



Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou  
Laboratoire de Physique et Chimie Quantique



## 4<sup>èmes</sup> Journées des Doctorants JDD'18



## RECUEIL DES RÉSUMÉS

Tizi-Ouzou, 25 et 26 mars 2018

**4<sup>èmes</sup> Journées des Doctorants - JDD4**  
**Auditorium, Hasnaoual, UMMTO, 25 et 26 mars 2018**

**4<sup>èmes</sup> Journées des Doctorants – JDD4**  
**Auditorium, HasnaouaI, UMMTO, 25 et 26 mars 2018**

Le Laboratoire de Physique et Chimie Quantique organise, pour la quatrième fois, les Journées Des Doctorants les 25 et 26 mars 2018. Ces journées ont pour objectif de donner l'occasion à nos doctorants de présenter leurs travaux de thèse, permettant ainsi d'échanger entre eux et avec les enseignants chercheurs, et, par là même, d'apprécier leurs états d'avancement. Ces journées sont aussi l'occasion de faire connaître les thèmes de recherche des différentes équipes de notre laboratoire.

Il est prévu, au cours de ces journées, 14 communications orales et 3 conférences animées par nos invités : TADJEDDINE Abderrahmane, de l'Université Paris-Sud-Orsay (lauréat de la médaille RAMMAL de physique et décoré de la légion d'honneur française), BELABBAS Imad, de l'Université de Béjaia et GUITTOUM Abderrahim du Centre de Recherche Nucléaire d'Alger. Ces derniers présenteront un « état de l'art » dans leurs domaines de recherche respectifs et nous les remercions vivement d'avoir accepté notre invitation.

En plus de doctorants d'autres facultés de l'UMMTO, des doctorants de différentes universités nationales (Boumerdes, Béjaia, USTHB, Blida ...) et de l'université de la Sorbonne (France) ont manifesté leur volonté d'assister à ces journées. Ce rendez-vous sera donc une occasion de rencontres et de partages entre les participants qui ont en commun, soit un thème scientifique, soit une discipline, soit encore une approche ou une méthode.

Nous souhaitons sincèrement que ces journées soient bénéfiques à tous.

Les Organisateur

## Sommaire

---

### Conférences

<b>CI1</b>	Etude des propriétés vibrationnelles et électroniques des interfaces et des nanoparticules par spectroscopie optique non linéaire de génération de la fréquence somme	<b>06</b>
<b>CI2</b>	Etude par simulations atomistiques des dislocations dans les matériaux nitrures-III	<b>07</b>
<b>CI3</b>	Nanomatériaux magnétiques : microstructure et propriétés magnétiques	<b>08</b>

---

### Communications Orales

<b>CO1</b>	Conception de lames demi-onde ultra-minces dans la gamme optique	<b>10</b>
<b>CO2</b>	Observation et interprétation des configurations $4f^{10}5p$ , $4f^{10}5d$ et $4f^{10}6s$ de l'Erbium IV	<b>12</b>
<b>CO3</b>	Étude par dynamique moléculaire de la conductivité thermique de nanofluides en vue de l'amélioration de l'efficacité d'un distillateur solaire	<b>13</b>
<b>CO4</b>	Synthèse et caractérisation des verres spéciaux dopés terres rares : application au développement laser et amplification optique	<b>14</b>
<b>CO5</b>	Transitions vallée-dépendantes dans le système Fe/WS <sub>2</sub>	<b>15</b>
<b>CO6</b>	Atomic scale modeling of reaction mechanism of fluorine and oxygen atoms with silicon	<b>16</b>
<b>CO7</b>	Etude par simulation de l'effet de charges sur les décharges partielles dans un diélectrique solide	<b>17</b>
<b>CO8</b>	Simulation et optimisation d'un laser à double cavités passivement Q-déclenché dopé Er:Tm.	<b>18</b>
<b>CO9</b>	Etude DFT des ligands hétérocycliques bidentés d'intérêts biologique et environnemental	<b>19</b>
<b>CO10</b>	Étude du couplage plasmonique longue distance : Application à la spectroscopie Raman exaltée en surface	<b>20</b>
<b>CO11</b>	Diffusion de magnons via une nanojonction sandwich de type A(Ferro)/ B(Antiferro)/A( Ferro)	<b>21</b>
<b>CO12</b>	Interprétation des configurations à cœur excité dans le Neodyme trois fois ionisé (Nd IV)	<b>22</b>
<b>CO13</b>	Modélisation d'un laser entièrement fibré passivement Q-déclenché par la méthode FDTD	<b>23</b>
<b>CO14</b>	Etude théorique avec simulation numérique des propriétés dynamiques des structures de nano-alliages de surfaces ordonnées Au <sub>3</sub> Pd, AuPd et AuPd <sub>3</sub>	<b>24</b>

---



## CONFÉRENCES INVITÉS

## CH

### Etude des propriétés vibrationnelles et électroniques des interfaces et des nanoparticules par spectroscopie optique non linéaire de génération de la fréquence somme

Abderrahmane Tadjeddine

Directeur de recherche émérite au CNRS  
Membre Fondateur de l'Académie Algérienne des Sciences et Technologies  
Laboratoire de Chimie Physique, Université Paris-Sud, Orsay  
[abderrahmane.tadjeddine@u-psud.fr](mailto:abderrahmane.tadjeddine@u-psud.fr)

Les réactions aux interfaces jouent un rôle fondamental dans tous les processus physico-chimiques aussi bien en sciences et techniques des matériaux (catalyse, corrosion, énergie, résistance des matériaux,...) que biologiques (respiration, photosynthèse,...). Connaître et maîtriser ces processus qui, sont souvent localisés sur une ou deux couches moléculaires à la surface du matériau est un enjeu scientifique, technique, industriel et social qui implique des approches multidisciplinaires et des investissements humains et financiers considérables. Notre activité s'inscrit dans ce domaine de recherche, l'objectif étant la caractérisation in situ des espèces adsorbées, intermédiaires ou poison des réactions catalytiques se produisant soit dans des réacteurs de catalyse, soit dans des cellules électrochimiques. Nous avons été parmi les pionniers du développement de techniques d'étude des propriétés vibrationnelles et électroniques des interfaces et des nanoparticules basées sur l'optique non linéaire. En particulier la spectroscopie de génération de la fréquence somme Visible-infrarouge est une spectroscopie du second ordre qui sonde sélectivement les interfaces entre milieux à symétrie d'inversion. Nous décrirons les montages que nous avons développés basés sur des lasers picoseconde synchronisés avec le laser à électrons libres CLIO (Centre de lasers infrarouges d'Orsay) et présenterons nos résultats récents notamment le système platine-CO en milieu électrochimique, modèle de recherche sur les rendements des piles à combustibles [1] et les nanoparticules d'or fonctionnalisées [2, 3, 4].

#### Références :

- [1] Christophe Humbert, Bertrand Busson and Abderrahmane Tadjeddine, « Enhanced Stability of a Carbon Monoxide Monolayer Adsorbed on Platinum under Electrochemical Control Probed by Sum-Frequency Generation Spectroscopy », *J. Phys. Chem. C*, 2016, 120 (29), pp 16211–16220.
- [2] C. Humbert, O. Pluchery, E. Lacaze, A. Tadjeddine and B. Busson, “A multiscale description of molecular adsorption on gold nanoparticles by nonlinear optical spectroscopy”, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2012) **14**, 280-289.
- [3] L. Dalstein, M. Ben Haddada, G. Barbillon, C. Humbert, A. Tadjeddine, S. Boujday, and B. Busson “Revealing the interplay between adsorbed molecular layers and gold nanoparticles by linear and non-linear optical properties”. *Phys. Chem. C* (2015) **119**:17146–17155.
- [4] G. Barbillon, T. Noblet, B. Busson, A. Tadjeddine and C. Humbert “Localised detection of thiophenol with gold nanotriangles highly structured as honeycombs by nonlinear Sum Frequency generation”, *J. Mat. Sci.* 53, 4554-4562 (2018).

## CI2

### Etude par simulations atomistiques des dislocations dans les matériaux nitrures-III

Imad BELABBAS

Equipe de cristallographie et simulation des matériaux, Laboratoire de Physico-Chimie des Matériaux et Catalyse, Université Abderahmane Mira. Bejaia (06000). Algérie.

Les matériaux nitrures-III, que sont le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'indium (InN) ainsi que leurs alliages ternaires et quaternaires, constituent une classe de matériaux très attractive en optoélectronique, de part les applications qu'elle engendre. Le contrôle de la composition des alliages nitrures-III a permis d'obtenir des dispositifs électroniques émettant dans une large gamme du spectre électromagnétique, allant de l'ultra-violet à l'infrarouge en passant par le domaine du visible [1]. Cela a rendu possible, notamment, la fabrication d'émetteurs de lumière blanche de type LED à basse consommation en énergie, ce qui a constitué une véritable révolution. Les efforts déployés par la communauté scientifique des matériaux nitrures-III, au cours de ces trois dernières décennies, ont été récompensés par l'attribution, en 2015, du prix Nobel de physique à S. Nakamura, H. Amano et I. Akasaki.

Due à la non-disponibilité de substrats natifs bon marché, la quasi-majorité des couches minces de matériaux nitrures-III, destinées à l'industrie, sont élaborées par hétéro-épitaxie.

Les substrats utilisés peuvent présenter des écarts paramétriques pouvant aller jusqu'à 15%, ce qui conduit à des couches minces avec de fortes concentrations de dislocations [2]. Il a été clairement établi que la présence de ces dislocations est à l'origine de la réduction de l'efficacité des dispositifs optiques.

Dans cette conférence, un ensemble de résultats relatifs à des études atomistiques des dislocations dans les matériaux nitrures-III (GaN, AlN, InN) sera présenté. Ces études ont été conduites en adoptant différentes méthodes atomistiques, dont : la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT), la méthode des liaisons fortes ainsi que des potentiels empiriques. A travers quelques exemples choisis [3, 4, 5], l'impact des dislocations sur différentes propriétés des matériaux nitrures-III, dont : les propriétés électroniques, optiques, mécaniques et thermiques, va être mis en évidence. La capacité de la simulation atomistique à rationaliser l'effet des dislocations sur les propriétés de ces matériaux seramis en exergue.

Mots-clés : GaN, AlN, InN, nitrures-III, dislocations, coeur, simulation atomistique, DFT.

#### Références:

- [1] Morkoc et al., MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G1 (1999).
- [2] Qian et al., Appl. Phys. Lett. 67, 2284 (1995).
- [3] I. Belabbas, J. Chen and G. Nouet, Comput. Mat. Sci. 90, 71 (2014).
- [4] I. Belabbas, J. Chen, M. I. Heggie, C. D. Latham, M. J. Rayson, P.R. Briddon and G. Nouet, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 24, 075001(2016).
- [5] K. Termentzidis, M. Isaiev, A. Salnikova, I. Belabbas, D. Lacroix and J. Kioseoglou, Physical Chemistry and Chemical Physics (DOI: 10.1039/C7CP07821H).

## CI3

### Nanomatériaux magnétiques: microstructure et propriétés magnétiques

A. Guittoum

Centre de Recherche Nucléaire d'Alger, 02 Bd Frantz Fanon, BP 399, Alger-Gare, Alger, Algérie

De nos jours, les nanomatériaux ont suscité un intérêt particulier en raison de leurs propriétés singulières différentes de celles des matériaux massifs. Actuellement, le défi majeur des chercheurs en nanotechnologie est la synthèse de nouveaux matériaux en agissant sur leur composition chimique, leur structure cristalline, leur morphologie et leur taille, afin de prédire leurs différentes propriétés physico-chimiques, et cela donne accès à un large éventail d'applications.

La synthèse de nanomatériaux peut se faire selon plusieurs voies: les dépôts physiques ou chimiques en phase vapeur, l'électrodéposition, la mécanosynthèse et la méthode hydrothermale. En Algérie, à notre connaissance, les méthodes les plus utilisés sont la méthode sol-gel, la mécanosynthèse et la méthode hydrothermale.

Les nanomatériaux magnétiques, en particulier, ont reçu beaucoup d'attention en raison de leurs excellentes aptitudes utilisées dans une grande variété d'applications technologiques telles que le stockage de données, dispositifs de micro-électronique, diagnostic médical, séparation magnétique et la catalyse... etc. Un intérêt majeur est consacré aux matériaux ferromagnétiques, notamment le nickel (Ni), le fer (Fe), le cobalt (Co) ainsi que les composés binaires et ternaires à base des ces trois matériaux. Cet intérêt est dicté par le champ d'application vaste dans divers domaines technologiques tels que les fluides magnétiques, la biotechnologie, l'imagerie par résonance magnétique, la séparation magnétique, le stockage de données, ....

Dans cette intervention, nous exposerons une synthèse des différents résultats de recherche obtenus sur les nanomatériaux magnétiques binaires et ternaires élaborés par mécanosynthèse et hydrothermale [1-7]. Les différentes propriétés structurales, microstructurales, hyperfines et magnétiques seront discutées. L'effet de la taille et de la forme des nanoparticules sur le magnétisme de ces nanomatériaux sera discuté.

#### Références:

- [1] "Elaboration, structure and Mössbauer spectroscopy of nanostructured  $\text{Fe}_{100-x}\text{Si}_x$  powders elaborated by mechanical alloying", M. Hemmous, A. Guittoum, SPIN, 7 (2017) 1750002.
- [2] "Microstructure, morphology and magnetic properties of Ni nanoparticles synthesized by hydrothermal method", Materials Chemistry and Physics 160 (2015) 435-439.
- [3] "Crystal structure, microstructure and magnetic properties of Ni nanoparticles elaborated by hydrothermal route", A. Bouremana, A. Guittoum, M. Hemmous, B. Rahal, J.J. Sunol, D. Martínez-Blanco, J. A. Blanco, P. Gorria, N. Benrekaa", Journal of Magnetism and Magnetic Materials 358-359 (2014) 11–15.
- [4] "Effect of Si addition on the structural, microstructural and magnetic properties of  $(\text{Fe}_{70}\text{Al}_{30})_{100-x}\text{Si}_x$  nanostructured powders elaborated by mechanical alloying", M. Hemmous , A. Guittoum , M. Kezrane, N. Boukherroub, D. Martínez-Blanco, P. Gorria , J.A. Blanco, N. Souami , N. Fenineche , J. Magn. Mater. 439 (2017) 188–195.
- [5] "Structure, Microstructure and Magnetic Properties of  $\text{Co}_x\text{Ni}_{100-x}$  Powders Synthesized by Hydrothermal Method", A. Bensouilah, A. Guittoum, M. Hemmous, A. Bouremana, B. Rahal, C. Yavru, R. M. Oksuzoglu, M. Kechouane , J Supercond Nov Magn. vol (2017) 26 (9) " DOI 10.1007/s10948-017-4035-3".
- [6] "The role of silicon on the microstructure and magnetic behavior of nanostructured  $(\text{Fe}_{0.7}\text{Co}_{0.3})_{100-x}\text{Si}_x$  powders", M. Hocine, A. Guittoum, M. Hemmous, D. Martínez-Blanco, P. Gorria, B. Rahal, J.A. Blanco, J.J. Sunol, A. Laggoun, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 422 (2017) 149–156
- [7] "Elaboration, Microstructure, and Magnetic Properties of Nanocrystalline  $\text{Fe}_{90}\text{Ni}_{10}$  Powders", M. Kezrane, A. Guittoum, M. Hemmous, S. Lamrani, A. Bourzami, W. Weber, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 28 (2015) 2473-2481.



## COMMUNICATIONS ORALES

## CO1: Conception de lames demi-onde ultra-minces dans la gamme optique

Thinhinane Zeghdoudi<sup>\*</sup>, Zahia Kebci, Abelaziz Mezeghrane et Abderrahmane Belkhir

Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud MAMMERRI, Tizi-Ouzou, Algérie.

\* email : [zeghdoudi23@yahoo.fr](mailto:zeghdoudi23@yahoo.fr)

### Résumé

Dans ce travail, nous nous sommes intéressés à la conception et à l'étude de lames à retard demi et quart d'onde à base de métamatériaux constitué d'un réseau métallique dont le motif est une combinaison d'ouvertures annulaire et en forme de C. L'anisotropie artificielle est induite par la géométrie de la structure qui présente une brisure de symétrie permettant ainsi le contrôle de l'état de polarisation de la lumière transmise à travers ces lames. Les résultats FDTD obtenus montrent que les lames conçues exhibent des transmissions et des biréfringences artificielles extraordinaires

Mots clés: Métamatériaux, lame demi-onde, lame quart d'onde, FDTD

### 1. Introduction

Les lames biréfringentes sont souvent utilisées dans les dispositifs optiques nécessitant une manipulation et un contrôle de l'état de polarisation de la lumière. Les lames conventionnelles, faites à base de cristaux biréfringents naturels, permettent d'introduire un déphasage entre les deux composantes orthogonales du champ. Cependant, il n'est pas évident de les intégrer dans des dispositifs optiques miniaturisés en raison de leur configuration volumineuse induite par la faible anisotropie  $\Delta n$  (différence entre l'indice de réfraction extraordinaire  $n_e$  et l'indice de réfraction ordinaire  $n_o$ ).

Pour améliorer les performances de ces lames, de nombreux travaux sont orientés vers l'utilisation de métamatériaux capables d'offrir des anisotropies artificielles conséquentes. Ces anisotropies sont obtenues soit par l'excitation de plasmon de surface [1] ou de modes guidés [2].

### 2. Résultats

Les lames proposées consistent en des réseaux métalliques sub-longueur d'onde dont le motif est constitué de deux ouvertures : une annulaire inclinée et une autre en forme de 'C'. Ces ouvertures sont disposées de manière à exciter le mode fondamental TEM de la cavité coaxiale inclinée (à indice effectif non nul) et le mode TE<sub>10</sub> de la cavité en forme de 'C' (à indice effectif nul). Ces modes, à indices effectifs différents, sont excités chacun par une des composantes orthogonales du champ électrique incident permettant ainsi d'obtenir une anisotropie artificielle. En ajustant les paramètres géométriques du motif du réseau, la structure se comporte comme une lame demi-onde à la longueur d'onde de fonctionnement 1587 nm pour une épaisseur de la couche métallique  $h=300$  nm ( $< \lambda/5$ ) et comme une lame quart d'onde à la longueur de fonctionnement de 1626 nm pour  $h=325$  nm ( $< \lambda/5$ ). Ces deux lames présentent une forte transmission accompagnée d'une biréfringence géante.

### Références

- [1] Drezet, A., Genet, C., & Ebbesen, T. W., "Miniature plasmonic wave plates," Physical review letters, 101, 043902 (2008).
- [2] Baida, F. I., Boutria, M., Oussaid, R., & Van Labeke, D., Physical Review B, 84 (2011) 035107.

## CO2 : Observation et interprétation des configurations $4f^{10}5p$ , $4f^{10}5d$ et $4f^{10}6s$ de l'Erbium IV ( $Er^{+3}$ )

Anis Chikh<sup>a\*</sup>, Djamel Deghiche<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie

\* email : [ch\\_anis92@yahoo.fr](mailto:ch_anis92@yahoo.fr)

### Résumé / Abstract

Les lanthanides sont introduits dans des matrices cristallines pour des applications technologiques dans les domaines de la physique des lasers et de l'information quantique. Dans notre travail, nous nous intéressons à l'ion libre d'Erbium trois fois ionisé. L'approche théorique est basée sur la méthode paramétrique de Racah-Slater pour calculer les niveaux d'énergies et les probabilités de transition. Nous avons utilisé les paramètres issus de la séquence isoélectronique et isoionique de cet élément. L'identification des niveaux d'énergie est réalisée par un ajustement par moindres carrés. Nous avons identifié 50 niveaux avec une déviation moyenne de  $40 \text{ cm}^{-1}$  pour les configurations de parité impaire ( $4f^{11}$  et  $4f^{10}6p$ ) et  $32 \text{ cm}^{-1}$  pour les configurations de parité paire ( $4f^{10}5d$  et  $4f^{10}6s$ ).

Mots clés : Erbium trivalent, configurations électroniques, niveaux d'énergies, probabilités de transition

### 1. Introduction

Les lanthanides trivalents sont utilisés comme dopants dans des matériaux pour des applications en physique des lasers [1] ou dans le domaine de l'information quantique [2]. La détermination et l'interprétation des niveaux d'énergie du spectre d'émission VUV de ces ions sont d'une grande importance pour étudier leurs propriétés optiques avant de les insérer dans des matrices cristallines. On s'intéresse, dans ce travail, au calcul des niveaux d'énergie et des probabilités de transition ainsi qu'à d'autres observables ( $g$ ,  $J$ , ...) de l'ion libre  $Er^{+3}$ .

### 2. Contextes théorique et expérimental

Les prédictions théoriques ont été faites au moyen de la chaîne de codes COWAN basée sur la méthode paramétrique de Slater-Racah [3] où toutes les intégrales radiales et de spin-orbite sont considérées comme des paramètres ajustables. Pour l'ion  $Er^{+3}$ , la base du calcul est composée de deux configurations de chaque parité,  $4f^{11}$ ,  $4f^{10}6p$  dans la parité impaire et  $4f^{10}5d$ ,  $4f^{10}6s$  dans la parité paire. Les paramètres Hartree-Fock Relativistes (HFR) sont corrigés avec des facteurs d'échelle SF (Scaling Factor) issus des éléments isoelectroniques et isoioniques de l'ion [4,5].

Le spectre VUV de l'ion  $Er^{+3}$  est obtenu par une source à étincelle glissante sous incidence normale avec le spectrographe de 10.7m à haute résolution de l'observatoire de Paris-Meudon. Il est enregistré sur deux types de détecteurs: les plaques photographiques (PP) et les écrans phosphore photostimulables (IP) dans la région spectrale allant de 700-2500 Å.

### 3. Conclusion

Dans le présent travail, nous avons identifié 50 nouveaux niveaux d'énergie avec des déviations moyennes de  $40 \text{ cm}^{-1}$  et  $32 \text{ cm}^{-1}$  pour les configurations impaire et paire respectivement, permettant de classer 250 raies spectrales.

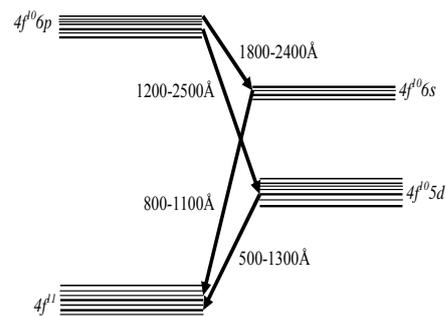


Fig. 1 : Diagramme de transition des configurations de plus basses énergies de l'ion  $Er^{+3}$ .

### Références / References

- [1] D. N. Petrov, J. Phys. Chem. Sol, 107 (2017) 18-22.
- [2] C. Yin, M. Rancic, G. G. de Boo, N. Stavrias, J.C. McCallum, M. J. Sellars et S. Rogge, Nature, 497 (2013) 91-94.
- [3] Cowan R. D., "The Theory of Atomic Structure and Spectra," Berkeley CA: University of California Press, (1981).
- [4] A. Meftah, J. F. Wyart, J. Sinzelle, W. Ü. L. Tchang-Brillet, N. Champion, N. Spector et J. Sugar, Physica Scripta, 77 (2008) 10.
- [5] A. Meftah, S. Ait Mammari, J. F. Wyart, W. Ü. L. Tchang-Brillet, N. Champion, C. Blaess, D. Deghiche et Lamrous, J. Phys B: At. Mol. Opt. Phys, 49 (2016) 19.

### CO3: Étude par dynamique moléculaire de la conductivité thermique de nanofluides en vue de l'amélioration de l'efficacité d'un distillateur solaire

Ilyes MITICHE<sup>a\*</sup>, Said MAKHLOUF<sup>b</sup>, Omar LAMROUS<sup>a</sup>.

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université de Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie

<sup>b</sup> Laboratoire de Mécanique, Structures et Énergétique, Université de Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie

\* email : mitiche.ilyes@gmail.com

#### Résumé :

La présence de particules solides de tailles nanométriques dans un fluide conduit à une augmentation anormale de la conductivité thermique du nanofluide (NF). Ce travail a pour objectif d'explorer la question via des simulations de dynamique moléculaire (DM) pour mieux comprendre l'impact de ces nanoparticules (NP) sur la conductivité thermique (CT) du NF, par exemple, ici, des NP de cuivre dans un fluide d'argon. Cette première étape servira d'orientation pour améliorer l'efficacité d'un distillateur solaire.

**Mots clés / Keywords :** Nanofluides, Dynamique moléculaire, Green-Kubo

## 1. Introduction

L'utilisation de NP rend possible la création de nouveaux matériaux aux propriétés physiques remarquables. C'est le cas par exemple, de propriétés de conductivité thermique apportées par les NP dispersées dans des fluides. Dans cette étude, la CT d'un NF cuivre/Argon (Cu/Ar) a été calculée en utilisant la méthode de DM. L'effet de la concentration des NP sur la CT a été étudié.

## 2. Méthode de simulation

Huit NP de Cu de 2,7 nm de diamètre dans une cellule contenant des atomes d'Ar dont le volume varie en fonction de la fraction volumique des NP ont été simulées avec des conditions aux limites périodiques. Le potentiel EAM a été utilisé pour décrire les interactions Cu-Cu, par contre, pour les interactions Ar-Ar et Ar-Cu, le potentiel de Lennard-Jones a été considéré. La CT a été calculée par la relation de Green-Kubo [1].

## 3. Résultats

La CT des NFs Ar/Cu a été calculée pour des fractions volumiques de 0 à 4,0 % à une température de 87K, telle que montrée dans la figure 1. On observe une augmentation linéaire de la CT de 12% jusqu'à une fraction volumique de nanoparticules de 3%. Ce résultat est conforme aux résultats théoriques [2] et expérimentaux [3] relevés dans la littérature.

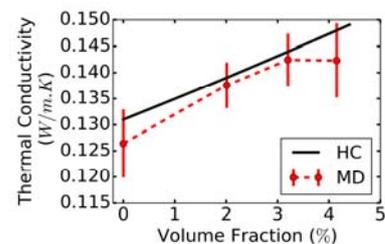


Figure 1 : CT en fonction de la fraction volumique des NP

## 4. Conclusion

La CT du NF Ar/Cu augmente avec la fraction volumique des NP de Cu et ce jusqu'à une concentration limite. La comparaison de nos résultats avec ceux de la littérature a permis de valider la simulation par la méthode de dynamique moléculaire proposée. La prochaine étape consiste à simuler la CT du NF eau saumâtre/NP en vue d'améliorer la condensation de l'eau dans un distillateur solaire.

#### Références

- [1] M.G. Muraleedharan et al, Journal of Physics : Condensed Matter, 29 (2017) pp 155302-155309.
- [2] R.L. Hamilton et al, Industrial & Engineering Chemistry fundamentals, 1(1962) pp 187-191.
- [3] W. Yu et al, Heat Transfer Engineering, 29(2008) pp 432-460.



## CO5 : Transitions vallée-dépendantes dans le système Fe/WS<sub>2</sub>

Omar Messaoudi\*, Hamid Bouzar

Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud Mammeri Tizi Ouzou,  
Tizi Ouzou, Algérie.

\* email : aom.mess@gmail.com

### Résumé / Abstract

Nous présentons une étude *ab initio* des propriétés électroniques d'une monocouche TMD (Transition Metal Dichalcogenide) WS<sub>2</sub> recouverte d'une couche atomique de Fe. Nos calculs montrent que le système est un demi-métal avec un gap de 1 eV pour les spins majoritaires. Plus encore, les effets de la brisure de la symétrie de renversement par le temps, due à la surcouche magnétique de fer, fait apparaître des vallées non-dégénérées K et K', ce qui engendre un effet non négligeable sur les états excités induits par un champ extérieur circulairement polarisé.

**Mots clés / Keywords :** TMD, WS<sub>2</sub> Fe, Circular dichroism, valleytronics, Half-metallic

### 1. Introduction

Les systèmes à deux dimensions à structure hexagonale présentent une brisure de symétrie d'inversion [1]. L'absence de cette symétrie fait émerger un nouveau degré de liberté sous forme de pseudo-spin qui décrit la structure de bande aux coins de la zone de Brillouin : les vallées K et K'. Ces dernières sont inéquivalentes mais énergétiquement dégénérées. Ce nouveau degré de liberté intervient dans les règles de sélection, ce qui permet d'expliquer les transitions observées lorsqu'on applique un champ circulairement polarisé.

### 2. Transitions induites par polarisation circulaire de la lumière

La figure ci contre représente les transitions observées pour 2 branches voisines près du niveau de Fermi. On peut clairement observer que, selon la polarisation de l'onde lumineuse incidente, les vallées K et K' présentent des probabilités de transition différentes selon que la lumière soit polarisée gauche ou droite (L, R). Cette différence d'absorption correspond à ce qu'on appelle un dichroïsme circulaire.

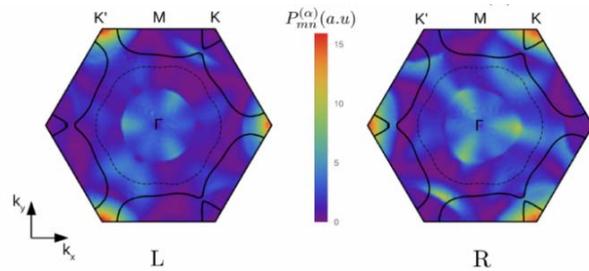


Figure [2]: Transitions observées pour une excitation circulairement polarisée gauche ou droite (L, R)

### 3. Conclusion

La brisure de la symétrie de renversement par le temps, induite par la présence de la couche de fer, fait apparaître un dichroïsme circulaire permettant d'adresser sélectivement les vallées K et K' en utilisant une source de lumière circulairement polarisée [3], permettant ainsi diverses applications en optoélectronique et vallée-tronique.

### References

- [1] J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, Nat. Rev. Mater. 1, 16055 (2016)
- [2] O. Messaoudi, J. Ibañez Azpiroz, H. Bouzar, and S. Lounis, Phys. Rev. B 97, 035404 (2018)
- [3] G. Aivazian, Z. Gong, A. M. Jones, R.-I. Chu, J. Yan, D. G. Mandrus, C. Zhang, D. Cobden, W. Yao, and X. Xu, Nat. Phys. 11, 148 (2015)

**CO6: Atomic scale modeling of reaction mechanism of fluorine and oxygen atoms  
with silicon**

Lemya. Bouamama<sup>1\*</sup>, Amel. Lounis<sup>1</sup>, Arezki. Mokrani<sup>2</sup>, Abdelhamid. Ziane<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou, Algérie

<sup>2</sup> Institut des Matériaux Jean Rouxel, BP 32229, 2 rue de la Houssinière, F-44322 Nantes Cedex, France

\* E-mail: [lemya.bouamama@yahoo.fr](mailto:lemya.bouamama@yahoo.fr)

Abstract

Chemical etching of silicon by fluorine plasma is one of the most important materials tailoring techniques in the manufacture of semiconductor devices [1, 2]. The etching mechanism with fluorine plasma, which generates a variety of high-energy reactive atoms, ions and even polyatomic radicals, is very complicated [3]. Although there are many theoretical as well as experimental studies but still the mechanism of fluorine etching process is not comprehensively understood [4-6]. The objective of this work is the modeling of the physical processes in the atomic scale, which are the base of the chemical etching of silicon by fluorine plasma.

In the present study we carried out density functional calculations of the interaction between fluorine, oxygen and silicon atoms. We begin by examining the reaction behaviour of F and O and Si atoms in  $\text{Si}_n\text{F}_m$  ( $n=1,2$  and  $m=1-4$ ) and  $\text{Si}_n\text{O}_k$  ( $n=1,2$  and  $k=1-4$ ) clusters. We have found that, the fluorine atoms form the Si-F bond which is shorter and more energetic (1.60 Å, 5.81 eV) than the Si-Si bond (2.27 Å, 3.84 eV). In the  $\text{Si}_2\text{F}_m$  ( $m=1-4$ ) clusters, the interatomic distance Si-Si increases with the increase of fluorine atoms number. However, our calculations shown that the Si-O bond is the most favored (7.28 eV) in  $\text{Si}_n\text{O}_k$  ( $n=1,2$  and  $k=1-4$ ) as compared to Si-F bond.

We have also studied diffusion mechanisms of fluorine atom adsorbed on Si (001) surface by using first-principles calculations. We find that both the adsorption energy for the most stable site (5.80eV) and the energy barrier diffusion of the fluorine atom from a dangling bond to another (1.6 eV) are high. These calculations are in good agreement with Ezaki results [7].

Keywords : Silicon, Fluorine, Oxygen, Adsorption, etching, Plasma

References

- [1] J. W. Coburn and H. F. Winters: J. Vac. Sci. Technol. 16 (1979) 1734
- [2] H. F. Winters, J. W. Coburn and T. J. Chuang: J. Vac. Sci. Technol. B1(1983) 469.
- [3] J. L. Mauer, J. S. Logan, L. B. Zielinski and G. C. Schwartz: J. Vac. Sci. Technol. 15 (1978) 1734
- [4] F. A. Houle: J. Appl. Phys. 60 (1986) 3018.
- [5] P. J. van den Hoek, W. Ravenek and E. J. Baerends: Phys. Rev. B38 (1988) 12508.
- [6] B. I. Craig and P. V. Smith: Surf. Sci. 239 (1990) 36.
- [7] T. Ezaki, T. Ohno, Surf. Sci (2000) 79–86

## CO7 : Etude par simulation de l'effet de charges sur les décharges partielles dans un diélectrique solide

Faouzi DJEMMAL\*, Fadila LALAM

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou, Algérie

\* email : djfaouzi2009@yahoo.fr

### Résumé / Abstract

L'objectif de notre travail est l'étude de l'interaction entre les décharges partielles et la charge d'espace dans un diélectrique solide. Dans ce papier, nous présentons les résultats de la simulation de l'effet de la présence de charges dans un polyéthylène réticulé, isolant un câble, avec une micro cavité contenant de l'air. L'effet de la charge a été mis en évidence, en variant sa position dans le volume de l'isolant, son signe et le diamètre de la micro cavité. La simulation a été faite avec le logiciel COMSOL Multiphysics qui est un outil, pour la résolution des équations aux dérivées partielles, basé sur la méthode des éléments finis.

Mots clés : décharges partielles, polyéthylène réticulé, microcavité d'air, COMSOL Multiphysics.

### 1. Introduction

Il n'est plus à démontrer que les décharges partielles (DP) et l'accumulation de charges dans les isolants sont parmi les principales causes du vieillissement électrique, ou claquage à long terme des isolants. Ces deux phénomènes peuvent paraître liés ; en effet lorsque des DP se produisent dans un isolant, une charge d'espace s'accumule dans le matériau et l'accumulation de la charge d'espace réduit la rigidité du matériau et affecte la génération de DP [1,2].

### 2. Résultats de simulation

La distribution du potentiel dans l'isolant est gouvernée par l'équation de Poisson [3].

$$\nabla^2 V = -\frac{\rho}{\epsilon} \quad (1)$$

Où,  $\epsilon$  est la constante diélectrique,  $V$  est le potentiel électrique et  $\rho$  est la densité de charge d'espace.

Cette équation est résolue avec COMSOL Multiphysics en imposant des conditions aux limites sur les frontières, et en utilisant la méthode de discrétisation de la structure simulée sur un maillage à l'aide d'éléments tétraédriques,

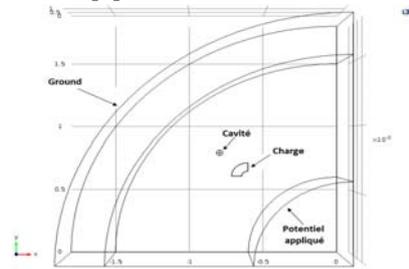


Fig. 1 : Configuration de la partie isolante du câble contenant une cavité et une charge avec les conditions aux limites.

### 3. Conclusion

Nos résultats de simulations montrent l'effet de la taille et de l'emplacement de la micro cavité d'air dans l'isolant sur la distribution du potentiel électrique et sur l'apparition de la décharge partielle.

### Références

- [1] G.Chen, 'Space charge and its impact on DC breakdown of polymeric materials', 18<sup>th</sup> International Symposium on High Voltage Engineering, 2013.
- [2] G. Mazzanti, M. Marzino, 'Extruded Cables for High-Voltage Direct-Current Transmission: Advances in Research and Development', IEEE PRESS, 2013, Chapter 6, pp. 268-277.
- [3] A. Haddad, D.F. Warne, 'Advances in High Voltage Engineering', IET Power and Energy, 2004, Chapter 11, p. 515-518.

## CO8 : Simulation et optimisation d'un laser à double cavités passivement Q-déclenché dopé Er:Tm.

Djillali djellout, Hocine Djellout, Rabah Mokdad

Laboratoire LPCQ, UMMTO, Tizi-Ouzou, Algérie.  
email : [djellout85@yahoo.fr](mailto:djellout85@yahoo.fr)

### Résumé

Cette communication porte sur la modélisation et la simulation du fonctionnement d'un laser à double cavités entièrement fibré passivement Q-déclenché dopé Er:Tm, deux trains d'impulsions sont produit par ce laser, le premier est à la longueur d'onde de 1570 nm, et le deuxième est à 1860 nm, dans ce travail on montre que la concentration en Tm est un paramètre important pour l'optimisation des deux signaux lasers à 1860 nm et 1570nm. Mots clés : laser à fibre, Q-déclenchement passive, double cavité.

### 1. Introduction :

Les lasers impulsions passivement Q-déclenchés, présentent un grand intérêt dans divers domaines d'applications médecine, télémétrie, détection de polluants ...[1]. Ils sont simples à réaliser et maniables. Récemment certains auteurs ont réalisé des lasers dont l'absorbant saturable est mis en cavité séparée pour diminuer la durée de vie du niveau métastable de ce dernier [2,3], ceci permet d'augmenter la gamme des terres rares pouvant être utilisé comme absorbant saturable.

### 2. Résultats de simulations

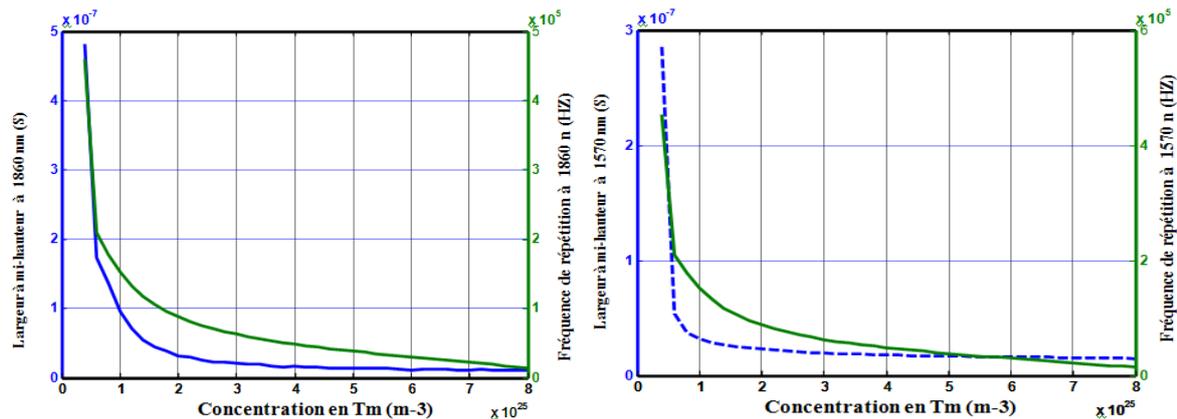


Figure2 : largeur à mi-hauteur et fréquence de repetition des deux signaux lasers en fonction de la concentration en Tm.

### 3. Conclusion :

La modélisation et la simulation d'une architecture laser à double cavité passivement Q-déclenché Er:Tm est effectuée, deux trains d'impulsions laser à 1570nm et 1860nm sont observés dans nos simulations, on montre aussi que la concentration en ions Tm est un paramètre important pour l'optimisation de ce type de laser

### Références

- [1] Michel J. F. Digonnet, ``Rare Earth Doped Fiber Lasers and Amplifiers, 2001.
- [2] V. V. Dvoryn, V. M. Mashinsky and E. M. Dianov, *Optics Letters*, vol 32(2007) pp 451-453
- [3] Yi Lu, Xijia Gu, *IEEE photonics journal* vol6 No 3 (2014).

## CO9 : Etude DFT des ligands hétérocycliques bidentés d'intérêts biologique et environnemental

Hayat Ayache<sup>1,2</sup>, Fazia Derridj<sup>3</sup>, Aziz Elkechai<sup>1</sup>, Dalila Hammoutène<sup>2</sup>

<sup>1</sup> LPCQ, Faculté des Sciences, UMMTO, Tizi-Ouzou, Algeria

<sup>2</sup> LTMM, Faculté de Chimie, USTHB, 16111, Algiers, Algeria

<sup>3</sup> LPCM, Faculté des Sciences, UMMTO, Tizi-Ouzou, Algeria

\* email : hayatayache@yahoo.com

### Résumé

Les ligands hétérocycliques bidentés constituent une classe intéressante d'agents chélatants capables de coordonner les ions métalliques en donnant des complexes pouvant servir de modèles pour la dépollution métallique. L'étude des spectres de vibration infrarouge, résonance magnétique nucléaire, UV-visible et de fluorescence a été faite par le biais de la DFT et la TD-DFT avec la fonctionnelle PBE0 et la base de fonctions 6-31++G\*\*. Les descripteurs locaux et globaux ont été déterminés pour détecter les sites les plus actifs lors d'une attaque par des métaux de transition tels que Zn et Cd. Un accord quantitatif satisfaisant a été trouvé confirmant la validité de notre modèle théorique à reproduire les données expérimentales.

Mots clés : ligands hétérocycliques, DFT, TD-DFT, descripteurs locaux, descripteurs globaux.

### 1. Introduction

Dans le but d'étudier les propriétés structurales, électroniques et spectroscopiques de complexes moléculaires portant des ligands hétérocycliques azotés dérivés du benzoxazole [1], des calculs DFT/PBE0 ont été effectués à l'aide de Gaussian09, les effets du solvant (DMF) étant pris en compte en utilisant le modèle PCM implémenté dans G09. Les descripteurs locaux et globaux ainsi déterminés sur ces systèmes hétérocycliques du benzoxazole à base de zinc et de cadmium ont été confrontés à des données expérimentales.

### 2. Travaux effectués

Des optimisations de géométries des systèmes moléculaires étudiés ont été effectuées en utilisant la technique DFT/PBE0/6-311++G\*\* couplée au modèle PCM, suivies par des calculs de fréquence pour s'assurer qu'il s'agit bien de minimas sur la PES. Par ailleurs, des calculs TD-DFT ont permis la détermination de différents spectres (Infrarouge, UV-visible et RMN) alors que la spectroscopie NMR a été explorée via la méthode GIAO dans CDCl<sub>3</sub>. Les énergies d'excitation verticales calculées pour les 10 premiers états excités (de l'état singulet) sont ensuite comparées aux résultats des spectres électroniques expérimentaux.

### 3. Conclusion

Les résultats obtenus grâce à la méthode DFT/PBE0/PCM utilisée reproduisent correctement les données expérimentales, notamment en spectroscopie IR, UV-Visible et RMN. Ces spectres (IR dans le DMF et RMN dans le CDCl<sub>3</sub>) ont permis l'identification et la caractérisation des ligands bidentés, ainsi que l'accès à l'ordre de stabilité de (C=N) du cycle benzénique dans les ligands. Enfin, en électrochimie, la réduction réalisée sur des ligands expérimentaux conduit à un bon accord avec les résultats théoriques trouvés dans la littérature. Compte tenu de ces résultats, ces ligands hétérocycliques se trouvant fonctionnalisés, par deux fonctions amides, font de ces molécules des systèmes capables de complexer les métaux tels que Zn ou Cd.

### Références

[1] (a) Geary WJ. Coord Chem Rev 1971;7:81–122. (b) Gaballa AS, Asker MS, Barakat AS, Teleb SM. Spectrochim Acta A 2007;67:114–21.

## CO10 : Étude du couplage plasmonique longue distance : Application à la spectroscopie Raman exaltée en surface

Macilia Braik<sup>1\*</sup>, Abderrahmane Belkhir<sup>1</sup>, Abdelaziz Mezeghrane<sup>1</sup> et Nordin Félidj<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi Ouzou, Algérie

<sup>2</sup> Interfaces, Traitements, Organisation et Dynamique des Systèmes, Université Paris Diderot, Paris, France

\* email : massiliabraik@gmail.com

### Résumé / Abstract

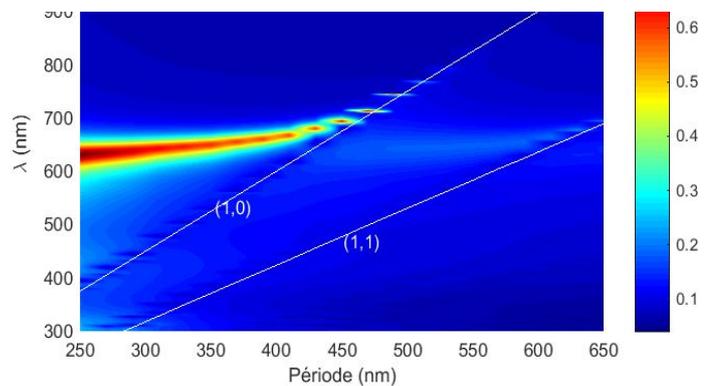
L'exaltation du champ électromagnétique local dans les structures plasmoniques est exploitée dans plusieurs applications en nano optique comme la spectroscopie Raman exaltée en surface (SERS). Dans ce travail, nous nous sommes intéressés au couplage à longue distance entre un plasmon de surface localisé (LSP) et l'anomalie de Rayleigh (AR) d'un réseau de nanoparticules d'or. Lorsque la position de l'AR est proche de celle de la résonance LSP, un couplage se produit permettant ainsi une forte exaltation du champ local. Nous avons montré que cette exaltation dépend de l'environnement diélectrique dans lequel est inséré le réseau métallique étudié.

**Mots clés / Keywords :** Plasmonique, anomalie de Rayleigh, SERS.

Très récemment, Khlopin et al. [1] ont montré que l'interaction entre les modes LSPR et diffractés dans un réseau de nanoparticules métalliques génèrent des modes hybrides capables d'exalter le champ électromagnétique local.

Dans cette présente étude, nous avons considéré un réseau carré 2D de nano-disques en or déposés sur un substrat en verre ( $n=1.5$ ). Deux cas sont considérés : réseau recouvert d'air ou d'huile. Les spectres d'extinction calculés grâce à la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) montrent un couplage du plasmon localisé avec l'anomalie de Rayleigh due au substrat lorsque la longueur d'onde de cette anomalie est proche de celle de la LSPR. Ce couplage donne naissance à un mode hybride caractérisé par un facteur de qualité élevé entraînant une exaltation du champ local. Les résultats obtenus montrent également que ce couplage est plus intense en présence d'un environnement symétrique, *i.e.* quand l'indice du superstrat (l'huile dans ce cas) est proche ou égal à l'indice du substrat.

Fig.1 : Spectre d'extinction (dans l'huile) à différentes périodes, calculé par FDTD.



La figure 1 montre une cartographie de l'intensité d'extinction en fonction de la période et de la longueur d'onde calculée par FDTD. Comme on peut le voir, le couplage se situe vers la période 490nm correspondant à l'anomalie de Rayleigh d'ordre (1,0). Les résultats obtenus par calcul FDTD sont en bon accord avec ceux obtenus expérimentalement.

### References

[1] D. Khlopin, F. Laux, W. P. Wardley, J. Martin, G. A. Wurtz, J. Plain, N. Bonod, A. V. Zayats, W. Dickson, and D. Gérard, J. Opt. Soc. Am. B 34, 691-700 (2017).

**CO11: Diffusion de magnons via une nanojonction sandwich de type  
A(Ferro)/B(Antiferro)/A( Ferro)**

Lamia Saim<sup>a\*</sup>, Rachid Tigrine<sup>a,b</sup>

<sup>1</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou

<sup>2</sup> Laboratoire des Molécules et des Matériaux Université du Maine, Av. Olivier Messiaen, 72085 Le Mans Cedex 09 France.  
e-mail : lamiasa2010@yahoo.fr

Résumé

Ce travail est consacré à l'étude d'ondes de spins diffusées par une double interface dans une structure cristalline à maillage cubique centré suivant la direction 100. Le model examiné est constitué de deux systèmes semi-infinis d'un même matériau A ferromagnétique, reliés par un film ultramince, composé de cinq plans atomiques d'un matériau B antiferromagnétique. Pour cette étude nous utilisons la méthode de raccordement. Les résonances observées, sont dues à l'interaction entre les modes localisées induits par le défaut et le continuum de propagation du guide d'ondes parfait.

Mots clés : onde de spin, méthode de raccordement, interfaces ferromagnétique.

## 1. Introduction

Les surfaces et les interfaces présentent un grand intérêt dans le domaine de la nanotechnologie [1-2]. L'une des obsessions de la technologie moderne est de créer des systèmes atomiques capables de transférer une information à l'échelle du manomètre. L'existence d'interfaces dans les matériaux constitue une brisure de symétrie qui peut affecter et modifier profondément ces propriétés magnétiques et dynamiques.

## 2. Coefficients de transmission et de réflexion

Les coefficients de réflexion et de transmission sont donnés respectivement par [3-4]:

$$r_{\bar{v}\bar{v}} = \left| \rho_{\bar{v}\bar{v}} \right|^2 = \frac{V_{\bar{v}}}{V_{\bar{v}}} \left| R_{\bar{v}\bar{v}} \right|^2 \quad \text{et} \quad t_{\bar{v}\bar{v}} = \left| \tau_{\bar{v}\bar{v}} \right|^2 = \frac{V_{\bar{v}}}{V_{\bar{v}}} \left| T_{\bar{v}\bar{v}} \right|^2$$

Ou  $V$  désigne un mode propageant du guide d'onde et  $\bar{v}$  le mode incident.  $\tau$  et  $\rho$  sont les éléments de la matrice de diffusion.

## 3. Conclusion

Les résultats numériques montrent que les figures présentent des pics de résonances dont les origines sont attribuées au couplage entre les modes propageant de volume et les modes localisés dus à la présence du défaut.

## Références

- [1] N. Shibata, S. D Findlay, S. Azuma, T. Mizoguchi, T. Yamamoto, Y. Ikuhara., *Nature Materials* 8, 654–658 (2009)
- [2] Verbeeck, G. V. Tendeloo, A. Brinkman & H. Hilgenkamp, *Nature Materials* 5, 556 - 560 (2006).
- [3] B. Bourahla, O. Nafa, A. Khater and R. Tigrine, *Physica E* 43, 1213 (2011).
- [4] P. Böni, B. Roessli, D. Görlitz and J. Kötzler, *Phys. Rev. B* 65, 144434 (2002).

## CO12 : Interprétation des configurations à cœur excité dans le Néodyme trois fois ionisé (Nd IV)

Kamel Arab\*, Djamel Deghiche

Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri<sup>1</sup>, BP 17 RP, 15000 Tizi-Ouzou, Algérie

\* email : [Kamel-sub@outlook.fr](mailto:Kamel-sub@outlook.fr)

### Résumé

Dans ce travail, on s'intéresse à l'interprétation des configurations électroniques à cœur excité dans les spectres des ions trois-fois chargés. Ces derniers ont beaucoup d'applications dans la physique des matériaux laser. La détermination des niveaux d'énergie de ces configurations permettrait de confirmer l'effet de réduction d'intensité du faisceau de transitions fondamental  $5p^64f^3-5p^64f^25d$  au profit du faisceau  $5p^64f^3-5p^54f^35d$  par interaction de configurations  $5p^64f^25d-5p^54f^35d$ . Pour cela, les enregistrements du spectre de Néodyme effectués sur le spectrographe VUV de 10m à l'observatoire de Meudon ont été étendus aux courtes longueurs d'onde allant jusqu'à 350 Å. Ces effets d'interactions de configurations ont été étudiés par calculs paramétriques des niveaux de la parité paire basés sur la méthode théorique de Slater-Racah. L'analyse spectrale basée sur l'identification de plus de 400 raies nous a conduit à la détermination de 120 niveaux d'énergie de la configuration à cœur excité  $5p^54f^35d$ . Les résultats confirment la réduction des probabilités de transitions du faisceau fondamental  $5p^64f^3-5p^64f^25d$  prédite dans la littérature.

Mots Clés : Spectroscopie atomique; Lanthanide; Slater-Racah; Configuration à cœur excité; Etincelle glissante.

### REFERENCES

- [1] J.F. Wyart, A. Meftah, W.-Ü L. Tchang-Brillet, N. Champion, O. Lamrous, N. Spector et J. Sugar, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 40, 3957 (2007).
- [2] D. Deghiche, A. Meftah, J. F. Wyart, N. Champion, C. Blaess et W. Ü. L. Tchang-Brillet, Physica Scripta, 90, 17 (2015).
- [3] J. Reader, J. F. Wyart, Phys. Rev. A, 80, 042517 (2009).
- [4] R D Cowan 1981, the theory of Atomic structure and Spectra (Berkeley, CA: University of California Press).

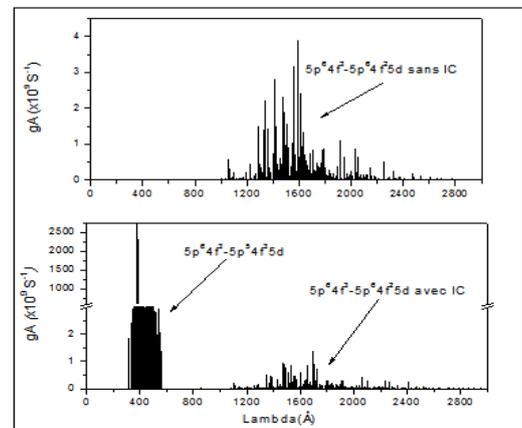


Figure 1: Effet des interactions de configurations sur la réduction du faisceau fondamental  $5p^64f^3-5p^64f^25d$

## CO13 : Modélisation d'un laser entièrement fibre passivement Q-déclenché par la méthode FDTD

Zaina Sidi Ahmed<sup>1a\*</sup>, Rabah Mokdad<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Laboratoire de physique et chimie quantique, Université Mouloud Mammeri, 15000 Tizi-ouzou, Algérie

email : [sidiahmedz@yahoo.com](mailto:sidiahmedz@yahoo.com)

Résumé

Dans ce travail, nous avons développé la méthode des différences finies dans le domaine temporel (FDTD) basée sur la discrétisation dans le temps des équations cinétiques décrivant le fonctionnement d'un laser Q-déclenché à fibre de haute puissance. L'objectif de notre étude est, d'une part, l'optimisation des paramètres géométriques intervenant dans le fonctionnement du laser pour améliorer les caractéristiques de sortie, et d'autre part, choisir un pas de discrétisation adapté en vue d'obtenir de meilleurs résultats tout en réduisant la complexité de l'algorithme de calcul.

Mots clés FDTD, laser Q-déclenché

### 1. Introduction

Les lasers à fibre Q-déclenchés ont attiré beaucoup d'attention en raison de nombreuses applications dans divers domaines, et notamment la détection de fibres, la médecine et la télémétrie [1]. Pour ce type de lasers, le Q-déclenchement est effectué activement par les composants électro-optiques et modulateurs acousto-optiques ou passifs par des absorbants saturables [2]. Dans notre travail nous nous sommes intéressés à cette dernière catégorie de lasers.

### 2. La mise en équation du laser par la FDTD

Les équations cinétiques du laser sont données par [2] dans le cas d'un modèle ponctuel. La résolution de ces équations différentielles est faite par la FDTD avec un pas de discrétisation optimisée. Les résultats obtenus dans le cas de nos simulations sont représentés dans la figure ci-dessous :

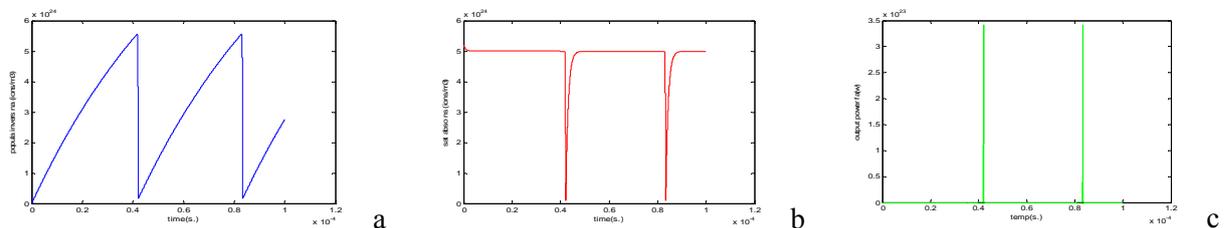


Figure: a- évolution de l'inversion de population en fonction du temps, b- évolution de la densité AS en fonction du temps et c- évolution de la puissance de sortie du laser en fonction du temps

### 3. Conclusion

Dans ce travail nous avons présenté les résultats obtenus en utilisant l'algorithme FDTD pour la résolution des équations cinétiques d'un laser Q-déclenché. Les résultats obtenus sont prometteurs car ils sont comparables à ceux présentés par d'autres auteurs tout en réduisant la complexité algorithmique.

### Références

- [1] Z.\_C. Luo, J.\_R. Liu, H.\_Y. Wang, A.\_P. Luo\*, and W.\_C. Xu” Wide\_Band Tunable Passively Q\_Switched All\_Fiber Ring Laser Based on Nonlinear Polarization Rotation Technique”, Laser Physics, 2012, Vol. 22, No. 1, pp. 203–206.
- [2] H. Djellout1 & L. Djebala1 & D. Djellout1 & R. Mokdad”Analytical equation for optimizing the passively Q-switched lasers” The Optical Society of India 2015.

**CO14: Etude théorique avec simulation numérique des propriétés dynamiques des structures de nano-alliages de surfaces ordonnées Au<sub>3</sub>Pd, AuPd et AuPd<sub>3</sub>**

Bilal Menguelti<sup>a\*</sup>, Rabah Chadli<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Laboratoire de Physique et Chimie Quantique, Université Mouloud Mammeri, Tizi-Ouzou, Algérie  
 \* email : bilal.menguelti@gmail.com

Résumé/Abstract

Dans ce travail nous avons effectué un calcul des propriétés dynamiques des trois structures de nano-alliages de surfaces ordonnées Au<sub>3</sub>Pd, AuPd, AuPd<sub>3</sub>, obtenues pour différentes concentrations d'atomes de Pd déposées sur un substrat de surface Au(110). En utilisant la théorie de raccordement associée au formalisme des fonctions de Green, évaluée dans l'approximation harmonique, les courbes de dispersions des phonons, suivant les directions de hautes symétries,  $\Gamma$ X, XS, SY et Y  $\Gamma$ , ainsi que les densités d'états correspondantes, sont déterminées. Les résultats obtenus révèlent que le nombre de branches de phonons de surface observées est sensible à la concentration d'atomes de Pd en surface.

Mots clés: Nano-alliage, Phonons de surface, LDOS.

1. Introduction

Notre but à travers ce travail est d'examiner l'influence de la concentration d'atomes adsorbés en surface d'un substrat métallique sur les propriétés vibrationnelles de celles-ci. Pour ce faire, nous avons choisi les trois structures de nano-alliages de surfaces Au<sub>3</sub>Pd, AuPd, AuPd<sub>3</sub>, obtenues pour des concentrations d'atomes de Pd, 0.25 mc, 0.5 mc et 0.75, déposés sur un substrat d'or (110) [1].

2. Méthode de calcul

Le développement de la méthode de raccordement permet, en décrivant le mouvement de vibration des atomes d'un système semi-infini par un nombre fini d'équations, de déterminer les modes vibrationnels localisés au voisinage des trois structures de nano-alliages de surfaces citées ci-dessus, ainsi que les spectres des densités d'états correspondants, obtenus par l'équation (1) suivante [2] :

$$D(\Omega) = \sum_{\varphi_x \varphi_y} \sum_{\xi \alpha} \rho_{(\alpha \alpha)}^{(\xi \xi')}(\Omega, \varphi_x, \varphi_y) = -\frac{2\Omega}{\pi} \sum_{\varphi_x \varphi_y} \sum_{\xi \alpha} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} [Im G_{\alpha \alpha}^{\xi \xi'}(\varphi_x, \varphi_y, \Omega^2 + i\varepsilon)], \quad (1)$$

3. Phonons de surface de la structure AuPd<sub>3</sub>

Sur la Fig.1 ci-contre sont présentés les états de phonons de surface relatifs à la structure de nano-alliage de surface ordonnée AuPd<sub>3</sub>. On peut voir plusieurs branches de phonons, repérées sur une large gamme de fréquences, allant des plus basses aux plus hautes énergies, même dans les deux régions de gaps.

4. Conclusion

Nos résultats numériques, relatives aux trois structures de nano-alliages de surfaces étudiées, montrent la présence de nouvelles branches de phonons de surface en comparaison avec le système de surface propre Au(110), dont le nombre dépend fortement de la concentration d'atomes de Pd. Références

[1] I. Atanasov and M. Hou, Surf. Sci, 603 (2009) 2639-2651.  
 [2] H. Grimech, A. Khater, Surf. Sci, 323 (1995) 198-206.

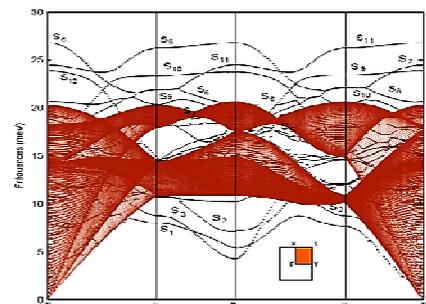


Fig. 1 : Phonons de surface de la structure AuPd<sub>3</sub>.







Laboratoire de Physique et Chimie Quantique  
**4<sup>èmes</sup> Journées des Doctorants**

**PROGRAMME**

25 et 26 mars 2018

Auditorium Hasnaoua 1 (UMMTO)

	Dimanche 25/03/2018	Lundi 26/03/2018
<b>LEGENDE</b>	08h30 : <b>Accueil &amp; Inscriptions</b>	08h45 : <b>CO10</b> - M. BRAIK 09h05 : <b>CO11</b> - L. SAIM 09h25 : <b>CO12</b> - K. ARAB 09h45 : <b>CO13</b> - Z. SIDAHMED 10h05 : <b>CO14</b> - B. MENGUELTI
<b>CP : Communication Plénière (45 mn)</b>	09h00 : <b>Ouverture</b>	
	09h15 : <b>CP1</b> <b>A. TADJEDDINE</b> (Paris-sud)	
	10h00 : Pause Café	10h35 : Pause Café
	10h30 : <b>CO1</b> - T. ZEGHDOUDI 10h50 : <b>CO2</b> - A. CHIKH	11h00 : <b>CP3</b> <b>A. GUITTOUM</b> (CRN Alger)
	11h10 : <b>CO3</b> - L. MITICHE 11h30 : <b>CO4</b> - S. AMROUCHE	12h00 : <b>Clôture et photo des JDD'18</b>
	12h00 : <b>Déjeuner Auditorium</b>	12h30 : <b>Déjeuner Restaurant "TWELVE"</b>
<b>CO : Communication Oraie (20 mn)</b>	13h30 : <b>CP2</b> <b>I. BELLABAS</b> (U. Béjaia)	<b>Départ</b>
	14h15 : <b>CO5</b> - O. MESSAOUDI 11h35 : <b>CO6</b> - L. BOUAMAMA	
	14h55 : Pause Café	
	15h30 : <b>CO7</b> - F. DJEMMAL 15h50 : <b>CO8</b> - D. DJELLOUT 16h10 : <b>CO9</b> - H. AYACHE	