

# **Étude des Structures Électroniques, Propriétés Magnétiques et Optiques non-Linéaires de Troisième Ordre de l'Oxyde de Zirconium Cristallin Stabilisé avec de l'Yttrium et Dopé à l'Erbium.**

**Hassan DENAWI, Michel RÉRAT and Karamanis PANAGHIOTIS**

*Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux, CNRS, Université de Pau et des Pays de l'Adour, 64053 Pau Cedex, France*

La technologie utilisant les propriétés d'optique non linéaire des matériaux est une voie ultime pour le traitement ultra-rapide de signaux optiques dans les systèmes de communication des prochaines générations. De nouvelles fonctionnalités non linéaires doivent être mises en œuvre en photonique, et les oxydes sont considérés comme des candidats prometteurs en raison de leur large éventail de caractéristiques, de propriétés allant de la ferroélectricité, des optiques non-linéarités au ferromagnétisme ou à la transition de phase. La combinaison de leurs propriétés accordables conduit au développement de dispositifs innovants aux fonctionnalités multiples dans de nombreux domaines tels que les cellules solaires, les capteurs, l'électronique ou l'optique. Cependant, les optiques non-linéarités sont encore inconnues pour la plupart des oxydes cristallins. Dans ce contexte, le cristal cubique de dioxyde de Zirconium ( $ZrO_2$ ) stabilisé par un pourcentage d'Yttrium (Yttria Stabilized Zirconia: YSZ), dopé à l'Erbium se distingue par sa capacité de croître par épitaxie sur du Silicium en adaptant son réseau.

Nous présentons une étude théorique détaillée de la susceptibilité électrique non linéaire du troisième ordre de YSZ cristallin dopé avec  $Er^{3+}$ .

En utilisant les code VASP et Crystal, plusieurs calculs de premier principe ont été effectués pour étudier les structures YSZ plus  $Er^{3+}$ , ces calculs reposant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) polarisée en spin avec l'approximation en gradient généralisée (SGGA) résolue en spin pour le potentiel d'échange et de corrélation de Perdew, Burke et Ernzerhof (PBE), et avec la fonction hybride PBE0 (PBE+25% d'échange Hartree-Fock). Les calculs permettent de déterminer la structure électronique, les couplages magnétiques et les propriétés d'optique non linéaire de YSZ. Ils ont été effectués, en particulier, pour comprendre la dépendance à la concentration et à la distribution de dopage de l'indice de réfraction dépendant de l'intensité du laser (IDRI) en interaction avec le matériau.

Ces études prometteuses constituent une nouvelle étape vers la mise en œuvre d'oxydes fonctionnels pour les applications en photonique.