



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:

KHELIFI Widad

AMROUN Chaima

DOMAINE: Sciences et Technologies

FILIERE: GÉNIE DES PROCÉDÉS

OPTION: **GENIE CHIMIQUE**

Thème

**Étude DFT des propriétés physiques du
composé bromure de cadmium CdBr_2 par la
méthode FP-LAPW: Etude comparative entre
LSDA et LSDA+U**

Jury de soutenance:

Nom et Prénom	Grade	Qualité
CHABIRA Salem Fouad	Pr	Président
HANNACHI Manelle	MCB	Examinatrice
BELHADJ Soraya	MCB	Rapporteuse
SIGA Khaoula	Doctorante	Co-rapporteuse

Année Universitaire: 2022-2023

Remerciement

Avant toute chose, on tient à remercier Allah pour nous avoir donné la force et le courage.

Nous tenons tout d'abord à remercier notre encadreur de ce mémoire, Madame Soraya BELHADJ, professeur à l'université Amar Telidji Laghouat.

Recevez ici nos sincères remerciements pour la confiance, les conseils que vous nous avez accordés tout le long de ce travail. Merci également pour votre encadrement, votre disponibilité et votre gentillesse. Nous vous adressons

Notre profonde reconnaissance pour vos remarques et conseils en vue d'améliorer ce manuscrit.

Nous tenons à remercier sincèrement tous les membres du jury. pour le temps qu'ils nous ont donné, et pour les remarques que nous accepterons humblement.

Nous remercions enfin toutes les personnes qui ont contribué à la réalisation de ce travail.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

Je dédie ce modeste travail à mes très chers parents, pour leurs sacrifices durant ces longues années d'étude.

A ma grand-mère

A toutes ma famille (KHÉLIFI et BOUALAOUI).

Et mes amis, surtout CHAIMA, AICHA, FATIMA et KHADIDJA,

A tous ceux qui ont veillés sur ma réussite durant les années d'étude

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

*A mes très chers parents qui m'ont beaucoup aidé et
encouragé durant toutes mes études*

*Tous mes frères Mohamed Nadhîr et Youcef et
à toutes ma famille Amroun et Naouari*

Surtout à mon binôme widad

A tous mes amies et mes proches

A tous ceux que j'aime et je respect

*Tout le groupe de master génie chimique et les
enseignants de génie des procédés*

Liste des abréviations

a,c	Paramètre de maille
DFT	Density Functional Theory
DOS	Density of States
E	Energie
eV	Electron volte
FP-LAPW	Full Potential Linearized Augmented Plane Waves
K	Nombred'onde
LSDA	Local Spin polarized Density Approximation.
TB-mBJ	Tran etBlahaModified Becke Johnson potentiel.
RMT	Rayon atomique de la sphère muffin tin
V	Volume

Liste des figures

Chapitre 1

Figure I.1: Les 14 réseaux de Bravais	06
Figure I.2: Représentation schématique d'un système cristallin à gap direct et d'un système cristallin à gap indirect)	08
Figure I.3: Structures cristallines de di halogénures métalliques (MX_2) en (a) vrac et (b et c) monocouche	11
Figure I.4: Propriétés magnétiques et électroniques calculées des monocouches d'halogénure: total des moments magnétiques par atome M.	12
Figure I.5: Structure cristalline de $CdBr_2$	13

Chapitre 2

Figure II.1: Variation de l'énergie de la maille en fonction du volume	17
Figure II.2: Variation de l'énergie en fonction de c/a	17
Figure II.3: Densité des états totale et partielle calculés pour $CdBr_2$ sans TB-mBJ	19
Figure II.4: Densité des états totale et partielle calculés pour $CdBr_2$ Avec TB-mBJ	20
Figure II.5: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br sans TB-mBJ	21
Figure II.6: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br Avec TB-mBJ	21
Figure II.7: Structure de bande électronique sans TB-mbj	22
Figure II.8: les deux parties de la fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident (eV) sans TB-mbj	23
Figure II.9: Propriété optique en fonction d'énergie du photon incident (eV) le long de trois direction cristallographique absorption $I(\omega)$, l'indice de réfraction $n(\omega)$, la perte d'énergie $L(\omega)$ et la réflectivité $R(\omega)$	24
Figure II.10: Variation de l'énergie de la maille en fonction du volume de la maille	25
Figure II.11: Variation de l'énergie on fonction de c/a	25
Figure II.12: Densité des états totale et partielle up pour la configuration sans TB-mBJ calculé	26
Figure II.13: Densité des états totale et partielle down sans TB-mBJ calculés pour $CdBr_2$ ur $CdBr_2$	26

Figure II.14: Densité des états totale et partielle (up) avec TB-mBJ calculés pour CdBr ₂	27
Figure II.15: Densité des états totale et partielle sans et avec TB-mBJ calculés pour CdBr ₂	27
Figure II.16: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br Sans TB-mBJ	28
Figure II.17: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br avec TB-mbj	29
Figure II.18: structure de band(up) calculée pour CdBr ₂ sans TB-Mbj	29
Figure II.19: structure de band(DN) calculée pour CdBr ₂ sans TB-mBJ	30
Figure II.20: structure de band(up) calculée pour CdBr ₂ avec TB-mBJ	30
Figure II.21: structure de band (DN) calculée pour CdBr ₂ avec TB-mBJ	31
Figure II.22: Parties imaginaires $\epsilon_2(\omega)$ et réelles $\epsilon_1(\omega)$ calculées de la fonction diélectrique pour CdBr ₂ sans TB-mbj	32
Figure II.23: Parties imaginaires $\epsilon_2(\omega)$ et réelles $\epsilon_1(\omega)$ calculées de la fonction diélectrique pour CdBr ₂ Avec TB-mBJ	33
Figures II.24: Propriétés optiques calculées pour CdBr ₂ en fonction de l'énergie du photon incident (eV) sans TB-mbj	34
Figures II.25: Propriétés optiques calculées pour CdBr ₂ en fonction de l'énergie du photon incident (eV) avec TB-mbj	34

Liste des tableaux

Chapitre 1

Tableau I.1: les paramètres de cadmium	10
---	-----------

Chapitre 2

Tableau II.1: Détails de calcul	16
Tableau II.2: Valeur fondamentales calculées de l'optimisation du volume	18
Tableau II.3: Propriétés optiques calculés pour CdBr ₂ avec l'approximations LSDA sans TB-mBJ	24
Tableau II.4. Contribution pour chaque intervalle	28
Tableau II.5. Les valeurs de band gap sans et avec TB-mBJ	31
Tableau II.6. Propriétés optiques calculés pour CdBr ₂ Sans et Avec TB-mBJ	35

Sommaire

	<i>Page</i>
Introduction général.....	1
Chapitre I	
I.1. Introduction.....	4
I.2. Liaisons chimiques.....	4
I.2.1. Liaison covalente.....	4
I.2.2. Liaison ionique.....	4
I.2.3. Liaison métallique.....	5
I.2.4. Liaison de van der Waals.....	5
I.3. Systèmes cristallins.....	5
I.4. Propriétés physiques.....	5
I.4.1. Propriétés structurale.....	5
I.4.2. Propriétés électroniques.....	6
I.4.2.1. Densité des états.....	6
I.4.2.2. Structure de bandes électronique	6
I.4.2.3. Densité électronique.....	7
I.4.2.4. Propriétés optiques.....	7
I.5. Définition des semi-conducteurs.....	7
I.5.1. Gap direct et gap indirect.....	7
I.6. Code WIEN2K.....	8
I.7. Approximation de la densité locale du spin (LSDA).....	8
I.8. potentiel TB-mBJ.....	9
I.9. Généralités sur les halogénures de métaux de transition MX_2	9
I.9.1. Métaux de transition M.....	9
I.9.1.1. Cadmium.....	9
I.9.2. Halogènes X.....	10
I.10. Propriétés des halogénures de métaux de transition MX_2	10
I.10.1. Propriétés structurales.....	10
I.10.2. Propriétés magnétiques.....	11

I.11. Halogénures de cadmium.....	12
I.12. Bromure de cadmium CdBr₂.....	13

Chapitre II

II.1. Introduction.....	16
II.2. Calculs des propriétés avec la DFT.....	16
II.2.1. Détails du calcul.....	16
II.2.2. Etude des propriétés structurales.....	16
II.2.3. Propriétés électroniques.....	18
II.2.3.1. Densités des états DOS.....	18
II.2.3.2. Densité de charges électronique.....	20
II.2.3.3. Structure de bande électronique.....	22
II.2.4. Propriétés optiques.....	22
II.2.4.1 Fonction diélectrique.....	22
II.2.4.2. Autres propriétés optiques.....	23
II.3. Calculs des propriétés avec DFT+U.....	24
II.3.1. Etude des propriétés structurales.....	24
II.3.2. Propriétés électroniques.....	26
II.3.2.1. Densité des états totale et partielle.....	26
II.3.2.2. Densité de charge électronique.....	28
II.3.2.3. Structure de bande.....	29
II.3.3. Propriétés optiques.....	31
II.3.3.1. Fonction diélectrique.....	31
II.3.3.2. Autres propriétés optiques linéaires.....	33
II.4. Comparaison entre DFT et DFT+U.....	35
II.5. Conclusion.....	35
Conclusion général.....	36

Introduction Générale

La physique du solide a connu dans les cinquante dernières années un essor impressionnant à la fois dans le domaine de la théorie, des implémentations de cette théorie utilisant des outils et méthodes informatiques, font que la modélisation des composés réels (à structures éventuellement complexes) devient parfaitement envisageable avec des moyens et dans des délais qui restent « raisonnables » et plus précises, permettant d'obtenir avec une grande rapidité les propriétés de nombreux solides [1].

Les méthodes de prédiction des propriétés physiques des ces matériaux sont nombreuses. Parmi elles on trouve les méthodes dites Ab-initio. Ces dernières permettent de décrire le comportement énergétique des matériaux en connaissant seulement leurs différentes constitutions de ces matériaux. Donc, ces méthodes nécessitent seulement de savoir la composition chimique d'un matériau pour pouvoir le simuler à partir de la résolution des équations de la mécanique quantique (équation de Schrödinger).

Parmi les méthodes ab-initio les plus utilisées actuellement pour la prédiction des propriétés physiques des semi-conducteurs, on trouve la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) [2], qui a valu le prix de Nobel à Walter. Kohn en 1998. Elle présente l'avantage d'être simple à mettre en œuvre, d'être prédictive sur l'ensemble des matériaux et enfin d'être utilisable sur des systèmes de très grandes tailles. Elle s'impose aujourd'hui au niveau de la recherche comme un outil très puissant, utilisé dans presque tous les domaines d'actualité de la physique [1].

Les matériaux semi-conducteurs sont présentés dans multiples domaines, et ils prennent une place de plus en plus importante dans les systèmes que nous trouvons autour de nous ou que nous utilisons chaque jour. L'étude des différentes propriétés physiques des semi-conducteurs joue un rôle très important dans les développements technologiques dans plusieurs domaines [3].

Dans ce travail, nous allons essayer de déterminer les propriétés physiques du matériau fonctionnel CdBr_2 .

Cette thèse s'articule autour de deux chapitres:

Introduction générale

Le premier chapitre est divisé en deux parties. La première partie est consacré à un rappel des fondamentaux sur les type de liaison chimique, les systèmes cristallins, les propriétés des semi-conducteurs, et présentation du programme Wien2k et de l'approximation LSDA et du potentiel TB-mBJ.

Dans la deuxième partie du premier chapitre, nous concentrons particulièrement sur les halogénures de métaux de transition MX_2 , les halogénures de cadmium et présentation bibliographique du composé CdBr_2 .

Dans le deuxième chapitre nous présentons les résultats obtenus à partir de notre base de données par Wien2k. Nous avons interpréter les résultats obtenus issus des calculs de la structure de bandes électroniques, la densité d'états, la densité de charge électronique et les propriétés optiques. Nous discuterons ces résultats pour l'approximation LSDA sans et avec TB-mBJ.

Références bibliographiques

[1] N. Guenniche, Etude par la théorie DFT des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du MnAs comme matériau magnétocalorique, mémoire de master, Université Abou-Bekr Belkaid de Tlemcen (2018) p1.

[2] N. Bioud, Etude par la théorie DFT des propriétés structurales, électroniques et magnétiques du MnAs comme matériau magnétocalorique, thèse de doctorat, Université de Sétif 1 (2018) p1.

[3] L. Cherifi, Etude des propriétés physiques du composé CuBr, mémoire de master, Université Amar Telidji de Laghouat (2021) p1.

Chapitre I
Synthèse bibliographique

I.1. Introduction

La théorie de la densité fonctionnelle (DFT) est actuellement l'approche la plus aboutie (et aussi la plus prometteuse) pour étudier la structure électronique de la matière. Son applicabilité va des atomes, molécules et solides aux noyaux et aux fluides quantiques et classiques. Dans sa formulation originale, la théorie de la densité fonctionnelle fournit les propriétés d'état fondamental d'un système et la densité électronique joue un rôle clé. La DFT prédit une grande variété de propriétés moléculaires : structurelles, mode des fréquences vibrationnelles, l'énergie des liaisons, l'énergie d'ionisation, propriétés électriques et magnétiques, voies de réaction, etc.

L'application des calculs de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) devient rapidement un «outil standard» pour divers problèmes de modélisation de matériaux en physique, chimie, science des matériaux et de multiples branches de l'ingénierie [1].

I.2. Liaisons chimiques

Il y a quatre types de liaison: covalent, ionique, métallique et la liaison de van der Waals.

I.2.1. Liaison covalente

La liaison covalente résulte de la mise en commun par deux atomes d'électrons par paires, ou doublets électroniques, de spins opposés. L'orbitale des électrons est rattachée autant à l'un qu'à l'autre atome et est telle qu'elle complète pour chacun d'eux l'octet du gaz noble le plus proche dans la classification périodique, pour les éléments allant de la troisième à la cinquième colonne de cette classification. La liaison covalente est dite simple ou homopolaire si seulement deux électrons sont mis en commun, et multiple dans le cas de plus de deux électrons mis en commun [2].

I.2.2. Liaison ionique

Une liaison ionique est créée lorsque des électrons passent complètement d'un atome à l'autre. Les atomes sont électriquement neutres, mais quand ils gagnent ou perdent des électrons au cours d'une liaison, l'équilibre parfait des charges positives et des charges négatives est rompu; on obtient des particules chargées appelées ions. L'atome qui gagne un électron acquiert une charge nette négative. Cet atome est appelé anion. Par contre, l'atome qui perd un électron acquiert une charge nette positive; il est appelé cation. Des

anions et des cations se forment chaque fois une liaison ionique survient. Etant donné que les charges opposées s'attirent, ces ions tendent à rester voisins [3].

I.2.3. Liaison métallique

Dans le cas des solides métalliques, les forces dispersives entre atomes neutres interviennent également. Cependant, contrairement aux molécules non polaires, ces éléments sont tous électropositifs et la nature des attractions qui lient un atome à son voisin est différente de celle décrite au paragraphe précédent [4].

I.2.4. Liaison de van der Waals

Les forces de Van der Waals trouvent leurs origines dans des effets très divers liés à la présence de dipôles électriques permanents ou induits. Très souvent ces effets se produisent simultanément, ce qui rend leurs analyses plus difficiles. La contribution essentielle aux forces de Van der Waals, est connue sous le nom de la force de dispersion de London, résultant de la combinaison du mouvement orbital des électrons et de leur répulsion mutuelle [5].

I.3. Systèmes cristallins

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui répétée périodiquement, et qui forme le réseau cristallin. Tous les réseaux cristallins peuvent être décrits à partir de 7 mailles élémentaires qui définissent 7 systèmes cristallins (figure I.1). Selon que la maille élémentaire soit simple ou multiple, et à partir de ces 7 systèmes cristallins, on définit les 14 réseaux de Bravais [6].

I.4. Propriétés physiques

I.4.1. Propriétés structurale

L'état cristallin se distingue des autres états solides par le fait que, les atomes s'organisent suivant un ordre défini. Cet état est engendré par la répétition périodique d'atomes ou de groupement d'atomes (de même nature ou de nature différente) appelé motif du cristal ou maille suivant les trois directions de l'espace et qui permet, par translation, de générer la structure cristalline. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [7].

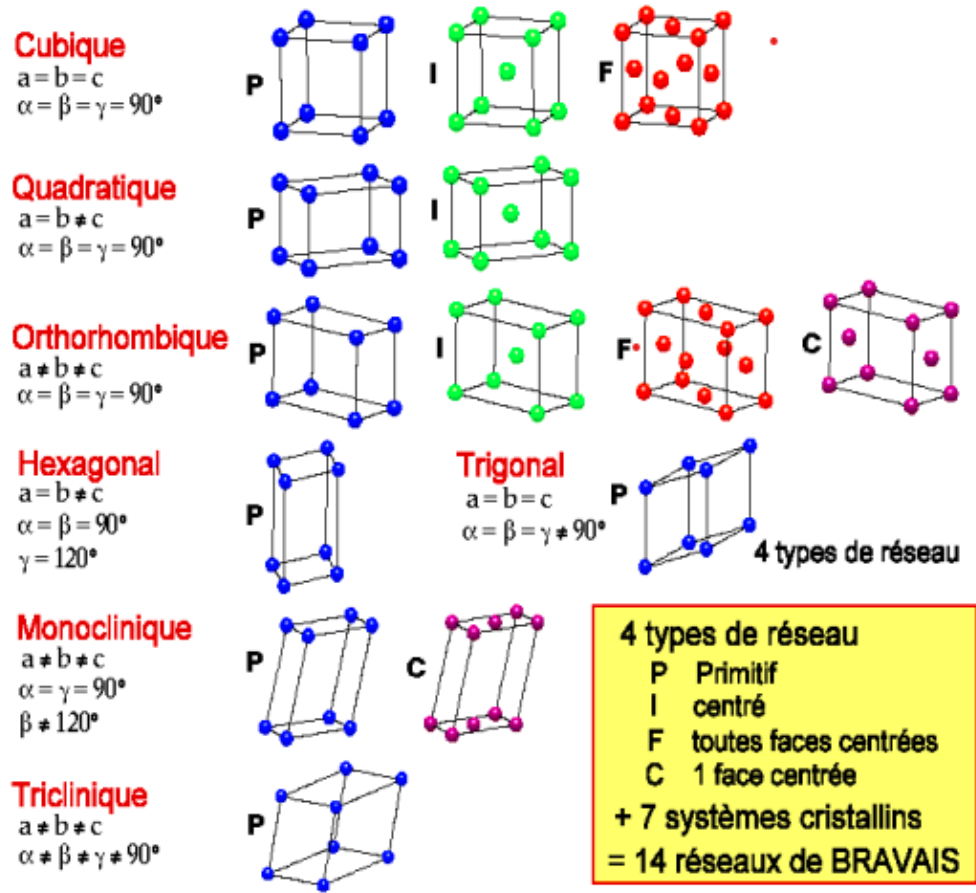


Figure I.1: Réseaux de Bravais (14 réseaux) [6].

I.4.2. Propriétés électroniques

I.4.2.1. Densité des états

La densité des états (DOS) est essentiellement le nombre d'états différents à un niveau d'énergie particulier que les électrons sont autorisés à occuper, c.-à-d. le nombre d'états d'électrons par unité de volume par unité d'énergie. Les propriétés en vrac telles que la chaleur spécifique, la sensibilité paramagnétique et d'autres phénomènes de transport des solides conducteurs dépendent de cette fonction. Les calculs DOS permettent de déterminer la distribution générale des états en fonction de l'énergie et peuvent également déterminer l'espacement entre les bandes d'énergie dans les semi-conducteurs [8].

I.4.2.2. Structure de bandes électronique

La structure de bande d'un matériau permet de déterminer la nature du gap et sa valeur, ainsi que les transitions optiques possibles. On représente le diagramme énergétique en

Chapitre I: Synthèse bibliographique

étudiant l'énergie E comme fonction du vecteur d'onde \vec{k} dans une direction cristallographique du réseau réciproque. Ce diagramme définit les extrema des bandes de conduction et de valence et montre les différents points de symétrie de la première zone de Brillouin [7].

I.4.2.3. Densité électronique

La densité électronique d'une zone d'une molécule est une mesure de la probabilité d'y trouver un électron. Plus la densité électronique est élevée, plus la probabilité est grande. Dans les textes d'introduction, les électrons sont souvent représentés dans des positions fixes autour du noyau, mais en réalité, ils peuvent se trouver n'importe où, même si certaines positions sont plus probables que d'autres. Les densités électroniques les plus élevées se trouvent autour des atomes et dans les régions qui constituent les liaisons.

La densité électronique peut être représentée par des cartes de potentiel électrostatique qui représentent graphiquement la densité électronique relative par un gradient de couleur [9].

I.4.2.4. Propriétés optiques

La propriété optique la plus connue est l'indice de réfraction ainsi que toutes les notions de transmission et réflexion qui en découlent. Si l'on y ajoute l'absorption, la diffusion et la dispersion de la lumière, on a une description assez complète de l'interaction entre la matière et la lumière [10].

I.5. Définition des semi-conducteurs

Un semi-conducteur est un matériau qui a les caractéristiques électriques d'un isolant, mais pour lequel la probabilité qu'un électron puisse contribuer à un courant électrique, quoique faible, est suffisamment importante. En d'autres termes, la conductivité électrique d'un semi-conducteur est intermédiaire entre celle des métaux et celle des isolants [11].

I.5.1. Gap direct et gap indirect

On parle de gap direct, lorsque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent sur le même vecteur d'onde k . Dans le cas où les bandes de conduction et de valence sont décalées l'une par rapport à l'autre, on parle de gap indirect. L'intérêt d'un gap direct est que les matériaux qui ont cette caractéristique sont

plus utilisés dans des dispositifs optiques, les transitions étant directes. Ce qui n'est pas le cas pour le gap indirect. Du coup les matériaux ayant un gap indirect ne sont pas bien adaptés pour les dispositifs optiques (exemple silicium) (figure I.2) [6].

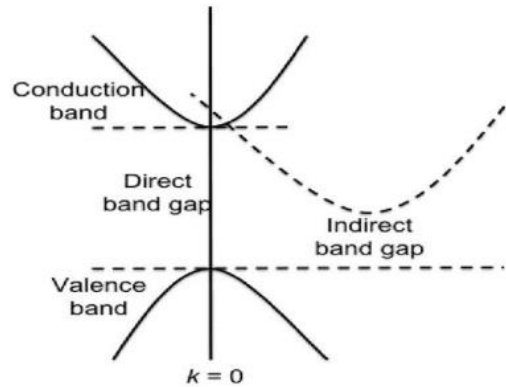


Figure I.2: Représentation schématique d'un système cristallin à gap direct et d'un système cristallin à gap indirect [6].

1.6. Code WIEN2K

Le programme WIEN2k est basé sur la méthode des ondes planes augmentées et des orbitales locales (APW+lo) pour résoudre les équations de Kohn-Sham de la théorie de la fonctionnelle de la densité. La méthode APW+lo, qui considère tous les électrons (cœur et valence) de manière auto consistante dans un traitement du potentiel complet, est mise en œuvre de manière très efficace dans WIEN2k, puisque différents types de parallélisations sont disponibles et que de nombreuses bibliothèques numériques optimisées peuvent être utilisées. De nombreuses propriétés peuvent être calculées, allant des propriétés de base, telles que la structure de bande électronique ou la structure atomique optimisée, à des propriétés plus spécialisées telles que le tenseur de blindage de la résonance magnétique nucléaire ou la polarisation électrique [12].

I.7. Approximation de la densité locale du spin (LSDA)

Dans le cas des systèmes ouverts l'énergie d'échange et de corrélation ne dépend seulement de la densité locale d'électron mais aussi de la densité locale du spin polarisés. Cette généralisation de la LDA et nommée l'approximation de la densité locale du spin(LSDA); la densité de charge est alors décomposée en deux parties: la densité du spin haut (\uparrow ρ_r) et la densité du spin bas (\downarrow ρ_r). L'énergie d'échange et de corrélation est donc donnée comme étant une fonctionnelle de deux densités du spin d'électron [1].

$$E_{XC}^{LDA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{LDA}[\rho(r)] d^3r \quad (I.1)$$

E: est l'énergie d'échange-corrélation par particule du gaz d'électrons homogène avec une densité constante ρ .

I.8. Potentiel TB-mBJ

Dans ce sens, d'autres améliorations ont été apportées telle que le l'approximation TB-mbj proposée par Tran et Blaha en 2009. La fonctionnelle de Tran et Blaha notée (TB-mBJ) est une version modifiée de la fonctionnelle de Becke et Johnson. Cette dernière a prouvé rapidement son efficacité par rapport aux modes de calculs les plus souvent utilisés tel que LDA et GGA [11].

I.9. Généralités sur les halogénures de métaux de transition MX_2

I.9.1. Métaux de transition M

Les métaux de transition sont des éléments du bloc d, qui remplissent progressivement une sous-couche électronique d en dessous d'une sous couches saturée, conformément à la règle de Klechkowski. Leurs métaux et alliages possèdent des propriétés mécaniques, électriques, magnétiques remarquables utilisés dans la vie de tous les jours (fer, cuivre, zinc, ...)]. Ces métaux à l'état stable et à température ambiante, se structurent soit en réseaux de Bravais monoatomiques CFC ou CC, soit ils forment des structures «HCP». Les métaux de transition ont été ainsi appelés parce qu'ils semblaient assumer la transition entre les éléments à caractères métalliques très prononcés et les non-métaux [13].

I.9.1.1. Cadmium

Le cadmium (Cd) est un métal très malléable. Il appartient à la Famille des métaux de transition. Il n'existe pas à l'état natif mais est obtenu Industriellement comme sous-produit de la métallurgie du zinc, mais est aussi présent Dans des minerais de plomb et de cuivre. Il se retrouve principalement sous forme de chlorure, d'oxyde, de sulfate, de nitrate ou de sulfure. Il est utilisé dans de nombreux procédés industriels comme par exemple la Fabrication des accumulateurs électriques, la production de pigments, les écrans de télévision, la photographie, la métallisation des surfaces, etc.

Chapitre I: Synthèse bibliographique

Ses propriétés physico-chimiques, proches de celles du calcium, lui permettent de traverser les barrières biologiques et de s'accumuler dans les tissus. Le cadmium est aussi présent dans la fumée de cigarette sous forme de très fines particules d'oxyde de cadmium. Le cadmium est l'élément chimique de groupe 12 et de la période 5 dans le tableau périodique [14].

Tableau. I.1: les paramètres de cadmium [15].

État d'oxydation	+II
État ordinaire	Solide
Masse volumique	8,69 g.cm ⁻³ (20 °C)
Couleur	Gris argenté métallique
Point de fusion	321,07 °C
Point d'ébullition	767 °C
Énergie de fusion	6,192 kJ.mol ⁻¹
Énergie de vaporisation	99,87 kJ.mol ⁻¹

I.9.2. Halogènes X

Les halogènes sont les éléments chimiques du 17^{ème} groupe (colonne) du tableau périodique comme fluor F, chlore Cl, brome Br., l'iode I. ils sont chimiquement très réactifs, leur réactivité décroissant lorsque leur numéro atomique augmente [16].

I.10. Propriétés des halogénures de métaux de transition MX₂

I.10.1. Propriétés structurales

Les dihalogénures métalliques de transition ont une structure en couches naturelles qui contient des filets triangulaires de cations dans la coordination octaédrique en partage des bords formant des couches MX₂ séparées par des interstices van der Waals. Le champ de cristal octaèdre divisera les orbitales 3d des atomes métalliques dans les couches supérieures.

À savoir, chaque halogénure métallique est composé de trois plans atomiques: une couche d'atomes de métal de transition (TM) pris en compte entre deux couches d'atomes halogènes.

Les composés MX_2 adoptent soit la structure trigonale CdI_2 (dite 1-T avec groupe d'espace P3m1) ou le rhomboèdre CdCl_2 (R3m). Ces structures ont des empilements différents [17].

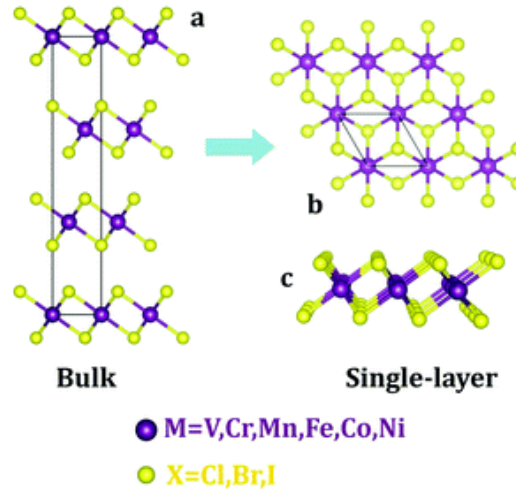


Figure I.3: Structures cristallines des di-halogénures métalliques (MX_2) en (a) vrac et (b et c) monocouche [17].

I.10.2. Propriétés magnétiques

La plupart des di halogénures de métal de transition (TD) possèdent un grand moment magnétique. Le moment magnétique total forme une courbe «volcan» (figure I.4) commençant avec halogénures en V ($3 \mu_B$ par atome MT), augmentant à Mn-halogène ($5 \mu_B$), puis progressivement diminuant à $2 \mu_B$ en Ni-halogénures, en bon accord avec les moments magnétiques du métal libre atomes, décrits par les règles de Hund. Les moments magnétiques calculés en halogène 2D sont plus élevés que ceux des dichalcogènes magnétiques 2D (p. ex. VS_2 , NbS_2). La majorité du totalement magnétique vient des atomes MT, tandis que les halogènes ont un petit moment magnétique de seulement 0,16 à 0,40. L'analyse détaillée indique que le moment magnétique local sur MT atomes augmente avec le nombre atomique de X atome (Cl, Br, I). Cette tendance est opposée à la quantité de transfert d'électrons entre les atomes MT et X. L'atome de Cl a la plus grande électronégativité et retire la plus grande charge d'électron de valence des atomes MT, diminuant leur magnétisation. Le mécanisme de liaison est examiné en traçant la distribution de densité d'électron. Le distinctif la caractéristique des halogénures métalliques 2D est un transfert de charge important. La liaison a un ionique profond caractère [17].

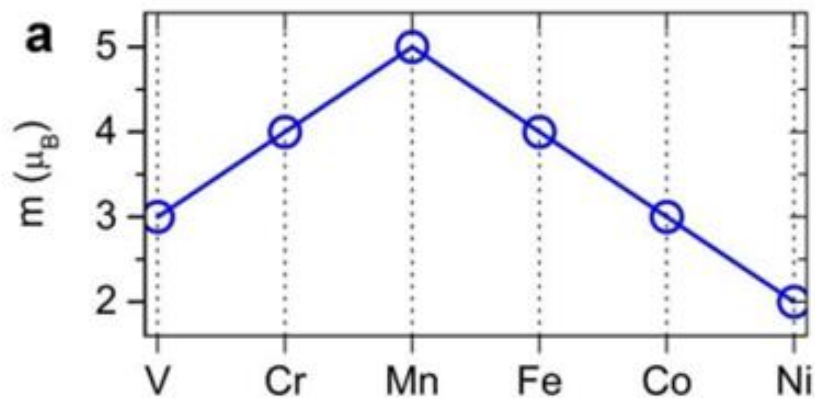


Figure I.4: Propriétés magnétiques et électroniques calculées des monocouches d'halogénure: total des moments magnétiques par atome M [17].

I.11. Halogénures de cadmium

Les cristaux d'halogénure de cadmium sont des composés à couche ionique, La structure du CdBr_2 et CdCl_2 est de type CdCl_2 , c'est-à-dire que le réseau, réseau rhombique avec une symétrie D_{3d}^5 [18].

Les halogénures de cadmium sont largement utilisés pour les radiations. Le réseau de ces cristaux compliqués est fortement anisotrope [19].

Les composés CdI_2 , CdBr_2 et CdCl_2 sont des matériaux qui ont attiré l'attention de nombreux travaux en raison de l'intérêt qu'ils présentent pour les caractéristiques dues à leur structure en couches, mais il existe encore peu de données sur l'indice de réfraction de ces composés. Bien que des mesures de l'indice de réfraction aient été effectuées sur le CdI_2 . Leurs données manquent les valeurs de l'indice de réfraction extraordinaire près du bord d'absorption [20].

De nombreux chercheurs sont intéressés aux propriétés optiques des monocristaux d'halogénure de cadmium d'une énergie inférieure à 10 eV. Ils ont réalisé la première étude du spectre de réflexion d'un monocristal de CdI_2 , dans laquelle ils ont observé des pics nets à des énergies bien au-dessus du seuil d'absorption fondamental. Les propriétés optiques des monocristaux de CdI_2 et de CdBr_2 ont été étudiées en détail, en mettant l'accent sur les spectres des cristaux mixtes et l'anisotropie optique autour du seuil d'absorption. Ces observations ont été expliquées en termes de transitions excitoniques dans le champ cristallin anisotrope [18].

I.12. Bromure de cadmium CdBr_2

Bromure de cadmium cristallisent avec des structures en couches dans lesquelles les bandes à l'intérieur de la couche est forte avec une contribution ionique importante, tandis que la liaison entre les couches est faible. La structure de ces matériaux est une feuille hexagonale infinie d'atomes de Cd pris en sandwich entre deux feuilles similaires d'atomes d'halogène, les atomes de Cd étant coordonnés de façon octaédrique coordonnés [19].

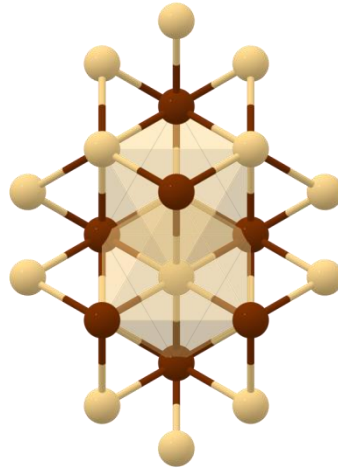


Figure I.5: Structure cristalline de CdBr_2 .

CdBr_2 est un composé intéressant qui peut trouver des applications dans l'optoélectronique et le diélectrique haut porte.

Des micros/nano bandes CdBr_2 ont été utilisées pour produire des photos détectrices À haute réactivité efficacité quantique externe de 105% et réactivité de la lumière de 250A/W lorsqu'il est excité avec une source de lumière UV de 185nm.

Il est également mentionné que les matériaux luminescents à l'état solide ayant une fluorescence retardée activée thermiquement en bleu ultra long et un rendement quantique de photoluminescence élevé peuvent être produits en utilisant CdBr_2 .

Bien que CdBr_2 soit un matériau prometteur pour les problèmes de détection d'énergie élevée, les couches empilées composent des structures hétéro-jonctives qui bénéficient de ce matériel ne sont pas célèbres [21].

Références bibliographiques

- [1] A. Bouakaz, N. Ghalmi, Etude comparative par méthode DFT des propriétés géométriques et énergétiques des molécules RH_2PO_4 et du RNO_3 (R = 2-amino-carboxypyridinium), mémoire de master, Université Larbi Ben M'hidi Oum El Bouaghi (2022) p3.
- [2] E. Frédéric, Liaison hydrogène et autres liaisons chimiques (2004) p3, <http://fred.elie.free.fr>.
- [3] A. Nani, Biochimie structurale et enzymologie, Université Ahmed Draïa Adrar (2020/2021) p9.
- [4] H. Bendekkiche, I. Benharzallah, Analyse topologique de la liaison chimique, mémoire de master, Université Mohamed Khider Biskra (2021) p20.
- [5] M. Achour, S. Achiba, Théorie quantique de la liaison chimique, mémoire de master, Université Mohamed Khider Biskra (2022) p7.
- [6] W. Benstaali, Etude des propriétés optoélectroniques et magnétiques des composés ZnX/CdX dopés par des métaux de transition, thèse de doctorat, université Abdelhamid Ibn Badis Mostaganem (2014) p4-12.
- [7] S. Djerida, Etude théorique à base de DFT de quelques propriétés physiques des semi-conducteurs, mémoire de master, Université Mohamed Boudiaf M'sila (2022) p21-23.
- [8] <https://www.amazon.com/Solid-State-Theory-M-Sachs/dp/B0000CLUXE>.
- [9] <https://theory.labster.com/electron-density-fr/Aug>.
- [10] <http://www.primeverre.com/tout-sur-le-verre/proprietes/#:~:text=Thermique-,Optique,le%20verre%20et%20la%20lumi%C3%A8re>.
- [11] L. Cherifi, Etude des propriétés physiques du composé CuBr , mémoire de master, université Amar Telidji Laghouat (2021) p3-12.
- [12] P. Blaha, WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids, The Journal of Chemical Physics 158 (2020).
- [13] I. Ferhat, S. Guesmia, L'influence de la température sur les propriétés des couches minces du ZnO , mémoire de master, Université Mohamed Khider de Biskra (2020) p4.
- [14] <https://www.cancer-environnement.fr/fiches/expositions environnementales/cadmium-et-ses-composes>.
- [15] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Cadmium>.

- [16] <https://fr.wikipedia.org/wiki/Halog%C3%A8ne>.
- [17] V. Kulish, W. Huang, Single-layer metal halides MX_2 (X = Cl, Br, I): stability and tunable magnetism from first principles and Monte Carlo simulations, *Journal of Materials Chemistry C* (2017) p6.
- [18] E. Eshiguro *et al.*, Optical spectra of cadmium halides crystals, *Journal of the physical society Japan* 59 (1989) p338.
- [19] H Salehi, N. Asare, Investigation of the optical properties of CdBr_2 , 1 (2011) p1.
- [20] S. Kondo, H. Matsumoto, Dispersion studies of CdI_2 , CdBr_2 and CdCl_2 , *Journal of the physical society Japan* 50 (1981) p3047.
- [21] A.Q. Areen, A. Hamarsheh, Band offsets: Electron affinities and optical dynamics at the $\text{CdBr}_2/\text{SiO}_2$ interfaces 243 (2021) p1.

Chapitre II

Expérimental, résultats et discussion

II.1.Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons nos résultats obtenus par le calcul ab-initio des propriétés structurales; électroniques et propriétés optiques du bromure de cadmium. Nous avons utilisé les variantes DFT et DFT+U avec l'utilisation la méthode FP-LAPW implémenté dans le cadre de code Wien2k nous avons associé la méthode de TB-mBJ (potentiel de Becke-Johnson modifié par Tran et Blaha). Et l'approximation de la densité locale du spin LSDA.

II.2. Calculs des propriétés avec la DFT

II.2.1. Détails du calcul

Le tableau ci-dessous représente les données d'entrée concernant le composé CdBr_2 .

Tableau II.1:Détails de calcul.

Composé	Classe	Groupe d'espace	RK_{max}	RMT (bohr)	Kpoint
CdBr_2	hexagonal	$\text{P}_{63\text{mc}}$	7	Cd =2.2000 Br=2.0000	10x10x11

II.2.2. Etude des propriétés structurales

Avant de faire le calcul des différentes propriétés structurales des composés CdBr_2 nous avons procédé à le choix le nombre de points k pris en compte dans l'intégration à travers la première zone de Brillouin .après ça Pour débiter l'étude structurale, nous introduisons les paramètres numériques énumérés précédemment dans un fichier spécial nommé fiche CIF et nous entamons la première étape dans le code WIEN2k, à savoir l'initialisation. Lors de cette étape, le code va vérifier si les paramètres que nous avons introduits ne causent pas un chevauchement des sphères Muffin-Tin, respectent la symétrie et vérifient l'énergie de séparation entre les états du cœur et les états de valence [1]. Une fois cette étape terminée, nous calculons l'énergie totale et conservons les valeurs de volume optimales (paramètre a et c) correspondant à la limite d'énergie minimale. 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 correspondante en minimum d'énergie toujours.

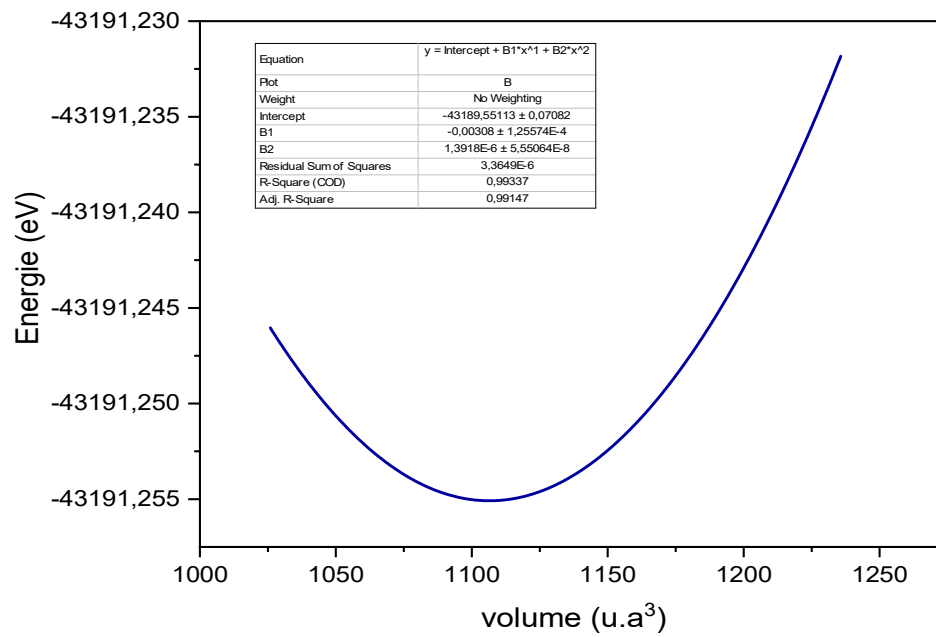


Figure II.1: Variation de l'énergie de la maille en fonction du volume.

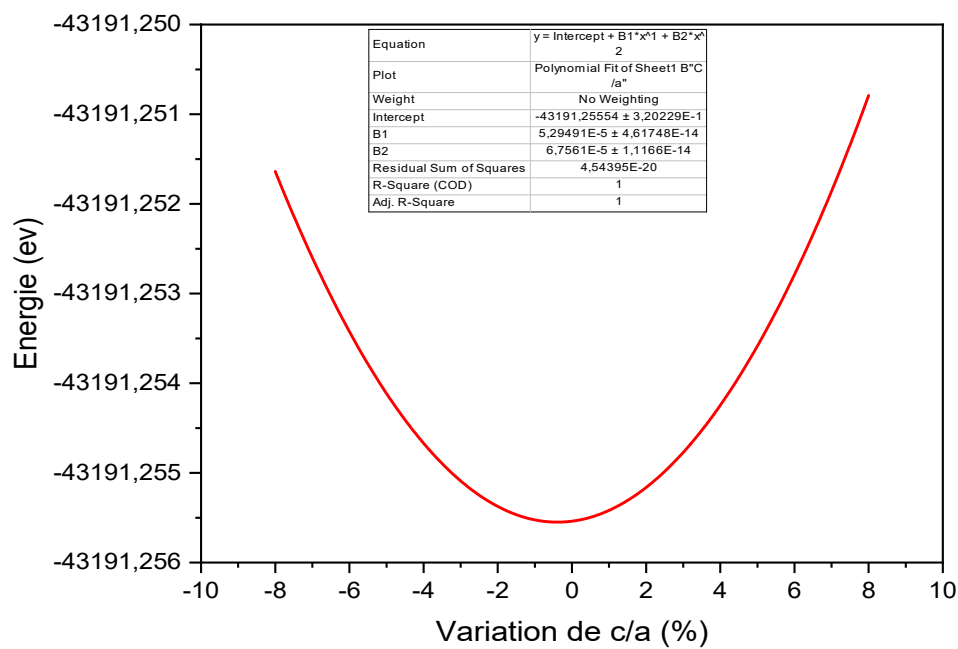


Figure II.2: Variation de l'énergie en fonction de c/a.

Chapitre II: Expérimental, résultats et discussion

Dans le cas d'une structure hexagonal, les paramètres a et c sont donnés par les formules:

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

Le résumé de constantes physiques ainsi obtenues sont reportées dans le tableau

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

		a (Å ³)	($\Delta a/a$ %)	c (Å ³)	($\Delta c/c$ %)	E (Ry)	V (Å ³)	($\Delta v/v$ %)
Expérimental		3,985	/	12,561	/	/	172,747	/
Nos calculs	E=f(v)	3,903	2,06	12,305	2,04	-43191,255	162,333	6,09

I.2.3. Propriétés électroniques

Dans cette section nous décrivons comment il est possible de calculer quelques propriétés électroniques importantes. Cette importance réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et comprendre la nature de ces matériaux pour une exploitation optimale. Ces propriétés comprennent la structure de bande d'énergie, la densité d'état (DOS; Densité Of States) et la densité de charge électroniques [2].

II.2.3.1. Densités des états DOS

Nous avons calculés les densités des états totale et partielle pour le composé CdBr₂ avec l'approximation sans et avec TB-mBJ. les densités d'état partielles qui permettent de déterminer la structure des liaisons chimiques entre les atomes d'un cristal ou d'une molécule.

Les figures II.3 et II.4 représentent les densités d'états totales et partielles du composé CdBr₂ sans et avec TB-mBJ respectivement.

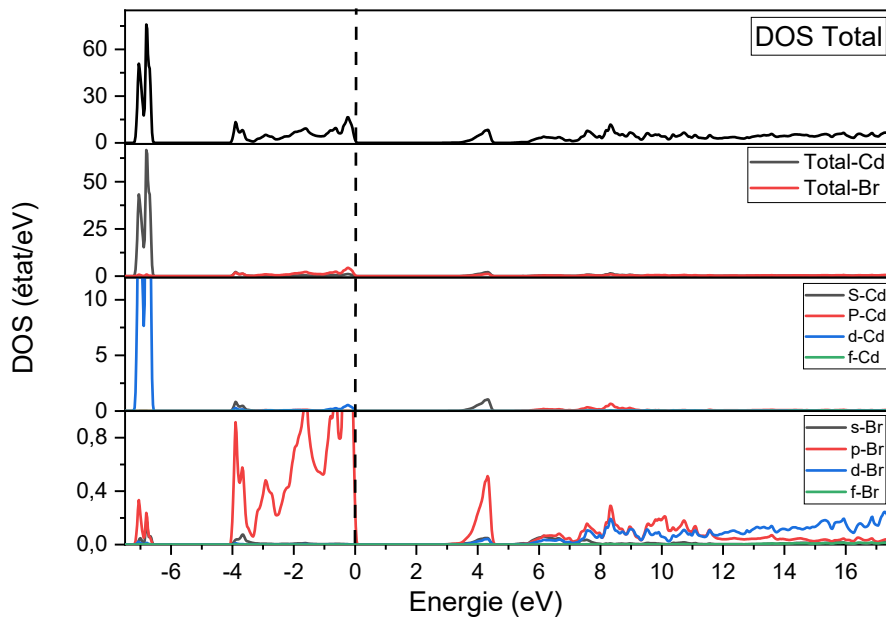


Figure II.3:Densité des états totale et partielle calculés pour CdBr₂ sans TB-mBJ.

Région de la bande de valence

Il y a deux régions de valence importantes comme sont :

- **[-7.5;-6.5 eV]**: dans cette région la contribution de l'état **d-Cd** est dominante avec une très faible contribution des états **p-Br** et **s-Br**, aucun contribution de l'état **f**.
- **[-4;0eV]**: dans cette région la contribution de l'état **p-Br** est dominante. avec une très faible contribution des états **s-Br** et **d-Cd**, aucune contribution de l'état **f**.
C'est un caractère de liaison covalente.

Région de la bande de conduction

Il y'a deux régions de conduction importantes qui sont:

- **[3;5eV]**: dans cette région la contribution de l'état **p-Br** est faible avec une très faible contribution de l'état **d-Br** et **s-Cd**. aucune contribution de l'état **f**.
- **[5,5;18eV]**: dans cette région la contribution de l'état **d-Br** et **p-Br** est faible. avec une très faible contribution de l'état **s-Br** et **p-Cd**.

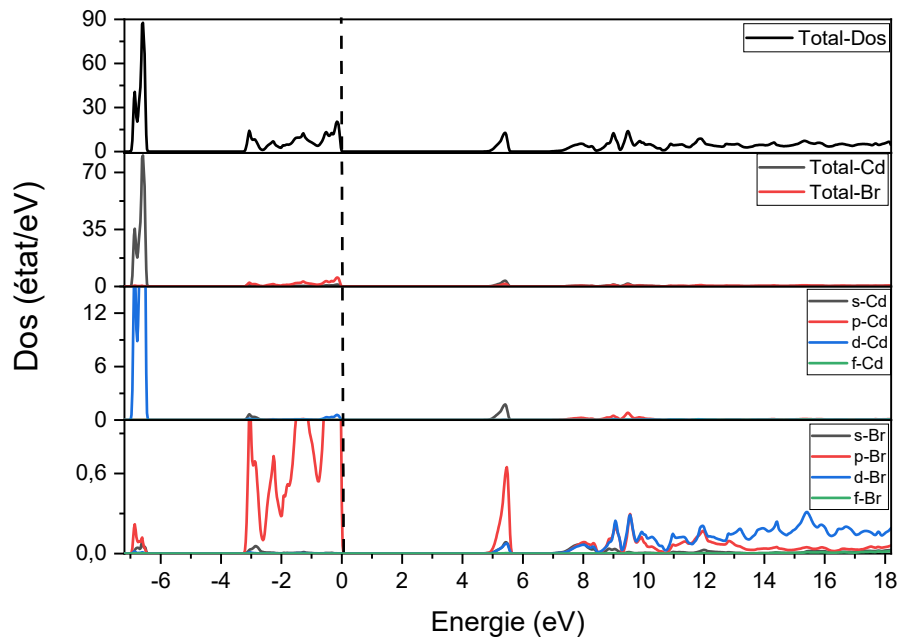


Figure II.4:Densité des états totale et partielle calculés pour CdBr₂ Avec TB-mBJ.

Région de la bande de valence

Il y a deux régions de valence importantes comme sont :

- [-7,;-6eV]:dans cette région la contribution de l'état **d-Cd** est dominante avec une très faible contribution des états **p-Br** et **s-Br**, aucun contribution de l'état **f**.
- [-3,5;0eV]: dans cette région la contribution de l'état **p-Br** est dominante. avec une très faible contribution des états **s-Br** et **d-Cd**, aucune contribution de l'état **f**.

Région de la bande de conduction

Il y'a deux régions de conduction importantes qui sont:

- [5,6 eV]:dans cette région la contribution de l'état **p-Br** est faible avec une très faible contribution de l'état **d-Br** et **s-Cd**.aucune contribution de l'état **f**.
- [7;18,5eV]:dans cette région la contribution de l'état **d-Br** et **p-Br** est faible.avec une très faible contribution de l'état **s-Br** et **p-Cd**.

II.2.3.2. Densité de charges électronique

Le but de La densité de charges est à analyser la nature des liaisons dans les composés sur les figures II.5 et II.6 est présenté le tracé des contours de la densité de charge dans la structure de CdBr₂ calculés sans et avec TB-mBJ.

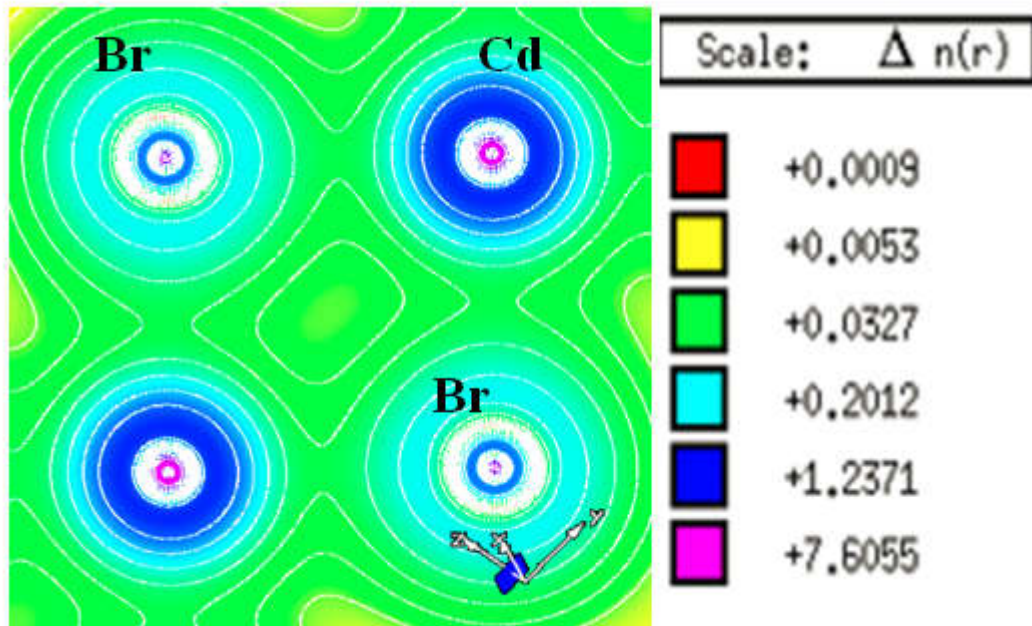


Figure II.5: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br sans TB-mBJ.

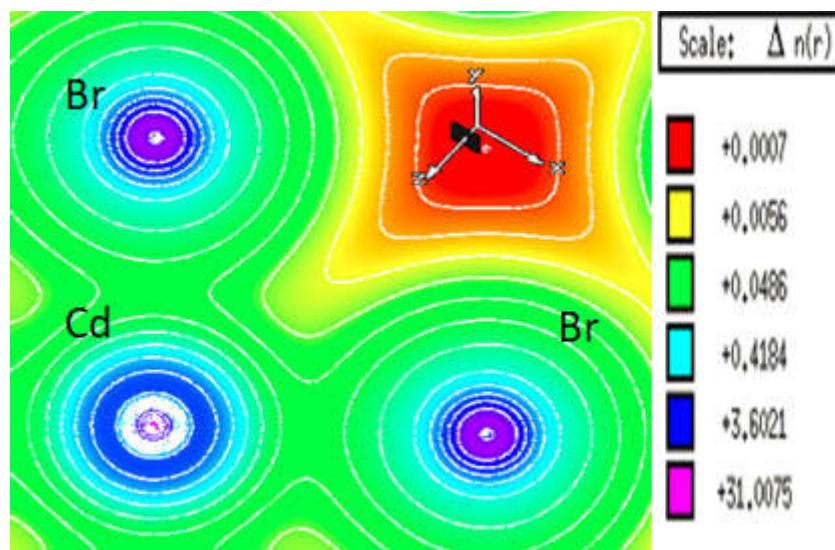


Figure II.6: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br Avec TB-mBJ.

Les contours sont non déformées autour des atomes Cd et Br, ce qui signifie qu'il ya un caractère ionique des liaisons Cd-Br. Les résultats obtenus dans la densité de charge sont en bon accord avec les résultats obtenus dans la densité des états. Nous concluons la nature de ce matériau est semi-conducteur.

II.2.3.3. Structure de bande électronique

Les structures de bande sont calculées le long de la direction des points de haute symétrie Γ , M, K, A et L dans la zone de Brillouin. Nous reportons dans La figures de II.7.

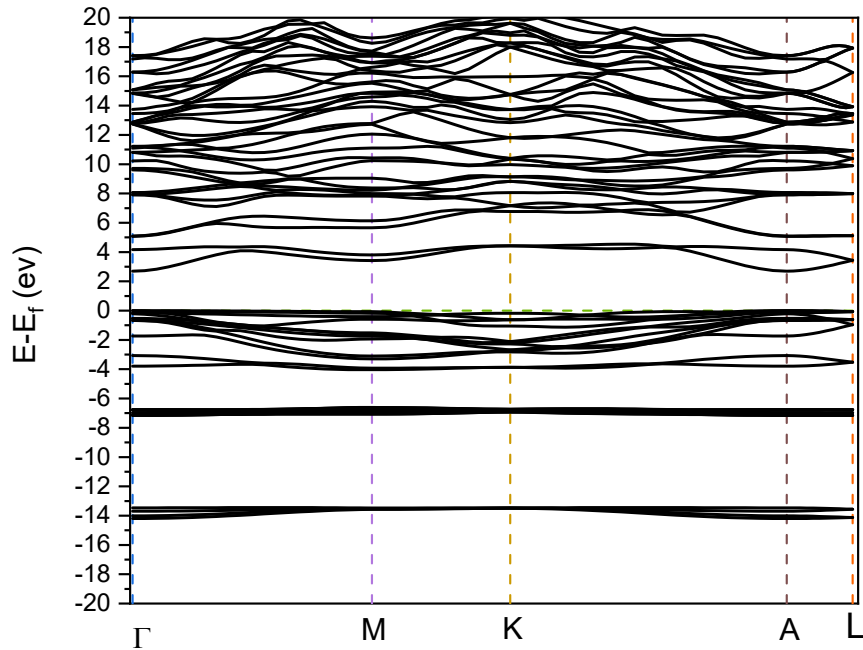


Figure II.7: Structure de bande électronique sans TB-mbj.

Le gap d'énergie concernant le composés CdBr_2 entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. Donc notre matériau a un gap direct: $E=2,7 \text{ eV}$

II.2.4. Propriétés optiques

Les propriétés optiques linéaires dans les solides peuvent être décrites par la fonction diélectrique

II.2.4.1 Fonction diélectrique

La première étape dans le calcul des propriétés optiques est le calcul de la fonction diélectrique dans ses deux parties réelle et imaginaire.

$\epsilon_1(\omega)$: représente la partie réelle et $\epsilon_2(\omega)$ la partie imaginaire de la fonction diélectrique

Les résultats de ces calculs en utilisant l'approximation LSDA avec la TB-mbj sont groupés dans la figure II.8.

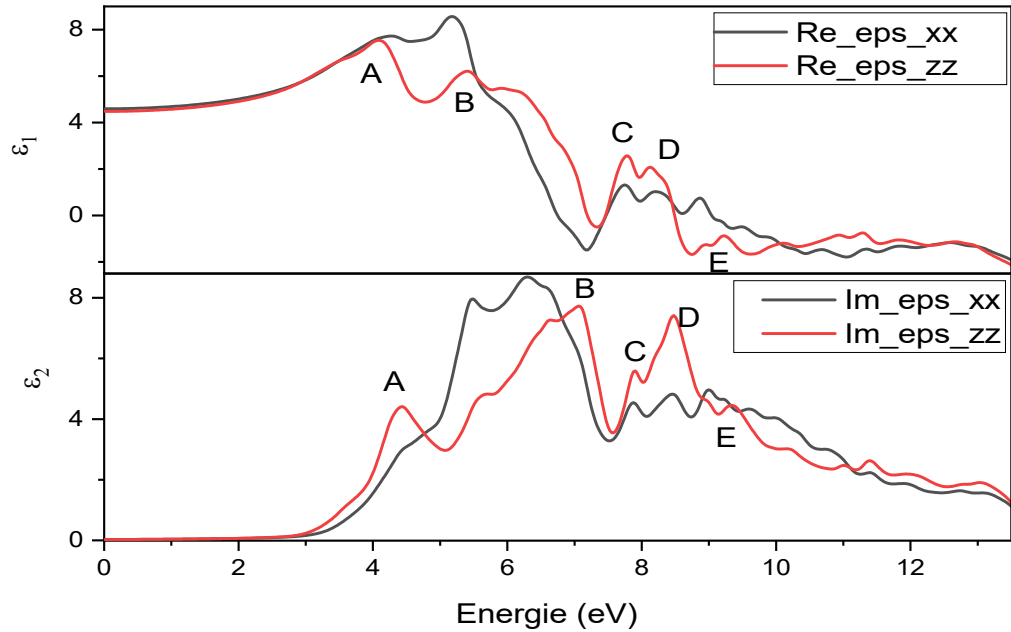


Figure II.8:les deux parties de la fonction diélectrique en fonction de l'énergie du photon incident (eV) sans TB-mbj.

Il ya cinq pics principaux A, B, C, D et E dans la représentation des parties imaginaire et réelle de la fonction diélectrique du CdBr₂ qui représentent les transition électronique entre l'état d'atome Cd et Br nous concluons les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats de calculs de densité des états.

II.2.4.2. Autres propriétés optiques

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

- Absorption $I(\omega)$: Pour l'estimation du gap optique.
- Réflectivité $R(\omega)$.
- Perte d'énergie «energyloss» $L(\omega)$: Décrit l'énergie d'un électron accéléré qui traverse le cristal.
- Indice de réfraction $n(\omega)$ Les résultats des calculs obtenus sont illustrés dans la figure II.9.

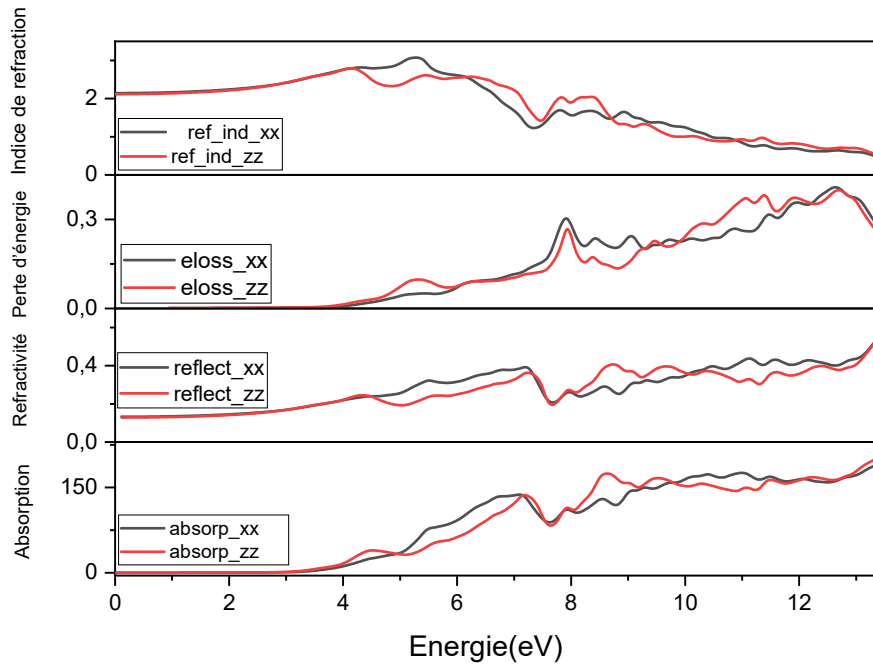


Figure II.9: Propriété optique en fonction d'énergie du photon incident (eV) le long de trois direction cristallographique absorption $I(\omega)$, l'indice de réfraction $n(\omega)$, la perte d'énergie $L(\omega)$ et la réflectivité $R(\omega)$.

Les résultats obtenus avec l'approximation LSDA sont résumé dans le tableau suivant:

Tableau II.3: Propriétés optiques calculés pour CdBr_2 avec l'approximation LSDA sans TB-mBJ.

	Gap optique (eV)	Indice de réfraction	Perte d'énergie Energie eV	Réflectivité Energie eV
xx	3,007	2,143	0,408 12,558	0,207 7,633
zz	2,871	2,117	0,399 12,639	0,195 7,633

II.3. Calculs des propriétés avec DFT+U

Pour objectif d'établir la meilleure valeur du gap, l'approximation du gradient *généralisé* plus le paramètre U (LSDA+U) avec et sans la méthode TB-mBJ, ont été utilisés dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité (DFT).

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

II.3.1. Etude des propriétés structurales

Chapitre II: Expérimental, résultats et discussion

Nous avons effectué un calcul auto-cohérent de l'énergie et le volume optimal pour l'approximation LSDA+U.

Nous présentons les résultats de cette étude dans les figures suivantes:

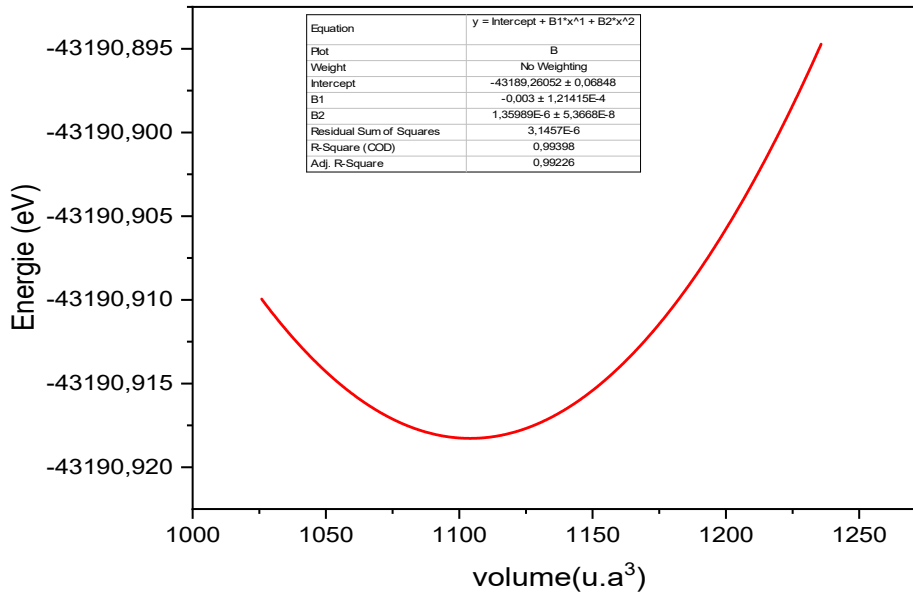


Figure II.10: Variation de l'énergie de la maille en fonction du volume de la maille.

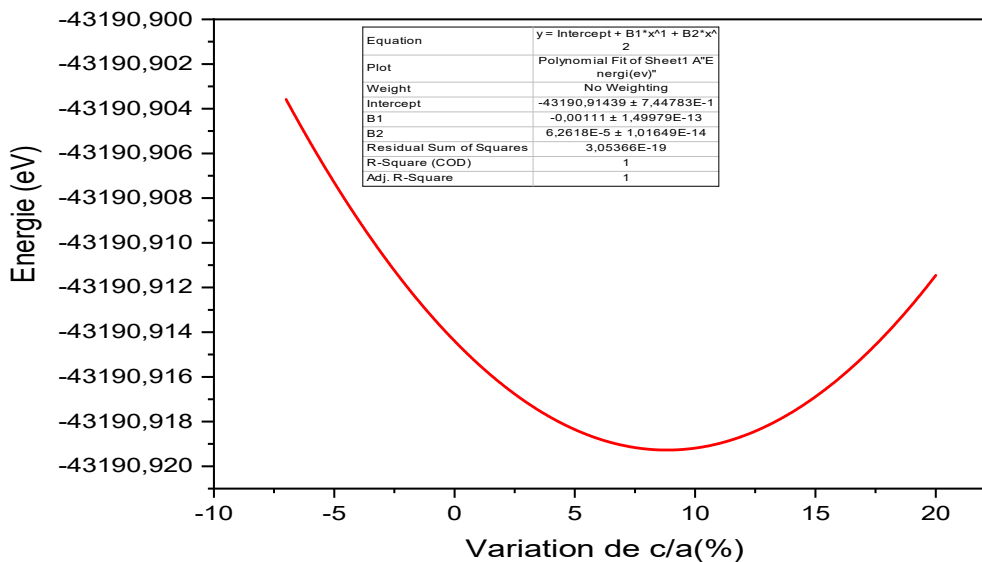


Figure II.11: Variation de l'énergie on fonction de c/a

2. Propriétés électroniques

II.3.2.1. Densité des états totale et partielle

A) Sans TB-mBJ

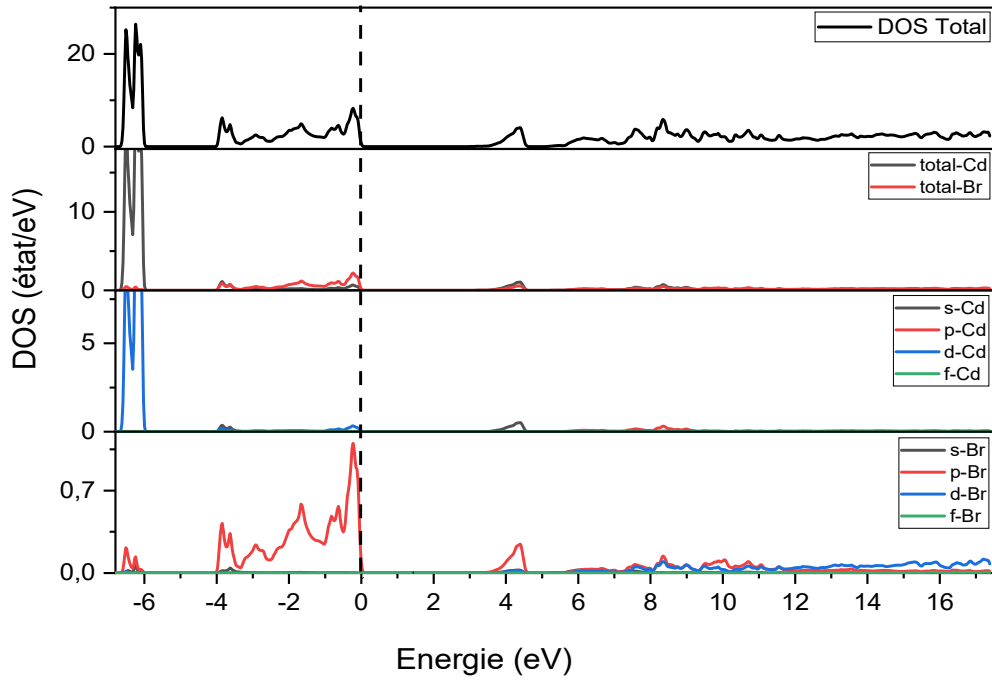


Figure II.12: Densité des états totale et partielle up pour la configuration sans TB-mBJ calculés pour CdBr₂

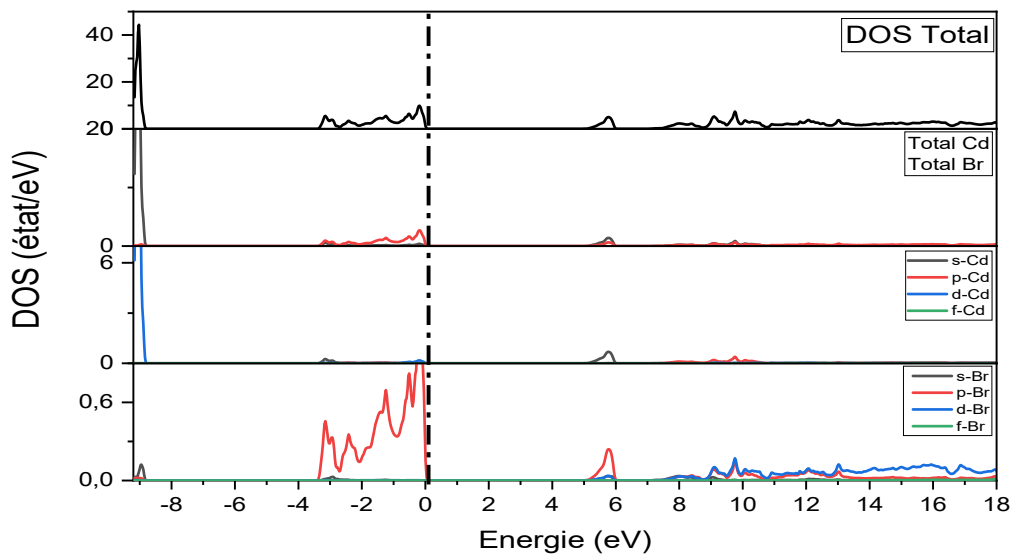


Figure II.13: Densité des états totale et partielle down sans TB-mBJ calculés pour CdBr₂⁻

B) Avec TB-mBJ

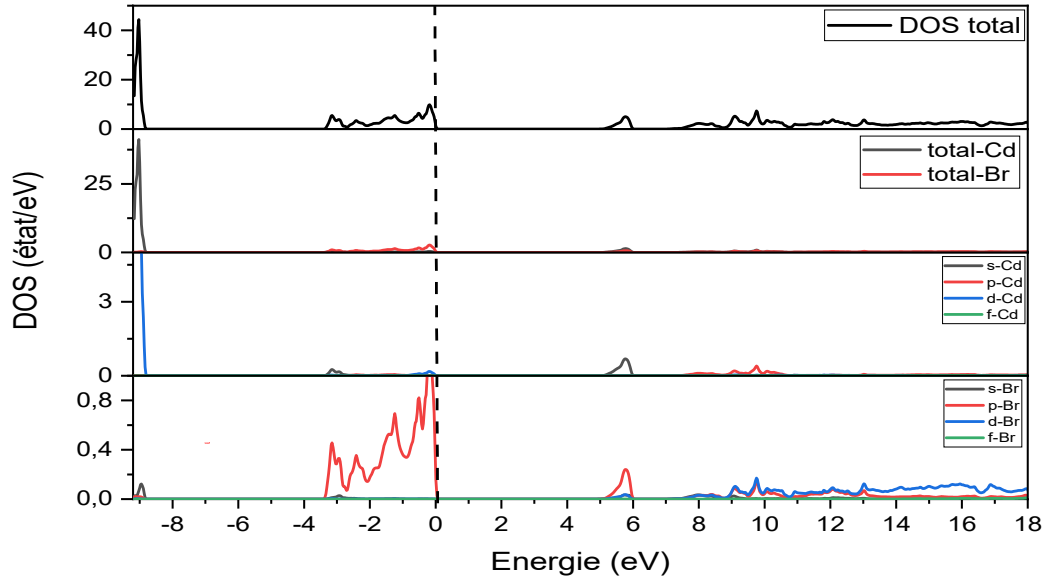


Figure II.14: Densité des états totale et partielle up avec TB-mBJ calculés pour CdBr₂

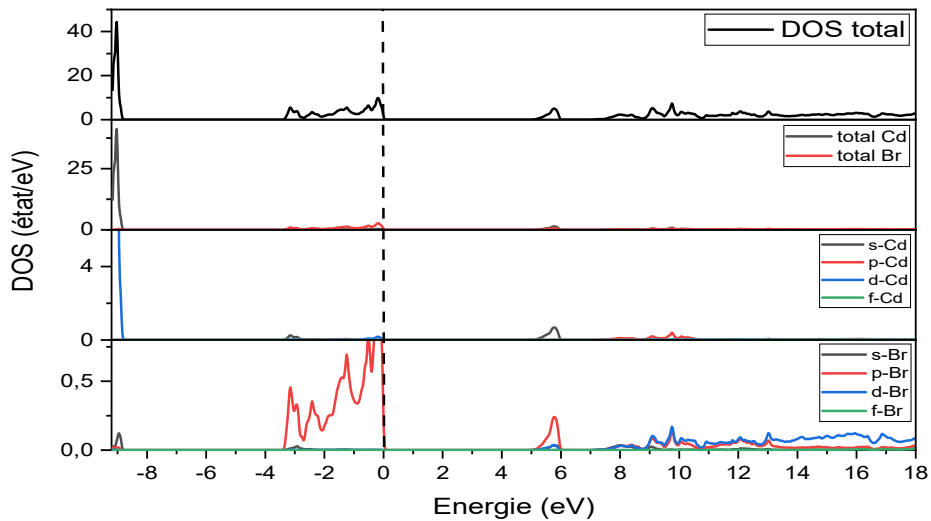


Figure II.15: Densité des états totale et partielle down avec TB-mBJ calculés pour CdBr₂

Chapitre II: Expérimental, résultats et discussion

Les résultats obtenus dans le tableaux suivant :

Tableau II.4.Contribution pour chaque intervalle.

	Intervalle (eV)	Contribution
Bande de Valence	[-9.1,-8]	Forte contribution de l'état d-Cd et faible contribution de l'état s-Br et p-Br , aucune contribution de l'état f
	[-3.5, 0]	Forte contribution de l'état P-Br .et très faible contribution de l'état s-Br , s-Cd , p-Cd et d-Cd , aucune contribution de l'état f
Bande de conduction	[5.2, 6]	Faible contribution de l'état p-Br et très faible contribution de l'état d-Br et s-Cd .
	[9, 18]	Faible contribution de l'état d-Br et p-Br et s-Br , p-Cd .

II.3.2.2. Densité de charge électronique

La figure, de II.9 est présenté le tracé des contours de la densité de charge dans la structure CdBr_2 . Sans et avec TB-mBJ

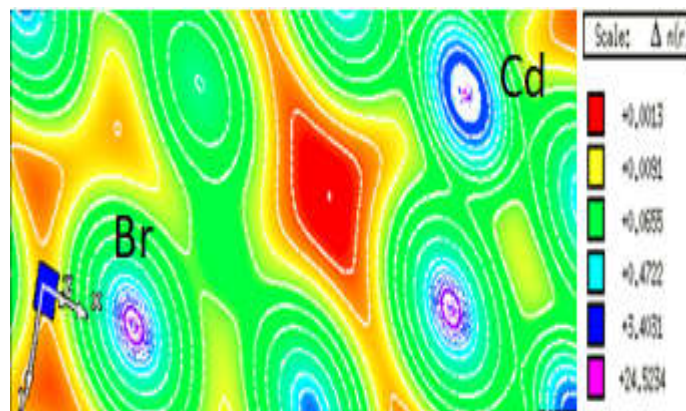


Figure II.16:Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br Sans TB-mBJ .

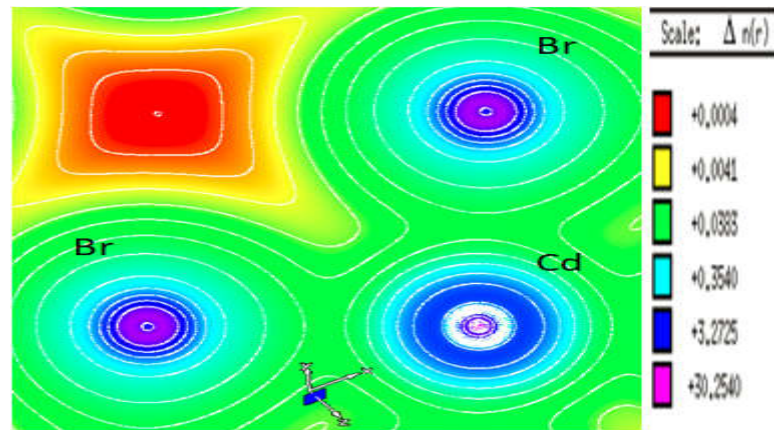


Figure II.17: Densité de charge calculée dans un plan contenant les atomes Cd et Br avec TB-mbj.

Un caractère ionique des liaisons Cd-Br.

II.3.2.3. Structure de bande

Le calcul de la structure de bande a été effectué avec la méthode LSDA+U sans et avec TB-mBJ. Les résultats obtenus sont ornés dans Les figure II.1 et II.16.

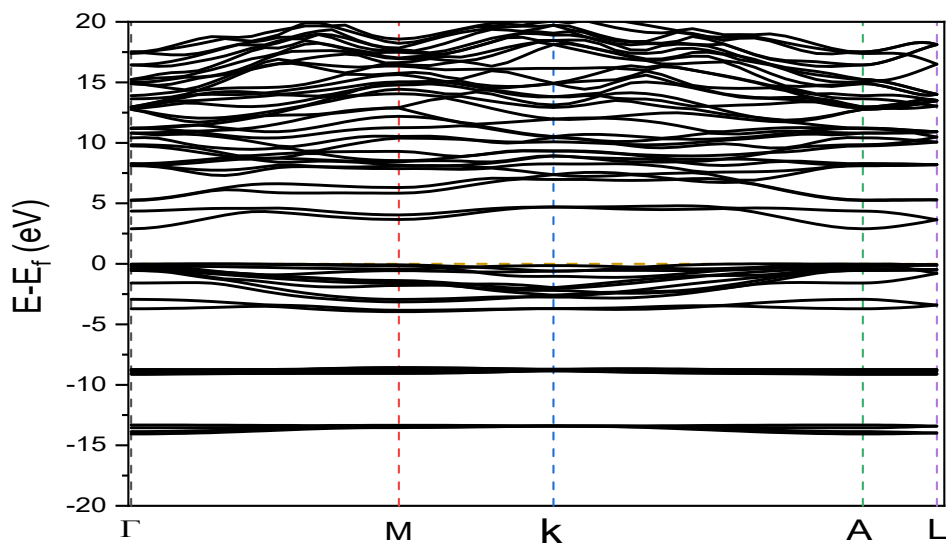


Figure II.18: Structure de band up calculée pour CdBr₂ sans TB-Mbj

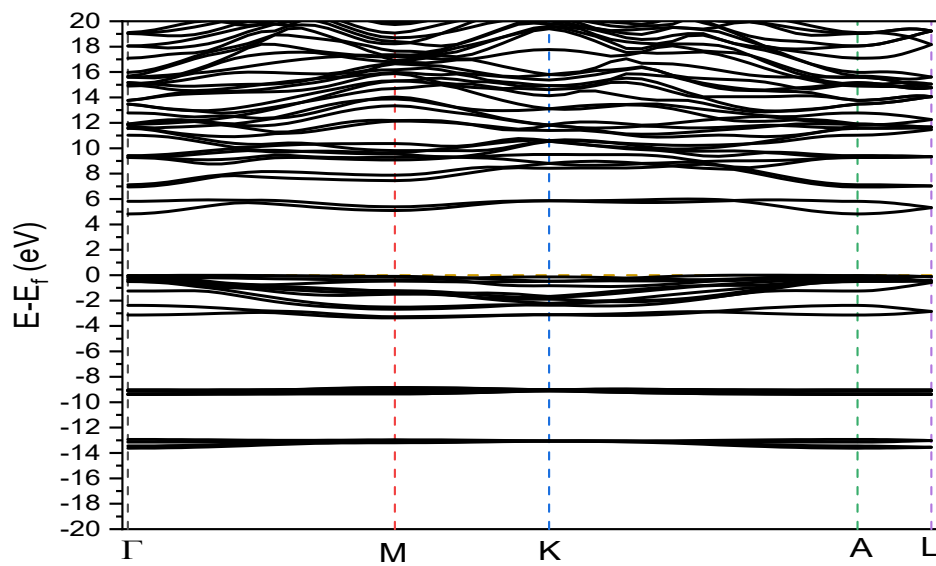


Figure II.19: Structure de band down calculée pour CdBr₂ sans TB-mBJ.

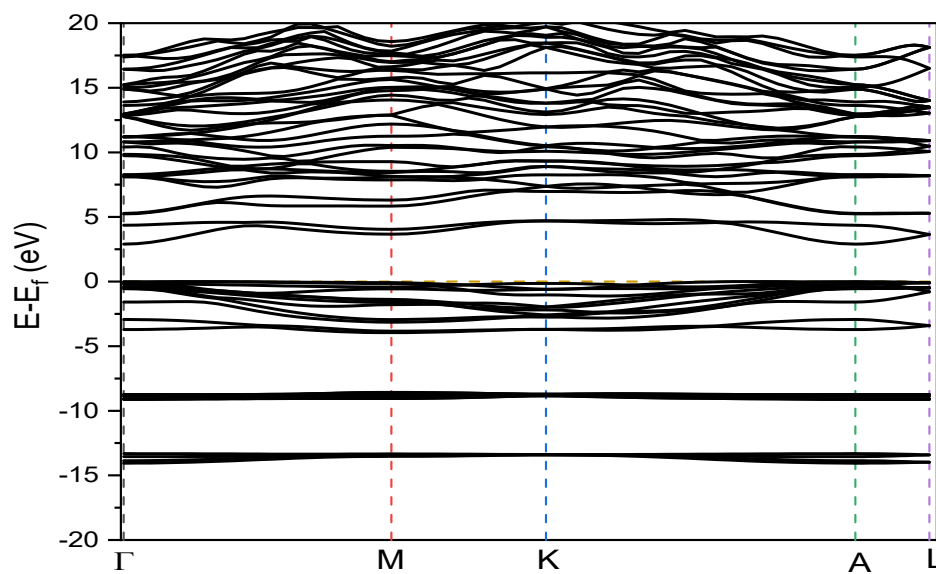


Figure II.20: Structure de band up calculée pour CdBr₂ avec TB-mBJ.

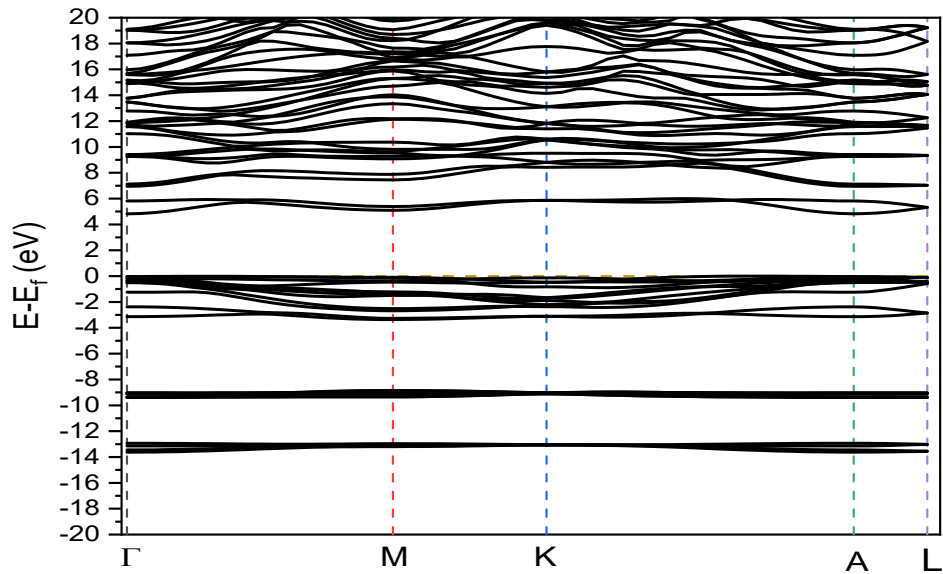


Figure II.21: Structure de band Down calculée pour CdBr₂ avec TB-mBJ.

Les résultats obtenus dans le tableau suivant :

Tableau II.5. Les valeurs de band gap sans et avec TB-mBJ

	Sans TB-mBJ	Avec TB-mBJ
up	2,9 eV	4,9 eV
down	2,9 eV	4,9 eV

II.3.3. Propriétés optiques

II.3.3.1. Fonction diélectrique

Les figure II.22 et II.23 reflète le résultat de calcul de la fonction diélectrique par LSDA+U sans et avec TB-mBJ.

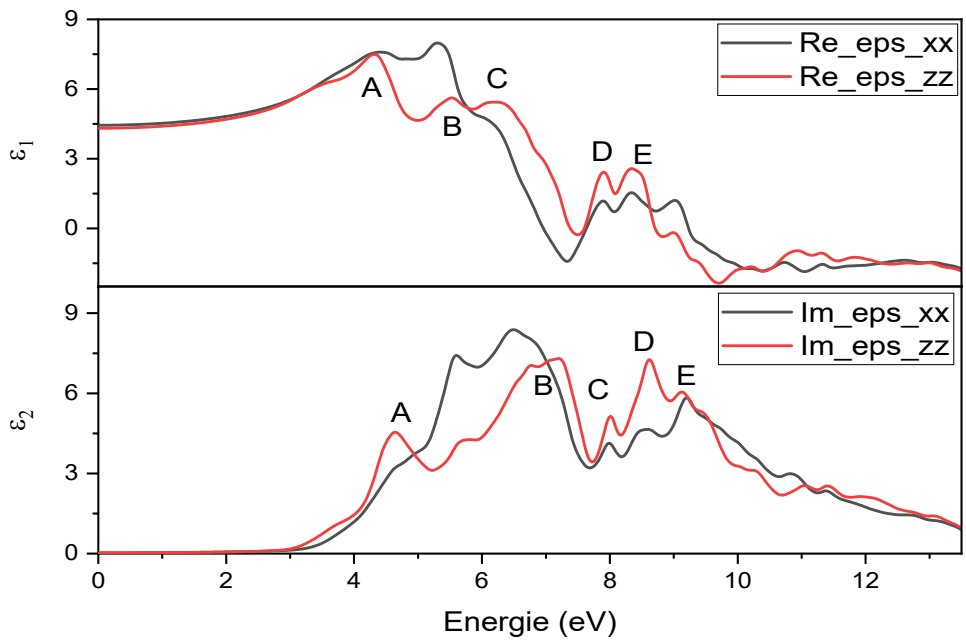


Figure II.22:Parties imaginaires $\epsilon_2(\omega)$ et réelles $\epsilon_1(\omega)$ calculées de la fonction diélectrique pour CdBr_2 sans TB-mbj.

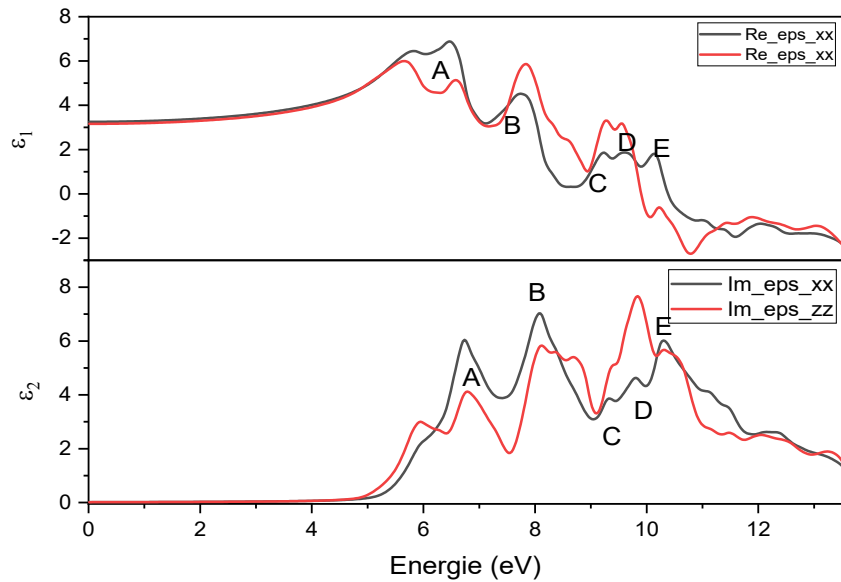
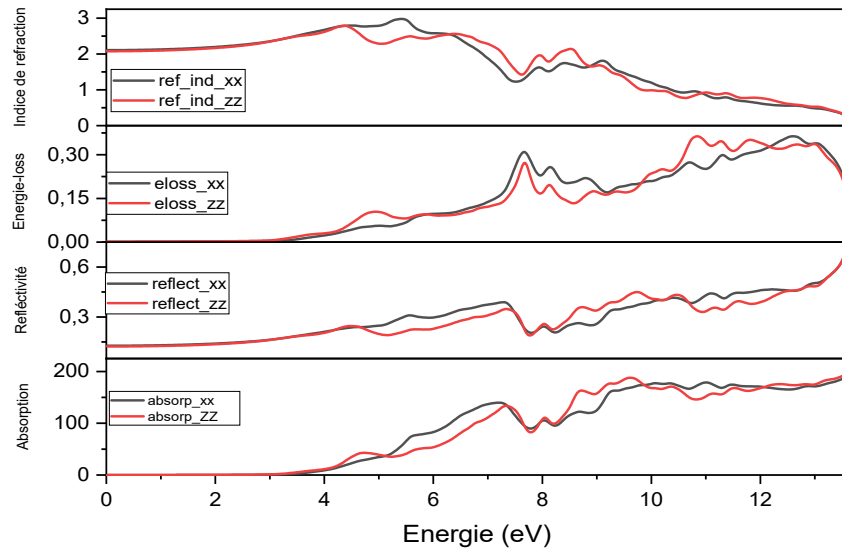


Figure II.23:Parties imaginaires $\epsilon_2(\omega)$ et réelles $\epsilon_1(\omega)$ calculées de la fonction diélectrique pour CdBr_2 Avec TB-mBJ.

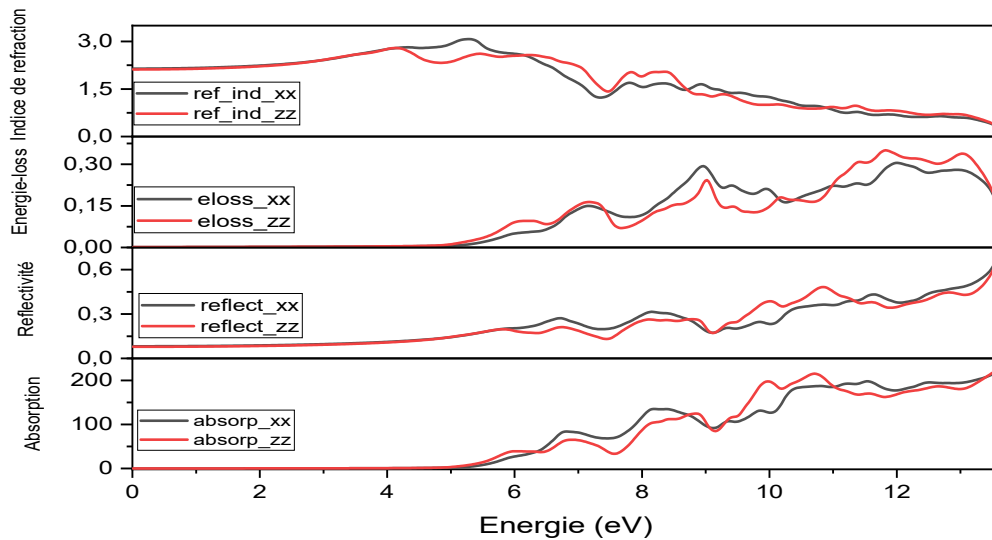
II.3.3.2. Autres propriétés optiques linéaires

Les autres propriétés peuvent être calculées à partir des deux parties réelles et imaginaires de la fonction diélectrique.

Les résultats obtenus sans et avec TB-mBJ sont illustrés dans les figures II.24 et II.25.



Figures II.24: Propriétés optiques calculées pour CdBr₂ en fonction de l'énergie du photon incident (eV) sans TB-mbj.



Figures II.25: Propriétés optiques calculées pour CdBr₂ en fonction de l'énergie du photon incident (eV) avec TB-mbj.

Chapitre II: Expérimental, résultats et discussion

Les résultats obtenus dans le tableau suivant :

Tableau II.6. Propriétés optiques calculés pour CdBr₂ Sans et Avec TB-mBJ.

			Gap optique	Indice de réfraction	Perte d'énergie Energie eV	Réfectivité Energie eV
Sans TB- mBJ	xx	3,116	2,108	0,364 12,6124	0,205 7,796	
	zz	2,952	2,076	0,363 10,844	0,330 10,954	
Avec TB- mBJ	xx	4,531	1,803	0,293 8,967	0,173 9,102	
	zz	4,422	1,778	0,350 11,823	0,342 11,905	

II.4. comparaison entre DFT et DFT+u

Tableau II.7. comparaison entre DFT et DFT+u

	DFT		DFT+U			
	Sans TB-Mbj		Sans TB-mBJ		Avec TB-mBJ	
	xx	Zz	xx	zz	xx	zz
Gap optique	3.007	2.871	3.116	2.952	4.531	4.422
Indice réfraction	2.143	2.117	2.108	2.076	1.803	1.778
Perte d'énergie Energie (ev)	0.408 12.558	0.399 12.639	0.364 12.6124	0.363 10.844	0.293 8.967	0.350 11.823
Réfectivité Energie (ev)	0.207 7,633	0.195 7,633	0.205 7,796	0.330 10,954	0.173 9,102	0.342 11,905
Gap (Ev)	2.7		2.9		4.9	

Conclusion

Selon nos résultats, le bromure de cadmium est un semi-conducteur.

Pour les propriétés électroniques et optiques que nous avons calculées, nous concluons que l'approximation de TB-mBJ et l'ajout de paramètre U (DFT+U) améliorent grandement l'estimation.

Références bibliographiques

[1] Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria) (2001). ISBN 3- 9501031-1-2.

[2] Houari, M., Bouadjemi, B., Haid, S., Matougui, M., Lantri, T., Aziz, Z., Bouhafs, B.. Semiconductor behavior of halide perovskites $AGeX_3$ (A= K, Rb and Cs; X= F, Cl and Br): first-principles calculations. Indian Journal of Physics 94(4) (2020) 455-467.

Conclusion Générale

Conclusion générale

Au cours de cette étude, nous avons examiné les propriétés structurales, électroniques et optiques du bromure de cadmium (CdBr_2) en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et l'approche des ondes planes augmentées linéarisées avec potentiel total (FP-LAPW) mise en œuvre dans le code Wien2k, en utilisant l'approximation LSDA.

Nos résultats indiquent clairement que:

- Le composé CdBr_2 est caractérisé par une liaison Cd-Br ionique.
- Le gap électronique est direct dans le point Γ - Γ .
- Le calcul des propriétés électroniques ont été réalisé en seconde étape, les résultats des structures de bandes de CdBr_2 démontrent un caractère semi-conducteur sans TB-mBJ et qui devient isolant avec l'introduction du potentiel TB-mBJ.
- Finalement, la DFT+U devrait donner des résultats plus exacts, mais la non signification du changement dans les résultats peut être expliquée par le fait que les orbitaux d et f des atomes de Cd et de Br sont totalement remplis et par conséquent le matériau CdBr_2 n'a pas d'électrons libres et donc n'a pas de spin et le coefficient U agit spécifiquement sur l'état du spin des matériaux.

عنوان المذكرة: دراسة الخصائص الفيزيائية لمركب بروميد الكاديوم

المؤطر: بلحاج صورية

الاسم: وداد

اللقب: خليفي

الاسم: شيماء

اللقب: عمرون

ملخص: في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص الالكترونية و الضوئية لمادة بروميد الكاديوم $CdBr_2$ من اجل القيام بهذه الدراسة قمنا باستعمال المبادئ الأولية باستعمال طريقة الأمواج المستوي المتزايدة خطيا FP-LAPW المدخلة في الشفرة Wien2k الذي يقوم على التقريب LSDA . ومن اجل تحسين النتائج قمنا بإضافة معامل U (LSDA+U) لدراسة هذه الخصائص النتائج أظهرت أن هذه المادة تمتاز بخاصية نصف ناقل والتي تترجم بوجود فجوة طاقة مباشرة و رابطة أيونية. و في النهاية من الخصائص الضوئية استخرجنا قيمة فجوى الطاقة الضوئية وكذلك معامل الانكسار

كلمات مفتاحية: Wien2k، LSDA، $CdBr_2$ ، ...

Memory title: Study of the physical properties of cadmium bromide compound

Name: KHELIFI

First name: Widad

Directed by: BELHADJ Soriya

Name: AMROUN

First name: Chaima

Abstract : This work we studied the electronic and optical properties of cadmium bromide $CdBr_2$ for Doing this study we used the initial principles using the increasingly linear level wave method FP-LAPW inserted into the code Wien2k which is based on LSDA approximation. In order to improve the results, we added a U (LSDA + U) coefficient to study these characteristics.

The results showed that this material has a half-vector characteristic that translates with a direct energy gap and a equivalent bond. And in the end of the photovoltaic properties, we extracted the value of the photovoltaic, as well as the refractive coefficient.

Key words: wien2k, LSDA, $CdBr_2$,...

Titre du mémoire : Étude des propriétés physiques du composé de bromure de cadmium

Nom : KHELIFI

Prénom : WIDAD

Encadreur : BELHADJ SORIYA

Nom : AMROUN

Prénom : Chaima

Résumé : Nous avons étudié les propriétés électroniques et optiques du bromure de cadmium $CdBr_2$ pour En faisant cette étude, nous avons utilisé le première principe en utilisant la méthode d'onde de niveau de plus en plus linéaire FP-LAPW insérée dans le code Wien2k qui est basé sur l'approximation LSDA. Afin d'améliorer les résultats, nous avons ajouté un coefficient U (LSDA + U) pour étudier ces caractéristiques.

Les résultats ont montré que ce matériau a une caractéristique semi-vectorielle qui se traduit par un écart d'énergie direct et une liaison ionique . Et à la fin des propriétés photovoltaïques, nous avons extrait la valeur du photovoltaïque, ainsi que le coefficient de réfraction.

Mots clés : wien2k, LSDA, $CdBr_2$,...