REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA

RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Sétif 1 Ferhat Abbas

Faculté des sciences

Département de Physique

Domaine : Science de la Matière

Filière: Physique

Mémoire de fin d'études

Pour l'obtention du diplôme de Master

En

Physique de matériaux

THEME

Caractérisation structurale et vibrationnelle du ZnO par approches expérimentales et calculs ab-initio

Présentée par : MENAA HANANE

Soutenu publiquement, le 23juin 2026

Devant le jury :

Pr. Bouhkenfouf Wassila	Président
MCA .Lebga Noudjoud	Examinateur
Dr. Daoud Khadidja	Encadreu

Résumé

Nous avons étudié les propriétés structurales, élastiques et électroniques de l'oxyde de zinc (ZnO) en phase wurtzite en utilisant des calculs de premiers principes basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémentés via le code CASTEP avec l'approximation GGA-PBESOL, ainsi qu'une caractérisation expérimentale par spectroscopie FTIR et UV-Visible. Nous étudions les paramètres de maille (a et c), les constantes élastiques (C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, C_{66}), les modules mécaniques (B, G, E), le coefficient de Poisson (ν), la température de Debye (θ_D), la structure de bandes et la densité d'états (DOS). Les résultats théoriques montrent que les paramètres de maille (a = 3.2372 Å, c = 5.2237 Å) sont en excellent accord avec les données expérimentales disponibles dans la littérature. Nous trouvons que le ZnO est un semi-conducteur à gap direct au point Γ, de caractère ductile (B/G = 3.94 > 1.75) et thermiquement stable (θ_D = 387.84 K). Expérimentalement, la spectroscopie FTIR révèle une bande d'absorption à 422 cm^{-1} attribuée à la vibration de la liaison Zn-O, confirmant la pureté de l'échantillon, tandis que la spectroscopie UV-Visible indique un gap optique de 3.16 eV déterminé par la méthode de Tauc, est en bon accord avec les valeurs expérimentales rapportées dans la littérature.

Abstract

We have studied the structural, elastic, and electronic properties of zinc oxide (ZnO) in the wurtzite phase using first-principles calculations based on Density Functional Theory (DFT), implemented through the CASTEP code with the GGA-PBESOL approximation, combined with experimental characterization by FTIR and UV-Visible spectroscopy. We study the lattice parameters (a and c), elastic constants (C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}, C_{66}), mechanical moduli (B, G, E), Poisson's ratio (ν), Debye temperature (θD), band structure and density of states (DOS). The theoretical results show that the lattice parameters (a = 3.2372 Å, c = 5.2237 Å) are in excellent agreement with available experimental data from the literature. We find that ZnO is a direct-bandgap semiconductor at the Γ point, with ductile character (B/G = 3.94 > 1.75) and good thermal stability (θD = 387.84 K). Experimentally, FTIR spectroscopy reveals an absorption band at 422 cm^{-1} attributed to Zn-O bond stretching, confirming the high purity of the sample, while UV-Visible spectroscopy yields an optical bandgap of 3.16 eV determined by the Tauc method, is in good agreement with experimental values reported in the literature.

ملخص

قمنا بدراسة الخصائص البنيوية والمرنة والإلكترونية لأكسيد الزنك (ZnO)في طور Wurtzite باستخدام حسابات المبادئ الأولى المبنية على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، المنفَّذة عبر برنامج CASTEP بتقريب GGA-PBESOL، إلى جانب توصيف تجريبي بطيفَي FTIR وUV-Visible. ندرس ثوابت الشبكة(a) و(c)، وثوابت المرونة (C_{11}، C_{12}، C_{13}، C_{33} C_{44}، (C_{66})، والمعاملات الميكانيكية (B)، (G)، (E)، ومعامل بواسون (ν)، ودرجة حرارة ديباي (θ_D)، وبنية النطاق الإلكتروني وكثافة الحالات .تُظهر النتائج النظرية أن ثوابت الشبكة (a = 3.2372 Å)، c = 5.2237 Å) تتوافق توافقاً ممتازاً مع البيانات التجريبية المتاحة في الأدبيات العلمية .نجد أن ZnOشبه موصل ذو فجوة طاقة مباشرة عند نقطة Γ، بطابع مطيلي (B/G = 3.94 > 1.75)وثبات حراري جيد .(θD = 387.84 K)وتجريبياً، يكشف طيف FTIRعن حزمة امتصاص عند 422 cm^{-1} تُعزى لاهتزاز رابطة Zn-Oمما يؤكد نقاء العينة، في حين يُعطي طيف UV-Visibleفجوة طاقة ضوئية تبلغ 3.16 eVبطريقة Tauc، في اتفاق جيد مع القيم التجريبية المُبلَّغ عنها في الأدبيات .

Sommaire

Introduction générale 1

Chapitre 1 La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité

1.1 Introduction 4

1.2 Problème à N corps avec des approximations 4

1.2.1 L'équation de Schrödinger d'un solide cristallin 4

1.2.2 Approximation de Born-Oppenheimer 6

1.2.3 Approximation de Hartree 7

1.2.4 Approximation de Hartree-Fock 8

1.3 La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) 11

1.3.1 Introduction 11

1.3.2 La DFT comme une théorie de plusieurs corps (Théorèmes de Hohenberg et Kohn) 11

1.3.3 Les équations de Kohn-Sham 14

1.3.4. Approximation de la densité locale 17

1.3.5 Approximation de Gradient generalize 18

1.3.6 Les pseudo potentiels 18

1.3.7 Construction des pseudopotentiels 19

1.4 Structure électroniques et périodicité 19

1.4.1 Théorème de Bloch 19

1.4.2 La base d'onde plane 20

1.4.3 Echantillonnage de la zone de Brillouin 21

1.5 Références 23

Chapitre 2 Propriétés structurales, élastiques et électroniques

2.1 Introduction 25

2.2 Propriétés structurales 25

2.3 Les propriétés élastiques 26

2.3.1 Tenseurs 26

2.3.2 Tenseur des contrainte 26
2.3.3 Tenseur des deformation 27
2.3.4 La loi de Hooke 28
2.3.5 Module de Young E : 30
2.3.6 Le Coefficient de Poisson 31
2.3.7 Modules d'élasticité pour des solides polycristallins 31
2.3.8 Les conditions de stabilité mécanique 32
2.3.9 La température de Debye 33
2.4 Propriétés électroniques 33
2.4.1 Structure de bandes électronique 33
2.4.2 Densité d'états 35
2.5 Références…. 37

Chapitre 3 Résultats et discussions

3.1 Introduction 39
3.2 Le code CASTEP 39
3.3 Convergence de l'énergie de coupure et du K-point 39
3.4 Les propriétés structurales 41
3.5 Les propriétés élastiques 42
3.5.1 Les constantes élastiques 43
3.5.2 Les modules d'élasticité 44
3.5.3 La température de Debye 45
3.6 Propriétés électroniques 45
3.6.1 Structure de bandes d'énergie 45
3.6.2 Densités d'états électroniques (DOS) 47
3.7 Références 51

Chapitre 4 Caractérisation du ZnO par spectroscopie FTIR et UV-Visible

4.1 Introduction 53

4.2 Spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (FTIR) 54

4.2.1 Résultats de la spectroscopie d'absorption infrarouge (FTIR) 56

4.3 Le spectrophotomètre UV Visible..... 57

4.4 Résultats et discussion..... 59

4.4.1 Caractérisation par spectroscopie UV-visible 59

4.4.2 Détermination de valeur de la bande interdite (énergie de gap Eg) 60

4.5 Références…. 64

Conclusion Générale 65