

EFFET D'HYBRIDATION SUR LE COMPORTEMENT DE SEMI-CONDUCTEUR TYPE Fe(III)-OXO/TiO₂ : ETUDE COMPUTATIONNELLE

**BEZZINA Belgacem, BOULKROUNE Sofiane, GHELLOUDJ Oualid,
RAMOUL Chems Eddine, KHATMI Djameledine**

Abstract : Les complexes métalliques ont une importance capitale en différents domaines industriels, tels que l'énergie renouvelable, biomécanique, métallurgie, peinture, chimie, biochimie, agricole ...etc. Plusieurs études expérimentales et théoriques ont été développées pour combiner entre ces complexes pour créer des nouveaux matériaux plus performants et répondant aux exigences les plus sévères possible. À cette raison nous avons étudié le comportement de croissance et la stabilité de petits agrégats à l'échelle moléculaire d'oxyde du titane pur (TiO₂)_n, et leurs hybrides (composites) FemTin-mO₂n[n=2-3,m=1 à (n-1)] aussi bien que leurs propriétés structurales, électroniques en employant la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) et théorie fonctionnelle de la densité dépendante du temps (TDDFT). Nous utilisons deux fonctionnels hybrides DFT/B3PW91, B3LYP avec différentes bases (6-31G(d), LANL2DZ, TZVP) pour obtenir les isomères plus stables des agrégats d'oxyde pur et hybride c-à-d le meilleur comportement des complexes. En outre l'énergie de formation et le gap d'énergie (HOMO, LUMO) pour la structure la plus stable des agrégats de(TiO₂)_n pour chaque n ont été également calculés et discutés. Avec l'augmentation de la taille de nanoparticule nous trouvons une augmentation dans l'énergie de formation et par conséquent la stabilité des agrégats. Nos résultats sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles.

Keywords : Complexes métalliques, comportement, Hybride, DFT