AVIS DE SOUTENANCE D'UNE THESE DE DOCTORAT

Le Directeur de l'Ecole Nationale des Sciences Appliquées a le plaisir d'informer le public qu'une soutenance de thèse de Doctorat en

«Sciences et ingénierie»

aura lieu le 20/06/2026 à 15H00 l'ENSA, Kénitra

La Thèse sera présentée par Mme BOUHAMIDI ALAOUI SALWA

Sous le thème :

Etude théorique des propriétés structurelles, électroniques, optiques et thermoélectriques des pérovskites $FrSnI_{3-x}Y_x$ (Y=F, Cl;x = 0, 1, 2, 3)

Devant le jury composé de :

Nom et Prénom	Titre	Etablissement
BENBRAHIM MOHAMMED	Président	ENSA, Kénitra
BELHAJ ADIL	Rapporteur	Faculté des Sciences, Rabat
BAHMAD LAHOUCINE	Rapporteur	Faculté des Sciences, Rabat
SAAD AOUATIF	Rapporteur	ENSA, Kénitra
LAANAB LARBI	Examinateur	Faculté des Sciences, Rabat
RMILI AHMED	Examinateur	ENSA, Kénitra
LABRIM HICHAM	Co-Directeur de thèse	Faculté des Sciences, Rabat
EL BOUAYADI RACHID	Directeur de thèse	ENSA, Kénitra

UNIVERSITE IBN TOFAIL ★ PÔLE DES ETUDES DOCTORALES ★ KENITRA

Nom et Prénom : BOUHAMIDI ALAOUI SALWA
Date de soutenance : 20/06/2026
Directeur de Thèse : EL BOUAYADI RACHID

Sujet de thèse :

Etude théorique des propriétés structurelles, électroniques, optiques et thermoélectriques des pérovskites $FrSnI_{3-x}Y_x$ (Y=F, Cl;x = 0, 1, 2, 3)

Résumé:

Dans cette thèse, nous présentons une étude approfondie basée sur la méthode des premiers principes (Ab initio) des propriétés structurelles, électroniques, optiques et thermoélectriques des pérovskites FrSnI3-xYx (Y = F, Cl ; x = 0, 1, 2, 3). Cette étude a été réalisée à l'aide de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW), implémentée dans le code WIEN2k, avec l'approximation TB-mBJ de Becke-Johnson. Nos résultats montrent que tous ces composés présentent un comportement de semi-conducteur de type p, avec une bande interdite ajustable grâce à la substitution d'halogène. L'énergie de la bande interdite varie de 1,169 à 2,951 eV pour les structures dopées au fluor et de 1,169 à 1,953 eV pour celles dopées au chlore. Il est à noter que le FrSnI2F et le FrSnICl2 présentent des bandes interdites directes optimales, ce qui en fait des candidats prometteurs pour des applications photovoltaïques.
L'analyse optique révèle par ailleurs que les structures dopées au fluor ou au chlore présentent une efficacité d'absorption élevée dans les domaines du visible et de l'infrarouge. Les propriétés thermoélectriques, évaluées à l'aide du code BoltzTrap entre 100 et 950 K, indiquent par ailleurs que ces matériaux présentent des coefficients de Seebeck prometteurs et des indices de performance proches de l'unité à haute température. Ces résultats soulignent le potentiel considérable des pérovskites pour les applications.

Mots Clés: TB-mBJ ; Bandes interdites ; Paramètres optiques Coefficient Seebeck ; Code BoltzTraP

Abstract:

In this thesis, we present a comprehensive ab initio study of the structural, electronic, optical, and thermoelectric properties of FrSnI3-xYx (Y = F, Cl; x = 0, 1, 2, 3) perovskites. The study was conducted using the full-potential linearised augmented plane wave (FP-LAPW) method as implemented in the WIEN2k code combined with the modified Becke–Johnson (TB-mBJ) approximation. Our results reveal that all of these compounds exhibit p-type semiconductor behaviour, with a tunable band gap that can be achieved through halogen substitution. The band gap energy ranges from 1.169 to 2.951 eV for fluorine-doped structures, and from 1.169 to 1.953 eV for chlorine-doped structures. Notably, FrSnI2F and FrSnICl2 have optimal direct band gaps, making them promising candidates for photovoltaic applications. Optical analysis indicates that fluorine- and chlorine-doped structures demonstrate high absorption efficiency in the visible and infrared regions. Evaluating the thermoelectric properties using the BoltzTrap code over the temperature range of 100–950 K demonstrates promising Seebeck coefficients and figures of merit approaching unity at high temperatures. These findings highlight the considerable potential of perovskite materials for energy-related applications.

Key words : DFT ; TB-Mbj ; Band gaps ; Seebeck coefficient ; Thermal conductivity ; BoltzTraP code