

AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr : **ACHEHBOUNE Mohamed**
 Soutiendra : le **02/10/2021** à **10H**
 Lieu : **Centre de Visioconférence**

une thèse intitulée :

*Etude expérimentale et théorique des propriétés structurales et optoélectroniques
 des nanostructures de ZnO Dopées aux terres rares.*

En vue d'obtenir le Doctorat

FD : Sciences des Matériaux et procédés industriels : (SMPI)

Spécialité : Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement

Devant le jury composé comme suit :

	NOM ET PRENOM	GRADE	ETABLISSEMENT
Président	Pr ZORKANI Izeddine	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Directeur de thèse	Pr JORIO Anouar	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
Rapporteurs	Pr TOUIMI BENJELLOUN Adil	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès
	Pr ZAZOUI Mimoun	PES	Faculté des Sciences et Techniques -Mohammedia
	Pr MANSOURI Imad	PH	ENSAM- Meknès
Membres	Pr SALI Ahmed	PH	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz – Fès
	Pr EL GHAZI Haddou	PH	ENSAM - Casablanca
Invitée	Pr KHENFOUCH Mohammed	PA	Faculté des Sciences appliquées Ait Melloul
	Pr BAITOUL Mimouna	PES	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz - Fès

Résumé :

Dans cette étude, des nanotiges de ZnO non dopées et dopées aux terres rares (TR = Yb, Er) ont été préparés sur des substrats de verre par la méthode hydrothermale. L'effet de la concentration des terres rares sur les propriétés structurales, morphologiques et optoélectroniques des nanotiges de ZnO a été étudié en utilisant la technique de diffraction des rayons X, la microscopie électronique à balayage, ainsi que les spectroscopies infrarouge à transformée de Fourier, Raman, UV-Visible et photoluminescence. De plus, le travail actuel fournit plus de détails sur l'effet de la longueur d'onde d'excitation sur la luminescence des matériaux de ZnO purs et dopés aux TR avec différentes concentrations pour l'application de meilleurs dispositifs optoélectroniques. En parallèle, une étude théorique basée sur le calcul des premiers principes, des propriétés structurales, électroniques, magnétiques et optiques du ZnO pur et dopé aux TR a été effectuée en utilisant la méthode de pseudopotentiels dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) avec l'approximation GGA+U, afin de soutenir les résultats expérimentaux. Par conséquent, les résultats de recherche de ce travail, suggèrent que les propriétés optoélectroniques du ZnO pourraient être améliorées par une concentration optimale de dopant et pourraient fournir une référence expérimentale-théorique qui pourrait motiver des recherches ultérieures pour l'étude des dispositifs optoélectroniques à base de ZnO.

Mots clés :

Oxyde de zinc (ZnO), Nanostructures, Terres rares (TR), Dopage, Hydrothermale, Structure électronique, DFT, Propriétés optoélectroniques.

Experimental and theoretical study of the structural and optoelectronic properties of rare earth doped ZnO nanostructures

Abstract :

In this study, undoped and rare earth (RE=Yb, Er) doped ZnO nanorods were prepared on glass substrates by a facile hydrothermal method. The effect of rare earth concentration on the structural, morphological and optoelectronic properties of ZnO nanorods was investigated using X-ray diffraction technique, field emission scanning electron microscopy, as well as Fourier-transform infrared, Raman, ultraviolet-visible and photoluminescence spectroscopies. Furthermore, the current work provides more details about the excitation wavelength effect on the luminescence of pure and rare earth doped ZnO materials with different concentrations. For the application of better optoelectronic devices, the visible photoluminescence emission intensity could be controlled by adjusting both Yb and Er concentrations as well as the excitation wavelength; better luminescence was obtained with high RE concentration and high excitation wavelength. In parallel,, GGA + U method based on the first-principles calculations was used to investigate the effect of rare earth doping on the electronic structures, structural , magnetic and optical properties of ZnO through density functional theory calculations in order to support the experimental results. Hence, the research findings of this work suggest that the optoelectronic properties of ZnO can be improved by an optimal concentration of dopant and could provide an experimental-theoretical reference that may motivate subsequent researches for the study of ZnO-based optoelectronic devices.

Key Words :

Zinc oxide (ZnO), Nanostructures, Rare earth (RE), Doping, Hydrothermal, Electronic structure, DFT, Optoelectronic properties.