propriétés structurales, électroniques, optiques, etc. C'est aussi un outil privilégié pour étudier certains effets difficiles ou impossibles à déterminer expérimentalement et pour prédire de nouveaux matériaux, et il peut parfois remplacer des expériences coûteuses voire inaccessibles en laboratoire.

Les semi-conducteurs binaires constituent une classe importante de matériaux grâce à leur richesse de propriétés électroniques, optiques, structurales et diélectriques qui sont des paramètres importants et jouent un rôle majeur dans les composants photovoltaïques.

Ce calcul a été effectué en utilisant la méthode FP-LAPW basée sur la théorie fonctionnelle de la densité DFT et sa mise en œuvre dans code informatique Wien2k [4], nous avons utilisé l'approximation généralisée du gradient (WC-GGA).

Ce travail est divisé en deux chapitres, en plus d'une introduction générale et d'une conclusion générale.

Le premier Chapitre contient une recherche bibliographique générale sur les matériaux  $\text{CdX}_2$ .

Le deuxième chapitre présente les résultats des calculs d'optimisation des propriétés structurales, électroniques et optiques par la méthode DFT et DFT+U.

Enfin, on conclut par une conclusion générale.

## Références bibliographiques

[1] : <https://enp-constantine.dz/genie-des-materiaux/>

[2] : <https://enp-constantine.dz/genie-des-materiaux/>

[3] : M.E. Gaidi, M. Drikeche; Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé binaire semi-conducteur In-Sb; mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim de Bordj Bou Arreridj (2021).

[4] : A Chadli, Calcul ab initio des propriétés de quelques pérovskites  $ABO_3$  et leurs solutions solides  $A_xA'_{1-x}BO_3$ , thèse de doctorat, Université Amar Telidji de Laghouat (2022).

## **Chapitre I.**

# **Généralités sur les matériaux et présentation**

## I.1. Introduction

Les halogénures bidimensionnels (2D) de métaux de transition ont suscité un grand intérêt en raison de leurs applications polyvalentes dans plusieurs domaines: l'électronique, stockage et la conversion des énergies renouvelables [1]. Parmi ces composés est le bromure de cadmium  $\text{CdBr}_2$  qui est entré dans la fabrication de dispositifs optoélectroniques.

Il est utilisé pour produire des photo-détecteurs à haute sensibilité, grâce à son comportement semi-conducteur.

Au Cour des années précédentes, il n'y avait pas beaucoup d'études et de calculs des propriétés physiques de  $\text{CdBr}_2$ , les résultats sont peu nombreux. Des calculs des propriétés optiques et de structure de bande ont été effectués par Hamdollah Salehi *et al.* [2].

## I.2. Généralité sur le matériau $\text{CdBr}_2$

### I.2.1. Structure cristalline de $\text{CdBr}_2$

$\text{CdBr}_2$  est structuré comme un oméga trigonal et cristallise dans le groupe spatial hexagonal  $P6_3mc$ . La structure est bidimensionnelle et se compose de deux feuilles de  $\text{CdBr}_2$  orientées dans la direction (0,0,1).  $\text{Cd}^{2+}$  est lié à six atomes équivalents  $\text{Br}^-$  pour former des octaèdres  $\text{CdBr}_6$  partageant les bords. Toutes les longueurs de liaison Cd-Br sont de 2,80 Å.  $\text{Br}^{1-}$  est lié dans une géométrie en forme de T déformé à trois atomes  $\text{Cd}^{2+}$  équivalents [3,4].

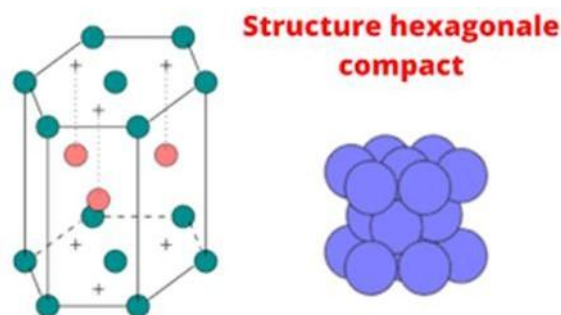
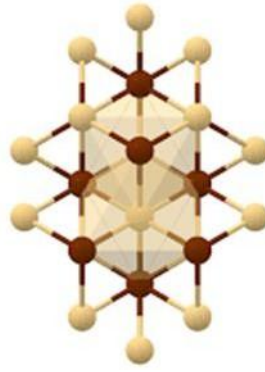
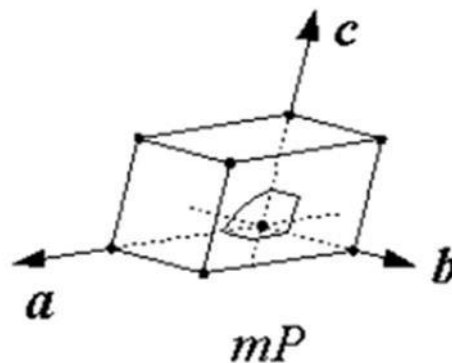


Figure I.1: Structure hexagonale compact [4]



**Figure 2:** Structure de  $\text{CdBr}_2$  [4]



**Figure I.3:** Maille hexagonale tridimensionnelle [5].

### I.2.2. Applications de $\text{CdBr}_2$

Le bromure de cadmium est connu un cristal photochromique et est largement utilisé comme [6]:

- Fenêtre pour les applications infrarouges.
- Comme protection contre la corrosion pour les matériaux ferreux (cadmiage).
- Comme revêtement de surface pour les matériaux en aluminium dans le génie militaire.

### I.3. Matériaux semi-conducteurs

Cette classe de matériaux se situe entre les métaux (conducteurs) et les isolants (non conducteurs). La résistivité des semi-conducteurs varie de  $10^{-3}$  à  $10^{+4}$ . Les électrons libres et les trous mobiles sont les porteurs de charges responsables de la conductivité électrique. Un semi-conducteur peut être soit intrinsèque (pur) ou extrinsèque (dopé) par des impuretés [7].

### I.3.1. Energie du gap

Le gap étant défini, comme étant la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence

Les structures de bandes représentées sur la figure I.4 font apparaître deux types fondamentaux de semi-conducteurs [8].

### I.3.2. Semi-conducteurs à gap direct

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction peuvent correspondre au même vecteur d'onde  $k$ .

### I.3.3. Semi-conducteurs à gap indirect

Si le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction ne correspondent pas au même vecteur d'onde  $k$ . La distinction entre le semi-conducteur à gap direct et indirect est très importante, notamment, dans les processus radiatifs, les processus d'absorption ou d'émission sont considérablement plus importants dans les semi-conducteurs à gap direct que dans les semi-conducteurs à gap indirect. [8]

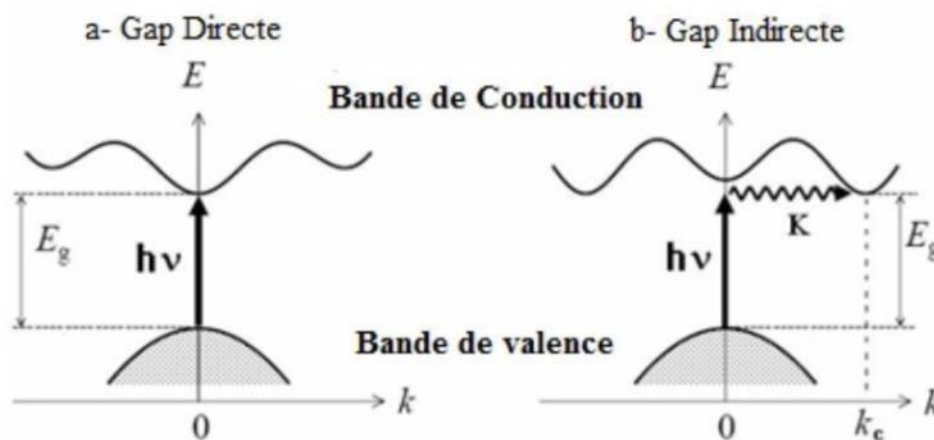


Figure I.4: Transitions optiques directes et indirectes [8].

## I.4. Théorie de la fonctionnelle de la densité DFT

La DFT est une méthode utilisée pour les calculs quantiques de structure électronique du solide, C'est une méthode de choix pour l'étude des propriétés physiques de l'état fondamental des solides [9].

La DFT est basée sur une description du système en entier de manière à constituer une meilleure approximation pour la résolution de l'équation de Schrödinger [9].

$$H \Psi = E \Psi \quad (\text{I.1})$$

$E$ : est l'énergie totale du système

$\Psi$ : Sa fonction d'onde (fonction propre).

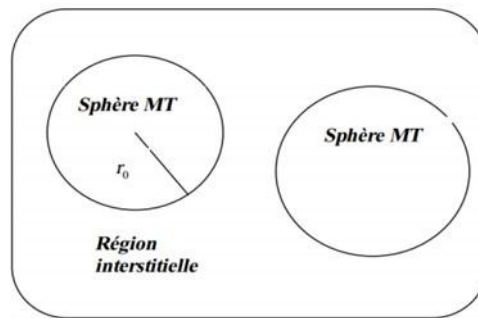
L'objectif principal de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique.

### I.4.1. Méthode de calcul FP-LAPW

Pour un cristal, l'espace est divisé en 2 régions

**1- La région de cœur:** elle est limitée par des sphères atomiques (sphère de Muffin-tin) de rayon RMT qui entourent les noyaux et ne se chevauchent pas.

**2- La région interstitielle:** région complémentaire hors des sphères, dans cette région les fonctions d'ondes sont planes et le potentiel est constant [10].



**Figure I.5:** Rayon muffin-tin et rayon interstitiel.

La fonction de base de FP-LAPW possède des ondes planes dans la région interstitielle et harmoniques sphériques multipliées par les fonctions radiales dans les sphères [11].

## I.5. Approximations

### I.5.1. Approximation du gradient généralisé (GGA)

Tous les systèmes atomiques ou moléculaires réels sont inhomogènes c'est-à-dire que la densité électronique possède une variation spatiale. La GGA a été développée de manière à prendre en compte cette variation de la densité en exprimant les énergies d'échanges et de corrélation en fonction de la densité mais également de son gradient [12].

### **I.5.2. Approximation WC-GGA**

GGA offre une amélioration notable, mais une approche récente appelée WC-GGA (approximation GGA développée par Z. Wu et R.E.E Cohen) a montré de meilleurs résultats en particulier pour les propriétés structurales. Wu et Cohen ont proposé une nouvelle approximation de GGA pour la fonction d'énergie d'échange, en utilisant en combinaison avec l'approximation PBE de l'énergie de liaison fonctionnelle [13]. Cela a apporté une énorme amélioration par rapport à LDA et PBE-GGA en particulier pour les paramètres de grille et le coefficient de compressibilité des solides.

Le zoom WC-GGA a quelques fonctionnalités intéressantes principalement parce qu'il s'agit d'un zoom GGA.

### **I.5.3. Potentiel TB-mBJ**

«Tran and Blaha Modified Becke Johnson Potentiel» c'est une nouvelle version du potentiel d'échange, proposée pour la 1ère fois par Becke et Johnson.

A été récemment publiée par Tran et Blaha [14]. Beaucoup de chercheurs ont montré que l'introduction du potentiel d'échange et de corrélation de semi-locale (TB-mBJ) donne des bons résultats pour les valeurs du gap énergétiques des semi-conducteurs et les isolants.

Ainsi que des largeurs de bande avec une précision comparable aux approches qui conduisent à des calculs très coûteux.

## **I.6. Méthode DFT+U**

Asimov *et al.* ont développé une méthode dite :méthode DFT+Hubbard, qui peut servir à résoudre certaines problèmes, surtout pour traiter les corrélations électroniques dans les composés de métaux de transition et de terres rares, en se basant sur des hamiltonien phénoménologiques à plusieurs corps tels que le modèle d'impureté Hubbard ou Anderson .

Parmi ces méthodes qui minimisent l'erreur d'auto-interaction est la méthode GGA+U reproduit souvent correctement l'énergie relative, les états de base magnétiques et la structure électronique des systèmes dans lesquels GGA échoue, compris les énergies de réaction redox, l'énergie de la bande interdite et le moment magnétique, la méthode GGA+U souffre également de plusieurs limitations [15] .

En particulier, la transférabilité de U entre les composés est limitée.

Le concept clé de DFT+U est d'adresser les interactions de Coulomb sur site dans les orbitales d ou f localisées avec un terme de type Hubbard supplémentaire.

## I.7. Code de calcul Wien2k

Le programme utilisé dans ce travail est WIEN2K, Développé par Blaha, Schwartz et Luiz. Ce code est une implémentation de la méthode FP-LMTO pour définir diverses propriétés, le calcul se fait en trois étapes [16].

- **Initialisation**

NN: C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

LSTART: Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du cœur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY: Il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN: Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART: Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART. Alors un cycle self consistant est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes [16]:

- **Calcul auto-cohérent**

Pour la présentation de la période d'auto-cohérence (SCF), les étapes d'initialisation sont définies, ce qui se fait avec un script logiciel comme suit:

LAPW0: Génère le potentiel pour la densité.

LAPW1: Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2: Calcul les densités de valence pour les vecteurs propres.

LCORE: Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER: Mélange les densités d'entrée et de sortie.

- **Détermination des propriétés**

Le calcul des propriétés physiques se fait à l'aide des programmes suivants:

OPTIMIZE: ce programme détermine l'énergie totale en fonction du volume pour trouver le Paramètre de réseau et le module de compressibilité.

LAPW5: ce programme génère la densité de charge.

TETRA: ce programme détermine la densité d'état totale et partielle.

SPAGHETTI: ce programme calcul la structure de bandes.

OPTIC: calcul les propriétés optiques [16].

## Références bibliographiques

- [1]: X. Yi, W. Wang, P. Zhou, Z.C. Zou, L.Z. Sun, A new family of two-dimensional topological materials: CdX (X=F, Cl, Br, and I), Phys. Status Solidi RRL (2018) 1800466(1-6), DOI: 10.1002/pssr.201800466.
- [2]: H. Salehi, N. Asareh, Investigation of the optical properties of CdBr<sub>2</sub>, Optics and Photonics Journal 1.1 (2011), DOI:10.4236/ opj.2011.11001.
- [3]: <https://materialsproject.org>.
- [4]: <https://materialsproject.org/materials/mp-568690>.
- [5]: M.EA. Gaidi, M. Drikeche, Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé binaire semi-conducteur InSb, University Mohamed El Bachir El Ibrahimy de Bordj Bou Arrerid (2022).
- [6] A. Bensouician, J.L. Plazab, E. Dieguezb, O. Halimia, L. Guerbousc, M. Sebais, Optical and structural characterization of KBr crystals doped cadmium bromide CdBr<sub>2</sub>, Journal of Luminescence (2010), DOI:10.1016/j.jlumin, 2009.11.020.
- [7]: A.H. Souici, Physique des semi-conducteurs, mémoire de master, Université de Béjaia, Algérie (2013-2014).
- [8]: Y. SAFI, S Doursaf, Etude ab- initio des propriétés électroniques et optiques des composés binaires BaX (X=Se, Te), mémoire de master, université de Larbi Tébéssi de Tébessa (2021) p3-4.
- [9]: M. Belmakki, Étude des propriétés structurales et électroniques des composés binaires et ternaires à base des chalcogénures de bismuth, mémoire de master, Université de Belhadj Bouchaib d'Ain Témouchent (2019) p16.
- [10]: K. Berarma, Nouveau matériaux de type I-II-IV-VI<sub>4</sub> investigation théorique physico-chimique, thèse de doctorat, Université de M'SILA (2017).
- [11]: S. Ghanem, Étude ab initio des propriétés structurales et électronique des composants binaires de types XY(X=Sc,Ce et Y=N ,P), mémoire de master, Université Saad Dahleb de Blida 1 (2019) p1.
- [12]: A. Bedjaoui, Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés AlX (X=N, P et As), mémoire de magister, Université Ferhat Abbas de SETIF (2011).
- [13]: Y. SAFI, S Doursaf, Etude ab- initio des propriétés électroniques et optiques des composés binaires BaX (X=Se, Te) ,mémoire de master, Université de Larbi Tébéssi de Tébessa (2021) .p1-2.

- [14]: H. Beldjilali, M. Boukhalkhal, Etude des propriétés électronique et thermoélectrique des composé XYZ pour dispositif, thermoélectrique, mémoire de master, Université de Saida (2019-2020) p17.
- [15]: M.EA. Gaidi, M. Drikeche, Etude des propriétés électroniques, optiques et diélectriques du composé binaire semi-conducteur In-Sb, mémoire de master, Université Mohamed El Bachir El Ibrahim de Bordj Bou Arreridj (2021).
- [16]: S. Ghanem, Étude ab initio des propriétés structurales et électronique des composants binaires de types XY(X= S-c, Ce et Y=N, P), mémoire de master, Université Saad Dahleb de Blida 1 (2019) p17-18.

**Chapitre II:**

**Résultats et  
discussion**



## II.1. Introduction

Dans ce chapitre nous allons discuter et présenter les résultats de nos calculs des propriétés physiques de composé  $\text{CdBr}_2$  dans le cadre de la DFT (Densité Functional Theory).

Ce chapitre est divisé en deux parties. En première partie nous allons énoncer l'optimisation et interpréter de calcul dans le code Wien2k (initialisation). La deuxième partie calcule les propriétés structurale et électronique et les propriétés optiques.

Nos calculs ont été réalisés par le biais du code Wien2k basé sur la densité fonctionnelle d'état (DFT) [1]. En utilisant les deux variantes de la DFT et la DFT+U et en utilisant la méthode FP-LAPW [2]. Pour l'énergie d'échange et de corrélation dans le calcul des paramètres structurels nous avons utilisé l'approximation du gradient généralisé (WC-GGA).

## Simulation

### II.2. Détails des calculs

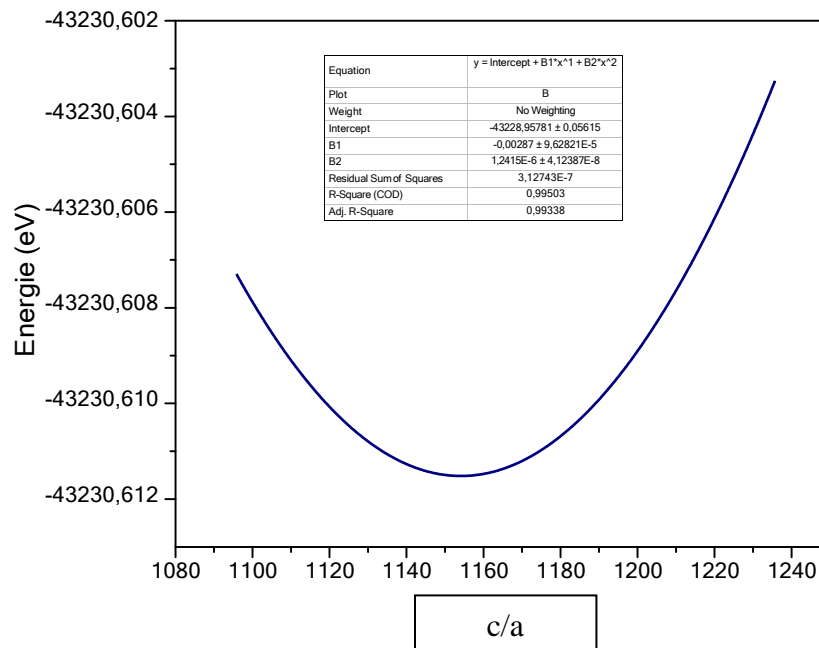
**Tableau II.1:** Détails de calcul.

Composé	Groupe ponctuelle (classe)	Groupe d'espaces	RMT (Bohr)	Etat de valence de $\text{CdBr}_2$	K point
$\text{CdBr}_2$	Hexagonale ( $a=b \neq c$ ) ( $\alpha=\beta=90^\circ$ ; $\gamma=120^\circ$ )	$P_{63mc}$	Cd=2.2 Br=2.0	$\text{Cd}_{48}:[\text{Kr}]4p^5 4d^{10} 5s^2 3d^{10} 4p^5$ $\text{Br}_{35}:[\text{Ar}]4s^2 3d^1$	$10*10*11^*$ (120 point)

### II.3. Propriétés structurales

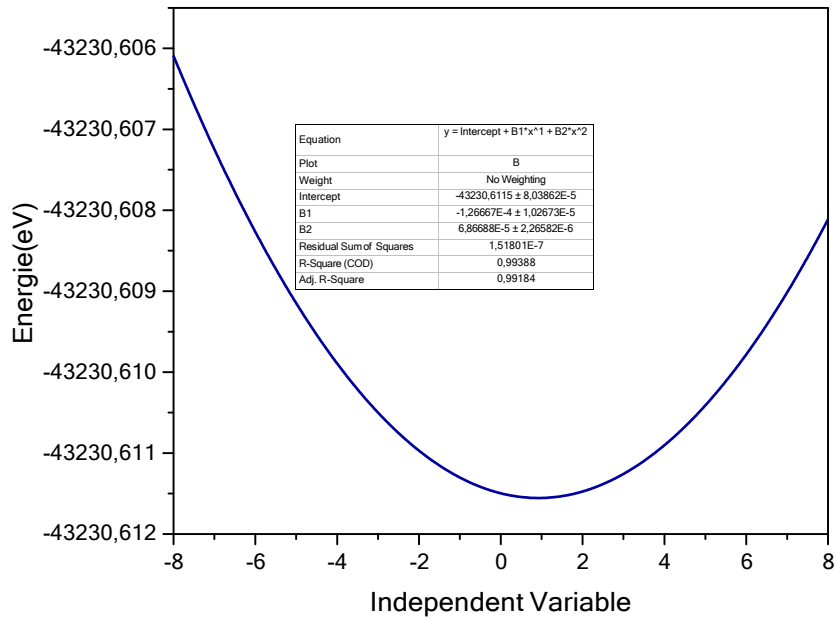
Avant de calculer les différentes propriétés structurales de  $\text{CdBr}_2$ , et après avoir obtenu les paramètres (k point), nous procédons à l'optimisation, Par la relation des atomes (c'est à dire minimiser les composantes des forces Exercés sur chaque atome). On doit varier les paramètres cristallins de la maille en fonction de L'énergie totale. La valeur minimale de cette énergie correspond aux paramètres de maille et Les positions optimales, dans le code de Wien2k , à savoir l'initialisation [3]. Lors de cette étape, la commande va vérifier si les paramètres que nous avons introduits ne causent pas un chevauchement des sphères Muffin-Tin, respectent la et vérifient l'énergie de séparation entre les états du cœur et les états de valence [4]. Une fois cette étape est achevée avec succès, symétrie c'est-à-dire qu'aucune erreur n'est signalée, on passe à l'étape

d'optimisation du volume en fonction de l'énergie[5] .nous allons calculer l'énergie totale du système pour différents volumes et nous retenons à la fin de cette étude la valeur du volume optimisée (les paramètres de réseau «a, c») correspondant au minimum d'énergie (on trouve cette valeur dans le fichier .struct, pour laquelle notre structure sera stable.



**Figure II.1:** Variation de l'énergie total en fonction du volume de CdBr<sub>2</sub> par WC-GGA.

Et on suit les mêmes étapes pour faire l'optimisation de l'énergie on fonction de c/a et nous retenons la valeur du c/a optimisé (on trouve c/a)



**Figure II.2:** Variation de l'énergie en fonction du rapport  $c/a$  de  $\text{CdBr}_2$  par WC-GGA.

Les paramètres du réseau «a, c» à l'équilibre sont calculés à partir du volume  $V_0$  à l'équilibre et qui correspond au minimum de la courbe  $E(V)$ . Dans le cas d'une structure hexagonal, les paramètres «a, c» sont donné par les formule:

$$V = a^2 \times c \times \sin(60) \dots \dots \dots \text{I.1}$$

Le tableau suivant présente les valeurs théories des paramètres cristallographiques calculés par le WC-GGA

**Tableau.II.2:** Valeurs fondamentales calculés de l'optimisation du volume.

WC-GGA	a [Å] $\Delta a/a$ (%)	c [Å] $\Delta c/c$ (%)	E [ev]	V [Å <sup>3</sup> ] $\Delta V/V$ (%)
<b>Expérimental</b>	3.98	12.56	-43230.601	172.30
<b>Calculé</b>	3.96 0.50	12.49 0.56	/	169.62 1.55

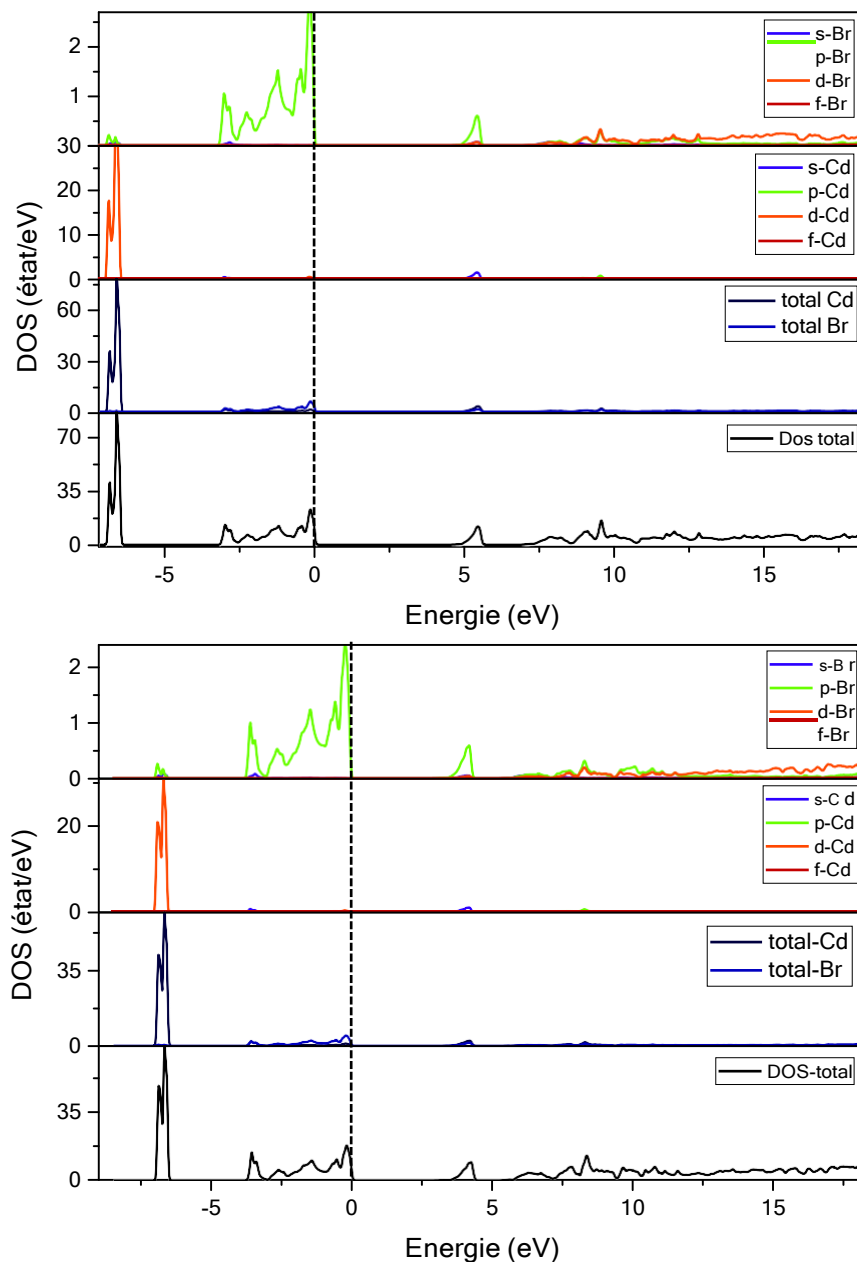
Les valeurs théoriques sont légèrement sous-estimées par rapport aux valeurs expérimentales. Cependant, l'accord de l'expérience théorique pour les paramètres a, c est très bon car les erreurs relatives sont systématiquement plus faibles.

## II.4. Propriétés électroniques

L'importance des propriétés électroniques d'un matériau réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments de ce matériau. Ces propriétés comprennent la structure de bande, la densité d'états totale et la densité d'états partielle (DOS).

### II.4.1. Densité des états DOS

Nous avons calculés les densités des états totale et partielle pour le composé  $\text{CdBr}_2$  avec l'approximation WC-GGA avec et sans TB-mBJ. Les résultats sont illustrés dans la figure.II.3.



**Figure.II.3:** Densité des états totale et partielle du composé  $\text{CdBr}_2$  avec et sans TB-mBJ.

## Sans TB-mBJ

- **Région de la bande de Valence**

Le numéro DOS doit comporter la liaison de WC-GGA à TB-mBj

Il existe deux régions de valence :

**[-7.5;-6.8eV]:** dans cette région la contribution de l'état d(Cd) est dominante contrairement à l'état p(Br) faible

**[-3.7;0 eV]:** dans cette région, la contribution de l'état p(Br) est la plus importante, avec très peu de contribution des états s(Br) et s (Cd) et l'absence de d(Cd)et p(Cd) , un caractère de liaison covalente.

- **Région de la bande de conduction**

**[4.9;5.3 eV]:** La contribution du état s(Cd) est légèrement inférieure à celle du état p(Br) et une faible contribution dud(Br).

Absence totale de p(Cd).

**[7.2;18.3 eV]:** Une petite contribution pour p(Br) et s(Br) avec une contribution nette pour d(Br).

Absence totale de s(Cd) et d(Cd) avec une faible contribution de p(Cd).

## Avec TB-mBj

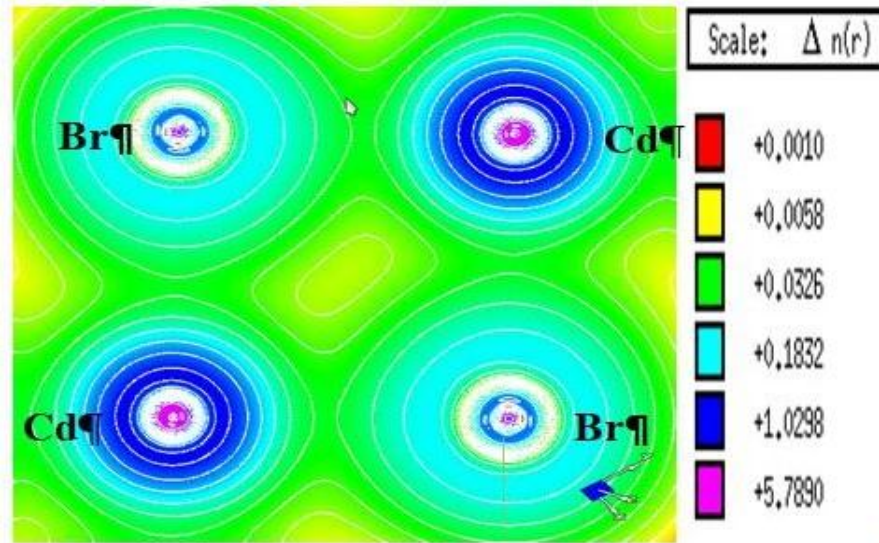
Il y a les mêmes contributions avec DOS TB-mBJ mais il y a une légère différence dans les valeurs domaines avec un déplacement vers les valeurs supérieures.

## II.4.2. Densité d'états de charge électronique

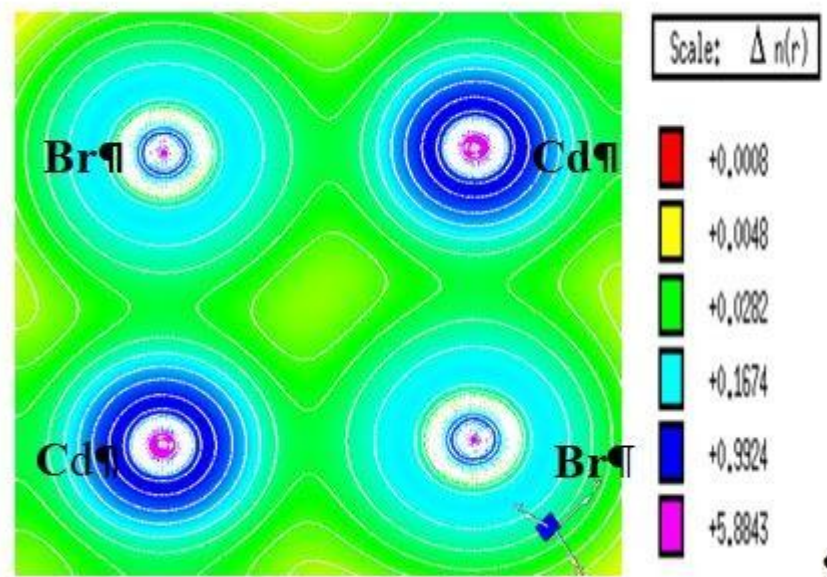
Le calcul des densités de charge il est confirmé la nature de la liaison entre les atomes Cd-Br, si elles sont à caractère ionique, covalent ou même mixte. Le calcul des densités de charge a abouti aux résultats interprétés dans les figures II.4 et II.5.

### Remarque:

On constate en représentant les liaisons entre Cd et Br par la densité de charge électronique des lignes ondulées, on en déduit qu'il existe une liaison covalente.



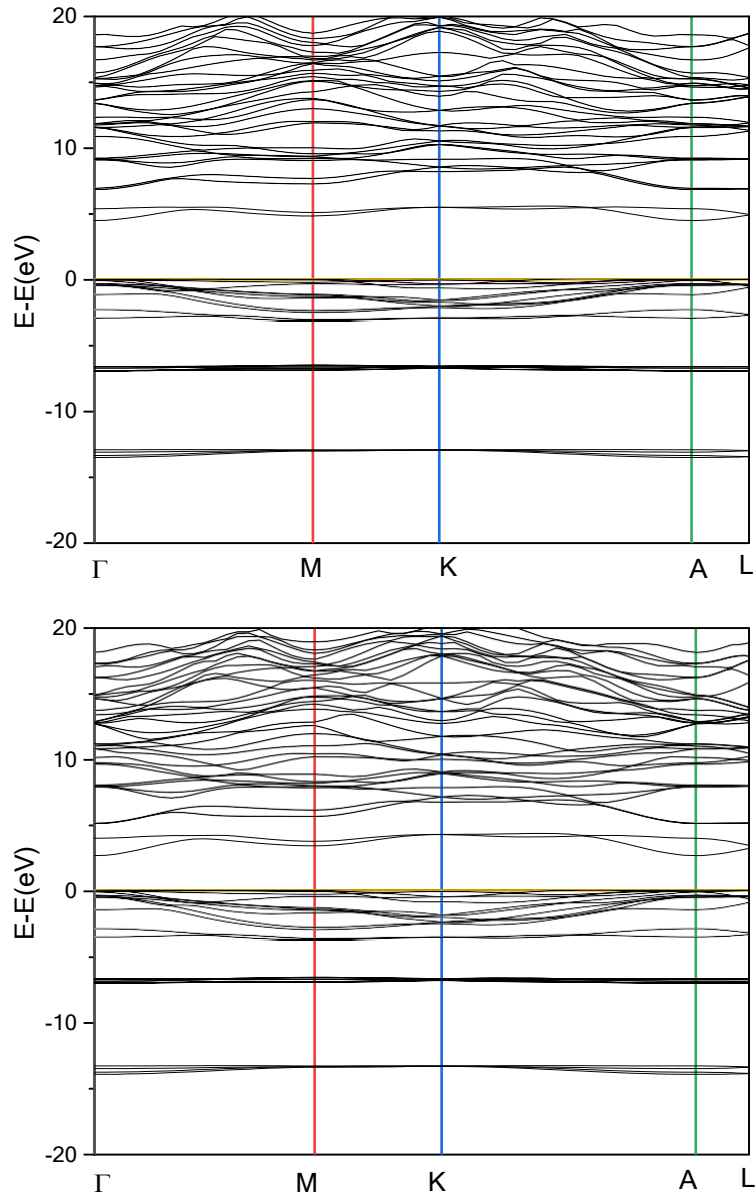
**Figure.II.4:**densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd avec TB-mBJ.



**Figure II.5:** densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd sans TB-mBJ.

### II.4.3 Structure de bande électronique

Les structures de bande sur la long de la direction des points de haute symétrie  $\Gamma$ -M-K-A-L sont calculées en utilisant l'approximation TB-mBJ.



**Figure II.6:** structure de bande électronique avec et sans TB-mBJ.

Les résultats obtenus pour les Gaps sont rassemblés dans le tableau II.3:

**Tableau II.3:** Variation du gap avec et sans TB-mBJ

Approximation	E <sub>gap</sub>	
	Sans TB-mBJ	Avec TB-mBJ
WC-GGA	2.5 eV	4.8 eV

Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont appelés le gap d'énergie lié au composé CdBr<sub>2</sub> entre eux aux points de symétrie  $\Gamma$ , donc notre matériau a un gap direct et qui vaut  $E_g = 4.8$  eV.

### **Remarque**

On remarque que l'approximation de WC-GGA avec TB-mBJ a donné une valeur proche de la valeur expérimentale.

## **II.5. Propriétés optiques**

La lumière a de nombreuses façons d'interagir avec la matière dans la physique du solide, telles que l'absorption, la réflexion, la transmission.

L'interaction de la lumière (onde électromagnétique) avec la matière (électrons de matière) peut clairement expliquer les propriétés optiques de la matière.

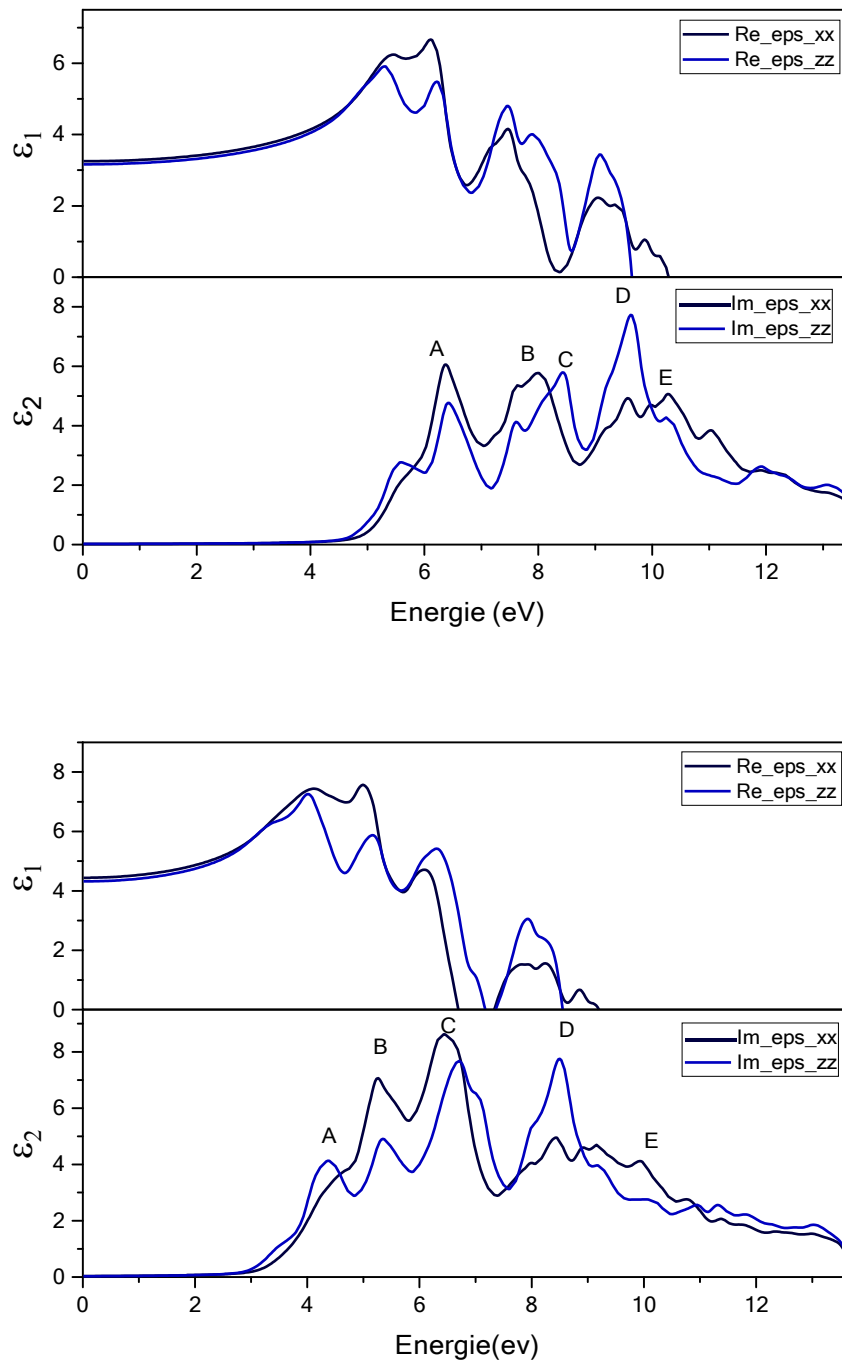
Le calcul direct des propriétés optiques basé sur les résultats de la structure de bande est associé à une compréhension plus approfondie de la structure électronique. Cependant, ce calcul nécessite une grille dense de k points (dans notre cas 120).

### **II.5.1. Fonction diélectrique**

La première étape du calcul des propriétés optiques consiste à calculer la fonction diélectrique en deux parties, réelle et imaginaire.

Les résultats de ces calculs ont été agrégés en utilisant l'approximation TB-mBJ dans les figures II.7.

Il y a cinq pics principaux A, B, C, D et E dans la représentation des parties imaginaires et réelles de la fonction diélectrique pour les transitions électroniques entre les états des atomes Cd et Br qui sont cohérents avec les résultats des calculs DOS.

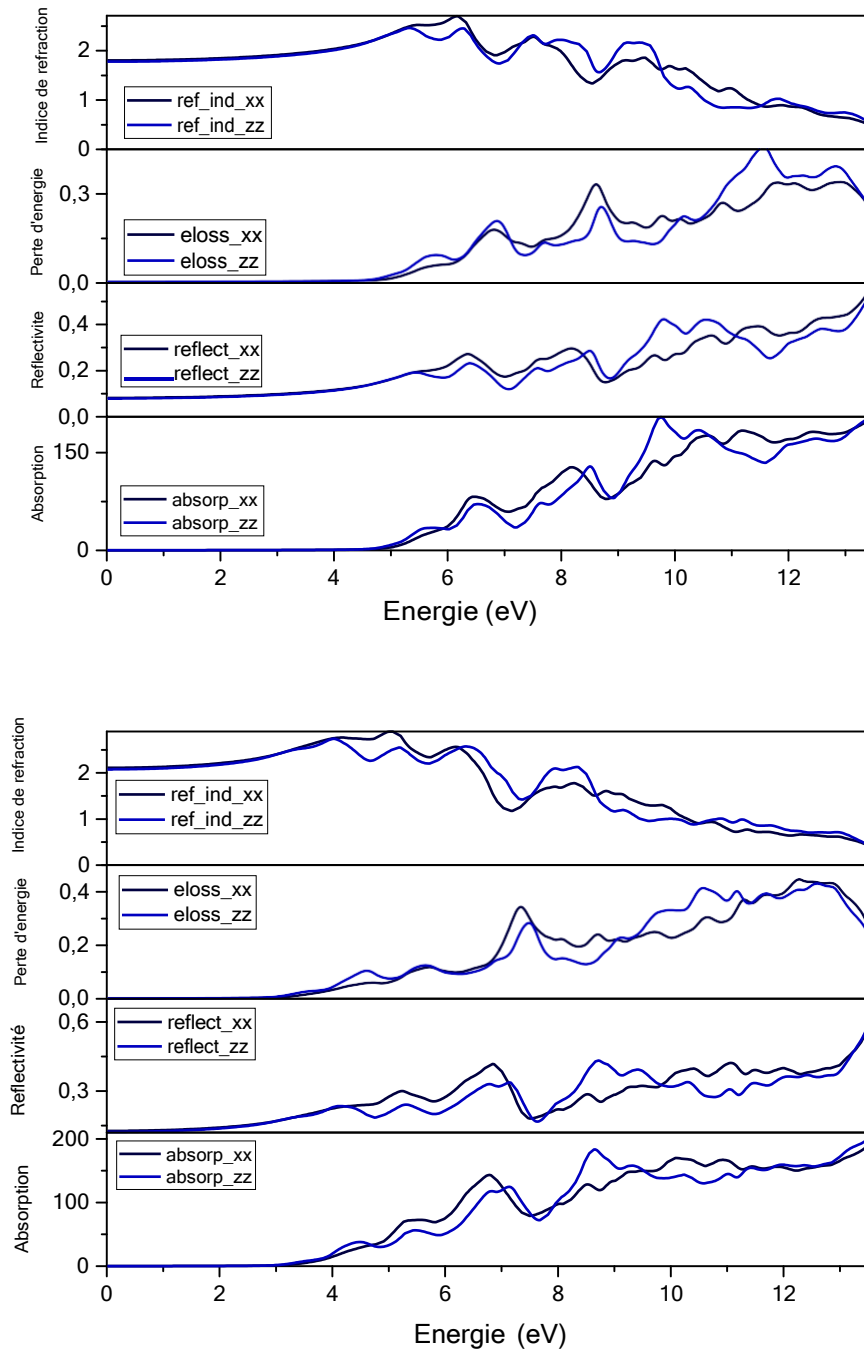


**Figure II.7:** Fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident avec et sans TB-mBJ.

### II.5.2. Autres propriétés optiques

La deuxième étape dans le calcul des propriétés optiques est alors l'estimation des paramètres optiques. Toutes les autres propriétés peuvent être calculées à partir des deux parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique. Ces paramètres sont les suivants:

- Absorption  $I(\omega)$ : Pour l'estimation du gap optique.
- Réflectivité  $R(\omega)$ .
- Perte d'énergie «energy loss»  $L(\omega)$ : Décrit l'énergie d'un électron accéléré qui traverse le cristal.
- Indice de réfraction  $n(\omega)$ :



**Figure II.8:** Propriétés optiques en fonction de l'énergie du photon incident: le coefficient d'absorption, la réflectivité, la perte d'énergie et l'indice de réfraction avec et sans TB-mBJ.

Les résultats que nous avons trouvés des graphes précédents sont résumés dans le tableau suivant:

**Tableau II.4:** Propriétés optiques calculés pour  $\text{CdBr}_2$  avec et sans TB-mBJ par DFT.

	Sans TB-Mbj		Avec TB-Mbj	
	x	zz	xx	zz
<b>Indice de réfraction</b>	2.1	2.0	1.8	1.7
<b>Gap optique (eV)</b>	1.4	1.1	1.8	1.5
<b>Perte d'énergie</b>	0.4434 (12.25)	0.4278 (12.58)	0.3351 (11.79)	0.4552 (11.55)
<b>Réfectivité</b>	0.182 (7.46)	0.172 (7.57)	0.173 (6.97)	0.11 (7.08)

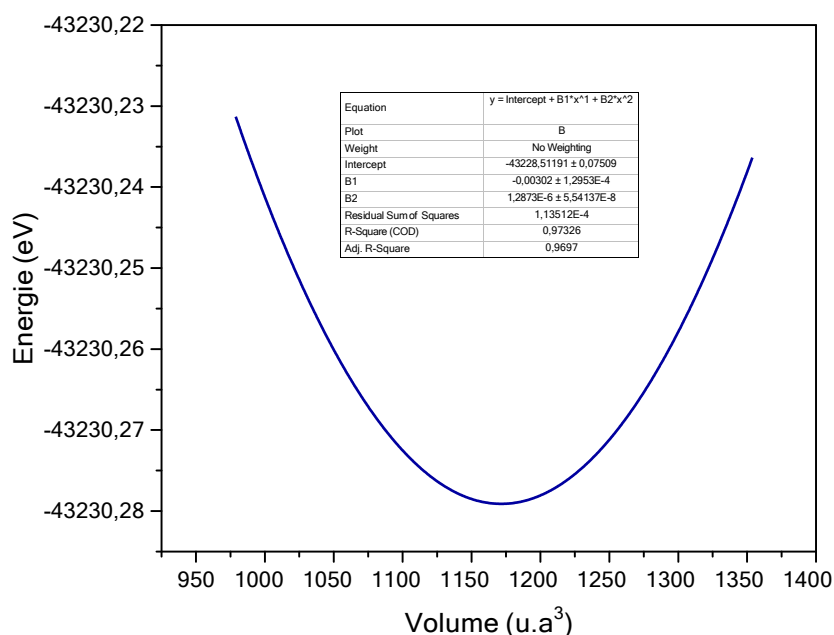
## II.6. Calculs des propriétés par la méthode DFT+U

Cette méthode c'est une correction de la méthode WC-GGA par ajout d'un coefficient de correction c'est le U pour augmenter (améliore) la valeur du Gap.

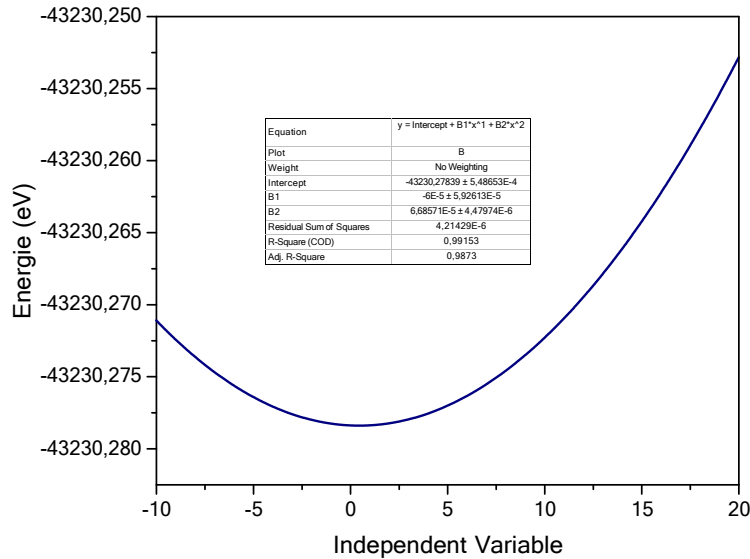
Les résultats obtenus après correction avec le coefficient U sont illustrés ci-dessous.

### II.6.1. Propriétés structurales

par rapport aux calculs DFT et à leur résultats, le coefficient d'implémentation U dans la méthode DFT+U contribue à améliorer les résultats et augmenter la valeur de l'énergie de gap ( $E_{\text{GAP}}$ ).



**Figure II.9:** Variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé  $\text{CdBr}_2$ .



**Figure II.10:** Variation de l'énergie en fonction du rapport  $c/a$  par l'approximation WC-GGA+U.

**Tableau II.5:** Valeurs fondamentales calculés de l'optimisation du volume avec DFT+U.

WC-GGA	a [Å] $\Delta a/a$ (%)	c [Å] $\Delta c/c$ (%)	E [eV]	V [Å <sup>3</sup> ] $\Delta V/V$ (%)
Expérimental	3.981	12.56	/	172.38
Calculé	3.96 0.53	12.49 0.56	-43230.277	170.2 1.26

## II.6.2. Propriétés électroniques

### II.6.2.1. Densité des états DOS

Le calcul de la densité des états totale et partielle a conduit aux résultats illustrés dans la figure II.11.

#### DOS Up avec TB-mBJ

- **Région de la bande de Valence**
  - ✓ [-3;0 eV]: Une forte contribution pour p(Br) et une très faible contribution pour s(Br), ainsi que l'absence du cas de d(Br).

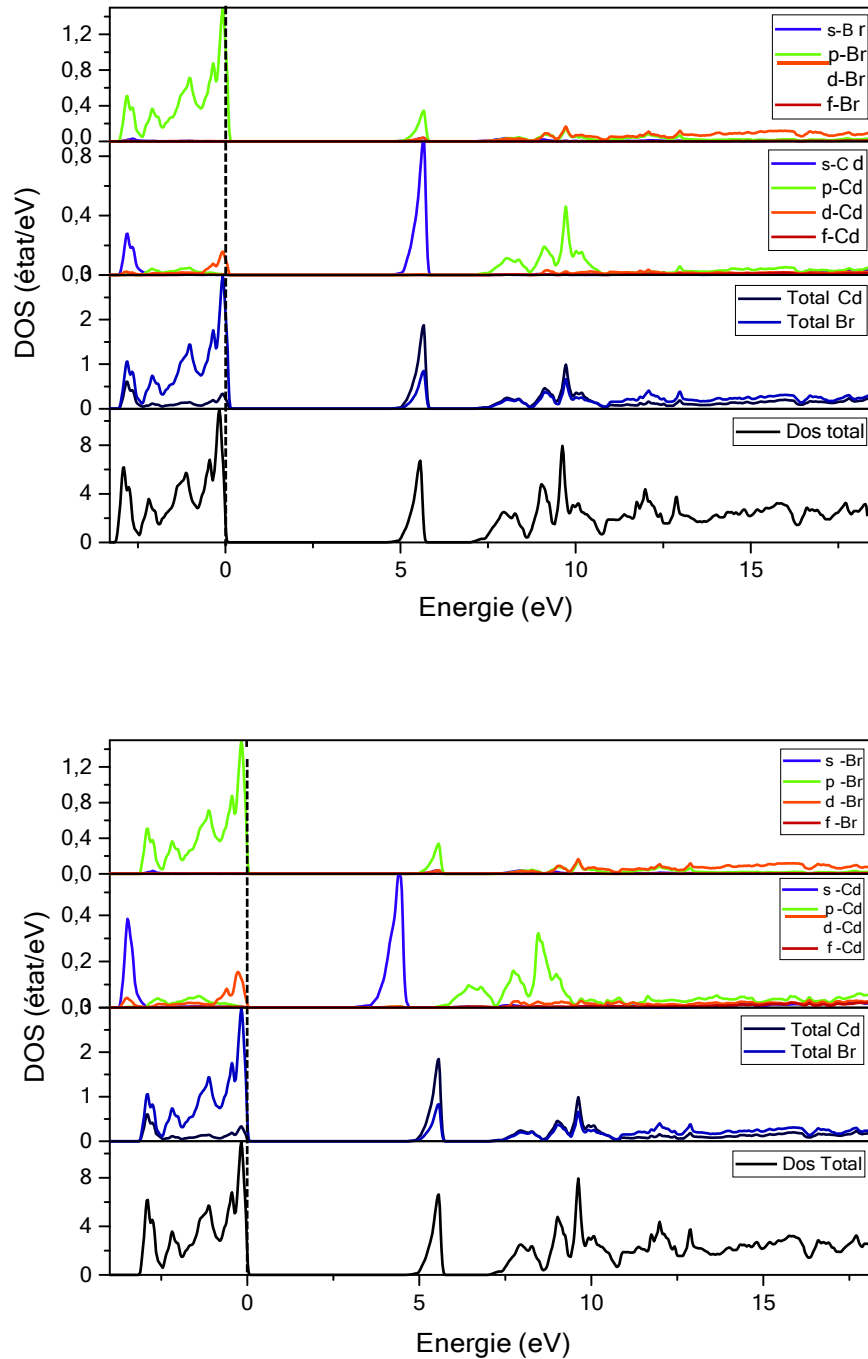
Une légère contribution de p et d(Cd) et une contribution significative de s(Cd).

- **Région de la bande de conduction**
  - ✓ [5;5.4 eV]: Une contribution très importante pour s(Cd) contrairement à la contribution de d et p(Br).

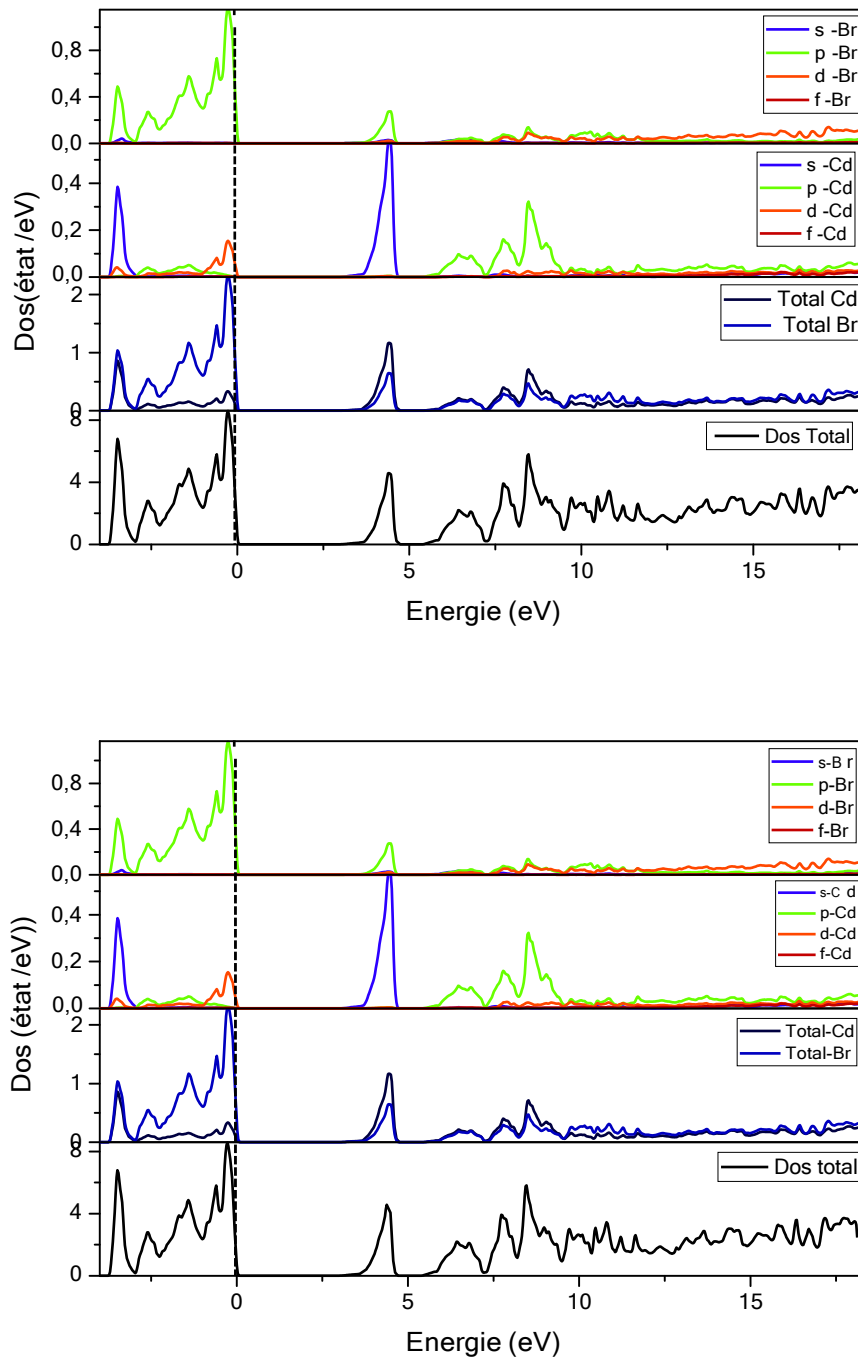
- ✓ [7.5; 18.3 eV]: La plus grande contribution est p(Cd) et de très petites contributions aux deux: d(Cd) ; s(Br) ; d(Br) ; p(Br).

### DOS DOWN avec TB-mBJ

Il y a les mêmes contributions avec DOS du TB-mBJ.



**Figure II.11:** Densité des états totale et partielle Up et Down avec TB-mBJ



**Figure II.12:** Densité des états totale et partielle DOS Up et DN sans TB-mBJ.

Le calcul de la densité des états totale et partielle a conduit aux résultats illustrés dans la figure dos down sans TB-mBJ:

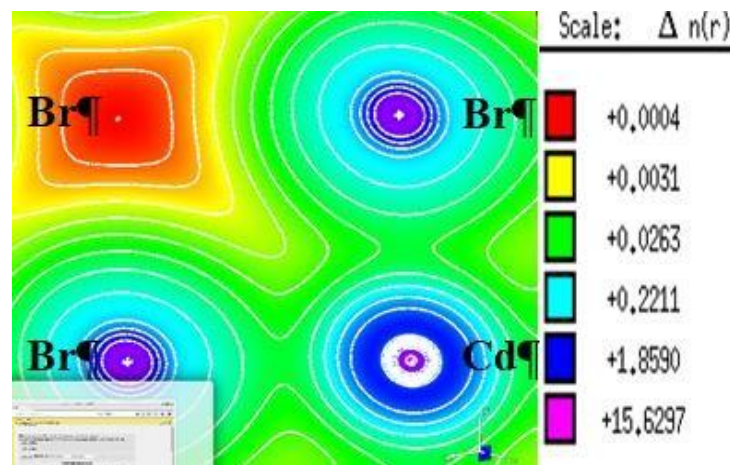
#### DOS up sans TB-mBJ

- Région de la bande de valence

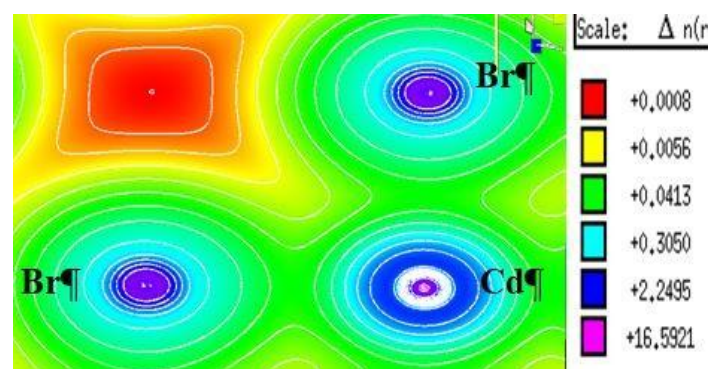
- ✓ [-3.9;0 eV]: p(Br) et s(Cd) contribuent de manière significative et s(Br) contribuent légèrement ainsi que d et p(Cd).
- **Région de la bande de conduction**
  - ✓ [3.2;4.8 eV]: Il y a une forte contribution de s(Cd). Une absence totale de p et d(Cd) ainsi que s(Br). Contribution moyenne de p(Br) avec très peu de participation de d(Br).
  - ✓ [5.2 ;18.3 eV]: contribution moyenne pour p(Cd) et petites contributions pour d(Cd), p(Br) et d(Br) contribution presque inexistante de s(Br) et s(Cd).

## II.7. Densité d'états de charge électronique

Nous avons calculé la densité de charge par la méthode DFT+U de  $\text{CdBr}_2$  avec la méthode WC-GGA+U et les résultats sont exprimés dans les figures II.13 et II.14.



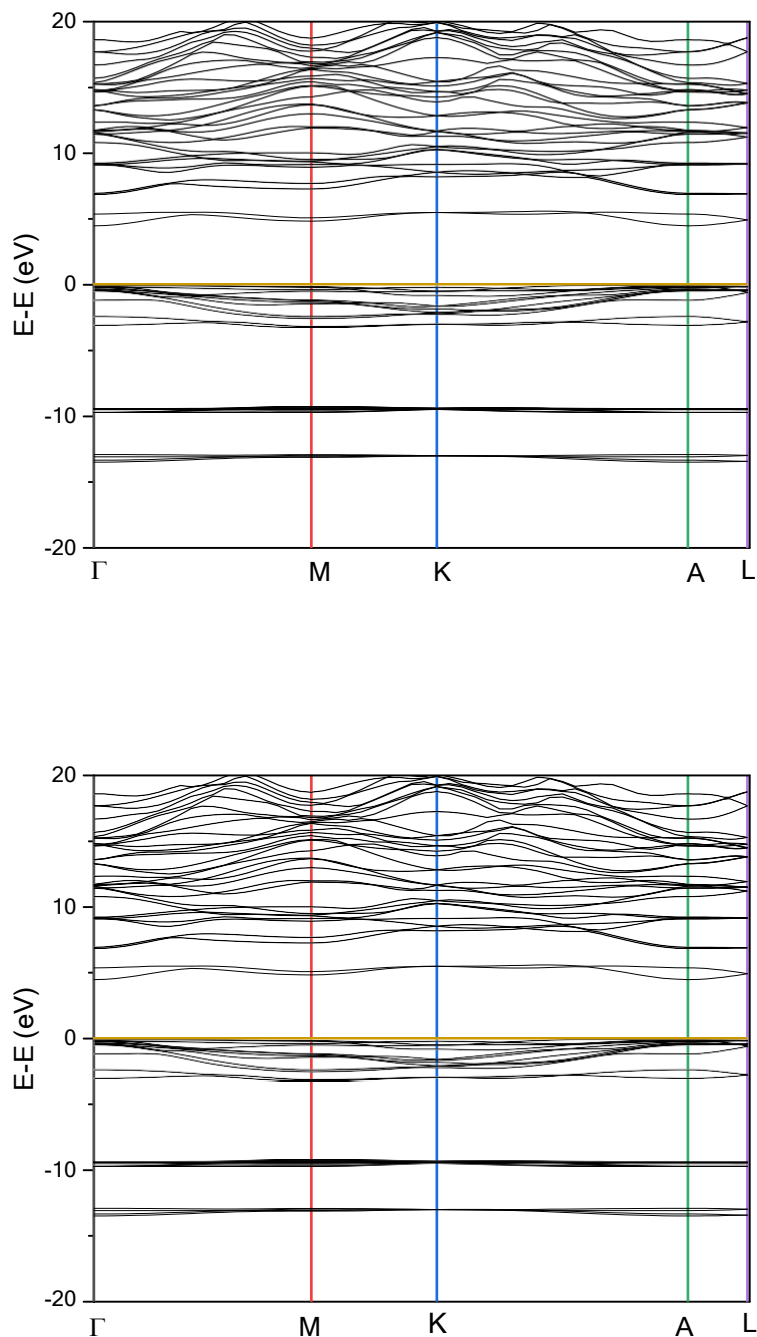
**Figure.II.13:** densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd avec TB-mBJ.



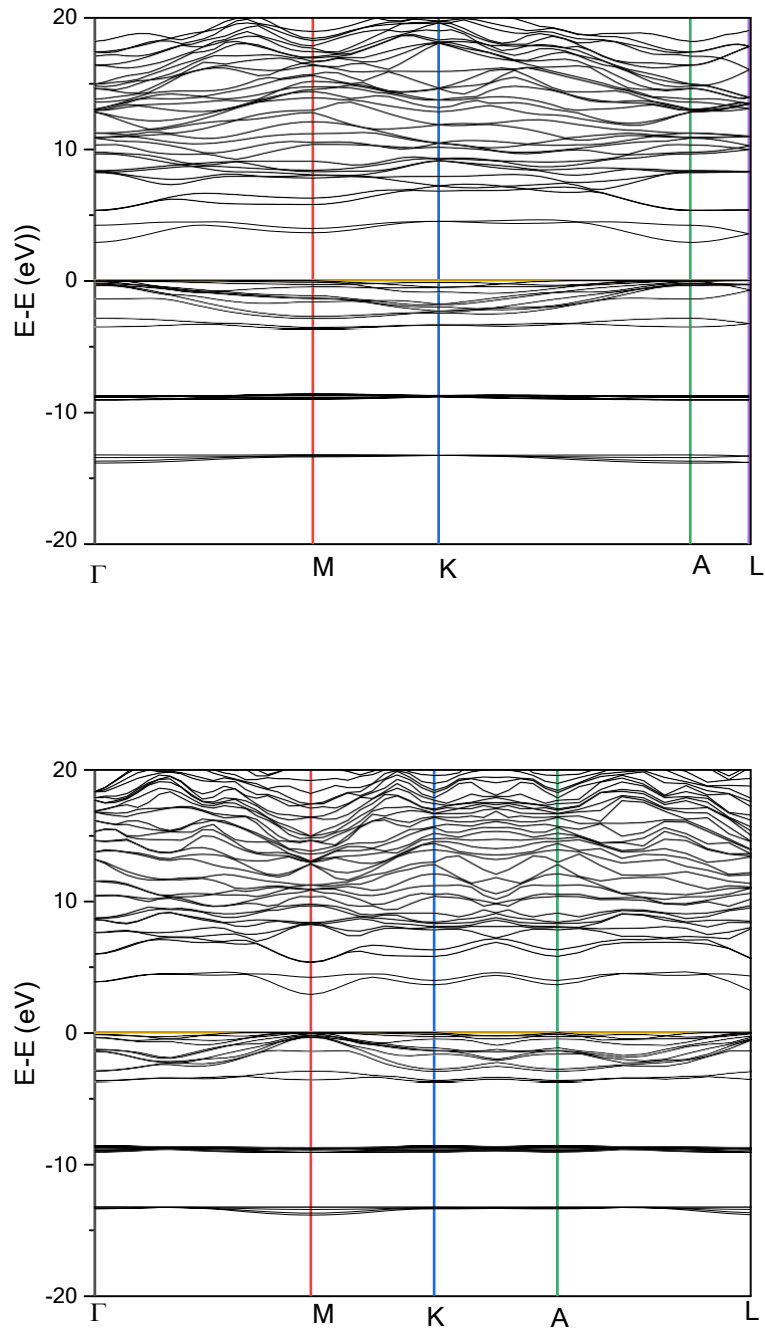
**Figure II.14:** densité d'état totale et partielle DOS dans un plan contenant les deux atomes Br et Cd Sans TB-mBJ.

On constate que les contours autour des atomes Cd et Br sont bien sphériques avec une très légère déviation de la sphéricité, alors la liaison Cd-Br est majoritairement ionique.

### II.7.1. Structure de bande électronique



**Figure II.15:** Structure de bande UP et DOWN avec TB-mBJ.



**Figure II.16:** Structure de bande UP et DOWN sans TB-m BJ.

On remarque de l'étude de DFT et l'étude de DFT+U augmentation dans la valeur de l'énergie de gap ( $E_{GAP}$ ):

\* Avec TB-mBJ:  $E_{GAP} (UP) > E_{GAP} (down)$ .

\* Sans TB-mBJ:  $E_{GAP} (UP) > E_{GAP} (down)$ .

**Tableau II.6:** Résultats de calculs des structures de bandes de Cd Br par WC-GGA avec TB-mBJ.

	Structure de bande UP	Structure de bande DOWN
<b>Bande de valence</b>	0	0
<b>Bande de conduction</b>	4.9	4,8
<b>Gap (eV)</b>	4.9	4.8

**Tableau II.7:** Résultats de calculs des structures de bandes de Cd Br par WC-GGA sans TB-mBJ.

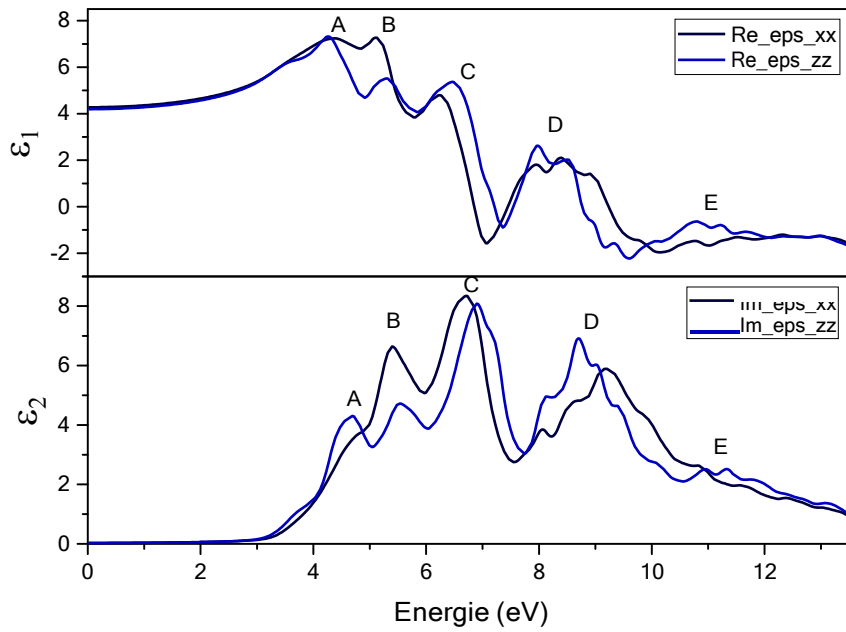
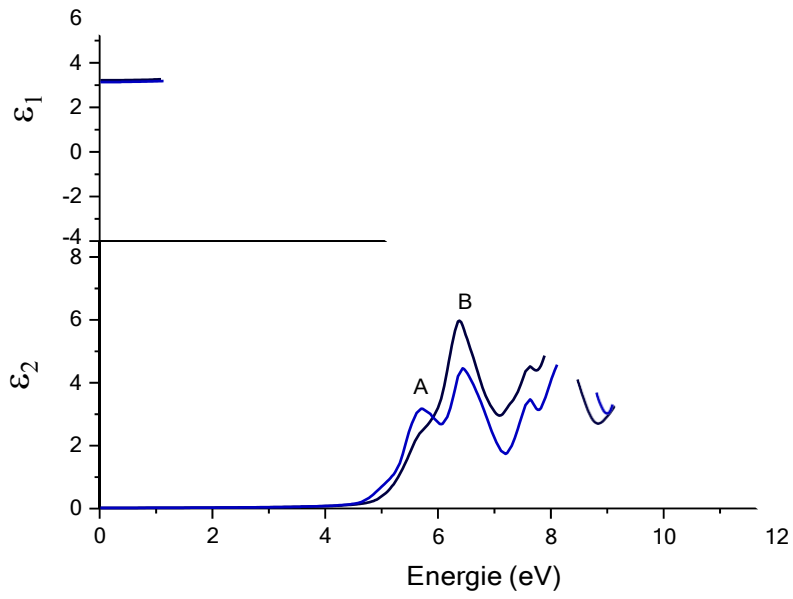
	Structure de bande UP	Structure de bande DOWN
<b>Bande de valence</b>	0	0
<b>Bande de conduction</b>	2,5	2,4
<b>Gap (eV)</b>	2.5	2.4

## II.8. Propriétés optiques

### II.8.1. Fonction diélectrique

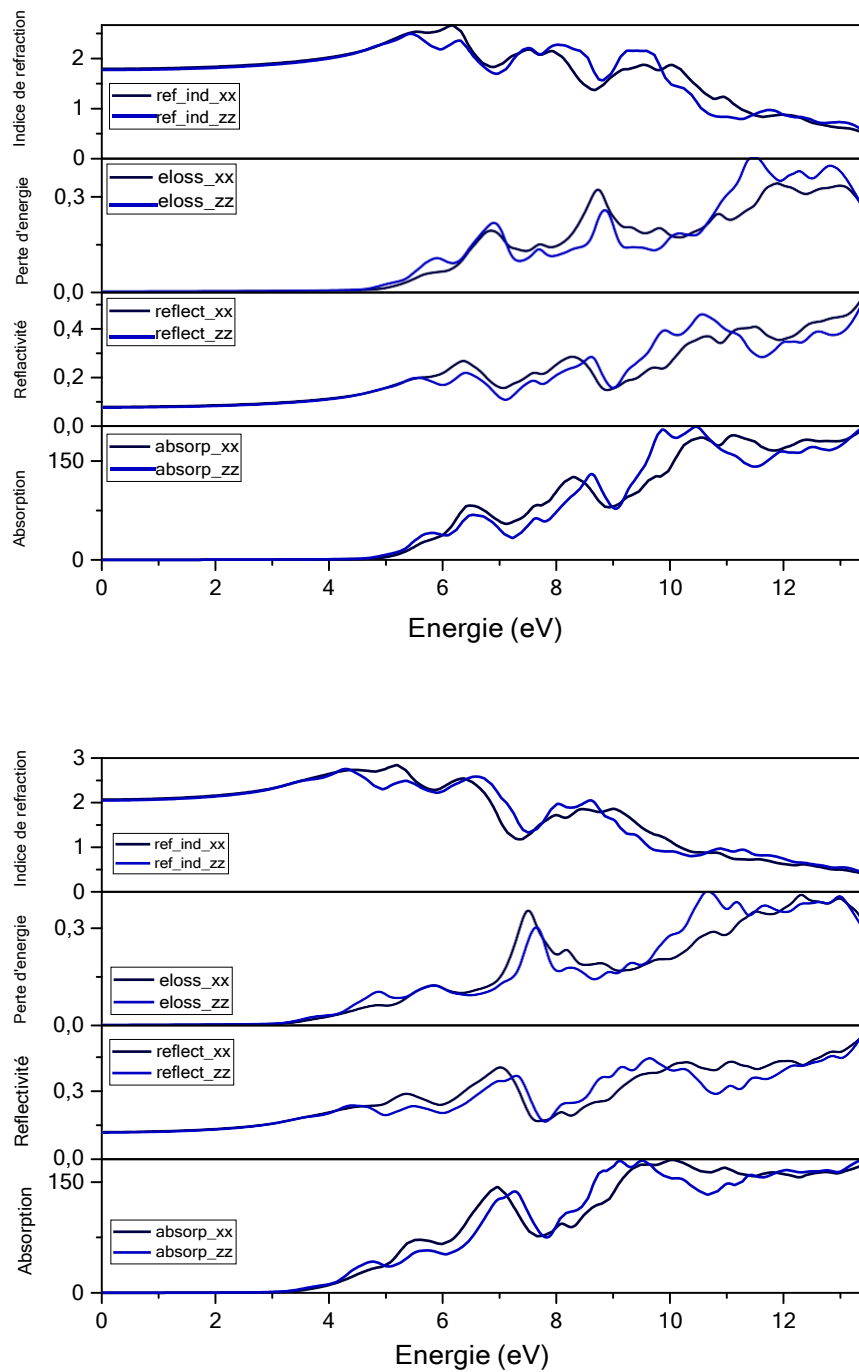
La figure II.17 présente l'allure de la fonction diélectrique dans ses deux parties réelle et imaginaire, et avec et sans TB-mBJ respectivement.

On constate l'existence de plusieurs pics importants notés A, B, C, D, et E dans les deux cas dans la courbe de la partie imaginaire de la fonction diélectrique. Les positions de ces pics en eV sont en accord avec ceux reportés avec les DOS de notre matériau CdBr<sub>2</sub>.



**FigureII.17:** Fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident avec et sans TB-mBJ.

## II.8.2. Autres propriétés optiques



**Figure II.18:** Propriétés optiques en fonction de l'énergie du photon incident: le coefficient d'absorption, la réflectivité, la perte d'énergie et l'indice de réfraction avec et sans TB-mBJ en utilisant la WC-GGA+U.

Les résultats tirés de ces figures sont récapitulés dans le tableau II.8.

**Tableau II.8:** Propriétés optiques calculés pour  $\text{CdBr}_2$  avec et sans TB-mBJ par DFT+U.

	Sans TB-mBJ		Avec TB-mBJ	
	xx	zz	xx	zz
<b>Indice de réfraction</b>	0.21	0.20	0.18	0.17
<b>Gap optique (eV)</b>	1.2	1.22	1.7	1.3
<b>Réfectivité</b>	0.173 (7.60)	0.167 (7.82)	0.159 (7.00)	0.109 (7.08)
<b>Perte d'énergie</b>	0.402 (12.31)	0.413 (10.65)	0.339 (11.87)	0.420 (11.49)

## II.9. Comparaison entre DFT et DFT+U

Le tableau II.9 ci-dessous englobe tous les résultats importants obtenus par DFT et par DFT+U pour but de comparaison.

**Tableau 0.9:** Valeurs de la bande interdite (gap) calculées par les deux méthodes DFT et DFT+U sans et avec TB-mBJ.

	DFT				DFT+U			
	Sans TBmBJ (xx)	Avec TBmBJ (zz)	Sans TBmBJ (xx)	Avec TB-mBJ (zz)	Sans TB-mBJ (up)	Avec TB-mBJ (down)	Sans TB-mBJ (up)	Avec TB-mBJ (down)
$E_{\text{Gap}}$ (eV)	2.5	4.8	2.4	4.8	2.5	2.4	4.9	4.8
Indice de réfraction	2.1	2.0	1.8	1.7	0.21	0.20	0.18	0.17
Gap optique (eV)	1.4	1.1	1.8	1.5	1.2	1.22	1.7	1.3
Perte d'énergie	0.4434 (12.25)	0.4278 (12.58)	0.3351 (11.79)	0.4552 (11.55)	0.173 (7.60)	0.167 (7.82)	0.159 (7.00)	0.109 (7.08)
Réfectivité	0.182 (7.46)	0.172 (7.57)	0.173 (6.97)	0.11 (7.08)	0.402 (12.31)	0.413 (10.65)	0.339 (11.87)	0.420 (11.49)

## II.10. Conclusion

Des résultats reportés nous pouvons conclure que:

- les résultats avec TB-mBJ corrigent le gap.
- notre matériau est un semi-conducteur sans TB-mBJ et devient isolant avec TB-mBJ.
- les résultats des densités de charge illustrent une liaison de nature ionique.
- le paramètre U est utilisé en plus pour obtenir des valeurs très proche des valeurs expérimentales.

## Références bibliographiques

- [1]: D. AMI, Modélisation des propriétés structurales, électroniques et optiques des polymères conjugués PPP et PPV, mémoire de master, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (2013).
- [2]: R. Parr, W. Yang, Density-functional theory of atoms and molecules, Oxford Univ. Press, New York (1989).
- [03 : run\_lapw-ec-0,0001-p-NI
- [04]: F. EL Haj Hassan, thèse de doctorat, Université de Metz de France (2000).
- [05]: ./optimize job.

# Conclusion générale

## Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques, et optiques du composé bromure de cadmium ( $\text{CdBr}_2$ ) en se basant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et la méthode DFT+U, et l'approche des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) implémentée dans le code Wien2k. Les résultats de notre étude peuvent être résumés comme suit:

Pour les propriétés structurales la méthode WC-GGA estime les valeurs avec des écarts faibles et appréciables.

- les résultats avec TB-mBJ corrigent le gap.
- dans les résultats des propriétés électroniques notre matériau est un semi-conducteur.

Et les résultats des densités de charge illustrent une liaison de nature covalente.

- la méthode DFT+U est utilisée en plus pour obtenir des valeurs très proche des valeurs expérimentales par rapport à la méthode DFT.

عنوان المذكرة: دراسة بواسطة DFT + U و DFT للخصائص الهيكلية والإلكترونية والبصرية لمركب  $CdBr_2$  بتقريب WC-GGA وإمكانات TB-mBJ.

المؤطر/ة: د. بلحاج.ص

الاسم: عائشة  
الاسم: ناطمة الزهراء

اللقب: نور الدين  
اللقب: سوداني

ملخص: لقد أجرينا دراسة نظرية باستخدام طريقة الموجات المستوية المعززة الخطية ذات الإمكانات الكلاسيكية (FP-LAPW) بواسطة كود wien2k بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) (وعلى DFT + U) لتحديد الهيكلية الإلكترونية، والخصائص البصرية لمركب  $CdBr_2$ . يتم التعامل مع إمكانات الترابط التبادلي من خلال ترتيب التدرج المعمم (WC-GGA). تتوافق الخصائص الهيكلية مثل معلمة الشبكة ومعامل الضغط ومشتقاتها بشكل جيد مع البيانات المحسوبة المتاحة. تظهر النتائج التي تم الحصول عليها لهذا الهيكل نطاق وكثافة الحالات (DOS) وكثافة الشحنة أن مركب  $CdBr_2$  له رابطة أيونية بين Cd و Br، وبالنسبة لهذا النطاق حصلنا على فجوة مباشرة ( $\Gamma$ ) وله مذبذبة عازلة كما أننا بحساب الخصائص البصرية لهذا المركب والنتائج ترتبط بالخواص الإلكترونية.

كلمات مفتاحية: DFT, Wien2k, DFT+U, بروميد الكاديوم, WC-GGA, TB-mBJ.

Memory title: DFT and DFT+U study of the structural, electronic and optical properties of the  $CdBr_2$  compound by the WC-GGA approximation and the TB-mBJ potential

Name: Aicha First name: NOURREDDINE Directed by: Dr. Soraya BELHADJ  
Name: Fatima Ezahraa First name: SOUDANI

**Abstract:** We have performed a theoretical study using full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) method by wien2k code based on density functional theory (DFT) and (DFT+U) to determine the structural, electronic and optical properties of  $CdBr_2$  compound. The cross-correlation potential is addressed by generalized gradient approximation WC-GGA). Structural properties such as lattice parameter compressibility modulus and their derivatives are in good agreement with the obtained calculated data. The results obtained for the band structure, density of states (DOS) and charge density show that the  $CdBr_2$  has an ionic bond between Cd and Br, and for the band structure we obtained a direct band gap ( $\Gamma$ ) and it is insulator We also calculated the optical properties of this compound and are well correlated to electronic ones.

**Key words:** DFT, Wien2k, DFT+U,  $CdBr_2$ , TB-mBJ, WC-GGA.

**Titre du mémoire:** Etude par DFT et DFT+U des propriétés structurales, électroniques et optiques du composé  $CdBr_2$  par l'approximation WC-GGA et le potentiel TB-mBJ

Nom: Aicha Prénom: NOURREDDINE Encadreur: Dr. Soraya BELHADJ  
Nom: Fatima Ezahraa Prénom: SOUDANI

**Résumé:** Nous avons effectué une étude théorique en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) par le code wien2k basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et sur (DFT+U) pour déterminer les propriétés structurales, électroniques, et optiques du composé  $CdBr_2$ . Le potentiel d'échange-corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé (WC-GGA). Les propriétés structurales telles que le paramètre de maille, le module de compressibilité et sa dérivée sont en bon accord avec les données calculées obtenus. Les résultats obtenus pour la structure de bandes et les densités d'états (DOS) et la densité de charge montrent que le composé  $CdBr_2$  a une liaison ionique entre Cd et Br, et pour la structure de bandes nous avons obtenus un gap direct ( $\Gamma$ ). Il présente un caractère isolant. Nous avons calculé aussi les propriétés optiques de ce composé et les résultats sont en corrélation avec ceux électroniques Il présente un caractère isolant.

**Mots clés:** DFT, Wien2k, DFT+U,  $CdBr_2$ , TB-mBJ, WC-GGA.