

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
جامعة عمار ثايجي بالأغواط
UNIVERSITE AMAR TELIDJI LAGHOUAT
كلية العلوم
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT Sciences de la Matière



Mémoire de Master

Domaine : Sciences de la matière
Filière : Chimie
Option : Chimie Inorganique

Par : CHOUIREB Amina

THÈME

Etude théorique et expérimentale de quelques propriétés physiques des iodates métalliques optiquement actifs

Soutenu publiquement devant le jury composé de :

<i>Lefkaier Iben Khaldoun</i>	<i>Professeur</i>	<i>UATL</i>	<i>Président</i>
<i>Kaouka Alaeddine</i>	<i>MCA</i>	<i>ENSL</i>	<i>Examineur</i>
<i>Benmoulai Hebboul Zoulikha</i>	<i>MCA</i>	<i>UATL</i>	<i>Rapporteur</i>
<i>Benghia Ali</i>	<i>MCB</i>	<i>UATL</i>	<i>Co-Rapporteur</i>

Année Universitaire 2019-2020

Dédicace

Avec un énorme plaisir, un cœur ouvert et immense joie, que je dédie mon travail :

A mes très chers parents : Aucune dédicace ne saurait exprimer mon respect, mon amour éternel et ma considération pour les sacrifices que vous avez consenti pour mon instruction et mon bien être. Puisse Dieu, le Très Haut, vous accorder santé, bonheur et longue vie et faire en sorte que jamais je ne vous déçoive.

A mon cher oncle : Chouireb Mohamed qui me soutenir et me donne du courage tout le temps. Le Grand Dieu vous accord la bonne santé et longue vie et bonheur.

A ma chère grande mère et la famille Guesmia : pour leurs encouragements tout le temps, merci beaucoup pour vos soutenir. Dieu Puissant vous donne la bonne santé, longue vie et bonheur.

A ma sœur et mon petit frère : Djamila Manal, Mohamed El-Amine.

A ma belle tante : B.Fatima Puisse Dieu, le Très Haut, vous accorder santé, bonheur et longue vie

A mes chers oncles : Mr. Saadi Ahmed et Mr. Mecheri Belkacem Que dieu vous protège et vous accord un brillant avenir avec une vie pleine de joie, de bonheur et succès.

A la famille Chikhaoui et Ma conseillère, et amie fidèle : Chikhaoui Rihab qui m'ont assisté dans les moments difficiles. Je vous en suis très reconnaissante, et je ne vous remercierai jamais assez pour vous amabilité, vous générosité, vous aide précieuse.

A toutes mes amies et spécialement mes amies les plus chères : Miloudi Messaouda, Allaoui Sara, Mechraoui Ibtissam, Bendali Braham Ouadjane, Bouziani Messaouda et Labgaâ Fatima Zahra.

Et puis à tous mes collègues dans département de sciences de la matière un par un.

Chouireb Amina

Remerciements

Tous les éloges et les remerciements à mon dieu ALLAH qui m'a donnée la force et la vie pour accomplir mes études.

*Ce travail a été réalisé au laboratoire pédagogique département sciences de la matière Université Amar Telidji de Laghouat, dirigé par l'ingénieur Madame **BENMOULAI Sara** et au laboratoire physicochimie des matériaux LPCM Université Amar Telidji de Laghouat, dirigé par Monsieur **TAOUTI Mohamed Benaballah**, je tiens à les remercier tous d'avoir accueilli dans leurs laboratoires, Je suis très reconnaissante pour la confiance qu'ils m'ont accordée.*

*Je remercie tout particulièrement avec mes plus sincère gratitude mes directeurs de thèse Madame **BENMOULAI HEBBOUL Zoulikha**, maître de conférences à l'université Amar Telidji de Laghouat et Monsieur **BENGHIA Ali** maître de conférences qui ont fait preuve de patience, d'enthousiasme, pour leurs multiples conseils et pour tout le temps qu'ils ont consacré à diriger ce mémoire. J'ai pu bénéficier de leurs expériences et leurs compétences.*

*J'exprime mes sincères remerciements à Monsieur **LEFKAIER Iben Khaldoun** Professeur à l'Université Amar Telidji de Laghouat d'avoir accepté de présider le jury, et à Monsieur **KAOUKA Alaeddine**, maître de conférences à l'école normale supérieure pour m'avoir fait l'honneur d'être l'examineur de ce travail.*

*Je tiens à remercier très chaleureusement Madame **Chikhaoui Rihab** Doctorante au département Science de la matière faculté des Sciences à l'Université Amar Telidji de Laghouat d'avoir déplacer et faire les analyses UV à l'université Larbi Ben M'Hidi d'Oum El Bouaghi.*

Et enfin un grand merci à l'ensemble des membres du LPCM et laboratoire physique des matériaux LPM qui par leurs compétences et leurs gentillesse nous ont permis de réaliser ce travail dans une atmosphère agréable.

L'intelligence, ce n'est pas seulement ce que mesurent les tests, c'est aussi ce qui leur échappe.

EDGAR Morin

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE	1
PARTIE I : UN RAPPEL THEORIQUE	
I- Introduction	4
II-Théorie des bandes et Energie de gap	4
II-1- Définitions	5
1. Bande de valence	5
2. Bande de conduction	5
3. Bande interdite (Energie de gap)	5
II-2- Energie de gap et Température	6
-Variation de la hauteur de la BI en fonction de T	6
II-3- Relation entre E gap et la conductivité	7
1) Matériaux conducteurs	7
2) Matériaux isolants	8
3) Matériaux semi-conducteurs	8
II-4- Relation entre diagramme d'énergie E(k) et les propriétés électroniques	9
III- La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	9
III-1 Approximation de la densité locale (LDA)	10
III-2 Approximation du gradient généralisé (GGA)	11
PARTIE II : ETUDE EXPERIMENTALE	
I - Matériels et méthodes	13
1.1. La spectroscopie infrarouge FT-IR	14
1.2. Préparation des échantillons pour l'analyse	14
2.1. Spectrophotomètre Ultraviolet	15
2.2. Préparation d'échantillons	16
2.3. Calcul de l'Egap expérimentale	16
II- Synthèse et caractérisation des iodates métalliques	17
1. Mode opératoire	17
III- Résultats et discussion	21
1. Caractérisation par IR	21
2. Caractérisation par UV	22

2.1. Détermination d'énergie de gap (Egap)	22
2.2. Résultats d'UV	24
CONCLUSION GENERALE	26
REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	27

La liste des abréviations

ONL	Optique Non Linéaire
DFT	La théorie de la fonctionnelle de la densité
MP	Materials Project
LDA	Approximation de la densité locale
LSD	Densité de rotation locale
GGA	Approximation du gradient généralisé
E gap	Energie de gap
BV	Bande de valence
BC	Bande de conduction
BI	Bande interdite
FT-IR	Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier
ATR	Réflectance totale atténuée
UV	Ultraviolet
LIDT	Seuil de dommage induit par laser

La Liste des figures

Figure	Titre	Page
I	Distribution de Gap et les dij pour des nombreux cristaux IR-NLO typiques (les Oxydes, les Sulfure, les Sélénium et les Tellures, les Halides et les Phiophosphates).	2
II-1	Schéma théorique établi selon la théorie des bandes d'énergie	5
II-2	Energie de gap en fonction de la température	7
II-3	Schéma des bandes d'énergies dans le cas des matériaux conducteurs.	7
II-4	Schéma des bandes d'énergies dans le cas des matériaux isolants	8
II-5	Schéma des bandes d'énergies dans le cas des matériaux semi-conducteurs.	8
II-6	Diagramme d'énergie E(k) permet de comprendre les propriétés électriques.	9
III-1	Spectromètre JASCO FT/IR-4200.	13
III-2	Préparation des échantillons de A à D.	15
III-3	Spectrophotométrie JASCO V-630.	15
III-4	Schéma de principe du mode opératoire.	18
III-5	Spectres infrarouges des produits obtenus (sources nitrates métalliques).	21
III-6	Spectres infrarouges A et B des produits obtenus (sources chlorures métalliques).	22
III-7	Détermination graphiquement d'Egap du produits obtenus (sources nitrates).	23
III-8	Détermination graphiquement d'Egap du produits obtenus (sources chlorures).	24

La Liste des tableaux :

Tableau	Titre	Page
II-1	Paramètres du modèle Thurmond Eg_0 , α , β .	6
III-1	Différentes quantités des réactifs (nitrates) utilisées pour chaque réaction.	19
III-2	Différents rendements obtenus dans chaque réaction.	19
III-3	Différentes quantités des réactifs (chlorures) utilisées pour chaque réaction.	20
III-4	Différents rendements obtenus dans chaque réaction.	20
III-5	Comparaison des Eg théoriques et expérimentales de quelques iodates caractérisés par UV.	25

Introduction générale

Lors des dernières décennies, la physique du solide a connu un essor impressionnant de par la mise au point des nouvelles techniques de calcul, plus rapides, plus précises et permettant d'obtenir avec une grande rapidité les propriétés de nombreux matériaux. Depuis 1990, des méthodes de calculs basées sur les lois fondamentales de la mécanique quantique ont été largement appliquées à l'étude des matériaux et ont contribué à améliorer notre compréhension de l'origine de leurs propriétés. En effet, il est possible de caractériser strictement les propriétés de nombreux solides en appliquant ces méthodes. Même si l'étude pratique des systèmes complexes nécessite quelques approximations, les résultats ne dépendent d'aucun paramètre empirique raccordable. C'est la raison pour laquelle ces techniques sont souvent appelées calculs ab-initio [1]. Récemment, les semi-conducteurs attirent une attention croissante de la communauté scientifique et industrielle en raison de leurs applications multiples. L'étude des semi-conducteurs, que ce soit par des procédés expérimentaux ou par des modèles théoriques, permet d'avoir une vision détaillée sur leurs propriétés physiques (électroniques, structurales.....) et d'augmenter ainsi leurs potentialités d'applications technologiques [2].

Plusieurs travaux récents ont été orientés vers la prédiction théorique, les techniques de la synthèse et caractérisation des nouveaux matériaux optiquement actifs prometteurs pour une bonne fonctionnalité en Optique Non Linéaire dans le domaine IR-moyenne. Ceci a permis la création d'un grand nombre de matériaux utilisés actuellement dans les nouvelles technologies (les domaines de l'optique intégré, des télécommunications, du stockage optique de l'information, de la spectroscopie, de la médecine de la télémétrie, de la détection de polluants [3-4].

Le développement de la technologie de la conversion de fréquence (Génération de second harmonie) dans la région infrarouge IR est fortement lié à la découverte des nouveaux matériaux optiques non linéaires transparents dans la région IR. Le problème actuel est comment atteindre un matériau candidat qui montre à la fois un bon équilibre entre le seuil d'endommagement laser et le coefficient optique non linéaire ONL (dij). La recherche des nouveaux candidats qui vérifient les deux conditions à la fois reste toujours un grand défi. Prenons un exemple les sulfures métalliques la zone de préférence en vert (**figure I-1**) est particulièrement occupés par qui ont été

systématiquement étudiés pour les applications ONL dans la région spectrale infrarouge moyenne (IR moyenne) [5-6].

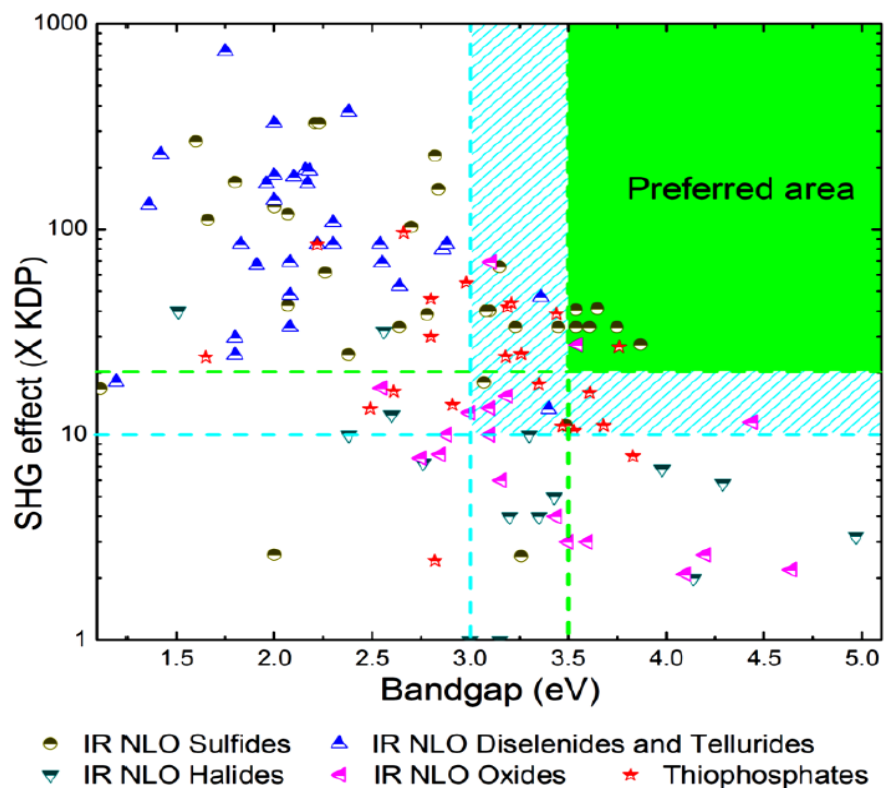


Figure I-1 : La distribution de E_{gap} et les d_{ij} pour des nombreux cristaux IR-NLO typiques (les Oxydes, les Sulfure, les Sélénium et les Tellures, les Halides et les Phiophosphates) dans les régions couvertes par le bleu et le vert, la région ($E_{gap} > 3,0$ eV et $d_{ij} > 10 \text{ \AA} \sim \text{KDP}$) et la région de préférence ($E_{gap} > 3,5$ eV et $d_{ij} > 20 \text{ \AA} \sim \text{KDP}$), respectivement, [5]

Ce travail s'intéresse à l'étude expérimentale de plusieurs iodates métalliques vu leurs propriétés remarquables, notamment leur stabilité thermique et leur domaine de transparence. Un intérêt particulier sera accordé à la balance entre la valeur de bande interdite E_{gap} d'un côté et la susceptibilité optique non linéaire d_{ij} d'autre coté. Comme première étude nous allons déterminer les valeurs de l'énergie de gap expérimentalement de plusieurs composés d'iodate métalliques en utilisant la technique spectroscopie UV-V afin de comparer les valeurs expérimentales avec les valeurs théoriques. Les propriétés électroniques et optiques linéaires sont déjà calculés et publiés en Materials Project.

Dans la première partie de ce manuscrit situe le cadre de recherche effectué un bref rappel théorique sur l'énergie de gap et la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT avec ses deux approximations LDA et GGA. Dans la seconde partie expérimentale nous présentons les différents matériels et techniques utilisés ensuite une description du

protocole expérimental dédié à l'élaboration des iodates métallique suivie d'une caractérisation rouge et ultra-violette.

Enfin, une conclusion dressera le bilan de cette étude et s'ouvrira sur les perspectives suscitées par ces travaux.

Partie I : Un rappel théorique

I- Introduction

L'application des lois de la mécanique quantique aux isolants, métaux et semi-conducteurs solides conduit à les traiter comme des sortes de molécules dont les niveaux d'énergie si serrés qu'ils forment ce qu'on appelle des bandes d'énergie. Dans un semi-conducteur, la bande de valence et celle de conduction sont séparées par un « **gap** ». Il est toutefois possible d'apporter facilement de l'énergie à des électrons situés dans l'état d'énergie minimale du solide, c'est-à-dire la bande de valence, pour qu'ils peuplent la bande de conduction. Ils laissent alors dans la bande de valence des trous qui se comportent comme des particules de charge opposée à celle des électrons. Trous et électrons peuvent s'attirer et produire des états liés. Globalement neutres, ces états composés d'un électron et d'un trou forment des « excitons », que l'on peut trouver aussi dans des isolants [7].

Ce présent chapitre constitue d'un rappel sur qu'est-ce que l'énergie de gap ? Et Pourquoi certains matériaux sont-ils conducteurs et d'autres isolants ? La deuxième partie de ce chapitre est consacré une vue d'ensemble sur la DFT.

II-Théorie des bandes et Energie de gap

La théorie des bandes est un modèle quantique en physique des solides qui détermine les énergies possibles des électrons dans un solide et permet de comprendre la notion de conductivité électrique. Il est issu de la théorie des orbitales moléculaires (**figure II-1**).

Dans un solide, les niveaux d'énergie permis sont confinés dans une bande dont la largeur, de l'ordre de l'électronvolt, dépend du cristal et du recouvrement des orbitales atomique.

Les solides ont une structure de bandes ; on distingue les bandes d'énergie permises, et les bandes d'énergie interdites. Les bandes d'énergie se remplissent selon la loi statistique de Fermi : on montre qu'à 0 K, les électrons occupent tous les niveaux d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi, ou niveau de Fermi. Sa valeur est caractéristique du cristal considéré [8].

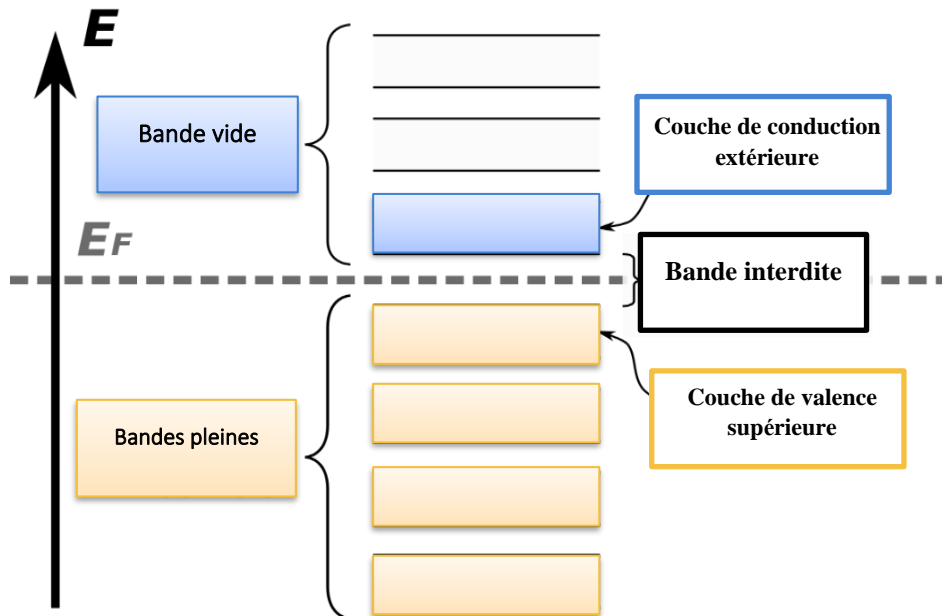


Figure II-1 : Schéma théorique établi selon la théorie des bandes d'énergie
 Chaque bande de valences construit à partir de deux électrons (l'un up et l'autre down)
Ces bandes peuvent être :

- Ou des bandes permises (successivement : les orbitales saturées, puis la couche de valence supérieure, puis une bande de conduction extérieure à l'atome).
- Ou bien des bandes interdites (dites aussi "**gap**"), sises à une distance (énergétique) plus ou moins grande et qui seront franchies quand l'énergie de l'électron sera suffisante (grâce à variation de température ou à action d'un agent externe).

II-1- Définitions

1. Bande de valence :

Dans la théorie des bandes, la bande pleine est les bandes permises (successivement : les orbitales saturées, puis la couche de valence supérieure (BV)). On notera toujours E_v , l'énergie maximale de cette bande permise [9].

2. Bande de conduction :

La bande d'énergie totalement vide ou partiellement remplie d'énergie la plus élevée s'appelle la Bande de Conduction (BC). On notera toujours E_c l'énergie minimale de cette bande permise [9].

3. Bande interdite (Energie de gap) :

C'est "l'espace" ou "intervalle d'énergie" qui sépare les bandes de valence et de conduction Il représente donc une valeur d'énergie que les électrons doivent absorber pour passer de la première à la seconde [10].

$$E_{\text{gap}} = \text{Min}(E_c) - \text{Max}(E_v) \text{ eV} \dots\dots\dots(1)$$

II-2- Energie de gap et température

E_g dépend de la température. En effet cette énergie est le résultat de deux effets : soit un changement en volume due à la variation température, et une dispersion électron-photon qui dépend aussi de la variation de cette température, qui fait varier le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction. L'énergie du gap dépend de la température selon la loi ci-dessous énoncée par Thurmond (1975) et qui s'exprime par :

$$E_g(T) = E_{g0} - \alpha T^2 / (T + \beta) \dots\dots\dots(2)$$

Où :

E_{g0} : hauteur de la BI à 0 °K.

T : température en °K.

α : constantes en eV/°K.

β : constantes en °K

➤ Variation de la hauteur de la BI en fonction de T :

Au **tableau II-1** suivant, sont regroupés les paramètres du modèle : E_{g0} , α , β de Thurmond pour le Silicium Si, le germanium Ge et l'arséniure de gallium AsGa. La **figure II-2** présente l'allure de la courbe $E_g = f(T)$.

Tableau II-1 Les paramètres du modèle Thurmond E_{g0} , α , β

	E (0 °K) (eV)	α (eV/°K⁻¹)	β (°K)
Si	1,170	$4.730 * 10^{-4}$	636
Ge	0,7437	$4.774 * 10^{-4}$	235
AsGa	1,519	$5,405 * 10^{-4}$	204

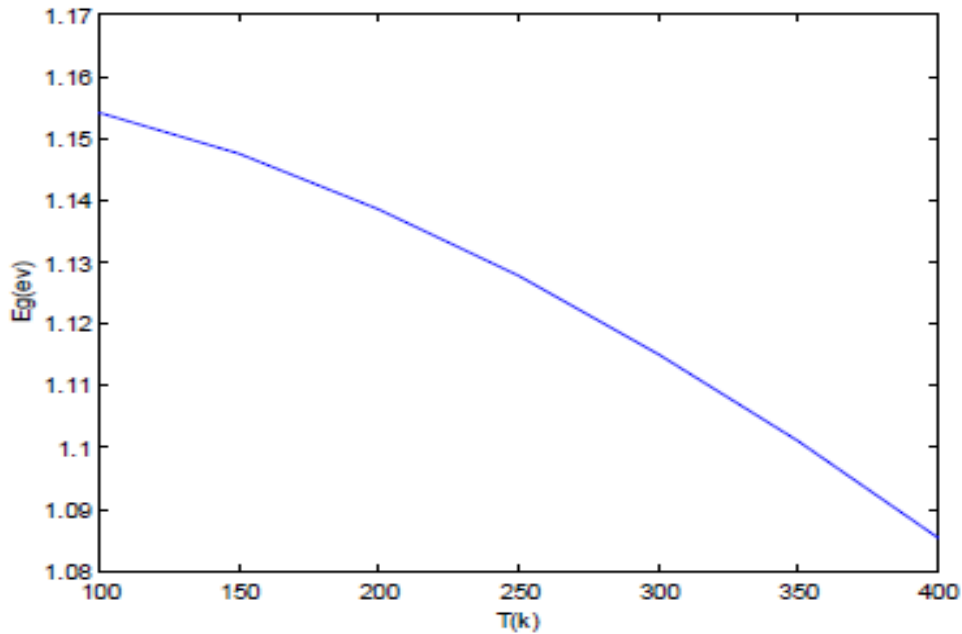


Figure II-2: Energie de gap en fonction de la température [11]

On remarque pour une grande variation de la température (delta T de 300 k) la valeur de gap ne change seulement de 0.05 eV. Cela justifie les valeurs de Egap de DFT (à 0 K) ait des valeurs valides.

II-3- Relation entre E gap et la conductivité

1) Matériaux conducteurs

Pour les conducteurs (**figure II-3**), la bande de valence et la bande de conduction se chevauchent. Les électrons et avec une très faible excitation peuvent donc passer directement dans la bande de conduction et circuler dans tout le solide. La conductivité est bonne [12].

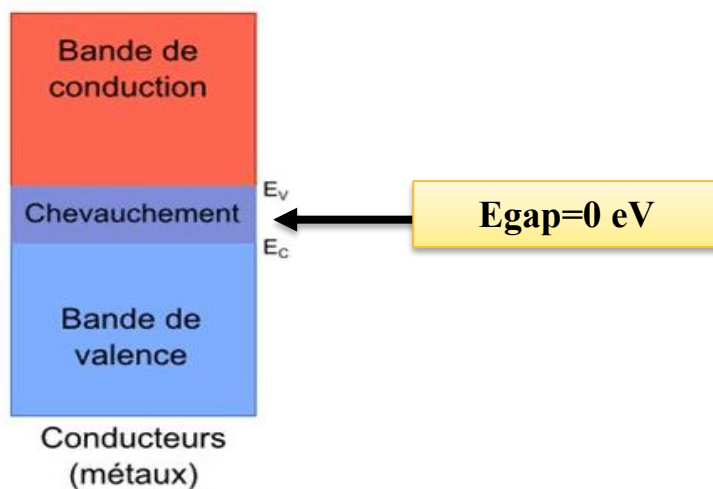


Figure II-3: Schéma des bandes d'énergies dans le cas des matériaux conducteurs.

2) Matériaux isolants

Pour les isolants (**figure II-4**), la bande de valence et la bande de conduction sont séparées par un gap (bande interdite) de l'ordre de 6 eV, si on excite l'isolant par cette valeur d'énergie le matériaux va claquer

Cette valeur est trop élevée pour que les électrons passent dans la bande de conduction [12].

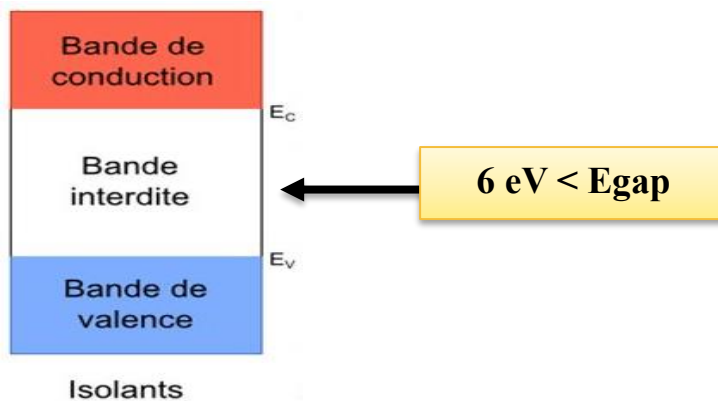


Figure II-4 : Schéma des bandes d'énergie dans le cas des matériaux isolants.

3) Matériaux semi-conducteurs

Pour les semi-conducteurs (**figure II-5**), la bande de valence et la bande de conduction sont séparées par un gap plus faible, compris entre 0,5 et 4 eV, mais le plus souvent voisin de 1 eV. Si on apporte cette énergie aux électrons, certains pourront passer dans la bande de conduction et circuler dans le matériau. L'apport d'énergie peut se faire par chauffage, par application d'un champ électromagnétique ou par illumination. A température ambiante la conduction est faible, elle augmente rapidement avec la température [12].

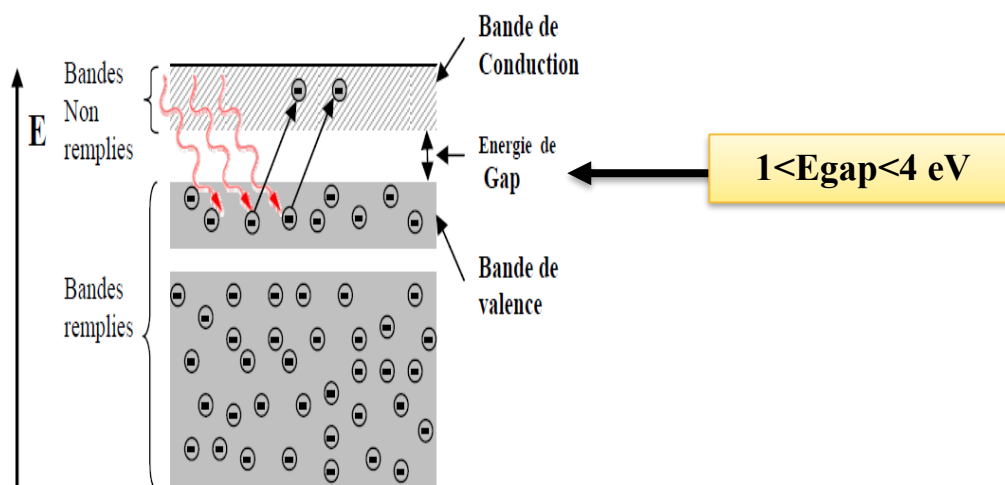


Figure II-5 Schéma des bandes d'énergie dans le cas des matériaux semi-conducteurs.

Les bandes d'énergie correspondent donc aux niveaux d'énergie qui sont permis, ou interdits, aux électrons des éléments ou des composés formant le matériau solide. La dernière bande remplie est appelée bande de valence, la bande immédiatement supérieure bande de conduction. La bande d'énergie comprise entre ces deux bandes est appelée bande interdite ou plus simplement "gap".

C'est la valeur de l'énergie de cette bande qui va fixer les propriétés électroniques du matériau (**figure II-6**).

II-4- Relation entre diagramme d'énergie $E(k)$ et les propriétés électroniques

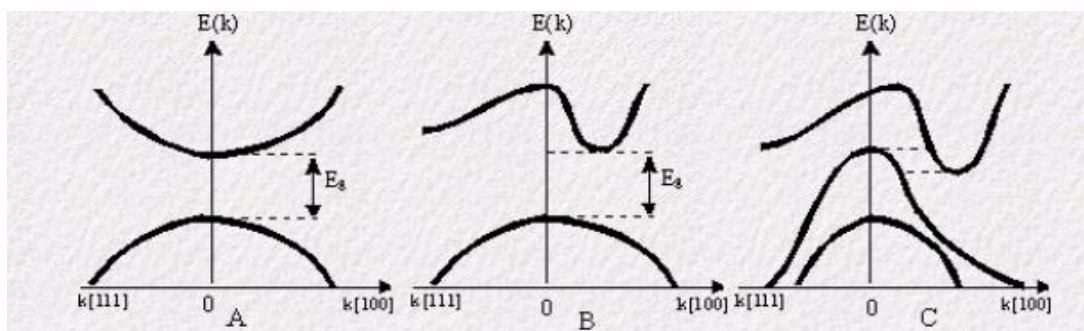


Figure II-6 Diagramme d'énergie $E(k)$ permet de comprendre les propriétés électroniques [13]

- ➔ Dans les cas (A) et (B), il existe E_g : hauteur de la bande interdite (bande gap, energy gap). C'est la différence entre le point le plus bas de la bande supérieure et le point le plus haut de la bande inférieure :
- Cas (A) : Bande interdite dite directe (direct gap) si le minimum de la bande supérieure correspond au même vecteur d'onde que le maximum de la bande inférieure.
- Cas (B) : Bande interdite dite indirecte.
- ➔ Dans le cas (C) : il a recouvrement de la bande inférieure par la bande supérieure, il n'y a pas de bande interdite, tous les niveaux d'énergie sont permis.

III- La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Les calculs ab initio permettent de simuler les propriétés des matériaux en calculant la structure électronique de la matière. Ces simulations permettant d'après la composition chimique et la structure du cristal de prédire ses propriétés :

- **Structurales** : Paramètres de maille, distance interatomique.
- **Electroniques** : Structure de bande, énergie de gap, densité d'état, ...

- **Optiques** : Fonction diélectrique, domaine de transparence, coefficient non linéaire
- **Mécaniques** : Constante élastique, module de Young, stabilité mécanique....

La théorie de la fonctionnelle de la densité électronique consiste en la réduction du problème à plusieurs corps en un problème à un seul corps dans un champ effectif prenant en compte toutes les interactions dans le système. L'idée fondamentale est que les propriétés exactes de l'état fondamentale d'un système formé de noyaux et d'électrons sont des fonctionnelles (fonction d'une fonction) de la seule densité électronique. La DFT est basée sur les deux théorèmes suivants [14] :

1. Il y a une correspondance exacte entre la densité électronique et le potentiel externe d'un système physique donnée ; le potentiel externe est déterminé grâce à une densité unique à une constante près.

L'énergie de l'état fondamental d'un système à plusieurs électrons dans un potentiel externe V_{ext} peut s'écrire :

$$E[\rho(r)] = \int V_{ext}(r)\rho(r)dr + F(\rho(r))..... (1)$$

$\rho(r)$ est la densité électronique, $F(\rho(r))$ est une fonction universelle de ρ qui contient la contribution cinétique et coulombienne à l'énergie qui ne dépend pas du système. Il existe une relation unique à une constante près entre $V_{ext}(r)$ et $\rho(r)$. $F(\rho(r))$ est une fonctionnelle universelle dans le sens où elle ne dépend pas du potentiel extérieur qui agit sur le système.

Le terme $\int V_{ext}(r)\rho(r)dr$ représente l'interaction noyau-électron.

2. La densité électronique qui minimise l'énergie du système est la densité exacte de l'état fondamental (Démontré par le principe variationnel). Il reste donc à déterminer $F(\rho(r))$. Avec :

$$F[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)]..... (2)$$

Comme on ne connaît pas l'expression de T et V_{ee} pour un système d'électrons en interaction, Kohn et Sham ont proposé alors les séparations suivantes :

$$T[\rho(r)] = T_s[\rho(r)] + (T[\rho(r)] - T_s[\rho(r)])..... (3)$$

T_s : Energie cinétique d'un gaz d'électrons sans interactions et de même densité électronique que le système réel, qu'on sait calculer en introduisant une description orbitale.

III-1 Approximation de la densité locale (LDA)

Dans un seul cas modèle, celui du gaz uniforme d'électrons (correspondant assez bien aux électrons de la bande de conduction d'un métal), on connaît les expressions exactes ou avec une excellente approximation des termes d'échange et de corrélation respectivement. Dans cette approximation LDA (Local Density Approximation), la densité électronique est supposée localement uniforme et la fonctionnelle d'échange-corrélation est de la forme [15] :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{XC}(\rho(\mathbf{r})) d\mathbf{v} \dots (4)$$

Son extension aux systèmes sans contrainte de spin (unrestricted) prend le nom de LSD (Local Spin Density). La fonctionnelle d'échange-corrélation distingue les densités α et β sous la forme :

$$E_{XC}^{LSD}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = \int \rho(\mathbf{r}) \mathcal{E}_{XC}(\rho_\alpha(\mathbf{r}), \rho_\beta(\mathbf{r})) d\mathbf{v} \dots (5)$$

III-2 Approximation du gradient généralisé (GGA)

Dans la LDA, on emploie la connaissance de la densité au point \mathbf{r} , alors que dans un système réel la densité est spatialement inhomogène, et par conséquent, il sera plus convenable d'introduire une correction à cette fonctionnelle qui tiendrait compte du taux de variation de $n(\mathbf{r})$. La plupart des corrections à la LDA utilisées aujourd'hui sont nées de l'idée qui consiste à tenir compte des variations locales de la densité $n(\mathbf{r})$, à travers son gradient $\nabla^{\rightarrow} n(\mathbf{r})$. C'est l'approximation du gradient généralisé GGA (Generalised Gradient Approximation). De telles fonctionnelles ont la forme générale donné par l'équation [14] :

$$E_{XC}^{GGA}[n(\mathbf{r})] = \int d^3r \mathcal{E}(n(\mathbf{r}), \nabla^{\rightarrow} n(\mathbf{r})) \dots (6)$$

Les différentes GGA qui existent, diffèrent l'une de l'autre par le choix de la fonctionnelle $\mathcal{E}(n(\mathbf{r}), \nabla^{\rightarrow} n(\mathbf{r}))$. La forme de GGA la plus souvent employée est celle proposée par Perdew-Burke et Enzerhoft.

En conclusion de cette partie, on peut dire que la théorie de la fonctionnelle de la densité est un outil très efficace pour l'étude des systèmes d'électrons en interaction. En effet, elle ramène le problème à N corps en interaction à celui de N corps indépendants qui se déplacent dans un potentiel effectif. L'introduction de ce système de particules

indépendantes a permis de prendre en compte la plus grande partie de l'énergie cinétique. La partie négligée de cette énergie provient du fait que la fonction d'onde totale du système n'est pas égale au déterminant de Slater (autrement la théorie Hartree-Fock serait exacte). L'effort qui doit être fait pour avoir la bonne description de l'énergie cinétique est qu'au lieu de résoudre une seule équation pour la densité, on doit en résoudre N .

Partie II : Etude Expérimentale

I- Matériels et méthodes

1.1. La spectroscopie infrarouge FT-IR

Les spectres infrarouges ont été enregistrés à l'aide d'un spectromètre à transformée de Fourier JASCO FT/IR-4200 dans le domaine 400-4000 cm^{-1} disponible au Laboratoire physicochimie des matériaux (LPCM) Université de Laghouat (**figure III-1**).

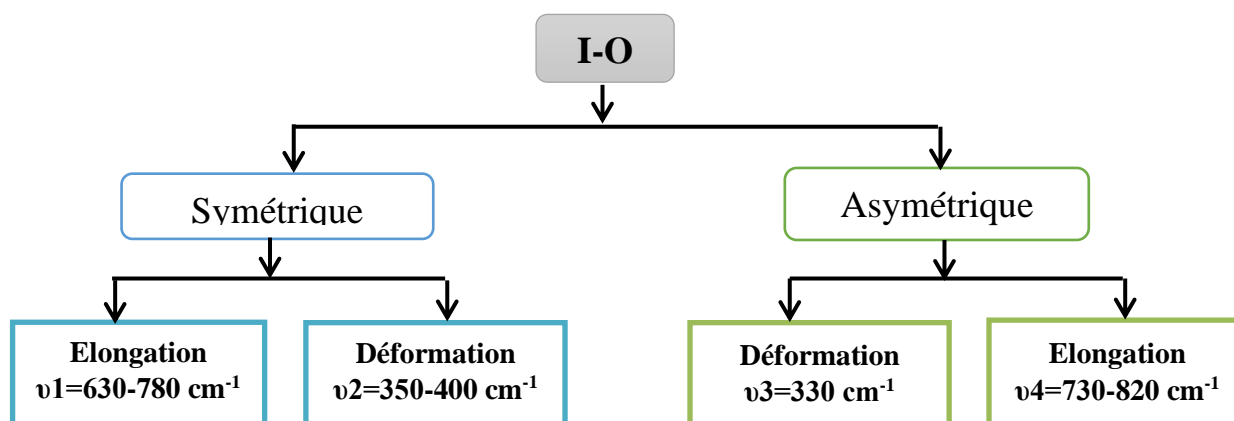


Figure III-1 : Spectromètre JASCO FT/IR-4200.

Le FT / IR-4200 offre d'excellents niveaux de résolution et de sensibilité pour répondre à une variété de demandes IR complexes. Il convient aux applications de recherche, de développement et de contrôle de la qualité où des niveaux élevés d'exactitude et de précision sont requis. Le FT / IR-4200 peut être utilisé pour la mesure d'échantillons solides et gazeux.

Cet appareil est fourni avec le logiciel Spectra Manager développé par JASCO.

Dans l'infrarouge, les énergies mises en jeu sont principalement des énergies de vibration (infrarouge proche) voire de rotation (infrarouge lointain). Les bandes d'absorption observées sur les spectres obtenus ne peuvent pas être interprétées après 650 cm^{-1} (14.4 mm) du fait de la technique utilisée réflectance totale atténuée (ATR). Pour les composés iodates, les bandes d'absorption présentes autour de 750 cm^{-1} sont dues aux vibrations des liaisons I-O du groupement IO_3^- . L'organigramme suivant résume les quatre modes principaux de vibration pour l'anion iodate qui sont actives en infrarouge et en Raman :



Dans les composés iodates, les bandes d'absorption dominantes se trouvent entre 700 cm^{-1} et 800 cm^{-1} , les modes de vibration correspondants sont : ν_1 , $2\nu_2$, ν_3 , $2\nu_4$ et $\nu_2 + \nu_4$. Des travaux ont montré que le mode ν_3 pouvait se fragmenter en deux sous modes ν_{3a} et ν_{3b} . Les bandes de vibration de liaison M-O dans les structures iodates se situent généralement entre 400 cm^{-1} et 700 cm^{-1} .

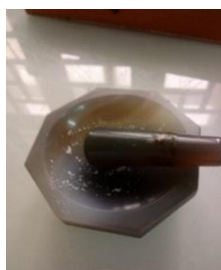
Les absorptions IR les plus fortes sont souvent dues à des groupes très polaires tels que C=O, N-O, O-H. Un composé est considéré comme transparent lorsque la transmittance est supérieure à 50%. Les spectres infrarouges ont été enregistrés en utilisant la technique de F.T.I.R (Infrarouge à transformé Fourier). Le principe consiste à mettre l'échantillon à analyser en contact avec un cristal de diamant. Il est donc directement placé à la surface du cristal, aucun additif n'est nécessaire, c'est une méthode directe. Cette technique permet donc d'observer exclusivement les différentes bandes d'absorption des produits étudiés, il n'y a pas d'ambiguïté possible. Il n'est donc plus nécessaire de réaliser des pastilles de KBr contenant le composé à analyser, s'affranchissant ainsi des problèmes liés à l'hygroscopicité du KBr. Avant d'enregistrer le spectre infrarouge de l'échantillon, il faut purger l'appareil par circulation de dioxyde d'azote de manière à éliminer les gaz atmosphériques. Ensuite, il convient de faire un enregistrement à blanc (détection d'eau et autres gaz résiduels comme CO_2) qui va être soustrait automatiquement au spectre infrarouge de l'échantillon. Dans nos analyses nous n'avons pas purgé l'appareil [16].

1.2. Préparation des échantillons pour l'analyse

Préparation de l'échantillon en pastille de KBr : l'échantillon Iodate métallique en poudre est incorporé à un support qui n'absorbe pas dans l'IR moyen, ici le KBr.

Un mélange homogène à environ 33% d'échantillon et 66 % de poudre KBr est préparé puis finement broyé (**figure III-2-a**). Il est déposé dans un moule (**figure III-2-b**) puis soumis à une très forte pression (60 bars) dans une presse hydraulique (pendant 5-8 min) (**figure III-2-c**). Il est ensuite extrait du moule sous la forme d'une pastille.

La pastille est ensuite placée dans un support (**figure III-2- d**) adapté au spectromètre et le spectre est enregistré en suivant les instructions sur l'appareil.



a : Mortier



b : Pastilleuse



c : Control de pression



d : Support

Figure III-2 : Préparation des échantillons de a à d.

2.1. Spectrophotomètre Ultraviolet UV

Les spectres UV solides ont été enregistrés à l'aide d'un spectrophotomètre JASCO V-630 dans le domaine 190-1100 nm disponible au Laboratoire des Matériaux et Structure des Systèmes Electromécaniques et leur Fiabilité (LMSSEF), de l'Université Larbi Ben M'Hidi d'Oum El Bouaghi. (**figure III-3**)



Figure III-3 : Spectrophotométrie JASCO V-630.

Le V-630 est un instrument économique à usage général avec une conception compacte pour économiser de l'espace sur le banc. Ses excellentes performances spectroscopiques conviennent aux applications de routine, de contrôle qualité et de recherche avec une bande passante spectrale de 1,5 nm. Deux interfaces utilisateur graphiques sont disponibles, y compris un module distant intelligent (IRM) nouvellement repensé avec un écran tactile LCD couleur et le logiciel Spectra Manager II la dernière version du logiciel innovant de spectroscopie multiplateforme de JASCO. Ces deux interfaces de contrôle et d'analyse permettent un contrôle complet du système et un traitement avancé des données.

UV peut être utilisé comme une nouvelle méthode et directe pour estimer avec précision l'énergie de bande interdite E_{gap} des matériaux inorganiques.

L'appareil utilisé contient :

- ✓ Spectrophotomètre à double faisceau avec monochromateur unique.
- ✓ Détecteurs à photodiode au silicium.
- ✓ Gamme 190 à 1100 nm.
- ✓ Passe-bande fixe de 1,5 nm.
- ✓ Numérisation à grande vitesse jusqu'à 8 000 nm / min.
- ✓ Plage de température : 20 à 70 ° C.

2.2. Préparation d'échantillons

On a suivi les étapes suivantes pour effectuer les analyses d'échantillons :

- 1) Calibrer le spectrophotomètre.
- 2) Effectuer un spectre d'Absorbance :
 - a. Remplir la cuvette avec l'échantillon. Pour s'assurer que le transfert est quantitatif, rincer la cuvette deux fois avec l'échantillon et puis remplissez-le sur $\frac{3}{4}$ plein. Assurez-vous que l'extérieur est propre des empreintes digitales, etc...
 - b. Placez la cuve dans le spectromètre dans le bon sens.
 - c. Couvrir la cuve afin d'éviter toute lumière ambiante.
 - d. À partir du spectre d'absorbance collectées, déterminer le maximum d'absorbance (λ_{max}). Répétez la collection des spectres pour obtenir une estimation de l'erreur en λ_{max} .

2.3. Calcul de l'E_{gap} Expérimentalement

C'est une méthode non destructrice consiste à enregistrer la transmission optique des échantillons en fonction de la longueur d'onde et permet de déterminer la valeur de

l'énergie du "Gap optique" par exemple : Egap des iodates métalliques, les indices de réfraction des échantillons, et leurs épaisseurs. Pour cela, nous utiliserons les formules suivantes données par la méthode de Manifacier et Swanepoe [17] :

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(n_1 \lambda_1 - n_2 \lambda_2)} \dots\dots\dots (1)$$

Où d est l'épaisseur de la poudre ; n₁ et n₂ sont les indices de réfraction de la poudre pour les longueurs d'onde λ₁ et λ₂ sont deux maxima consécutifs tirés du spectre alors que n_{1,2} sont tirés de la relation suivante :

$$n_{1,2} = \sqrt{N_{1,2} + \sqrt{N_{1,2}^2 - S^2}} \dots\dots\dots (2)$$

Avec :

$$N_{1,2} = \left(\frac{S^2+1}{2}\right) 2S(T_{max} - T_{min}/T_{max}T_{min}) \dots\dots\dots (3)$$

Où S est l'indice de réfraction du substrat (S_{verre} = 1.54), T_{max} et T_{min} représentent les maxima et minima de la courbe de transmission.

La détermination du gap optique des films est déduite par la relation de T (5) :

$$(\alpha h\nu)^2 = A(h\nu - E_{gap}) \dots\dots\dots (4)$$

Où A est une constante, h constante de Planck, α est le coefficient d'absorption (dépendant de la longueur d'onde) et ν la fréquence d'absorption.

D'ailleurs, on peut calculer les coefficients d'absorption α du matériau par l'utilisation de la relation de Bouguer-Lambert-Beer (6) :

$$T = e^{(-\alpha d)} \dots\dots\dots (5)$$

Si on exprime la transmittance T en (%), le coefficient d'absorption est donné par

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \frac{100}{T} \dots\dots\dots (6)$$

II- Synthèse et caractérisation des iodates métalliques

Différentes méthodes de préparation des iodates métalliques sont présentées dans la littérature. Les iodates métalliques anhydres sont principalement préparés en solution acide à des températures comprises entre 20 et 70°C [18].

1. Mode opératoire

Nous avons préparé les iodates métalliques en utilisant l'iodate de sodium comme source d'iodate et les nitrates ou les chlorures métalliques dans le milieu aqueux à température 70°C l'organigramme suivant résume les conditions et le protocole expérimental suivie. (figure III-4)

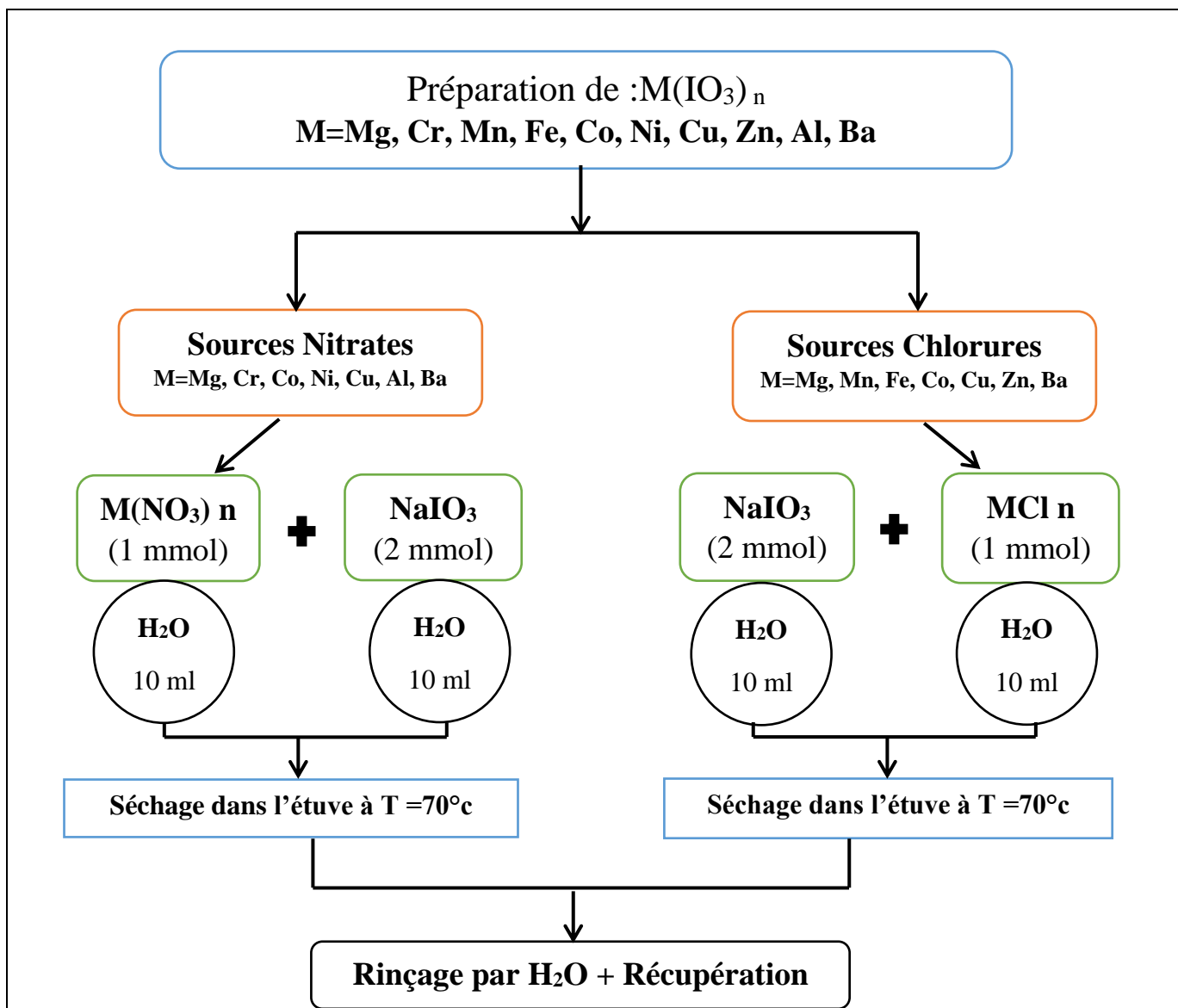
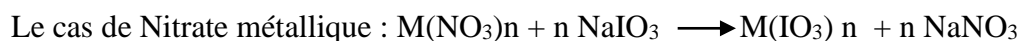
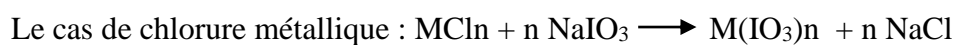


Figure III-4 : Le schéma de principe du mode opératoire.

On mélange séparément 0,02 mol (ou 0,03 mol selon le nombre d'oxydation du métal) de l'iodate de sodium et (0,01 mol) de chlorure (ou nitrate) métallique dans une quantité 10 ml d'eau distillé. Une fois les réactifs sont solubilisés complètement on mélange les deux réactifs, ensuite le mélange réactionnel est mis dans l'étuve à température 70°C pendant quelques jours. Pendant ce temps la réaction par double décomposition va se déclencher comme suit :



Un simple rinçage par l'eau distillé permet de débarrasser des chlorures (ou nitrates) métalliques résidus.

Les tableaux III-1, III-2, III-3 et III-4 rassemblent les quantités en masse des réactifs et les produits de chaque réaction.

Tableau III-1 : les différentes quantités des réactifs (nitrates) utilisées pour chaque réaction.

Source Iodate: NaIO_3	
Solvant : H_2O	
Sources Métalliques	Les masses (g)
$\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	0.241
$\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$	0.261
$\text{Mg}(\text{IO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	0.256
$\text{Co}(\text{IO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	0.291
$\text{Al}(\text{IO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$	0.375
$\text{Cr}(\text{IO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$	0.400
$\text{Ni}(\text{IO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	0.408

Tableau III-2 : Les différents rendements obtenus dans chaque réaction.

Les échantillons	Masse théorique (g)	Masse expérimentale (g)	Rendement %
$\text{Cu}(\text{IO}_3)_2$	0.413	0.404	97.84
$\text{Ba}(\text{IO}_3)_2$	0.487	0.353	73.18
$\text{Mg}(\text{IO}_3)_2$	0.374	0.343	91.84
$\text{Co}(\text{IO}_3)_2$	0.408	0.395	96.66
$\text{Al}(\text{IO}_3)_3$	0.551	0.413	74.89
$\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$	0.576	0.571	99.06
$\text{Ni}(\text{IO}_3)_2$	0.408	0.403	98.65

Tableau III-3 : les différentes quantités des réactifs (chlorures) utilisées pour chaque réaction.

Source Iodate: NaIO₃	
Solvant : H₂O	
Sources Métalliques	Les masses (g)
CuCl₂.2H₂O	0.170
BaCl₂.2H₂O	0.244
MgCl₂.6H₂O	0.203
MgCl₂	0.095
CoCl₂.6H₂O	0.237
FeCl₂.4H₂O	0.198
FeCl₃.6H₂O	0.270
ZnCl₂	0.136
MnCl₂.4H₂O	0.197

Tableau III-4 : Les différents rendements obtenus dans chaque réaction.

Les échantillons	Masse théorique (g)	Masse expérimentale (g)	Rendement %
Cu (IO₃)₂	0.413	0.399	96.64
Ba (IO₃)₂	0.487	0.352	72.3
Co (IO₃)₂	0.374	0.407	99.57
Mg (IO₃)₂	0.374	0.281	75.16
Mg (IO₃)₂	0.408	0.300	80.29
Fe (IO₃)₂	0.405	0.404	99.71
Fe (IO₃)₃	0.580	0.565	97.44
Zn (IO₃)₂	0.415	0.341	82.21
Mn (IO₃)₂	0.404	0.379	93.73

III- Résultats et discussion

1. Caractérisation par IR

Selon la symétrie d'une molécule, les vibrations des liaisons chimiques induisant une variation du moment dipolaire électrique donnent lieu à une absorption du rayonnement infrarouge lorsque l'énergie (longueur d'onde) est proche de l'énergie de vibration de la molécule. La spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier permet de déterminer certain mode de vibration des liaisons chimiques, se basant sur l'absorption d'un rayonnement infrarouge par un matériau.

L'objectif principal de notre étude est de vérifier l'existence des groupements iodates, donc la liaison I-O, qui apparaît dans le domaine de 400 à 900 cm^{-1} par l'analyse du signal spectroscopique Infrarouge. (Voir paragraphe précédent)

Les spectres IR (**figures III-5 et III-6**) réalisés sur les produits récupérés des réactions mener sur les nitrates et les chlorures métalliques montrent bien clairement la présence de la bande caractéristique du groupement iodate ainsi que la présence des bandes caractéristiques de la liaison OH et CO des deux molécules H_2O et CO_2 présentes dans l'atmosphère de la chambre d'analyse FTIR.

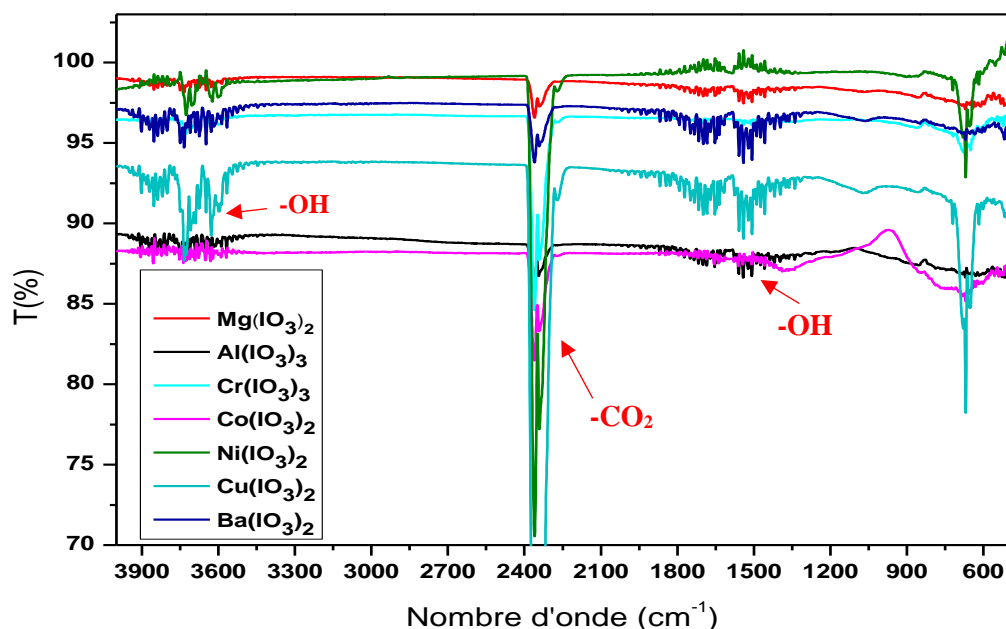


Figure III-5 : Spectres infrarouges des produits obtenus (sources nitrates métalliques)

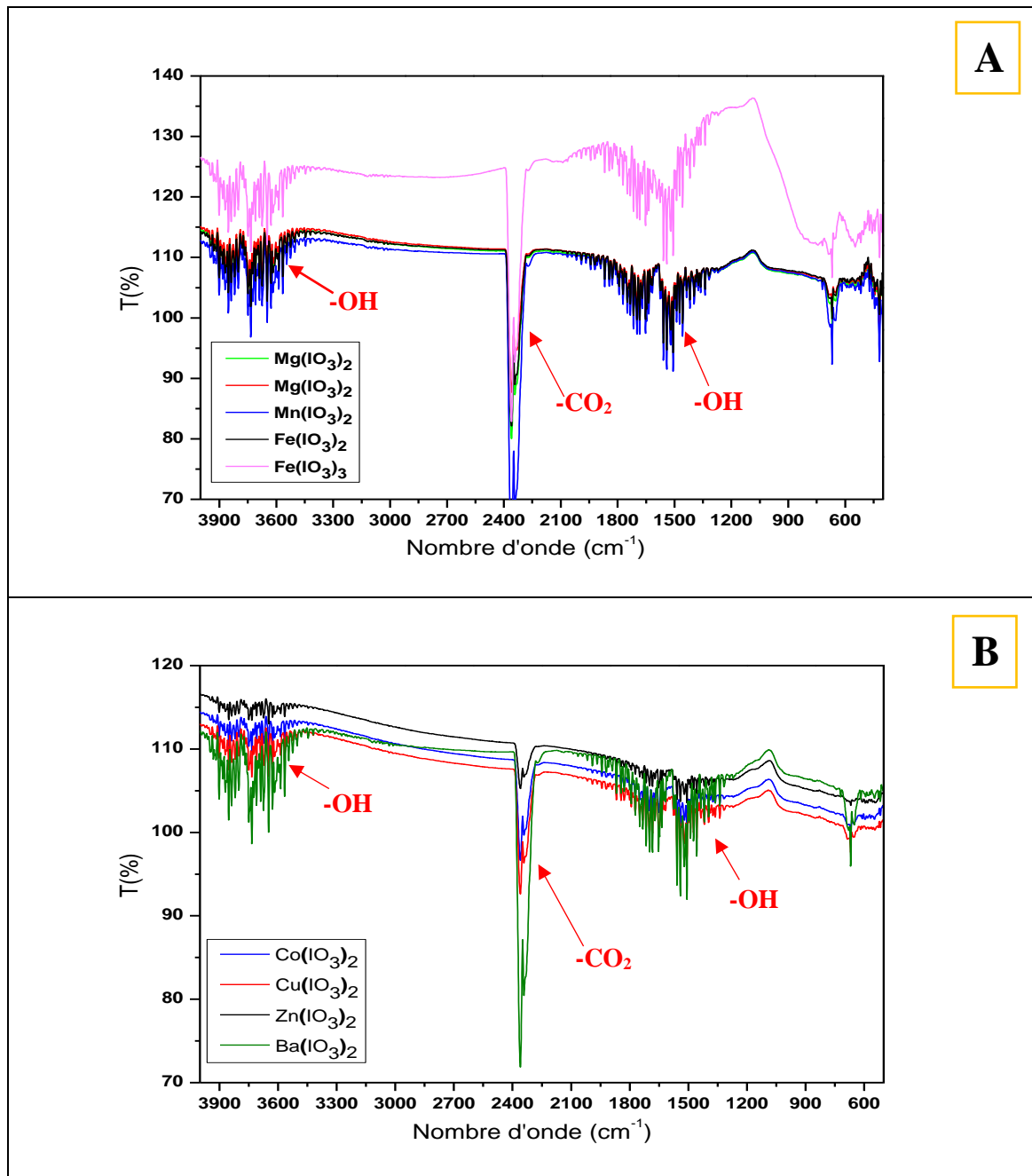


Figure III-6 : Spectres infrarouges A et B des produits obtenus (sources chlorures métalliques)

2. Caractérisation par UV

2.1. Détermination d'énergie de gap (E_{gap})

La largeur de bande interdite de quelques iodates métalliques a été déterminée à partir des spectres de transmission (voir annexe) au moyen d'une méthode graphique par utilisation de la relation (4).

Les figures donnent une illustration de la détermination d' E_{gap} de quelques échantillons.

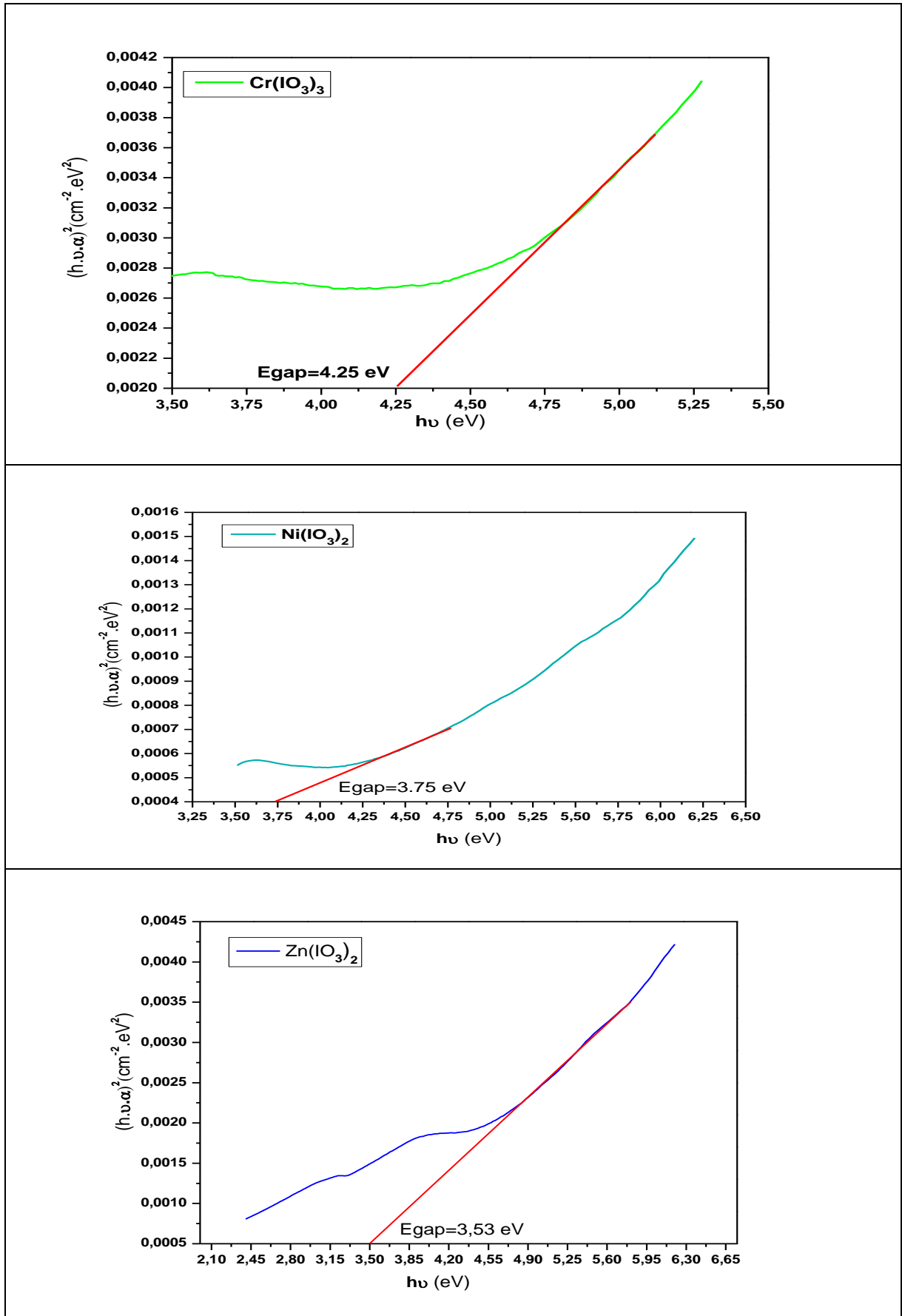


Figure III-7 : Détermination graphiquement d' E_{gap} du produits obtenus (sources nitrates)

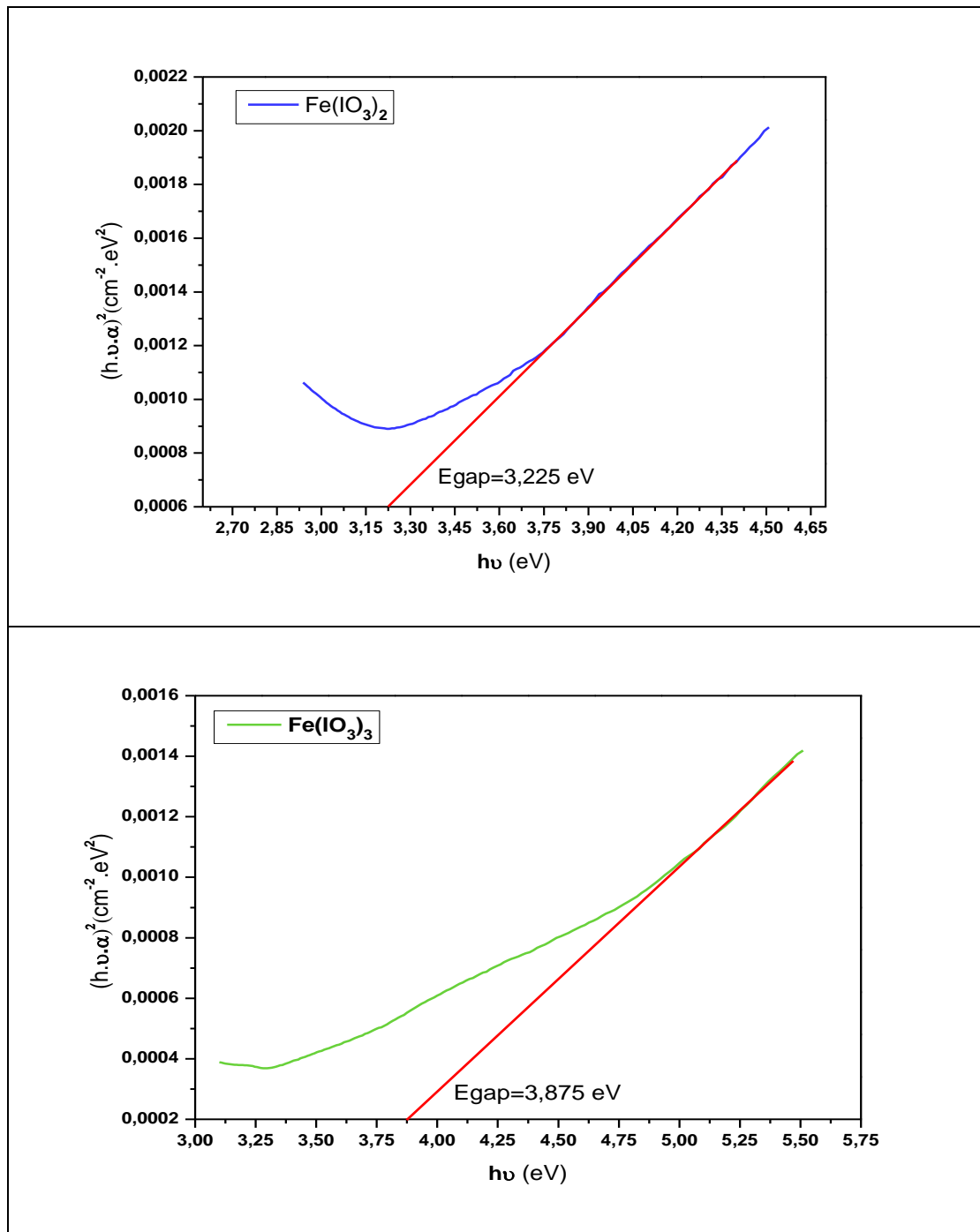


Figure III-8 : Détermination graphiquement d'Egap du produits obtenus (sources chlorures)

2.2. Résultats d'UV

Le **tableau III-5** représente une comparaison entre les valeurs de Eg théorique et Eg expérimentale des cinq matériaux suivants : iodates de chrome, de nickel, de zinc, de fer II et de fer III respectivement, on remarque que les valeurs théoriques publiées par MP sont très proches des valeurs expérimentales comme dans le cas de $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$.

La valeur de 3,75 eV du Ni (IO₃)₂ est très proche de celles 3,03 eV (GS P21) et 3,11 eV (GS P $\bar{3}$ _{1m}) théorique mais on ne peut malheureusement rien dire de plus sur notre échantillon car nous n'avons pas pu faire la diffraction des RX donc nous ne pouvons pas savoir avec certitude la structure cristalline (GS) du produit synthétisé. On remarque aussi l'absence totale des valeurs de Eg théoriques sur les iodates de chrome et de fer II.

Tableau III-5 : comparaison des Eg théoriques et expérimentales de quelques iodates caractérisés par UV

Produits	Egap expérimentale (eV)	Egap théorique (eV)	Groupe d'espace	Références d'Egap théorique
Cr (IO ₃) ₃	4.250 eV	/	/	/
Fe (IO ₃) ₂	3.225 eV	/	/	/
Fe (IO ₃) ₃	3.875 eV	2.469 eV	P6 ₃	mp-23069
Ni (IO ₃) ₂	3.750 eV	2.788 eV	P b c n	mp-772376
		2.850 eV	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	mp-779904
		0 eV	P21/c	mp-780326
		3.112 eV	P $\bar{3}$ _{1m}	mp-1180066
		3.038 eV	P2 ₁	mp-755246
Zn (IO ₃) ₂	3.530 eV	3.198 eV	P2 ₁	mp-23360

Conclusion générale

En science des matériaux, il est important que les scientifiques connaissent les propriétés de la matière car tout est constitué de matière. Chaque type de matière a des caractéristiques chimiques et physiques différentes et pour cela les scientifiques doivent connaître et comprendre ces caractéristiques pour effectuer des calculs.

Les iodates métalliques sont des matériaux clés utilisés dans plusieurs domaines. Les travaux de ce mémoire ont porté essentiellement sur la synthèse et la caractérisation pour objectif l'étude de propriété électronique (énergie de gap) de ces matériaux. Car la valeur de l'Energie de gap dépend fortement du seuil de dommage laser (LIDT) dans le cristal. Pour un bon cristal NLO IR moyen, la valeur de E_g doit être au moins supérieur à 3,0 eV (de préférence au-delà de 3,5 eV), ce qui est suffisant pour un haut seuil de l'endommagement optique [6]. Nos matériaux choisis sont synthétisés par les procédés de chimie douce et caractérisées par l'infrarouge FTIR et l'ultraviolet solide UV solide. Ce travail avait pour étude théorique et expérimentale de propriété électronique E_{gap} de la famille iodates ou le but principal est de faire une comparaison entre les valeurs calculées par DFT et les valeurs expérimentales.

Les résultats obtenus nous ont permis de conclure que la méthode de synthèse est représentée dans ce manuscrit pour essayer d'élaborer une famille des iodates, et la synthèse de chimie fine à basse pression est relativement réussie ou que nos efforts expérimentaux ne semblent pas vains en raison de les rendements obtenus.

L'énergie de gap de Cr (IO₃)₃, Fe (IO₃)₃, Fe (IO₃)₂, Ni (IO₃)₂ et Zn (IO₃)₂, qui a été déterminée à partir des spectres de transmission, ont des valeurs de l'ordre de 3.225 à 4.25 eV. Nous avons remarqué aussi l'absence des informations sur l'énergie de gap de Cr (IO₃)₃ et Fe (IO₃)₂ on a déterminé leurs valeurs expérimentales 4.250 et 3.225 eV respectivement ces valeurs sont au-delà 3,00 eV donc les deux composés sont des bons candidats pour l'ONL. Les iodates métalliques est une famille de matériaux possède la non centrosymétrie et des propriétés très importantes : une bonne stabilité thermique et chimique, un très large domaine de transparence...etc. et grâce ces conditions, les iodates métalliques potentiels pour l'ONL.

Références bibliographiques

- [1] S. CHELLI, Thèse de Doctorat, Université Badji Mokhtar, Annaba (2015).
- [2] S. KHOUALDIA, Etude des propriétés structurales et électroniques des Semi-conducteurs binaires CaX (X=S, Se, Te), Mémoire de Master, Université Larbi Tébessi, Tébessa (2016).
- [3] S. YAN, Synthèse et étude structurales de complexes à oxo-anion de l'iode (V) : Vers de nouveaux matériaux pour l'optique non linéaire quadratique. Thèse de Doctorat, Université Joseph Fourier-Grenoble, France (2010).
- [4] W. CHEN ; G. MOURET,.; D. BOUCHER, ; F. K. TITTEL , Mid-infrared trace gas detection using continuous wave difference frequency generation in periodically poled RbTiOAsO₄. Appl. Phys. 873-876 B72 (2001).
- [5] L. KANG, M. ZHOU, J. YAO, Z. LIN, Y. WU, C. CHEN , J. AM. CHEM, Soc, 137 DOI : 10.1021/jacs.5b07920 (2015) .
- [6] A. BENGHIA, Étude et prédiction théoriques des propriétés physiques de quelques chalcogénures fonctionnelles., Thèse de Doctorat UATL (2018).
- [7] L. SACCO, journaliste, Les droplettes, nouvelles quasiparticules de la physique du solide, SCIENCES, Futura-sciences, France (2014).
- [8] FUTURA-SCIENCES, Théorie des bandes, SCIENCES, France.
- [9] B. BOITTIAUX, Énergie des électrons dans un cristal, Physique de l'Etat Solide Université Laval, Canada (2004).
- [10] NANOTECHNOLOGIES, Gaps et bandes d'énergie, l'énergie photovoltaïque (2014).
- [11] C. ZIANI , Mise en évidence des effets de la température sur les paramètres du modèle EKV, Influence de la température sur le comportement Physique Et électronique des transistors MOS, Université Tlemcen, Algérie.
- [12] R. VALLS ; Dr. R. FREZE , Propriétés et structure des semi-conducteurs, Chimie de solides, Université Aix-Marseille (AMU), France.
- [13] J. P. COLINGE , F. VAN DE WIELE , Physique des dispositifs semi-conducteurs , De Boeck.wesmael , Département De Boeck Université Paris , Bruxelles (1996).
- [14] S. BENYETTOU, Calcul de premier principe de quelques propriétés physiques de quelques alliages semi-conducteurs, Thèse de Doctorat, Université Mohamed Khider de Biskra, Algérie (2016).

[15] P. CHAQUIN (LCT-UPMC), Cours : pratique de la chimie théorique M1-M2, Université Pierre et Marie Curie, France.

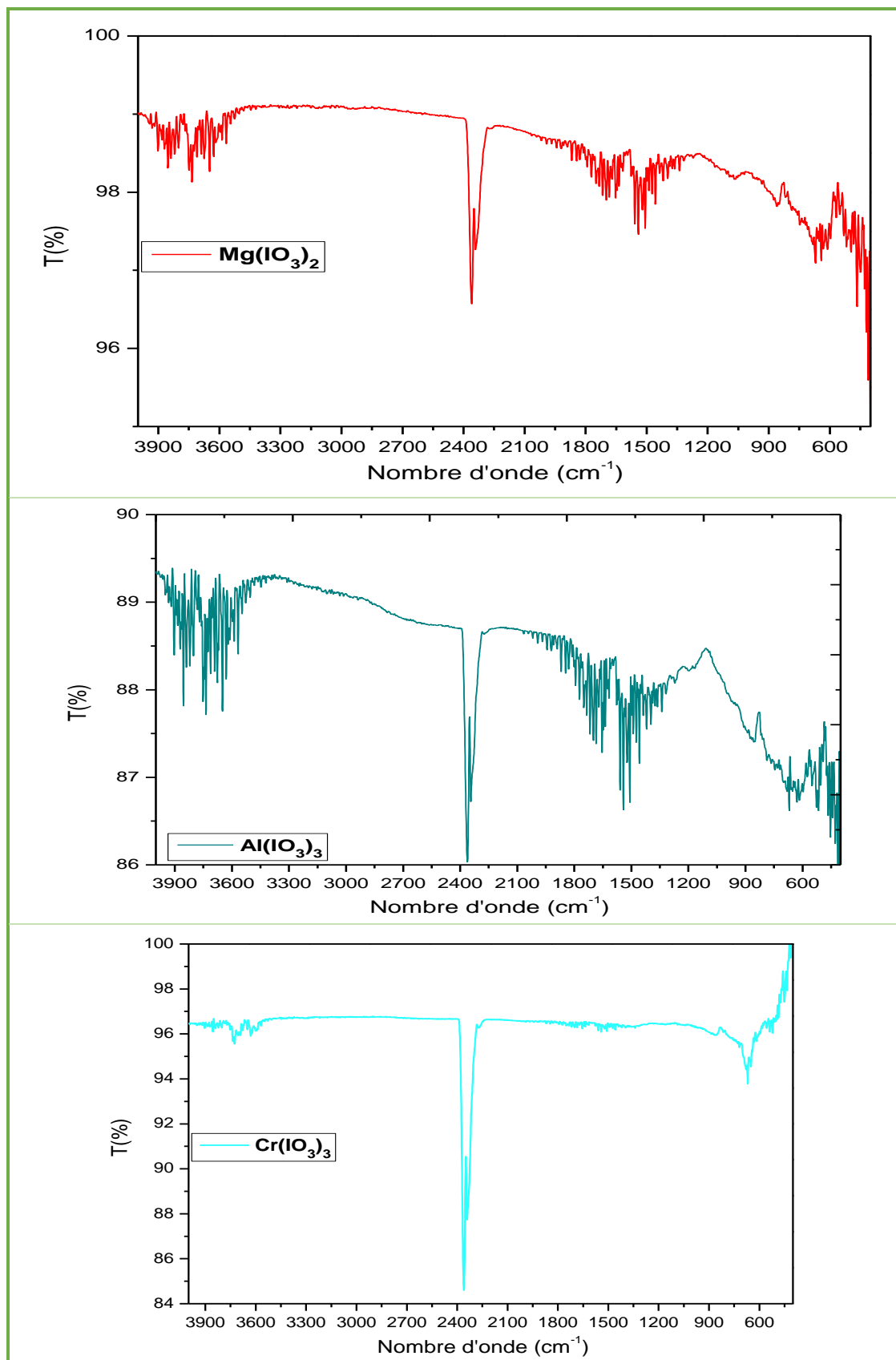
[16] R. CHIKHAOUI, Etude expérimentale et théorique de quelques propriétés physiques d'un matériau à base de zinc, Mémoire Master, Université Amar Telidji Laghouat, Algérie (2019)

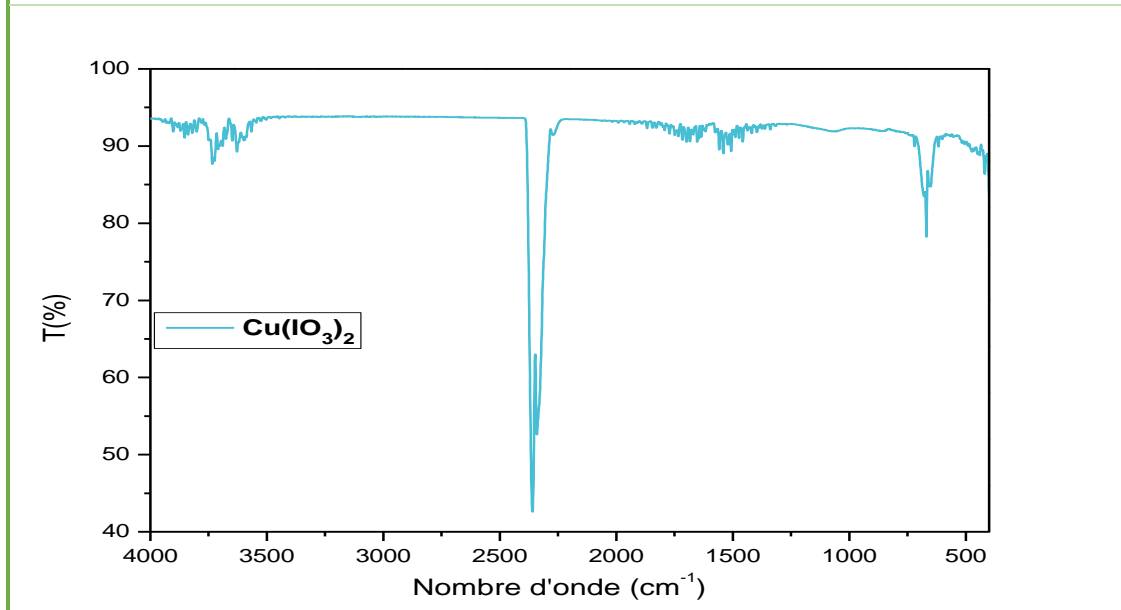
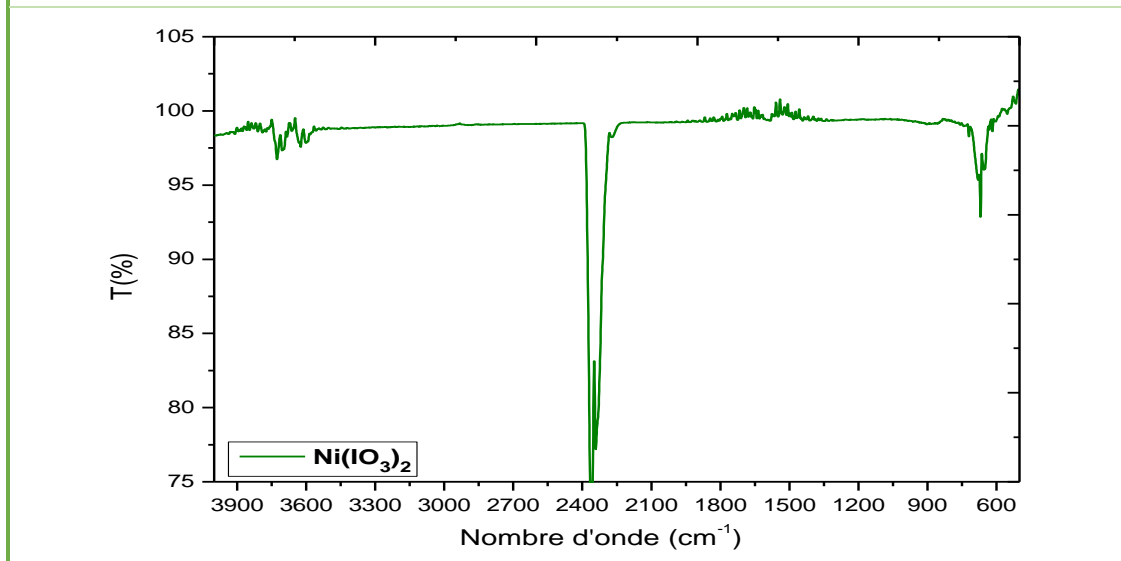
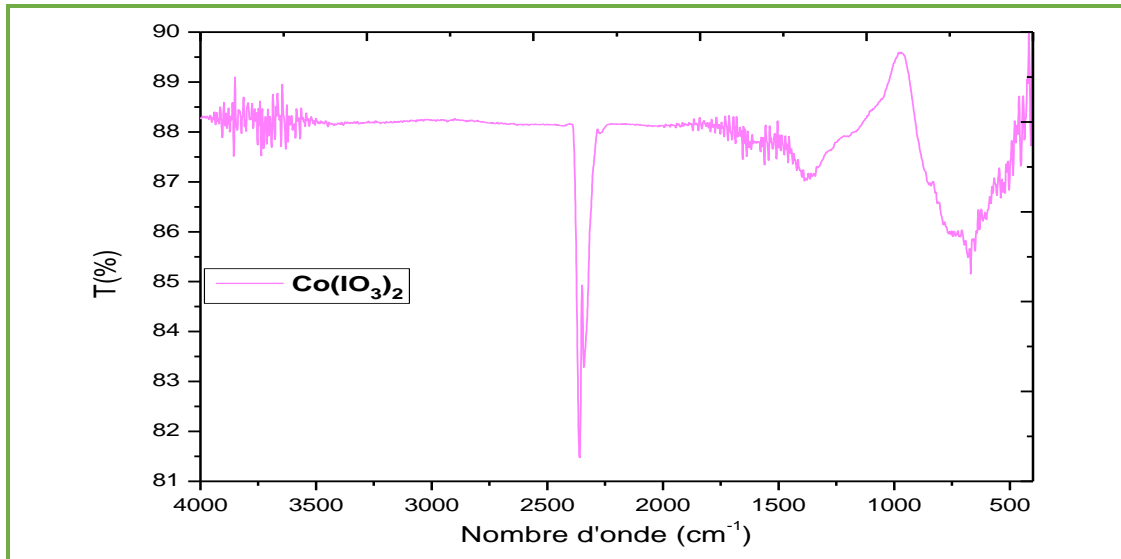
[17] S. ABBAS ; A. BEN HAOUA ; BEN HAOUA.B ; A. RAHAL, Caractérisation spectroscopique des couches minces du SnO₂ non dopées et dopées fluore élaborées par spray ultrasonique, Université d'El Oued et , Université d'Ouargla, Algérie (2014).

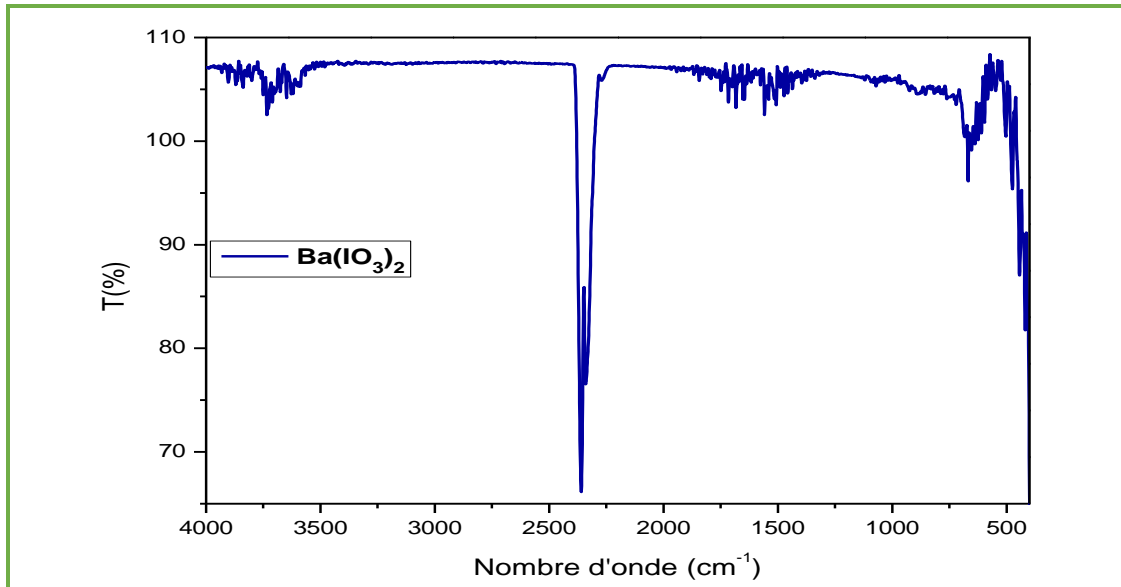
[18] M.B. TAOUTI, Synthèses et caractérisations structurales d'iodates métalliques, matériaux lasers convertisseurs de fréquences, Thèse de Doctorat, Algérie (2008).

Annexe :

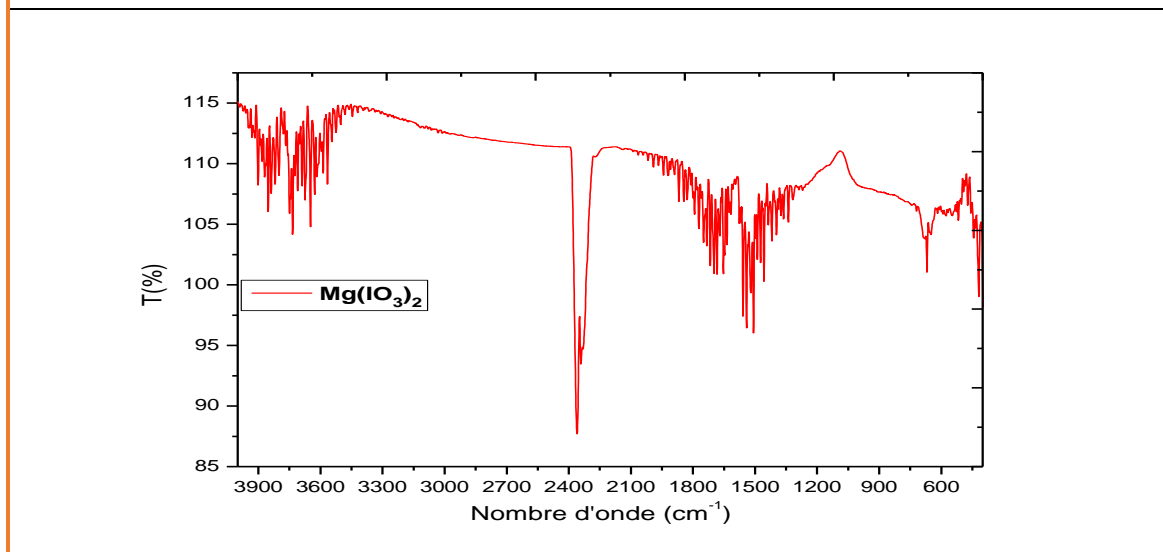
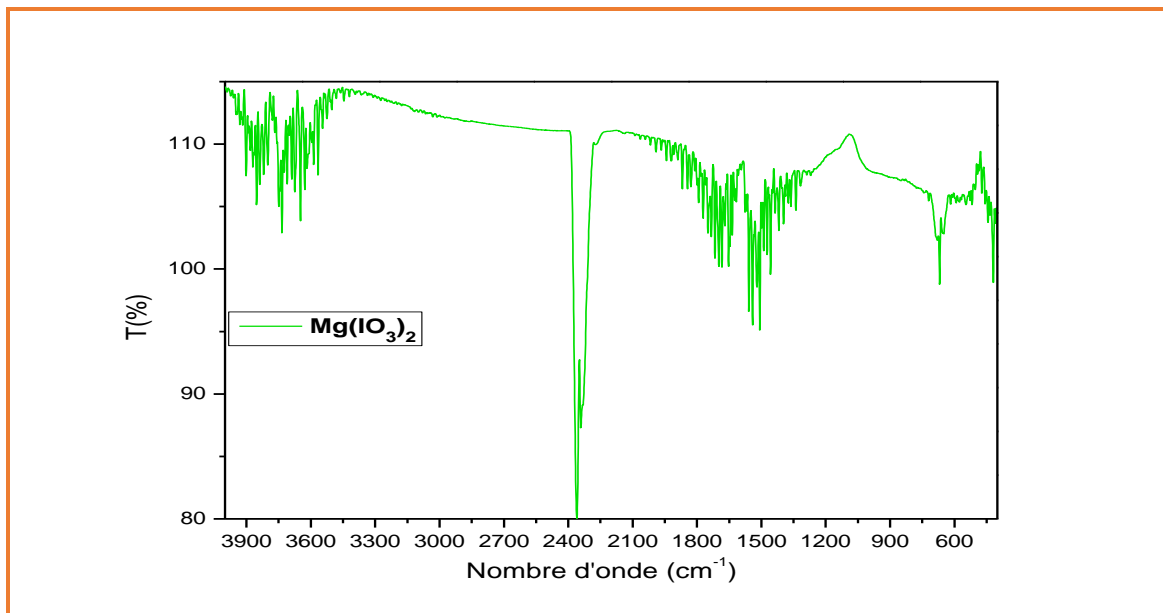
Spectres IR de quelques iodates synthétisés :

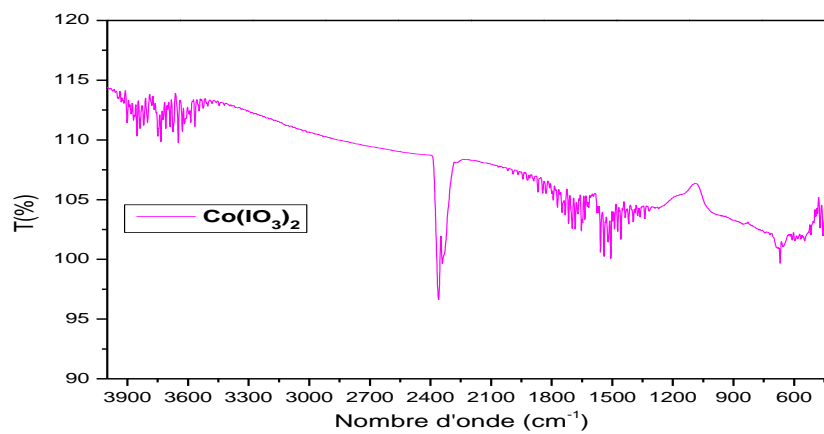
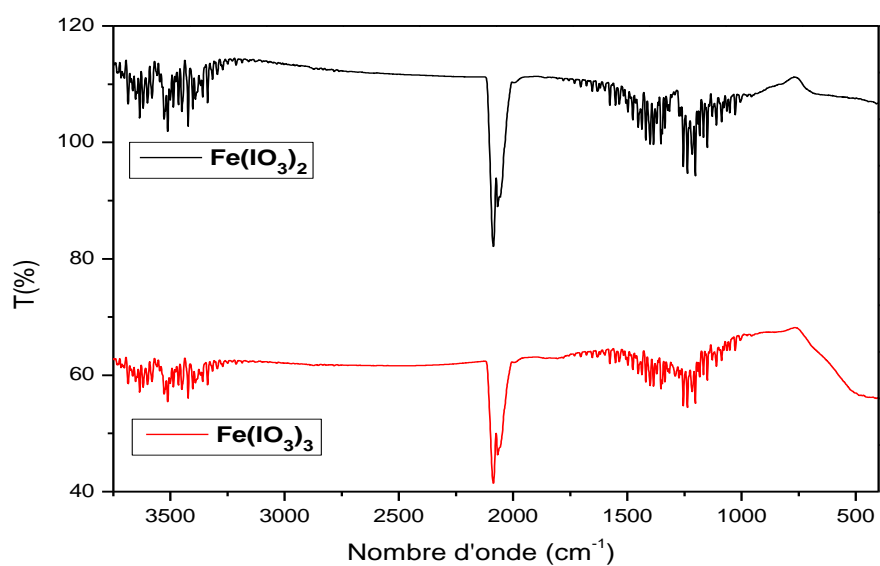
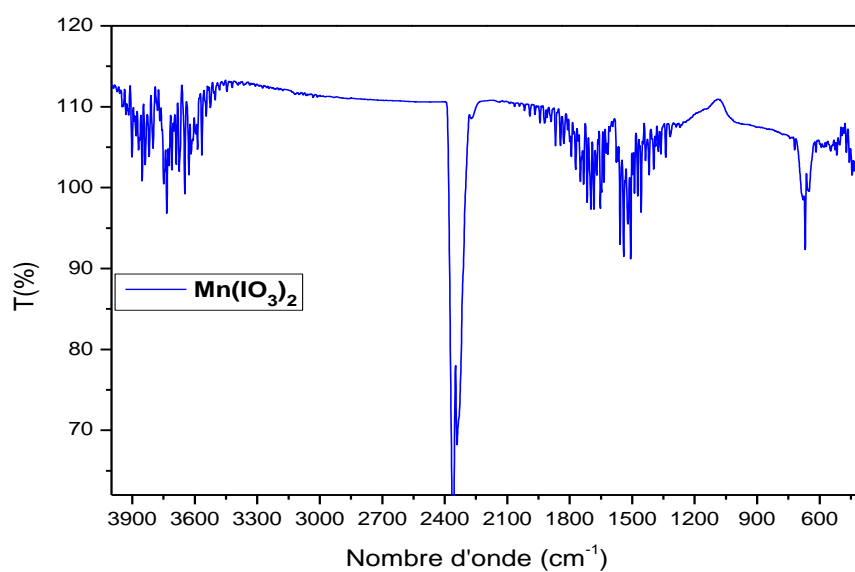


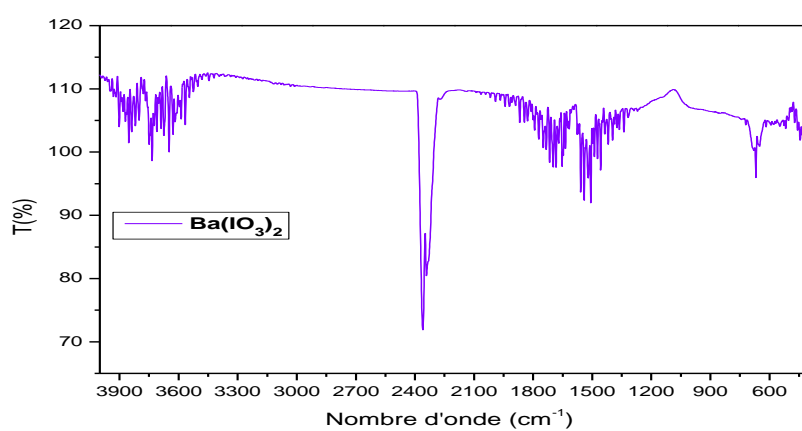
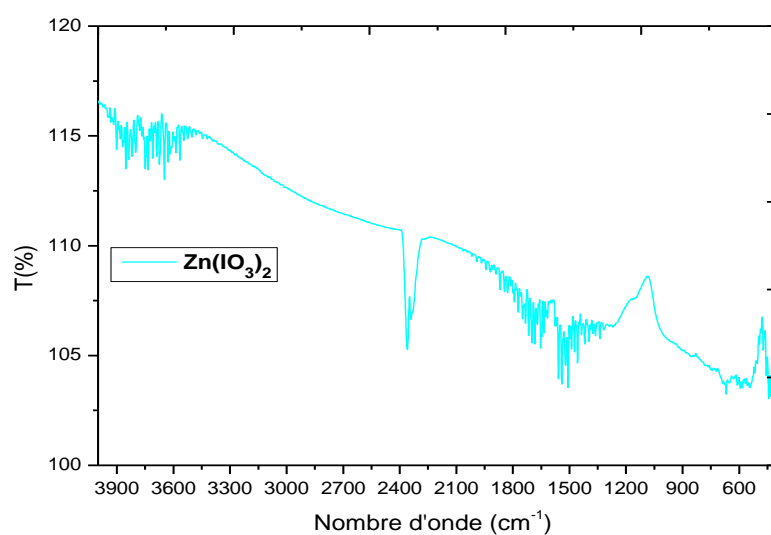
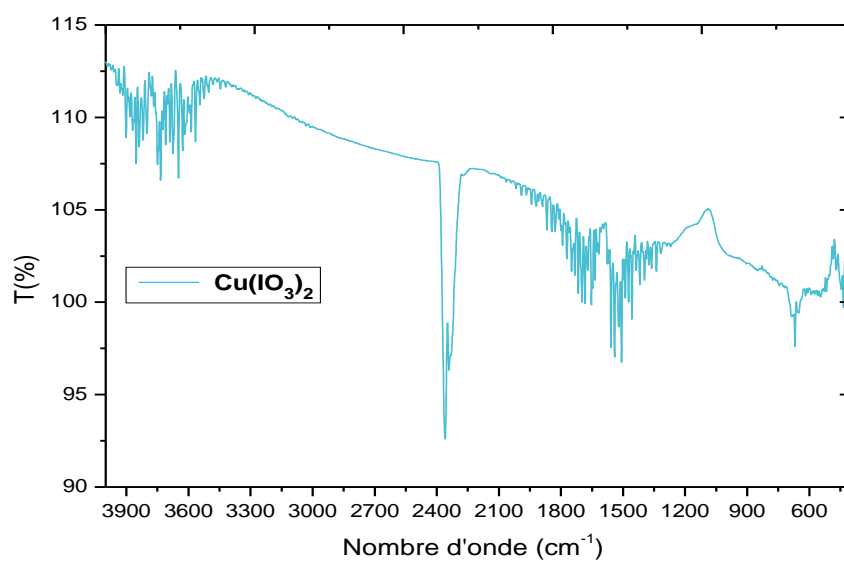




Spectres infrarouges des produits obtenus (sources nitrates métalliques).

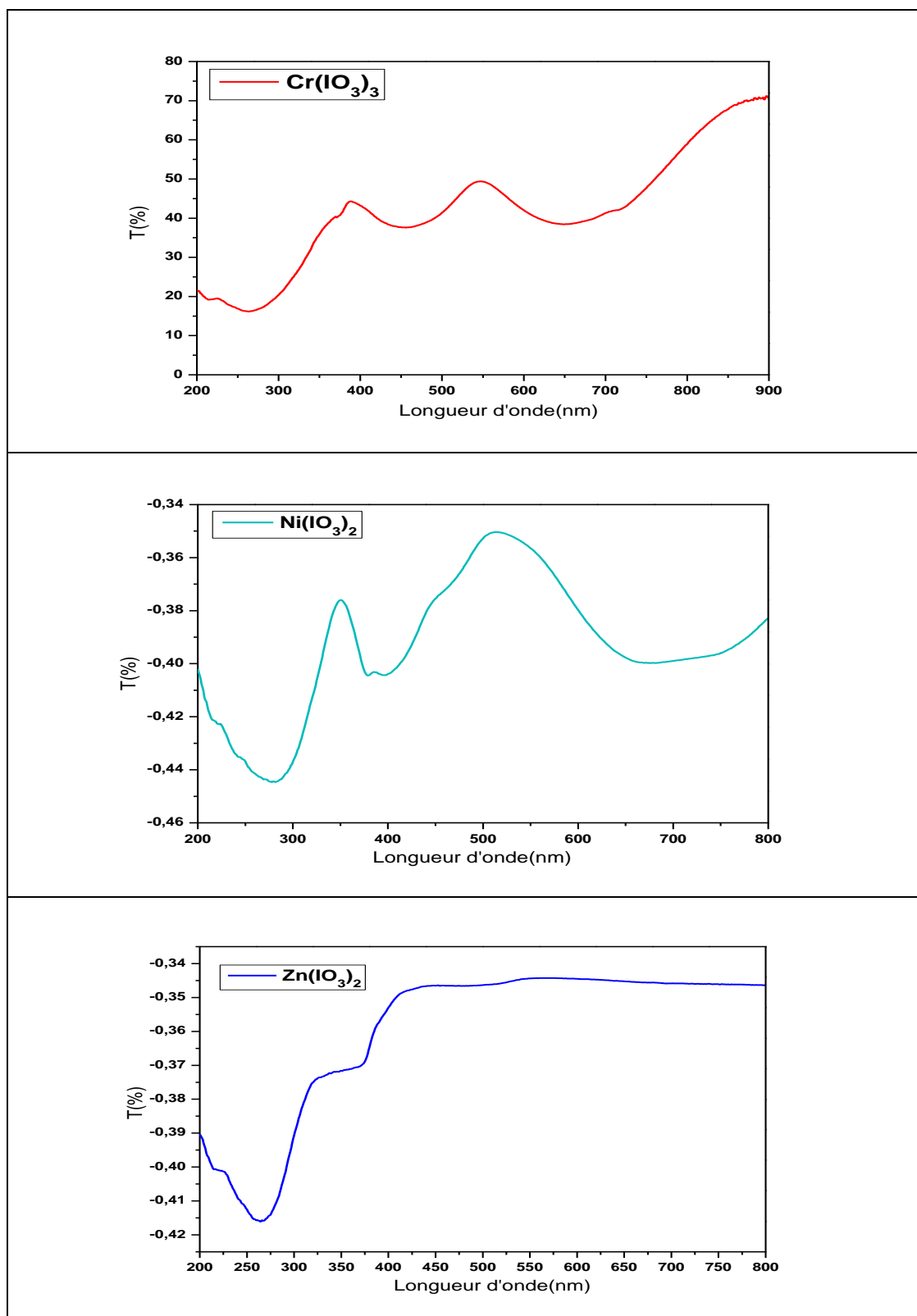




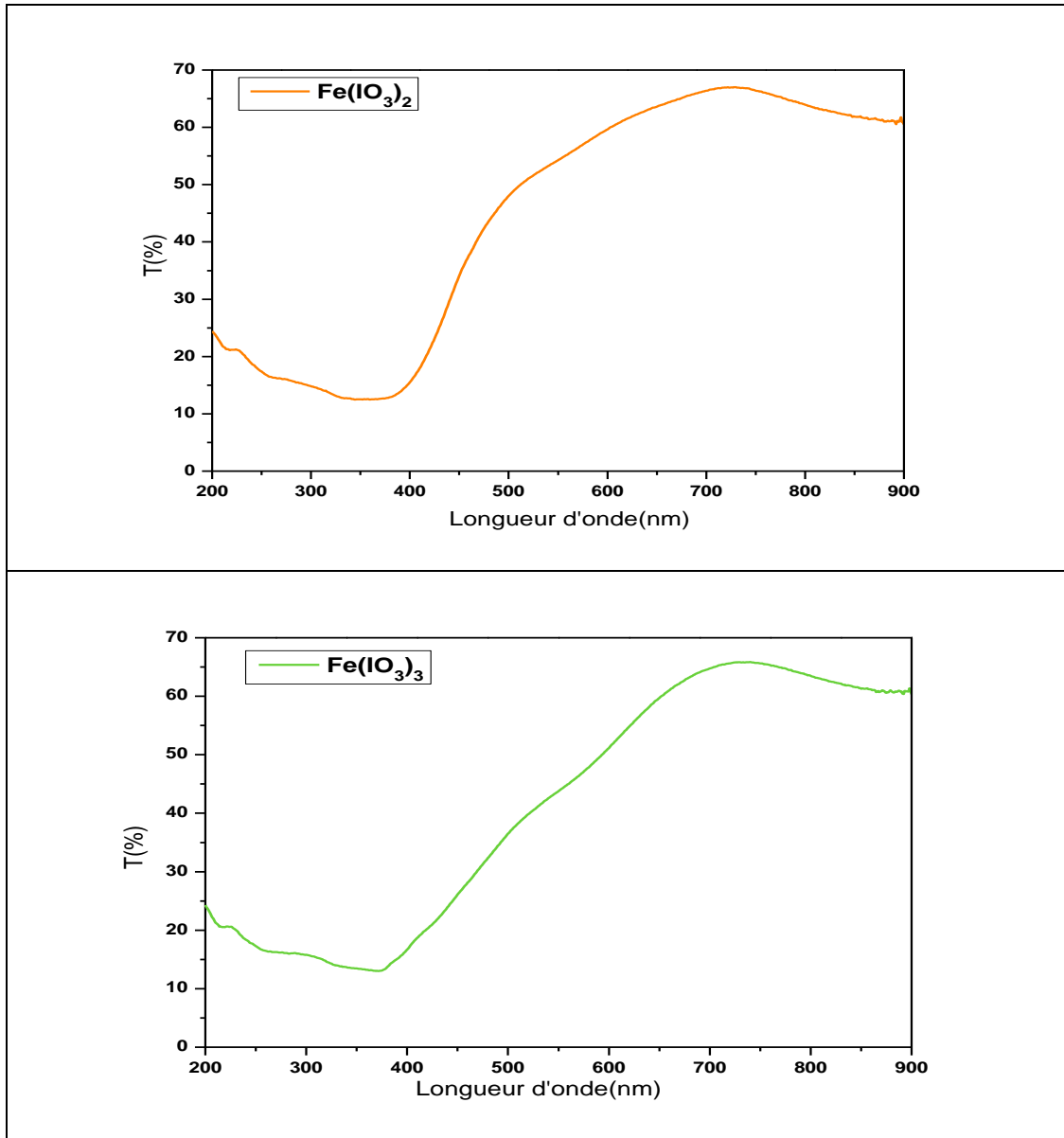


Spectres infrarouges des produits obtenus (sources Chlorures métalliques).

Spectres de transmission UV solide de quelques iodates synthétisés :



Les spectres de transmissions du produits obtenus (sources nitrates)



Les spectres de transmissions du produits obtenus (sources chlorures)

المخلص:

تم تحديد طاقات الفجوة لليودات المعدنية $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$ ، $\text{Ni}(\text{IO}_3)_2$ و $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$ ، من أطيايف انتقال الأشعة فوق البنفسجية. تتراوح القيم بين 3.225 و 4.25 eV. لاحظنا عدم وجود معلومات نظرية حول طاقة فجوة $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ و $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$. لقد حددنا قيمهما التجريبية 4.250 و 3.225 eV على التوالي. هذه القيم أعلى من 3.00 eV وبالتالي فإن كلا المركبين مرشحان جيدان لـ ONL.

الكلمات المفتاحية: اليودات المعدنية، طاقة الفجوة، البصريات اللاخطية، مطيافية الأشعة فوق البنفسجية.

Résumé :

Les énergies de gap des iodates métalliques $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$ ، $\text{Ni}(\text{IO}_3)_2$ et $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$ ، ont été déterminés à partir des spectres de transmission UV-V. Les valeurs obtenues sont de l'ordre de 3.225 à 4.25 eV. Nous avons remarqué l'absence des informations théoriques sur l'énergie de gap de $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ et $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$. Nous avons déterminé leurs valeurs expérimentales 4.250 et 3.225 eV respectivement. Ces valeurs sont au-delà 3,00 eV donc les deux composés sont des bons candidats pour l'ONL.

Mots clés : Iodates métalliques, Energie de gap, Optique non linéaire, Spectroscopie UV-V.

Abstract:

The gap energies of the metallic iodates $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_3$ ، $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$ ، $\text{Ni}(\text{IO}_3)_2$ and $\text{Zn}(\text{IO}_3)_2$ ، were determined from the transmission spectra. The values are around 3.225 to 4.25 eV. We noticed the absence of theoretical information on the energy of gap of $\text{Cr}(\text{IO}_3)_3$ and $\text{Fe}(\text{IO}_3)_2$. We determined their experimental values 4.250 and 3.225 eV respectively. These values are beyond 3.00 eV so the two compounds are good candidates for ONL.

Key words: Metallic iodates, gap energy, Nonlinear optics, UV-V spectroscopy.