

Résumé

Les composés II-VI sur lesquels porte notre travail sont de la famille du Zinc et de l'oxygène qui ont fait dernièrement l'objet d'un grand nombre de recherches expérimentales et théoriques. Ils sont employés dans le développement des systèmes à énergie solaire, ainsi que la fabrication des diodes électroluminescentes (LED) émettant dans la région visible du spectre électromagnétique. Ces composés ont connu récemment un grand intérêt en raison de leurs applications prometteuses dans les dispositifs optoélectroniques et photoniques. Comme ils sont utilisés dans la luminescence électronique, la rectification optique et la fabrication des lasers, ils jouent également un rôle primordial dans l'analyse biologique et le diagnostic médical. Possédant l'avantage de détecter le rayonnement térahertz (THZ) ces derniers peuvent être utiles pour les applications en radiologie.

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude de la spectroscopie électronique des systèmes contenant le tellure de zinc (ZnTe), ainsi qu'à la détermination de leurs états excités. Les travaux ont débutés par le calcul des différentes constantes spectroscopiques de l'état fondamental et des différents états excités du système diatomique ZnTe et ses ions $ZnTe^+$ et $ZnTe^-$. Cette partie est terminée par l'étude et la présentation des courbes de surface d'énergie potentielle.

La deuxième partie présente les résultats obtenus sur des calculs effectués sur une série de clusters $(ZnO)_6$ à l'état pur et substitué par le sélénium puis le tellure. Les spectres d'absorption et d'émission sont présentés pour ces composés.

Les complexes $[M(TePh)_2][TMEDA]$ où $M=Zn, Cd, Hg$ sont choisis pour étude théorique de leurs propriétés structurales et énergétiques, ainsi que leur activité biologique et spectroscopie infrarouge et UV-Visible.

Les calculs sont effectués à l'aide des méthodes multiconfigurationnelles, ainsi que la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ces dernières sont regroupées dans les deux logiciels Molpro et Gaussian.

Abstract

The compounds II-VI covered by our work are of the family of Zinc and oxygen, which was recently the subject of a large number of experimental and theoretical researches. They are used for the development of solar energy systems, as well as the manufacturing of light-emitting diodes (LED) emitting in the visible region of the electromagnetic spectrum. These compounds have recently attracted high interest due to their promising applications for optoelectronic and photonic devices. As they are used in electronic luminescence, optical correction and manufacture of lasers, they also play a lead role in biological analysis and medical diagnosis. Having the advantage of detecting terahertz radiation (THZ), such compounds can be useful for applications in radiology.

In the present work, we are interested in the study of the electronic spectroscopy of systems containing the Zinc telluride (ZnTe), as well as the determination of their excited States. The first job performed was the determination of the various ground state spectroscopic constants and the different excited states of the diatomic system ZnTe and its ions ZnTe^+ and ZnTe^- . This part was finished by studying and presenting the curves of potential energy surface.

The second part presents the results obtained from calculations carried out on a series of clusters $(\text{ZnO})_6$ in pure state and with substitution by selenium or tellurium. Absorption and emission spectra are presented for these compounds.

The complexes $[\text{M}(\text{TePh})_2][\text{TMEDA}]$ where $\text{M} = \text{Zn}, \text{Cd}, \text{Hg}$ are chosen as a subject for theoretical study of structural and energetic properties, as well as biological activity and infrared and UV-Visible spectroscopy.

The calculations were performed using multiconfigurational methods and the density functional theory (DFT) as implemented in the two software packages Molpro and Gaussian.

Keywords: ZnTe, $(\text{ZnO})_6$, $[\text{M}(\text{TePh})_2][\text{TMEDA}]$, excited states, electronic spectroscopy