

# Modélisation des propriétés optiques des matériaux pour la photonique

Z. Chouahda, R. Khemissi, H. Meradji et S. Ghemid

*Laboratoire de Physique des Rayonnements (LPR)  
Université Badji Mokhtar Annaba (Algérie)*

Les simulations numériques sont des outils très utiles pour interpréter certaines propriétés physiques et chimiques qui ont lieu dans les matériaux. Il devient possible aujourd'hui de déterminer avec une grande précision ces propriétés dans des systèmes les plus complexes et ceci en appliquant les méthodes basées sur les lois fondamentales de la mécanique quantique, en particulier les méthodes ab-initio employant le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT : Density Functional Theory)<sup>1</sup>.

Le présent travail consiste à calculer les propriétés optiques des fluorures du type  $MF_2$ ,  $M'F_2$  ainsi que ceux des fluorures mixtes  $M'_xM_{1-x}F_2$  en utilisant le code de calcul WIEN2K basé sur la DFT. Les fluorures dopés terre rare sont largement utilisés comme matériaux susceptibles de donner une émission laser<sup>2</sup> ; ils sont utilisés aussi comme capteurs de température à distance<sup>3</sup>. Les calculs, tous électrons, ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW)<sup>4</sup> implémentées dans le code de calcul Wien2K. Les propriétés électroniques et optiques ont été calculées en utilisant, pour l'énergie d'échange et de corrélation, l'approximation du gradient généralisée (GGA). Les résultats obtenus montrent que les matériaux possèdent un gap direct avec un comportement isolant. Les grandeurs optiques telles que l'indice de réfraction, la constante diélectrique, la conductivité optique ainsi que le coefficient d'absorption et de réflexion ont été déterminées.

Références :

1. Hohenberg P, et al, Phys. Rev, B36, 864 1964
2. Pollack S.A., J. Chem. Phys., 40, 2751, 1964
3. Chouahda Z, Jouart J. P, Duvaut T, Diaf M, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 245504, 2009
4. D. Koelling D, et al, J. Phys., F5, 2041 1975