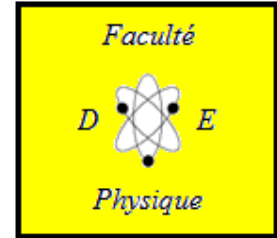




Université des Sciences et de la Technologie d'Oran Mohamed Boudiaf
Faculté de Physique
Département de Génie Physique
Laboratoire d'Analyse et d'Application des Rayonnements



Etude de l'effet de la stœchiométrie sur l'interaction du CdSe avec un rayonnement électromagnétique

Présenté par :

NOUAR Nesrine

Sous la direction du:

Dr L. GHALOUCI

25/06/2018

sommaire



Introduction

- Les structures cristalline du CdSe
- Stabilisation de la convergence
- Propriétés structurales du composé CdSe
- Propriété électronique du composé CdSe
- Propriété optique Du composé CdSe
- Interactions rayonnements matière
- conclusion

introduction

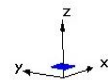
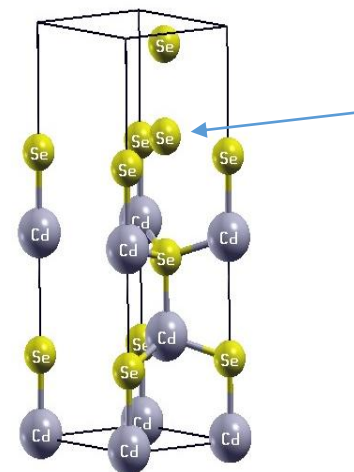
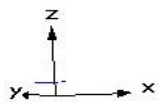
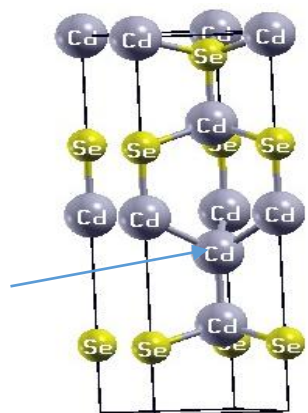
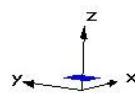
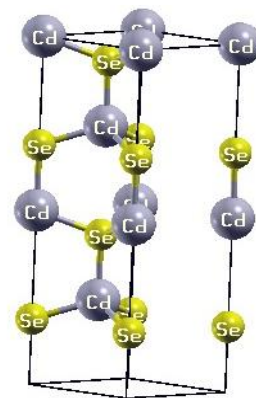
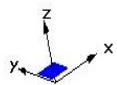
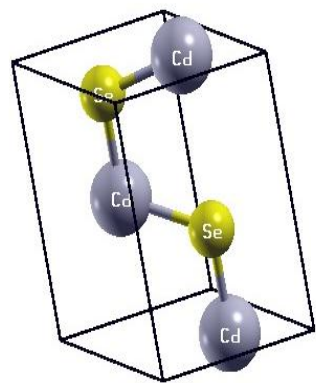
- Parmi les composés semi-conducteurs, qui suscitent de nos jours l'intérêt de la communauté scientifique, nous pouvons citer le mono Séléniure de Cadmium (CdSe), Grâce a son intérêt technologique dans des différents domaines :

L'optique, laser, la détection, la fabrication des cellules solairesetc.

- Malheureusement ce composé contient un élément (Cd) considéré comme toxique , Est-il possible de réduire la concentration du Cd dans la composition du CdSe sans altéré ses caractéristiques optoélectroniques?

Nous n'avons pas trouver de réponse à cette question posée dans l'alittérature,

- Notre objectif est d'élucider l'effet de la stœchiométrie sur la nature électronique du composé CdSe ainsi que sur son comportement dans le domaine des rayonnements électromagnétiques

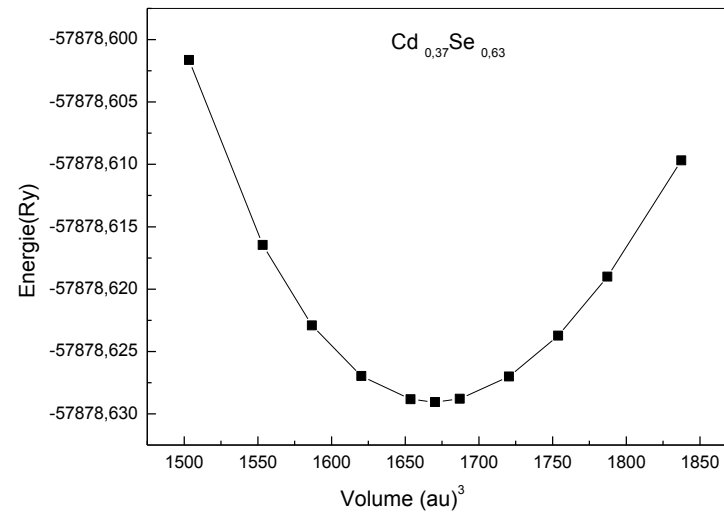
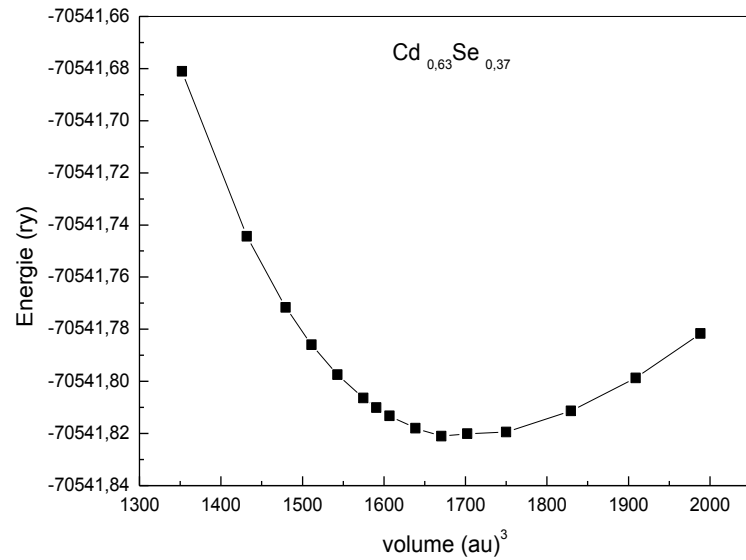
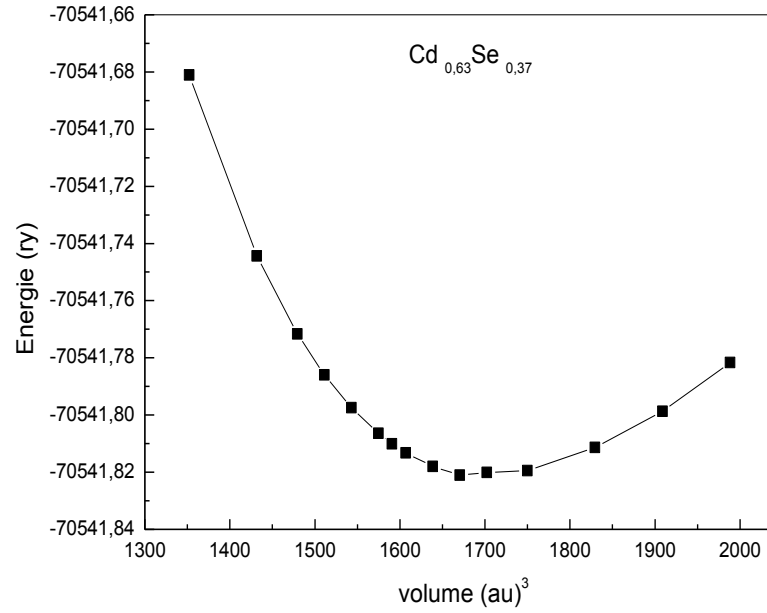
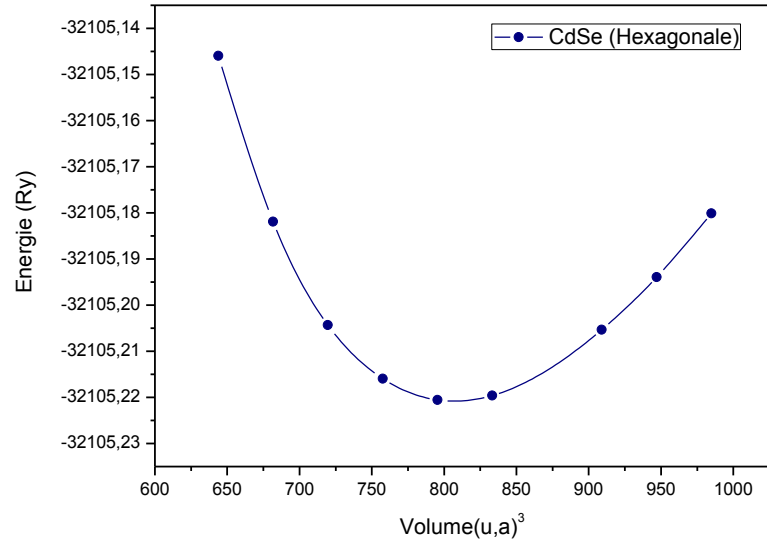


Données structurales et paramétrage utilisés dans nos calculs

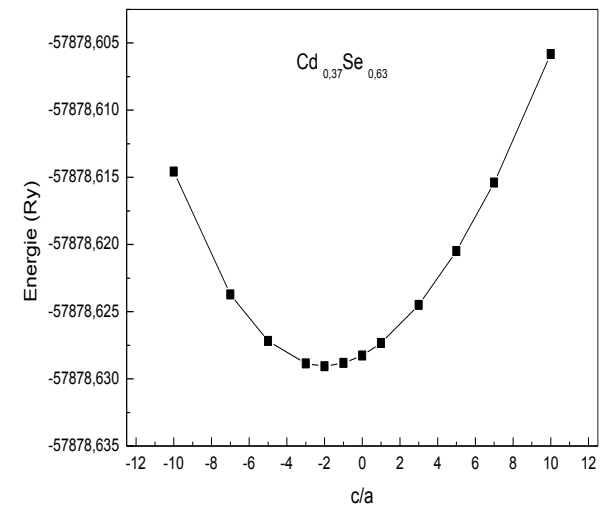
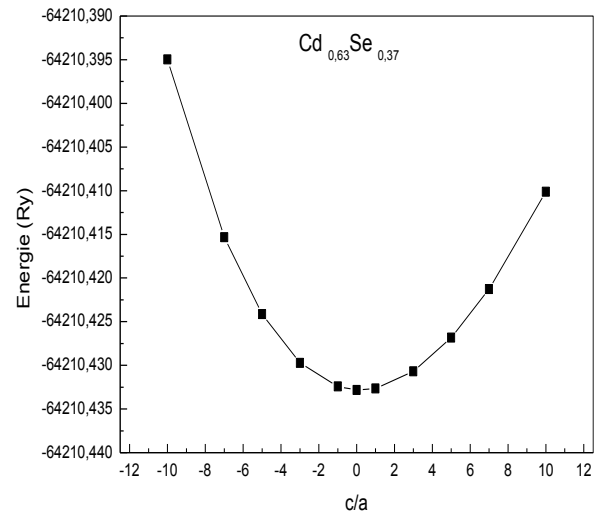
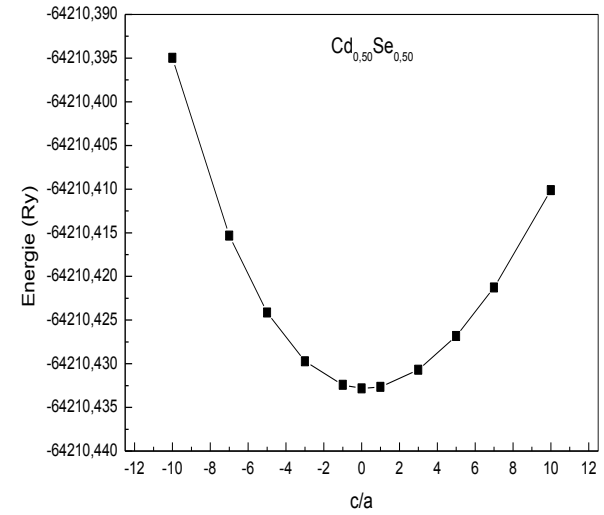
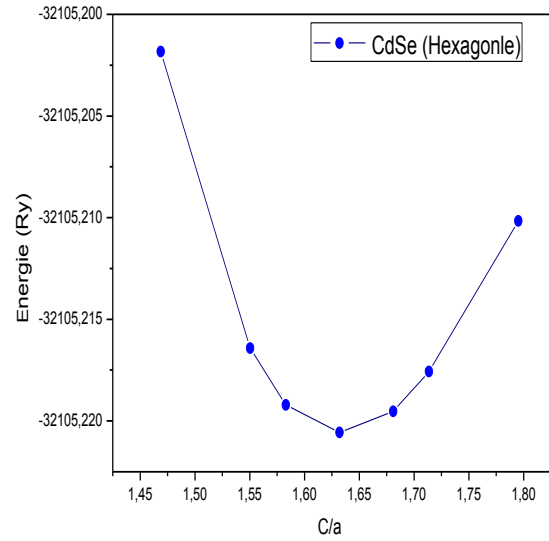
	Super cellule Cd _{0.50} Se _{0.50}	Super cellule Cd _{0.63} Se _{0.37}	Super cellule Cd _{0.37} Se _{0.63}
Rmt Cd(u,a)	2.2		
Rmt Se(u,a)	2.1		
Nombre des K-points	1400		
RK _{max}	8.5		
Fonctionnelle d'échange-corrélation	GGA (GGA-mBJ pour les propriétés optoélectronique)		
Energie de séparation(Ry)	-6		

Propriétés structurales

Optimisation de volume



Optimisation du C/a



Les résultats structuraux obtenus

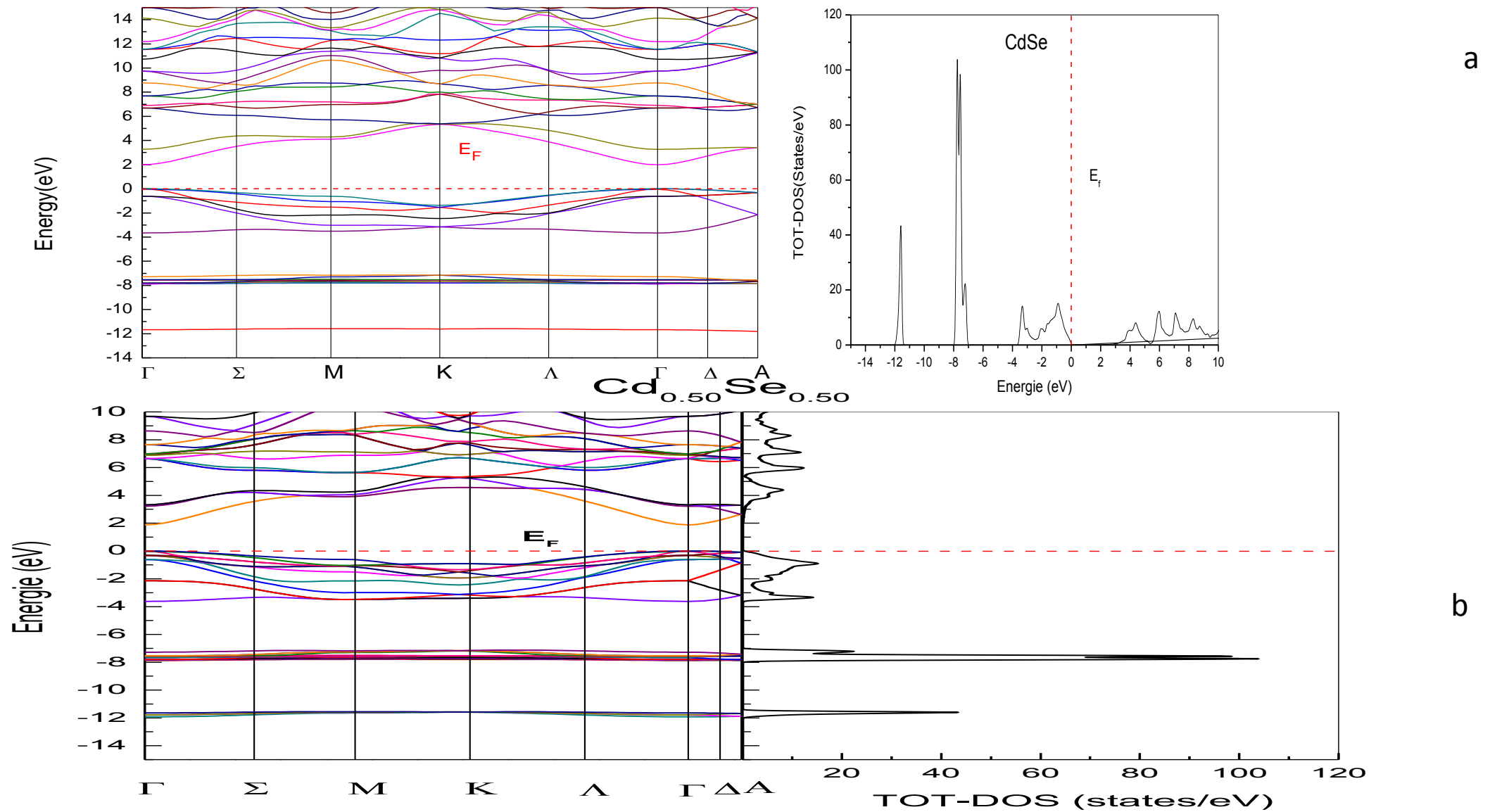
	CdSe [Chibane, 2017]	Cd _{0.50} Se _{0.50}	Cd _{0.37} Se _{0.63}	Cd _{0.63} Se _{0.37}
Groupe d'espace	#186 (P6 ₃ mc)	#156 (P3m1)	#156 (P3m1)	#156 (P3m1)
$V_0(a.u)^3$	805.474	1608.560	1669.483	1711.040
$a_0(\text{cel_unit})$ (a.u)	8.145	8.283	8.392	8.336
$C_0/a_0(\text{cel_unit})$	1.625	1.632	1.631	1.664
B0(GPa)	43.32	44.44	40.03	34.47
B' (Bpa)	4.74	4.65	4.49	4.63

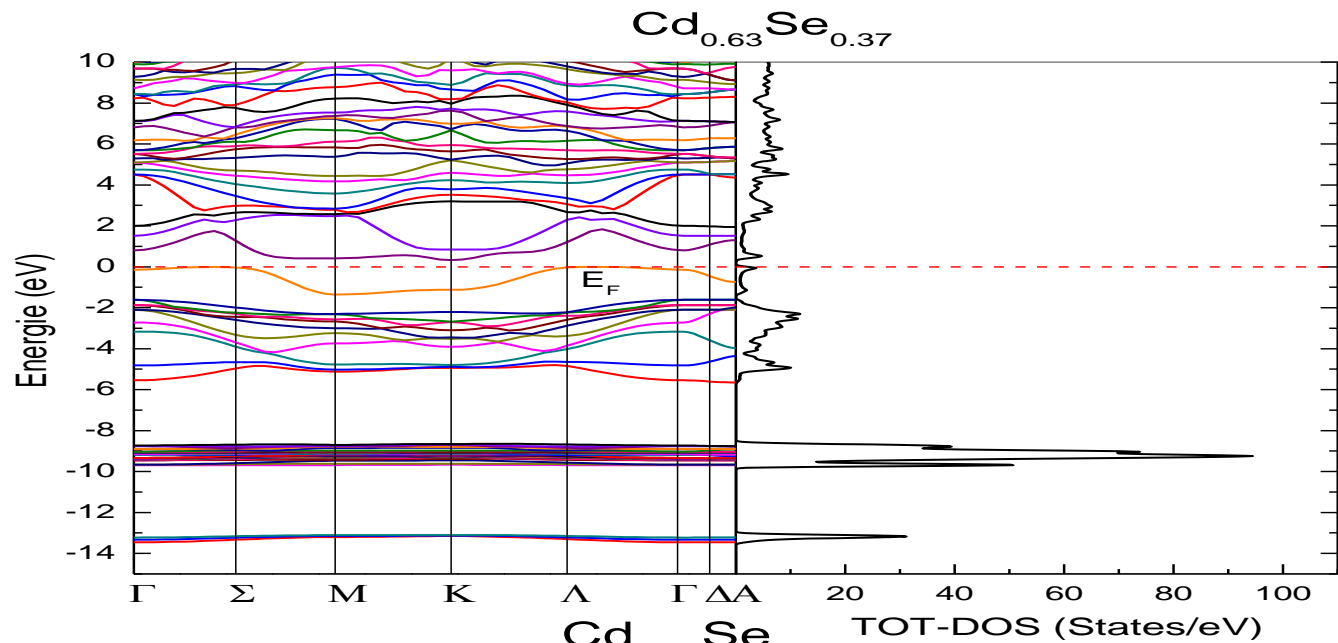
Relaxation des forces

CdSe (monocellule)	Cd_{0.50} Se_{0.50}	Cd_{0.63} Se_{0.37}	Cd_{0.37} Se_{0.63}
$z_{Cd1} = 0$	$z_{Cd1} = 0.999$	$z_{Cd1} = 0.997$	$z_{Cd1} = 0.008$
$z_{Se1} = 7/8$	$z_{Cd2} = 0.499$	$z_{Cd2} = 0.523$	$z_{Cd2} = 0.492$
$z_{Se2} = 3/8$	$z_{Se1} = 0.937$	$z_{Se1} = 0.944$	$z_{Se1} = 0.953$
$z_{Cd2} = 1/2$	$z_{Se2} = 0.437$	$z_{Cd3} = 0.421$	$z_{Se2} = 0.440$
	$z_{Se3} = 0.187$	$z_{Se2} = 0.179$	$z_{Se3} = 0.198$
	$z_{Se4} = 0.687$	$z_{Se3} = 0.707$	$z_{Se4} = 0.687$
	$z_{Cd3} = 0.249$	$z_{Cd4} = 0.231$	$z_{Cd3} = 0.250$
	$z_{Cd4} = 0.749$	$z_{Cd5} = 0.763$	$z_{Se5} = 0.731$

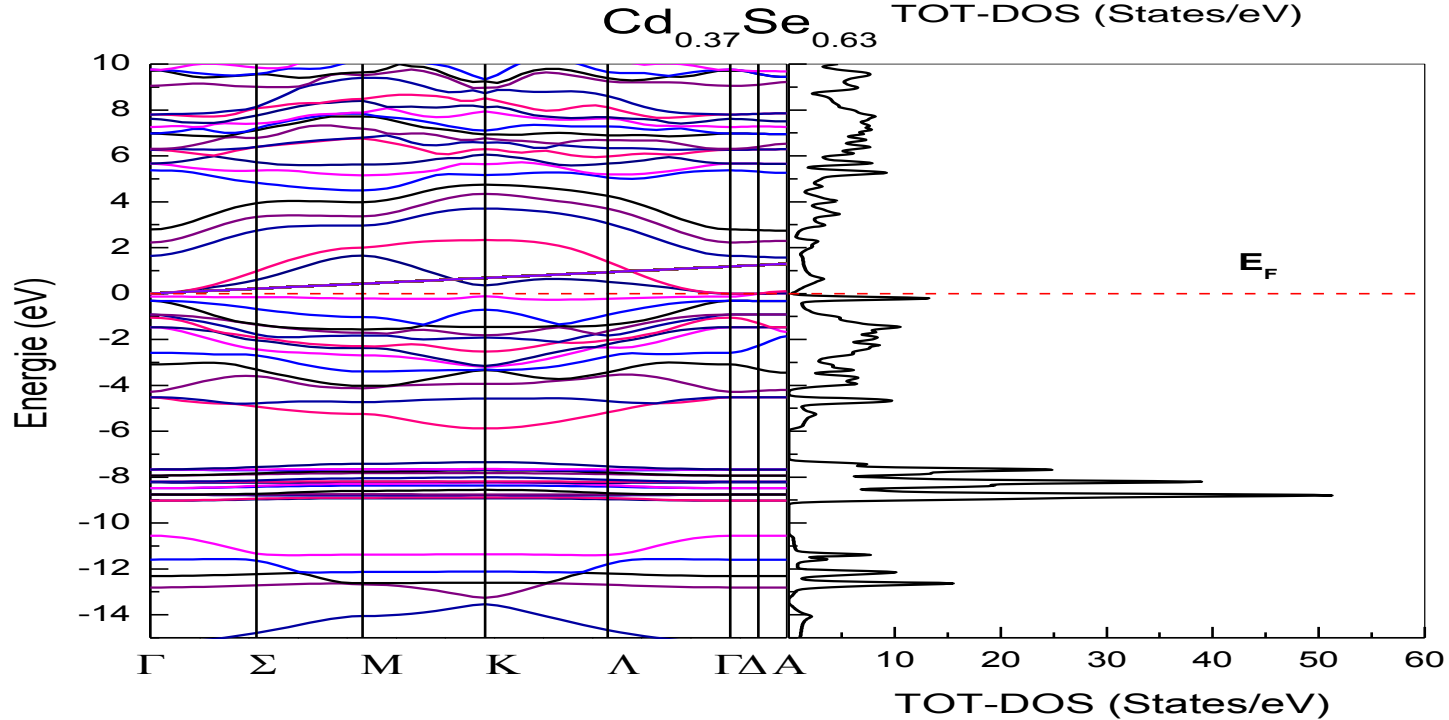
Les propriétés électroniques

Propriétés électronique



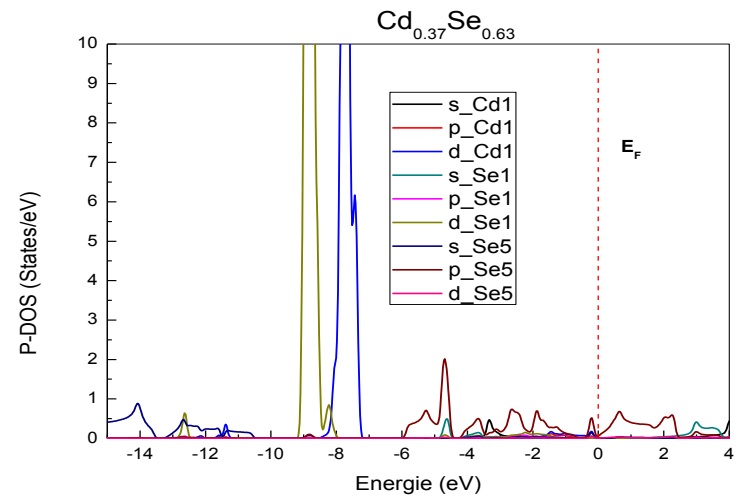
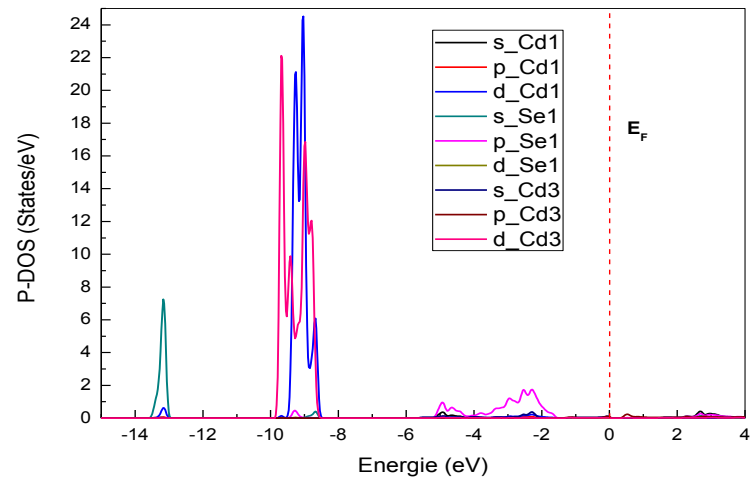
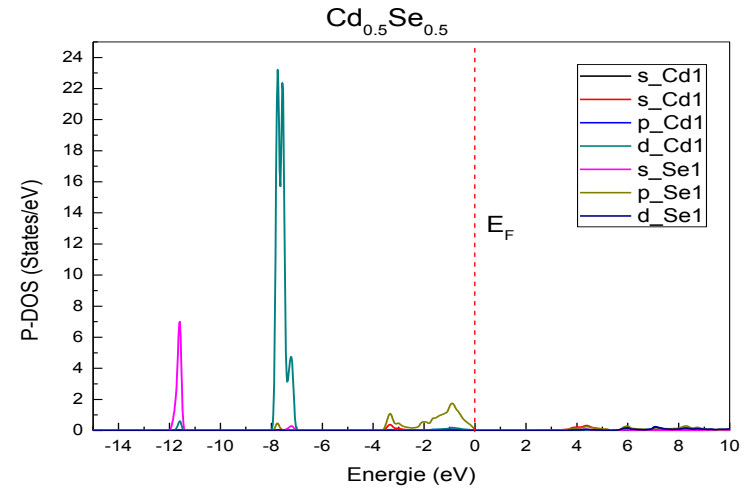
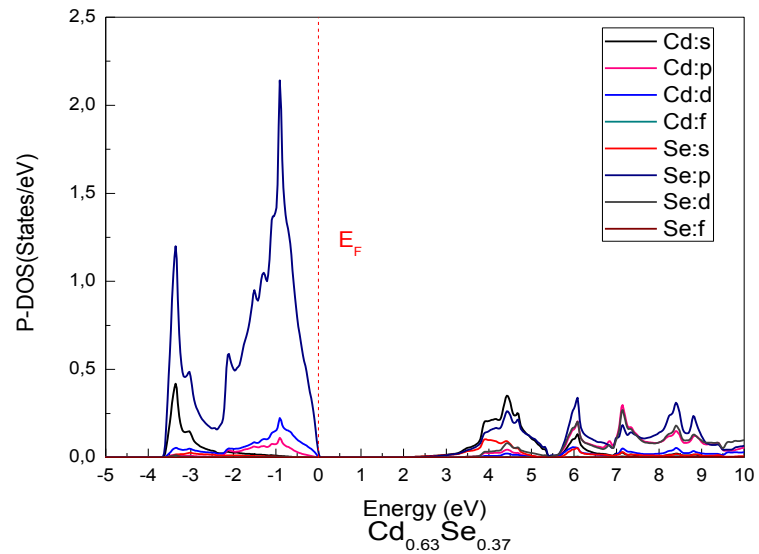


c



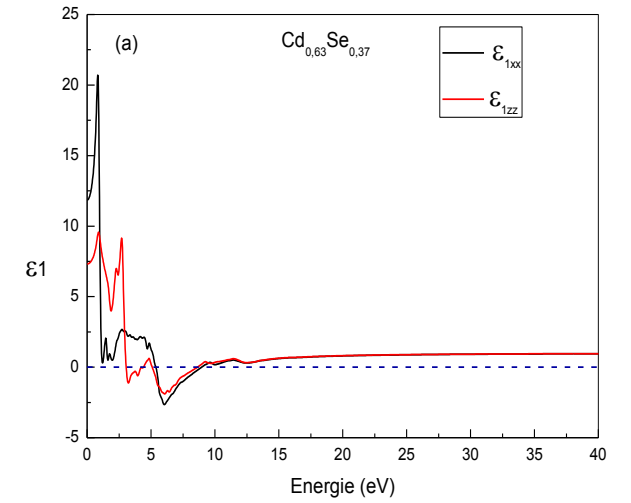
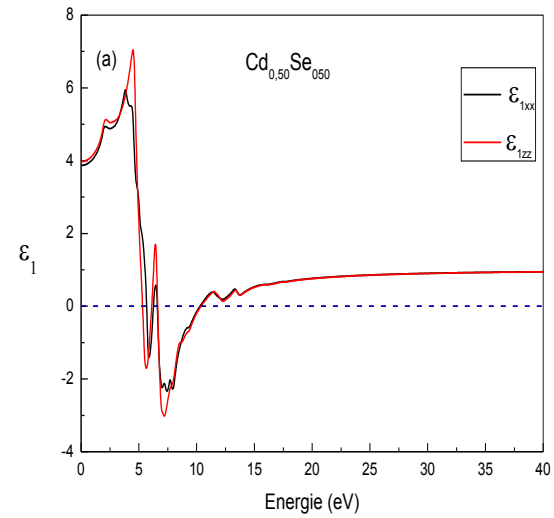
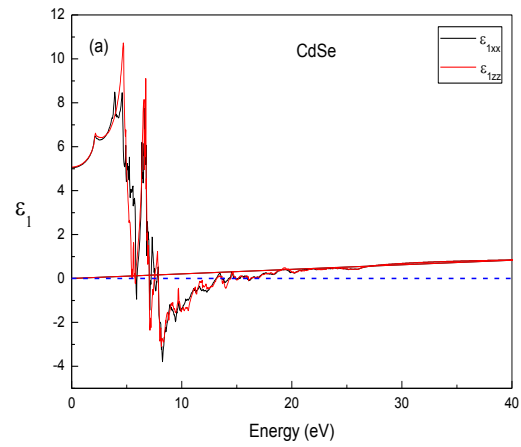
d

Les densités partielles du composé CdSe

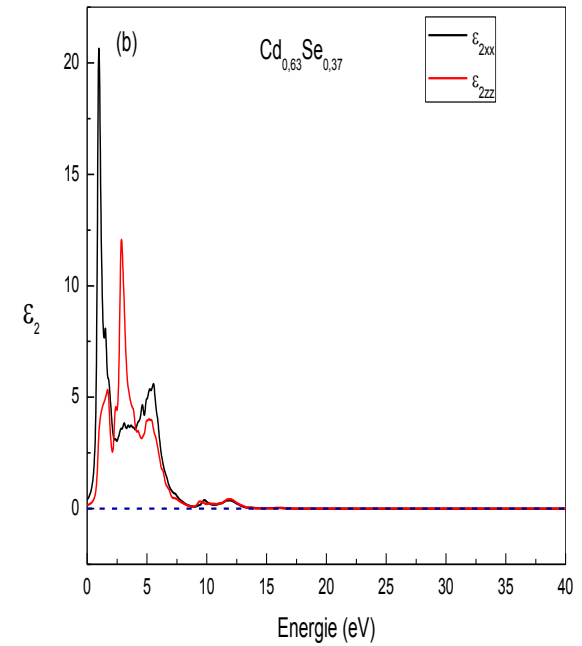
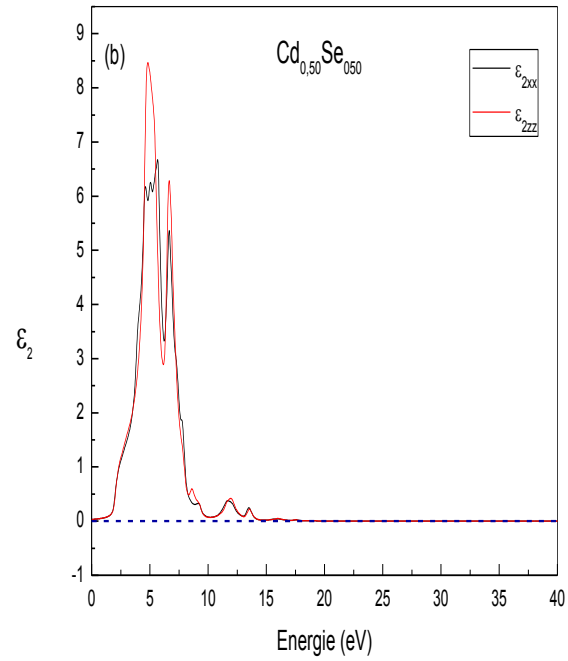
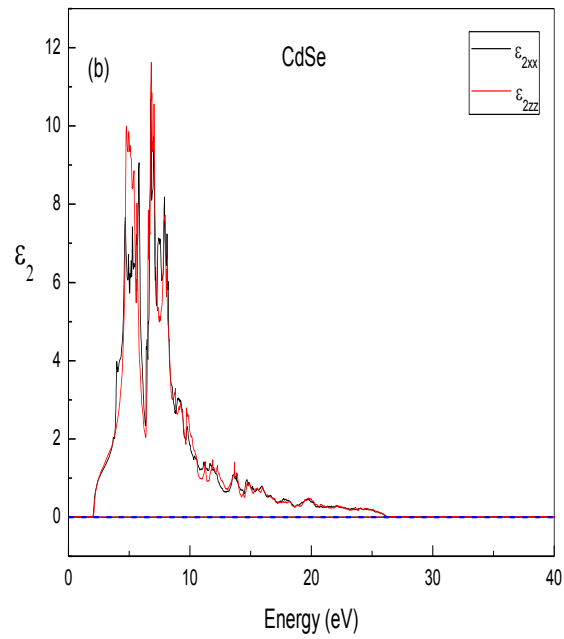


Les propriétés optiques

La fonction diélectrique (réelle)

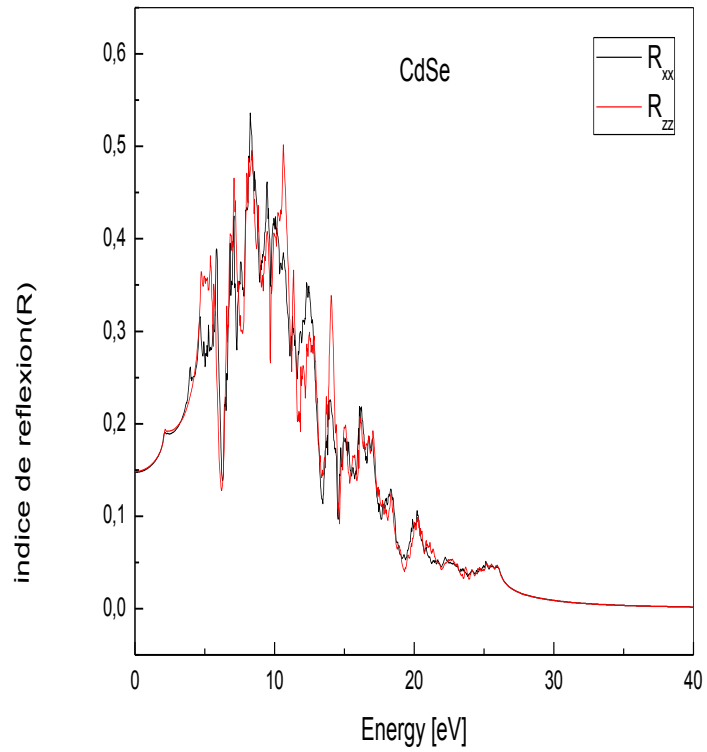


La fonction diélectrique (imaginaire)

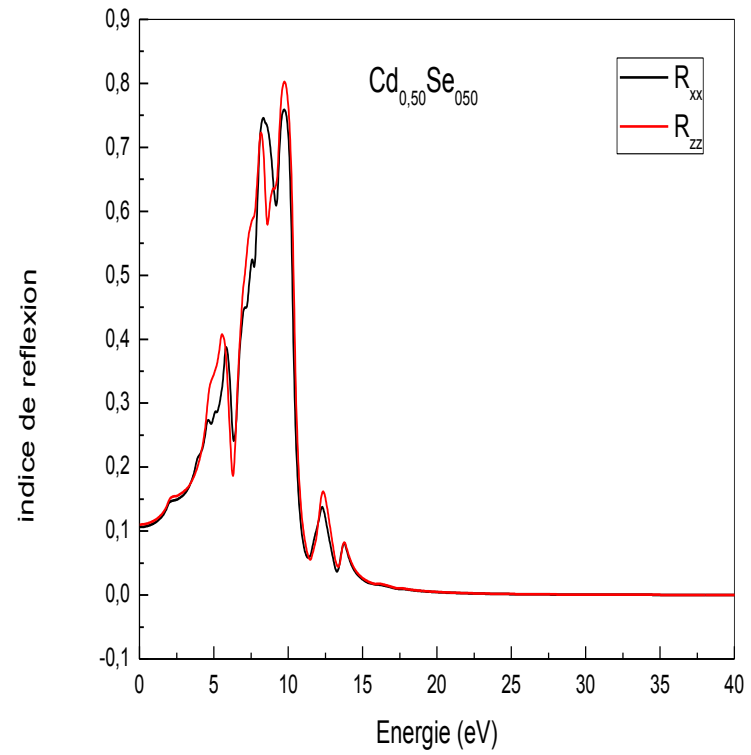


La réflectivité

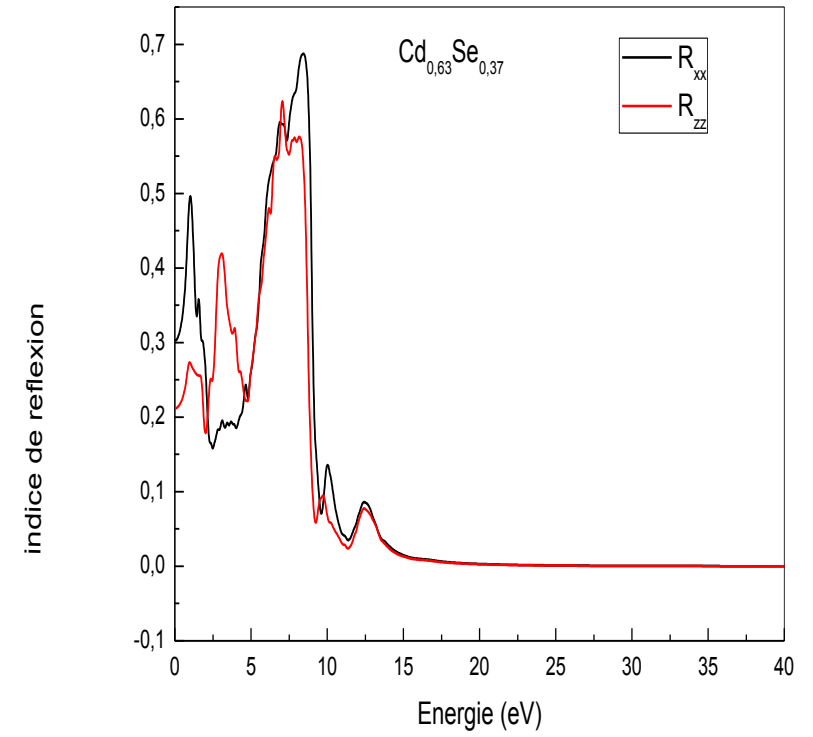
a



b

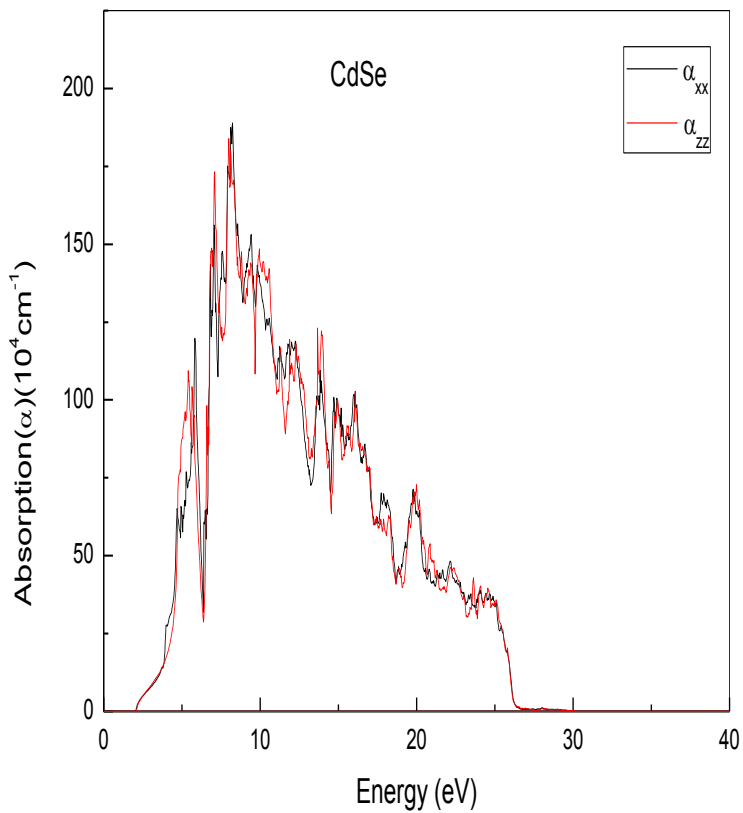


c

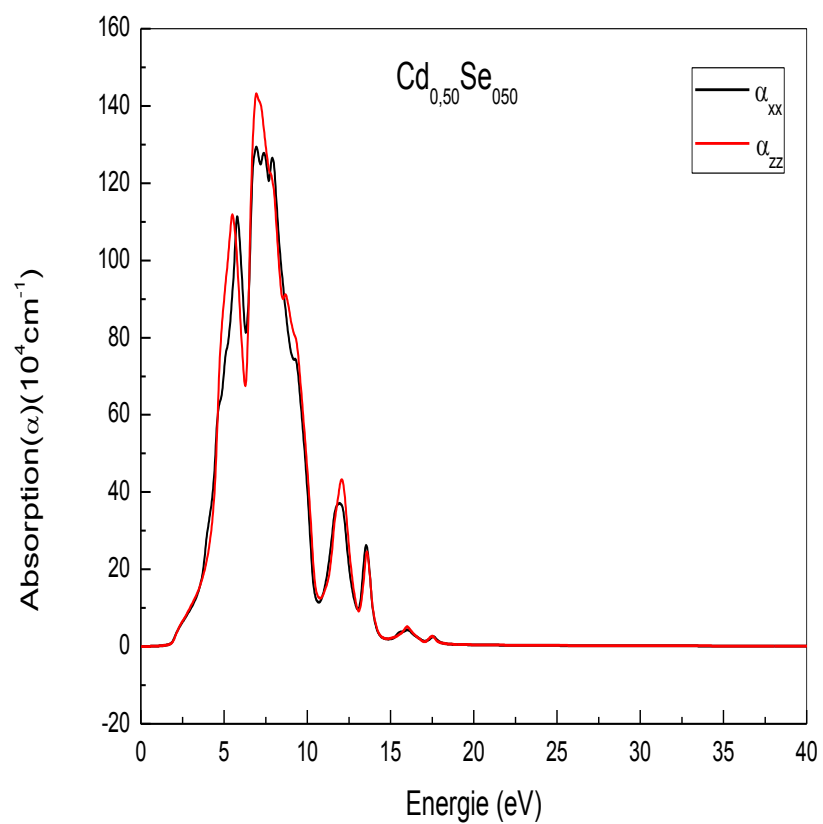


L'absorption

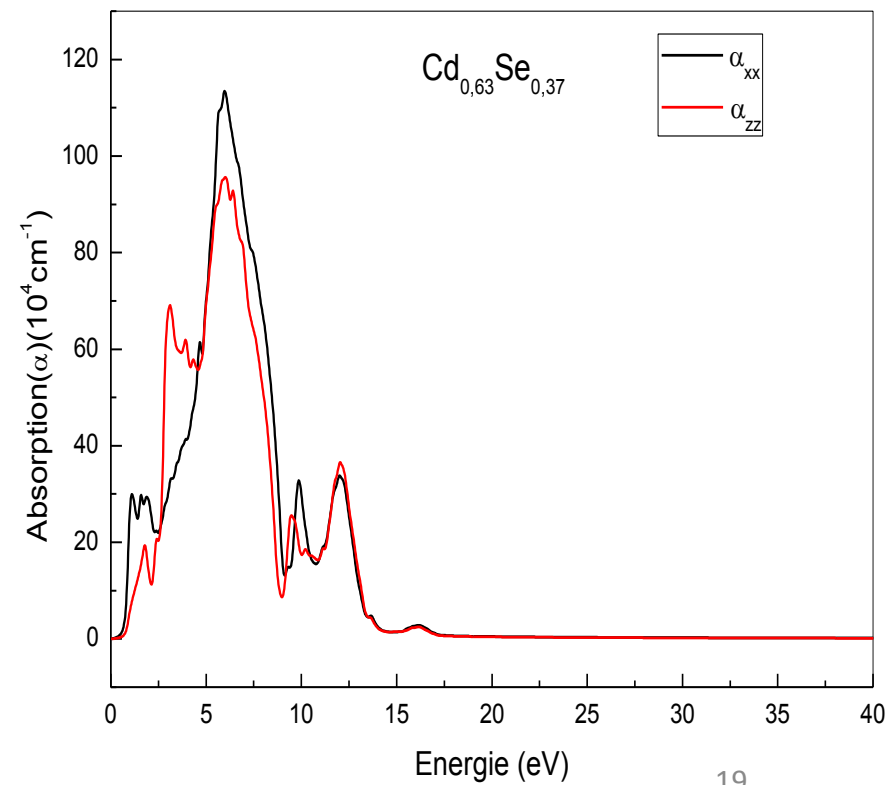
a



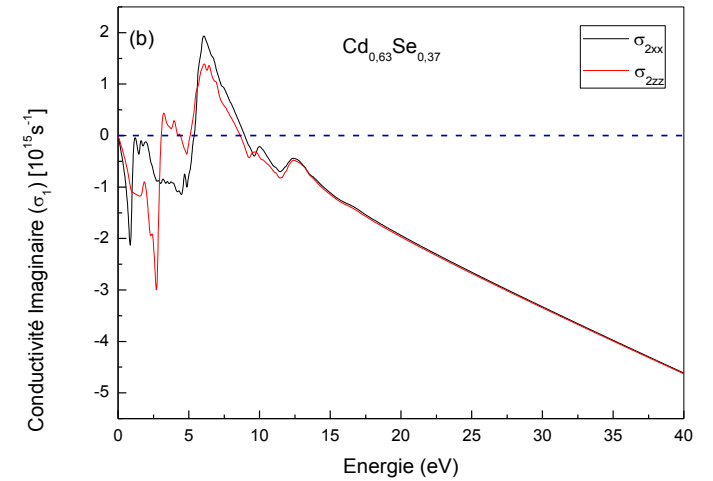
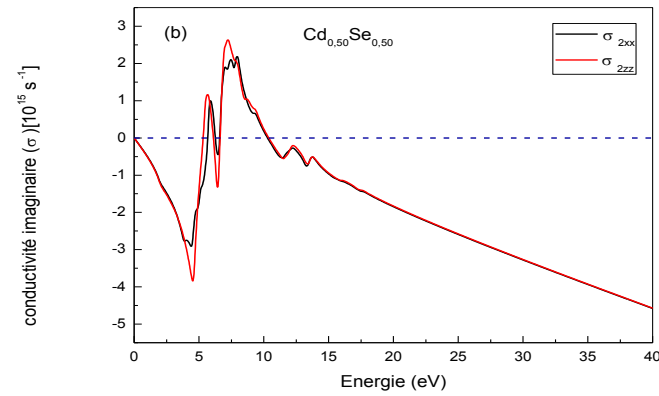
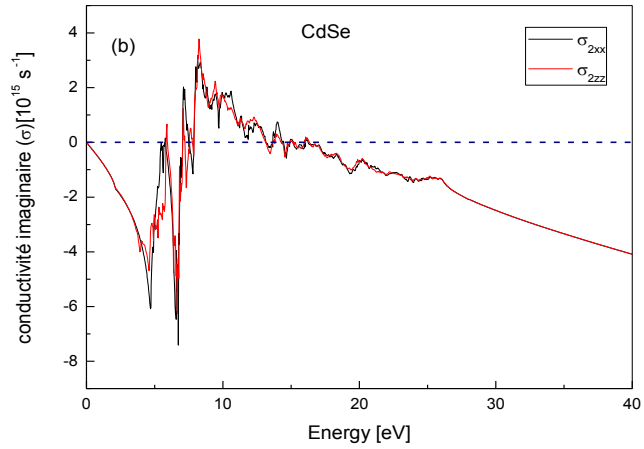
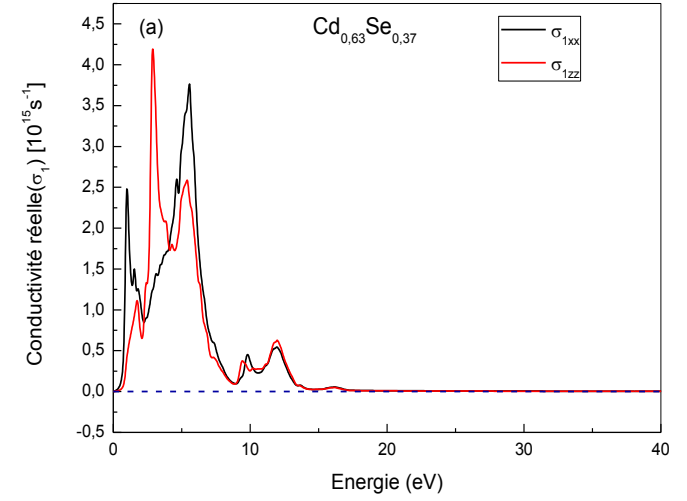
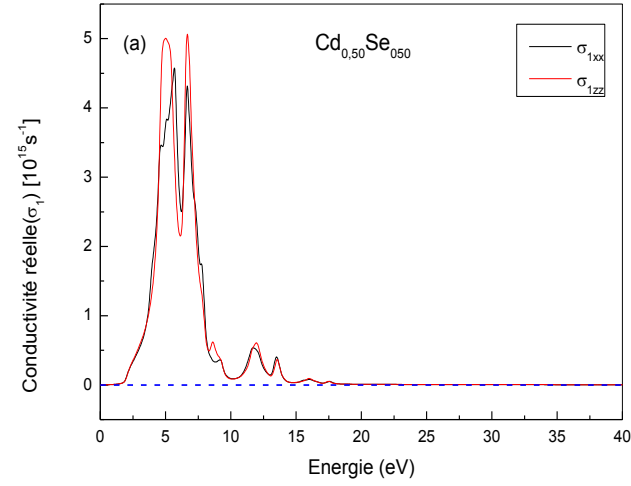
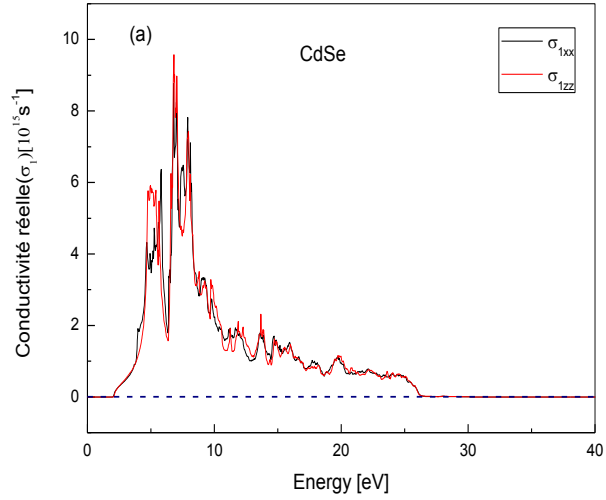
b



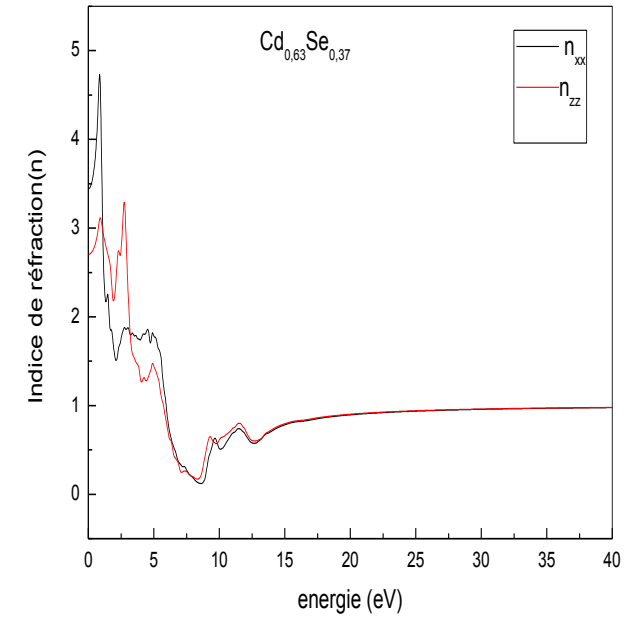
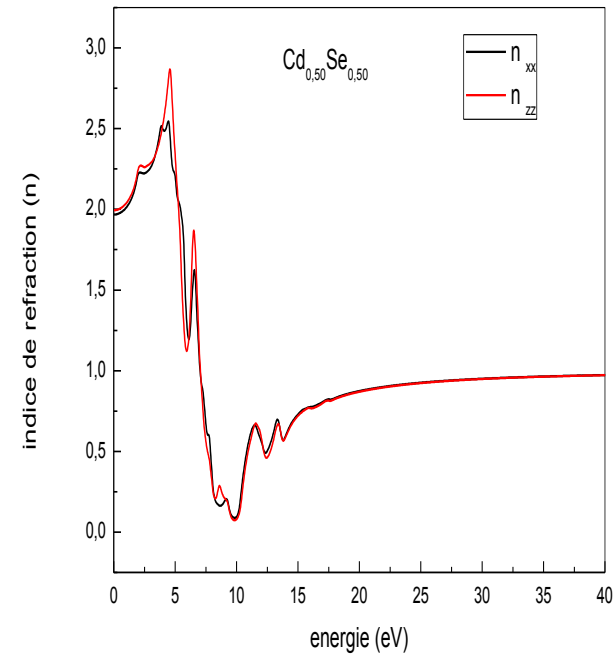
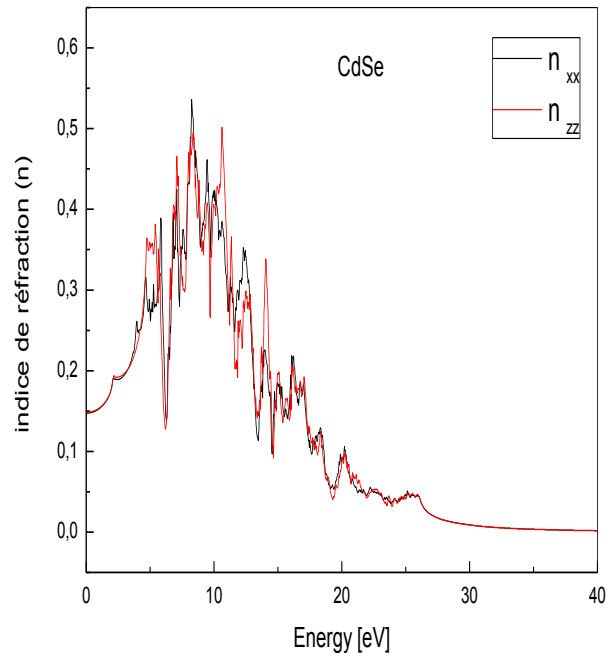
c



La conductivité (réelle et imaginaire)

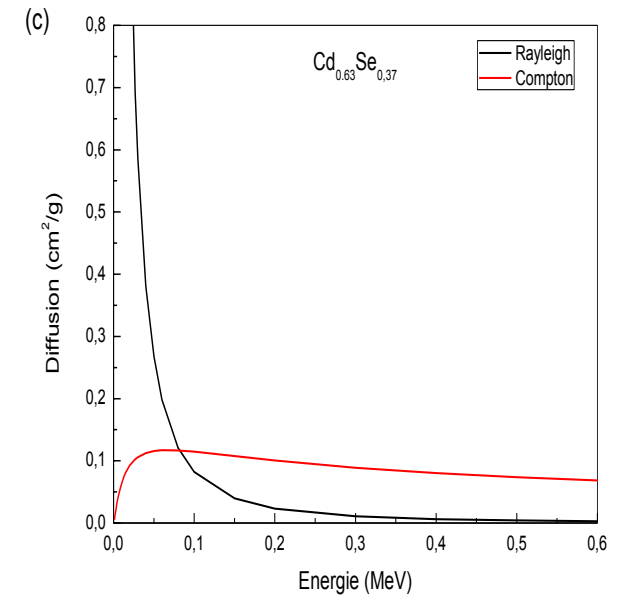
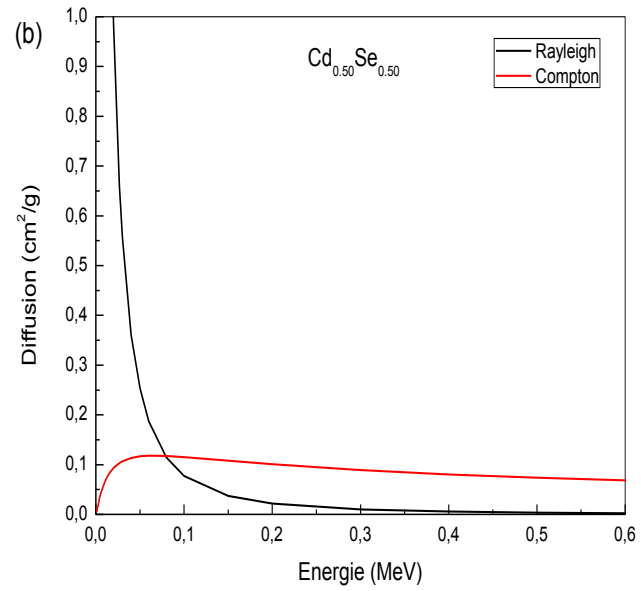
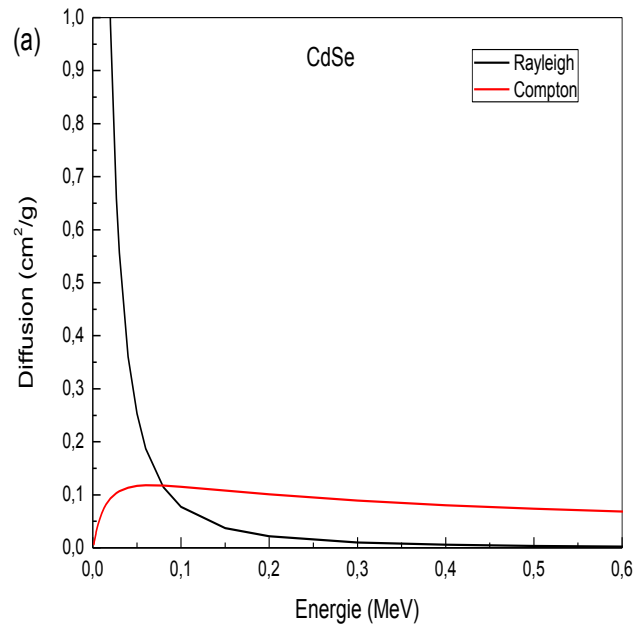


L'indice de réfraction

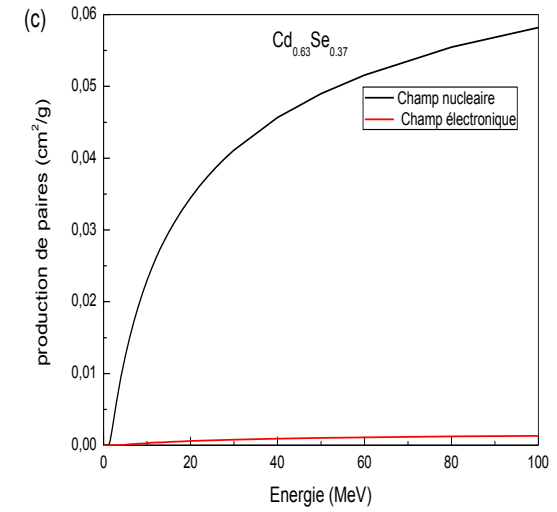
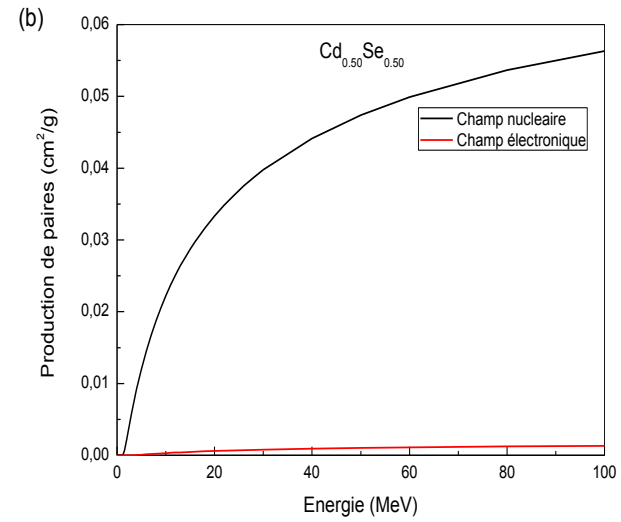
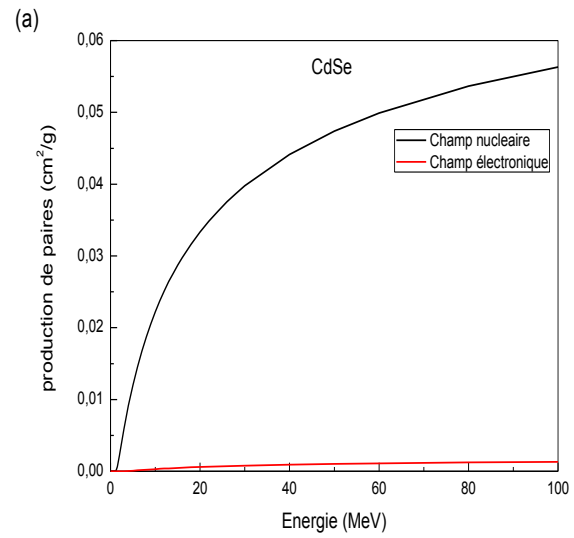


Interaction rayonnement énergétique-matière

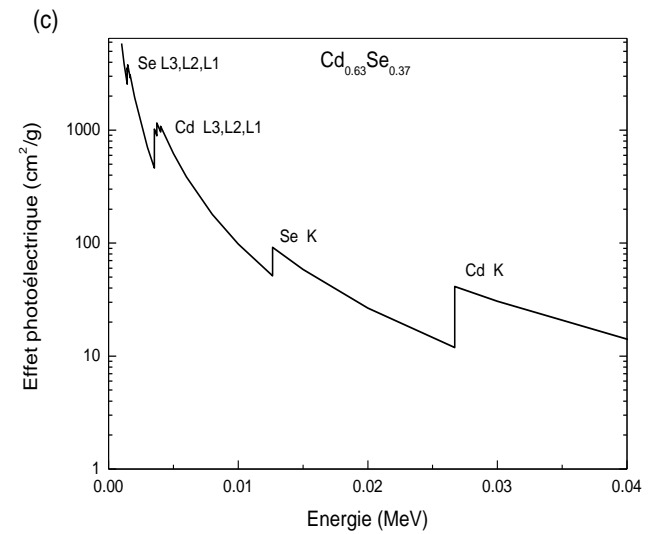
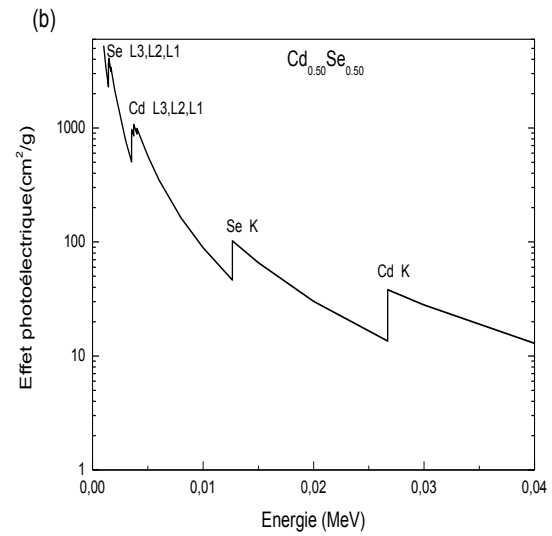
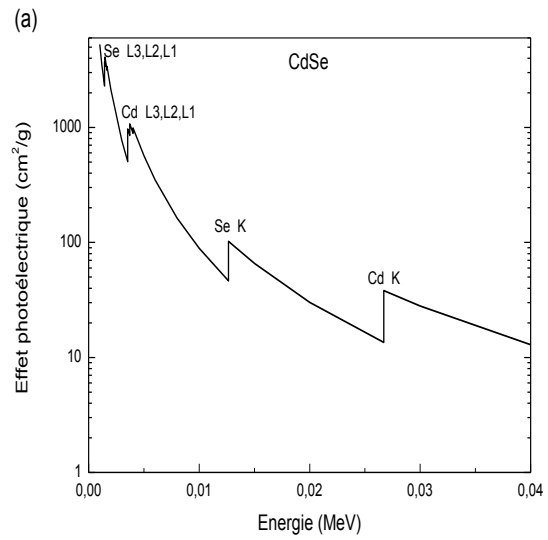
La diffusion



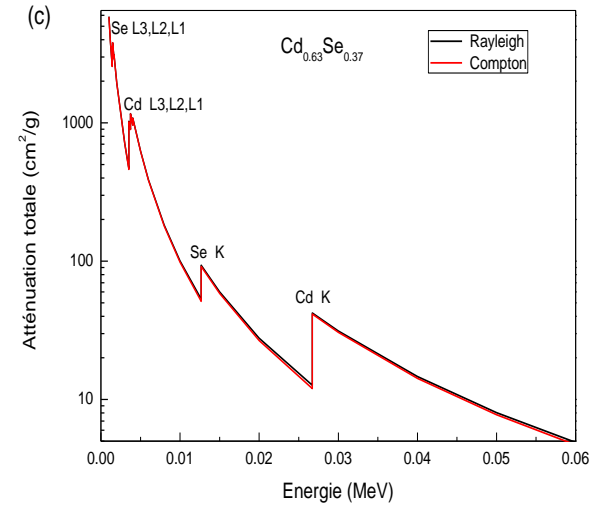
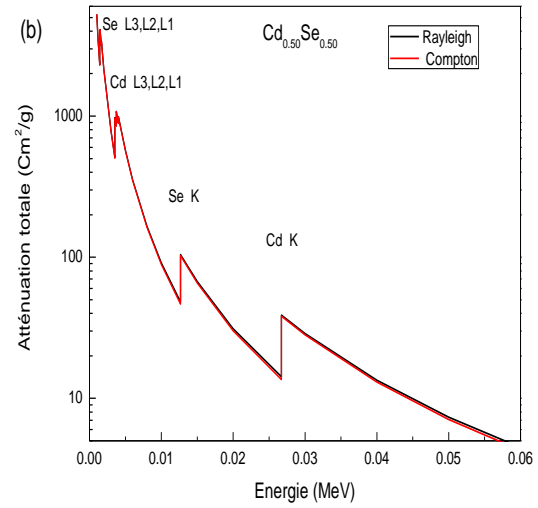
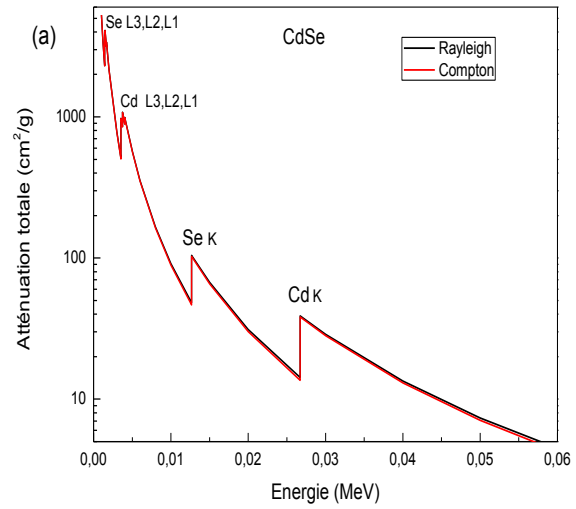
Création de paires



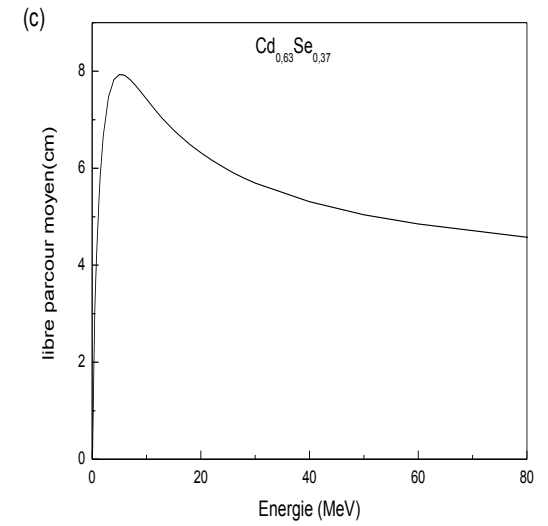
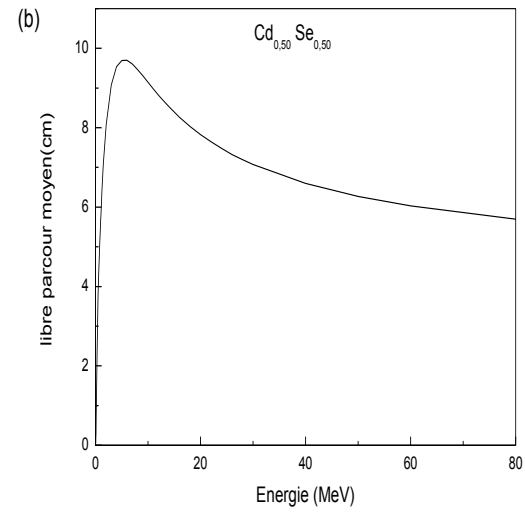
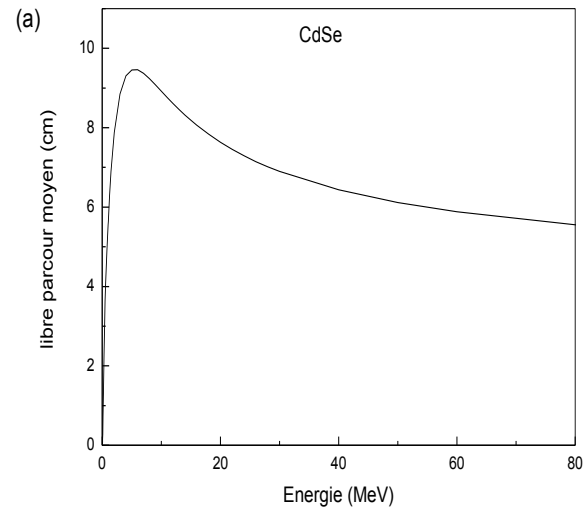
Effet photoélectrique



L'atténuation totale



Le libre parcours moyen



conclusion

- Une première constatation faite est que le passage d'une structure monocellule à une structure supercellule a engendré un changement dans le groupe d'espace (#186 → #156) sans pour autant perdre la nature hexagonale
- L'étude électronique, exploitant la correction mBJ, montre qu'un excès en atomes de Sélénium engendre théoriquement une perte du caractère semi-conducteur et transforme la supercellule $\text{Cd}_{0.37}\text{Se}_{0.63}$ en structure métallique. Par contre, un excès en atomes de Cadmium préserve le caractère semi-conducteur mais modifie le gap électronique initialement direct en indirect.

- L'étude photonique montre que le caractère biréfringent est plus prononcé pour la structure $\text{Cd}_{0.63}\text{Se}_{0.37}$, par contre une diminution dans l'absorption (conductivité optique) est ressentie par comparaison avec la structure équilibrée.
- Notre étude de l'interaction avec des rayonnements hautement énergétique nous révèle qu'une amélioration du pouvoir d'arrêt peut être obtenue avec la supercellule $\text{Cd}_{0.63}\text{Se}_{0.37}$.

**MERCI POUR
VOTRE
ATTENTION**