



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE MASTER

Filière : Physique
Option : Matériaux et modélisation numérique

THÈME

Calcul ab-initio des propriétés structurales et
mécaniques de l'alliage ternaire $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$

Préparé par : Abd el baki Hiba
Beztout Rima
Soutenu le : 02-07-2017

Devant le jury :

Président	Dr Abdelhakim LATRECHE
Encadreur	Dr Noudjoud LEBGA
Examineur	Dr Nadjet BENCHIHEUB

2016- 2017

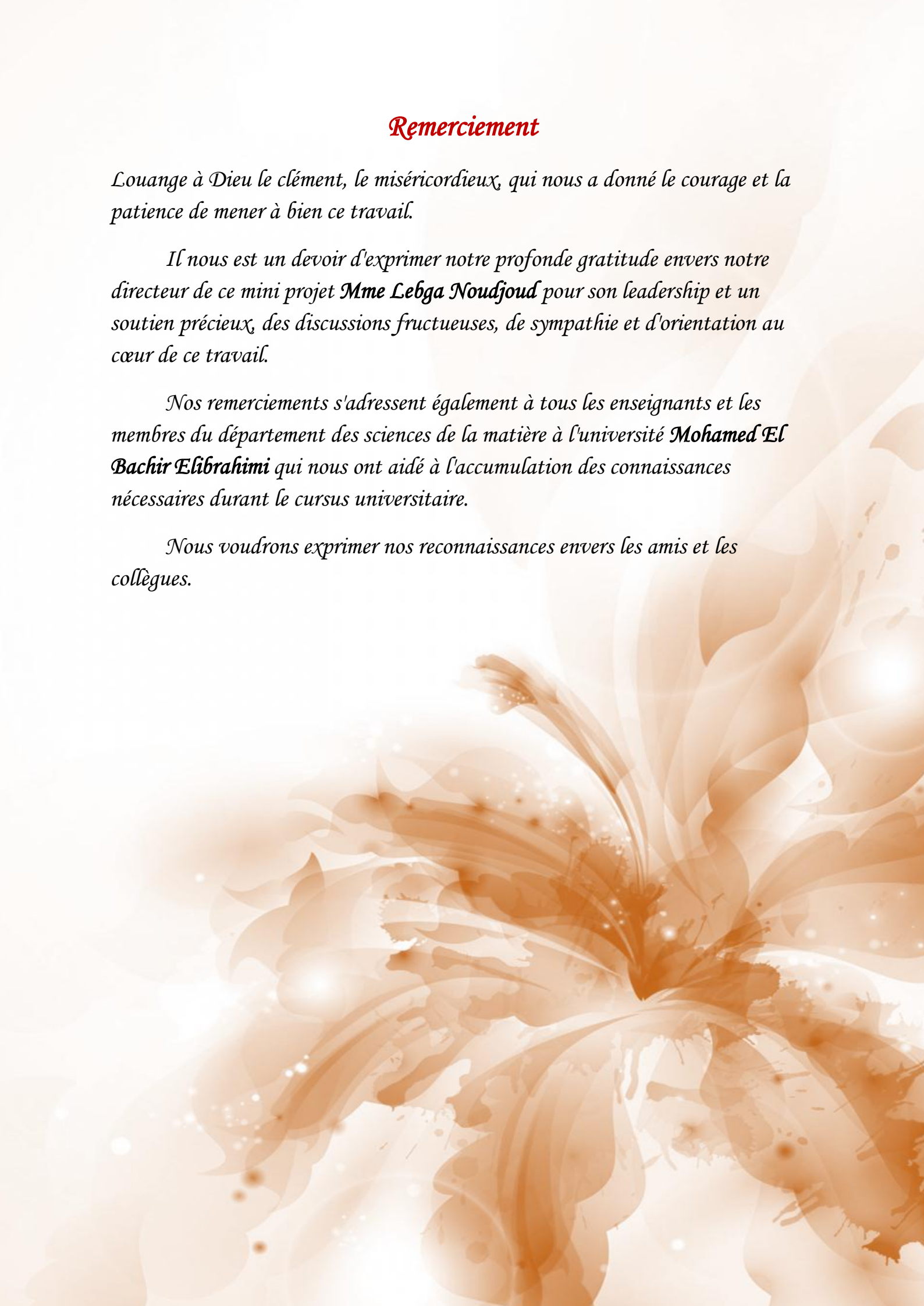
Remerciement

Louange à Dieu le clément, le miséricordieux, qui nous a donné le courage et la patience de mener à bien ce travail.

*Il nous est un devoir d'exprimer notre profonde gratitude envers notre directeur de ce mini projet **Mme Lebga Noudjoud** pour son leadership et un soutien précieux, des discussions fructueuses, de sympathie et d'orientation au cœur de ce travail.*

*Nos remerciements s'adressent également à tous les enseignants et les membres du département des sciences de la matière à l'université **Mohamed El Bachir Elibrahimi** qui nous ont aidé à l'accumulation des connaissances nécessaires durant le cursus universitaire.*

Nous voudrions exprimer nos reconnaissances envers les amis et les collègues.



Dédicace

*Je dédie ce modeste travail tous
ceux qui ont su être présents dans
ma vie :*

À Mon très cher père : Nasser

À Ma très chère mère : Djahida

À Mes sœurs : Rayane et Wafia

À Mes frères : Yaakoub, Imrane et Mohamed

À mon mari : Tayeb

À mon fils : Massoud

À mon grand-mère : Rashida et tous sa famille selloum

À tout ma famille: Abd Elbaki et Khadraoui

À tous mes amies

Hiba Abd Elbaki

Dédicace

Je dédie ce modeste travail en premier lieu aux personnes les plus chers à mes yeux et qui on fait à moi ce que je suis aujourd'hui , que dieu les garde et les protège pour leur soutien moral et financier, pour leurs encouragements et les sacrifices qu'ils ont endurés :

Mes chers parents

Mes chers frères Nassim et Zikou

Mes chères sœurs Massika, Maria et Hadjer

Ma famille et mes amies

Tous mes enseignants

Tous les gens qui m'aiment ,et que j'aime.

Beztout Rima

Sommaire

Sommaire

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale.....	2
Chapitre I: Rappel théorique sur les méthodes de calcul Ab-initio	
I.1-Introduction.....	4
I.2- La théorie de la fonctionnelle de densité (DFT).....	4
I.2.1- Les théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	4
I.2.1.a-Premier théorème de Hohenberg et Kohn	4
I.2.1.b-Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn	5
I.2.2- Approche Kohn- Sham.....	5
I.2.3- La fonctionnelle d'échange- corrélation.....	6
I.2.3.a- Approximation de la densité locale (LDA).....	6
I.2.3.b- Approximation du gradient généralisé(GGA).....	7
I.3- Méthode de pseudo-potentiels.....	8
I.3.1- Théorème de Bloch.....	8
I.3.2- Une base d'ondes planes.....	9
I.3.3-Approximation du cœur gelé.....	9
I.3.4- Le pseudo-potentiel.....	9
I.4- Théorie des alliages semi-conducteurs.....	10
I.4.1- Définition des semi-conducteurs III-V.....	11
I.4.2- Les composés ternaires.....	11
I.4.3- Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs.....	11
I.4.4- L'approximation du cristal virtuel (V.C.A).....	11
I.4.5- Constante du réseau de l'alliage ternaire.....	12
I.5- Les propriétés élastiques.....	12
I.5.1- Les Tenseurs.....	13
I.5.1.1-Le tenseur de déformation.....	13
I.5.1.2- Le tenseur des contraintes.....	14
I.5.1.3- Relation contrainte-déformation.....	15

Sommaire

<i>I.5.1.4- Les propriétés mécaniques</i>	16
Chapitre II :Résultats et discussions	
<i>II.1-Introduction</i>	19
<i>II.2-Etude des propriétés structurales et élastiques de l'alliage BN_xSb_{1-x}</i>	19
<i>II.3-Méthode de calculs</i>	20
<i>II.4-Les tests de convergence</i>	21
<i>II.4.1-Convergence par rapport à l'énergie de coupure</i>	21
<i>a-Pour BN</i>	22
<i>b-Pour BSb</i>	24
<i>II.4.2-Convergence par rapport aux nombre de points k</i>	25
<i>a-Pour BN</i>	27
<i>b-Pour BSb</i>	28
<i>II.5-Propriétés structurales</i>	29
<i>II.5.1- Les composants BN et BSb</i>	29
<i>II.5.2-Alliage BN_xSb_{1-x}</i>	31
<i>II.6-propriétés élastiques</i>	35
<i>II.6.1-Les constantes élastiques</i>	35
<i>a-Pour BN</i>	35
<i>b-Pour $BN_{0.75}Sb_{0.25}$</i>	35
<i>Conclusion générale</i>	42
Références bibliographique	44

Liste des figures

Liste des figures

Figure I.1: Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel10

Figure I.2: Tenseur $T(M)$ liant deux grandeurs physiques (\vec{u} et \vec{v}) dans un repère donné13

Figure I.3: Les composantes du tenseur des contraintes14

Figure II. 1: Structures cristallines du nitrure de bore: **a)**- la phase hexagonale , **b)**- la phase zincblende , **c)**- la phase wurtzite20

Figure II.2: La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BN23

Figure II.3: La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BSb24

Figure II.4: La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BN27

Figure II.5: La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BSb28

Figure II.6: La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille optimiser pour le BN30

Figure II.7: La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille optimiser pour le BSb31

Figure II.8: La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille optimiser pour le $BN_{0.75}Sb_{0.25}$ 33

Figure II.9: La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille optimiser pour le $N_{0.5}Sb_{0.5}$ 33

Figure II.10: La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille optimiser pour le $N_{0.25}Sb_{0.75}$ 34

Figure II.11: La variation de paramètre de maille optimiser en fonction de pourcentage (x).34

Figure II.12: La variation des constantes élastiques en fonction de pourcentage (x)39

Liste des tableaux

Liste des tableaux

Tableau II.1 : La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BN22

Tableau II.2 : La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BSb24

Tableau II.3 : La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BN27

Tableau II.4 : La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BSb.....28

Tableau II.5 : Le paramètre de maille, le module de rigidité et sa dérivée en comparaison avec les valeurs expérimentales et théoriques, théoriques. ^a à partir de l'équation de Murnaghan ^b $B = (C11+2C12)/3$ 30

Tableau II.6: Le paramètre de maille, le module de rigidité et sa dérivée pour le BN_xSb_{1-x}32

Tableau II.7: Constantes élastiques en comparaison avec d'autres résultats obtenus par des calculs Ab-initio [1,19,20] du BNSb.....38

Tableau II.8: Valeurs des paramètres de B , K , A , C_s , ξ et le rapport B/ C_s pour l'alliage $BN_xSb_{(1-x)}$ 40

Introduction générale

La physique de la matière condensée et les sciences des matériaux sont intimement liées à la compréhension et à l'exploitation des systèmes d'électrons et de noyaux en interaction. La théorie quantique des solides, a pour objet l'étude de leurs propriétés physiques à partir de leurs constituants microscopiques. Il s'agit de décrire et de prédire les propriétés d'un solide à partir de sa structure microscopique, et des interactions entre particules qui le composent. Pour comprendre le lien entre ces interactions au sein d'un solide et les propriétés observées qui en découlent, des expériences sont nécessaires. Il est aussi important de recourir à une modélisation, c'est-à-dire à l'élaboration de théories qui permettent non seulement de mieux comprendre les propriétés de ces composés mais de les prédire [1].

Donc pour comprendre les différentes propriétés physiques, on utilise les méthodes ab-initio qui sont devenues aujourd'hui un outil incontournable dans le calcul de ces propriétés. Elles sont aussi un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux et elles ont parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire [2].

Ce mémoire a pour but d'étudier les propriétés structurales et mécaniques du semi conducteur ternaires $\text{BN}_x\text{Sb}_{(1-x)}$. La majorité du travail est numérique et utilise les méthodes de calculs de premier principe implémentées dans le code d'accès public ABINIT [3]. Le manuscrit est composé de trois chapitres :

Dans le premier chapitre, nous rappelons le principe de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui regarde la densité électronique comme variable fondamentale et toutes les propriétés physiques, notamment l'énergie totale du système d'électrons, peuvent être exprimés comme une fonction de celle-ci. Cette densité peut être obtenue par la résolution des équations de Kohn et Sham, pour un système d'équation de Schrödinger mono électronique avec des approximations dite LDA ou GGA [4]. Aussi en présent le principe de la méthode des pseudo-potential [5], et les propriétés élastiques par rappelle succinctement les grandeurs caractéristiques de l'élasticité: les tenseurs de déformation, de contraintes, la loi de Hooke et les propriétés mécaniques [6].

Dans le deuxième chapitre nous allons présenter les résultats qu'on a obtenu comparais avec des résultats d'autres travaux expérimentaux et théoriques disponibles [4].

Finalement, on termine par une conclusion générale qui regroupe tous les principaux résultats de ce travail.

Chapitre I

*Rappel théorique sur les
méthodes de calcul Ab-initio*

I.1- Introduction:

Les codes de calcul dans tous les domaines et spécialement l'état de la matière, solide liquide ou gaz ont été mis en service ces dernières décennies. Devenus de plus en plus sophistiqués pour décrire plus précisément l'interaction des phases [4]. Ces codes utilisent les méthodes Ab-initio ou le premier principe, utilisant les constantes atomiques pour résoudre l'équation de Schrödinger. La DFT (la théorie de la fonctionnelle de densité) implantée dans ces codes c'est imposée comme meilleure méthode, pour le calcul quantique de la structure électronique de la matière. L'objectif principal de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique (étude de la structure de la matière par les méthodes traditionnelles), par la densité électronique de charges.

I.2- La théorie de la fonctionnelle de densité (DFT):

La théorie de la fonctionnelle de la densité ou DFT (Density Functional Theory) constitue actuellement l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs des propriétés structurales, élastiques, électroniques, optiques et thermodynamiques de la matière, aussi bien en physique de la matière condensée qu'en chimie quantique [7]. Historiquement, les premières idées dans ce sens furent introduites dans les travaux de Thomas et Fermi [5] à la fin des années 1920. Néanmoins, il fallait attendre le milieu des années 1960 et les contributions de Pierre Hohenberg, Walter Kohn et Lu Sham pour que soit établi le formalisme théorique sur lequel repose la méthode actuelle [7].

Le principe de la DFT consiste donc en une reformulation du problème quantique à N corps en un problème mono corps (ou, à la rigueur, bi-corps si l'on considère les effets de spin) avec pour paramètre la densité électronique. L'idée centrale de la DFT est que la densité électronique de l'état fondamental du système détermine entièrement les valeurs moyennes des observables, comme par exemple, l'énergie [7].

I.2.1- Les théorèmes de Hohenberg et Kohn:

la DFT a réellement été établie avec les théorèmes fondamentaux exacts de Hohenberg et Kohn en 1964 qui relient l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique [8]. Les deux théorèmes sont comme suit :

I.2.1.a- Premier théorème de Hohenberg et Kohn:

«L'énergie totale de l'état fondamental E est une fonctionnelle unique de la densité des particules $\rho(r)$ pour un potentiel externe $V_{ext}(r)$ donné».

Ce théorème met en évidence une correspondance unique entre le potentiel extérieur et la densité électronique. Puisque celle-ci fixe le nombre d'électrons, alors elle détermine aussi de manière unique la fonction d'onde et par là les propriétés électroniques du système. Ainsi, pour un système donné, l'énergie s'écrit comme suit:

$$E[\rho(r)] = T[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)] + V_{ext}[\rho(r)] \quad (I.1)$$

$$\Rightarrow E[\rho(r)] = F_{HK}[\rho(r)] + \int \rho(\vec{r})V_{ext}(r)dr \quad (I.2)$$

Avec $F_{HK} = T_e[\rho(r)] + V_{ee}[\rho(r)]$, qui est la fonctionnelle de Hohenberg-Kohn contenant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle dues à l'interaction répulsive électron-électron [5].

I.2.1.b-Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn:

Ce deuxième théorème découle du fait que, La fonctionnelle de l'énergie totale de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental [5]. La densité de particules de l'état fondamental vérifie :

$$E[\rho_0] = \text{Min } E[\rho] \quad (I.3)$$

«Une fonctionnelle universelle pour l'énergie $E[\rho(r)]$ peut être définie pour tout système d'électrons. Pour un $V_{ext}(r)$ donné, l'énergie fondamentale exacte est le minimum absolu par rapport à $\rho(r)$, et la densité $\rho(r)$ qui minimise cette fonctionnelle est la densité fondamentale exacte» [3].

I.2.2- Approche Kohn-Sham:

Puisqu'il existe une solution unique pour la densité de l'état fondamental, il ne manque plus que la façon de calculer cette densité. En 1965 Kohn et Sham [9] mettent alors en place une méthode pratique pour réaliser ce calcul de manière approchée. L'idée géniale est de remplacer le système de particules réelles par un système équivalent à particules indépendantes, tel que dans l'état fondamental ces deux systèmes aient la même densité. Ainsi le système de départ est remplacé par un système fictif de particules indépendantes plongées dans un potentiel moyen. Le minimum d'énergie du système fictif de Kohn-Sham correspond à l'état fondamental souhaité pour lequel on obtient la densité associée.

Pour ce système fictif, les théorèmes de Hohenberg et Kohn s'appliquent également. La fonctionnelle de la densité $F[\rho(r)]$ pour le système interactif peut être exprimée par l'expression suivante :

$$F[\rho(\vec{r})] = T_s[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad (I.4)$$

Où : $T_s[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie cinétique du gaz d'électrons non interagissant, $E_H[\rho(\vec{r})]$ désigne le terme de Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons décrite à travers leur

densité de charge), $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ est une fonctionnelle additionnelle qui décrit l'interaction inter électronique appelée énergie d'échange-corrélation [4].

Les fonctions d'onde φ sont alors obtenues par la solution d'une équation de type Schrödinger avec un potentiel effectif V_{eff} , donnée par :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{eff}\right)\varphi_i(r) = \varepsilon_i\varphi_i(r) \quad (I.5)$$

Où le potentiel effectif de Kohn et Sham est de la forme:

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \quad (I.6)$$

$$V_H(\vec{r}) = \frac{\delta E_H[\rho(\vec{r})]}{\delta\rho(\vec{r})} = ke^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3r' : \text{le potentiel de Hartree.}$$

$$V_{ext}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{ext}[\rho(\vec{r})]}{\delta\rho(\vec{r})} = -ke^2 \sum_K \frac{Z_K}{|\vec{r}-\vec{R}_K|} : \text{le potentiel extérieur.}$$

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta\rho(\vec{r})} : \text{le potentiel d'échange et de corrélation.}$$

Avec Z_K représente la charge du $K^{\text{ème}}$ noyau [10], et r et R_K désignant respectivement les vecteurs positions électroniques et nucléaires [9], $k = 1/4\pi\varepsilon_0$: constante de Coulomb.

φ_i et ε_i sont appelés respectivement orbitales et énergies de Kohn et Sham [10].

Et la densité de Kohn-Sham s'écrit en fonction des N fonctions d'ondes des particules libres [9] :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2 \quad (I.7)$$

Où la somme est sur les N états occupés dans le schéma à une particule [3].

La bonne description de la densité électronique du système de particules devient alors totalement dépendante de la qualité de la fonctionnelle et de sa partie échange corrélation. D'une part cette fonctionnelle va permettre de prendre en compte l'énergie d'échange d'Hartree-Fock et d'autre part elle va prendre en compte l'énergie de corrélation entre les électrons [9].

I.2.3- La fonctionnelle d'échange-corrélation :

La fonctionnelle d'échange-corrélation doit tenir compte, en plus du calcul auto cohérent, de la différence d'énergie cinétique entre le système fictif non interactif et les systèmes réels.

Ainsi, le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation repose sur un certain nombre d'approximations qui sont la LDA et la GGA [2].

I.2.3.a- Approximation de la densité locale (LDA):

L'approximation la plus répandue pour calculer le terme d'échange et corrélation est l'approximation de la densité locale, ou LDA. Cette approximation fait l'hypothèse que la densité

fluctue assez lentement, elle remplace donc le potentiel d'échange et corrélation en chaque point de l'espace par celui d'un gaz uniforme d'électrons qui interagissent. Le gaz d'électrons est pris de la même densité que la densité au point calculé, ceci a été fait au début des années 80. La LDA est souvent une approximation efficace, même quand la densité fluctue de manière non négligeable ; mais elle a certains désavantages, comme une sous-estimation systématique de l'énergie de cohésion des solides et des paramètres de maille. L'erreur sur les paramètres structuraux est souvent faible (de l'ordre de 1 à 2 %), mais peut devenir importante quand des liaisons de types Vander waals sont en jeu. L'énergie d'échange-corrélation (LDA) peut être écrite sous la forme :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (\text{I.8})$$

Dans laquelle $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ représente l'énergie d'échange et de corrélation par électron dans un gaz d'électrons dont la distribution est supposée uniforme [1]. Elle peut être décomposée en une contribution d'échange $\varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ et de corrélation $\varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ [10] :

$$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})] + \varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.9})$$

le potentiel d'échange-corrélation $V_{xc}^{LDA}(\vec{r})$ peut être obtenu d'une façon variationnelle selon l'équation :

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta(\rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})])}{\delta\rho(\vec{r})} \quad (\text{I.10})$$

I.2.3.b- Approximation du gradient généralisé(GGA):

Le succès de l'approximation de la densité locale a engendré le développement de différentes approximations du gradient généralisé (GGA), en apportant une nette amélioration de celle-ci et ainsi une meilleure adaptation aux systèmes étudiés. Cette approximation revient à considérer le terme d'échange-corrélation non plus comme une fonction uniquement de la densité ρ , mais de manière plus générale comme une fonction de la densité et de sa variation locale $|\nabla\rho|$ [4]. Ainsi la fonctionnelle $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ rend compte du caractère non uniforme du gaz d'électrons.

Dans ce cas, la contribution de $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$ à l'énergie totale du système peut être additionnée de façon cumulée à partir de chaque portion du gaz non uniforme comme s'il était localement non uniforme, elle s'écrit de la forme :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3\vec{r} \quad (\text{I.11})$$

Où $\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|]$ représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme [2].

I.3- Méthode de pseudo-potentiels :

Les électrons de valence déterminent presque toutes les propriétés physiques des matériaux en formant des liaisons chimiques et en se délocalisant dans le solide. L'interaction des électrons de valence avec les noyaux et électrons de cœur peut être remplacée par un potentiel effectif, beaucoup moins attractif que le potentiel créé par le noyau. Ce potentiel effectif est appelé un pseudo-potentiel. La théorie du pseudo-potentiel a été mise au point par Herring en 1940 [2].

La méthode du pseudo-potentiel est une technique de calcul très utilisée dans l'étude des structures de bande. Cette méthode s'est avérée, depuis son introduction, très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides [1].

A ce stade, une fonction d'onde doit être calculée pour chaque électron parmi un nombre infini dans le système. Ce problème peut être surmonté en appliquant le théorème de Bloch à la fonction d'onde électronique. Ce qui va naturellement conduire à utiliser une base d'ondes planes et la technique des points spéciaux dans l'espace réciproque [3].

I.3.1- Théorème de Bloch:

Bloch démontra un important théorème qui établit que les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique peuvent être mises sous la forme d'un produit d'une onde plane par une fonction $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ qui a la périodicité du réseau cristallin [3]:

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})} u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (I.12)$$

Où: $\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$: est la fonction d'onde du système, \vec{k} un vecteur de l'espace réciproque du cristal, et $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$: est une fonction qui a la périodicité du réseau cristallin étudié, associé à une bande n .

Physiquement, on peut dire que la fonction de Bloch est la fonction d'onde d'un électron libre $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})}$ modulée par le potentiel périodique du réseau d'ions à travers la fonction $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ [10].

Pour déterminer φ qui est une fonction périodique, l'idée la plus simple est de la décomposer en ondes planes à l'aide de la série de Fourier :

$$u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}}(\vec{G}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (I.13)$$

Où: \vec{G} : représente un vecteur du réseau réciproque, et $C_{n,\vec{k}}(\vec{G})$: représentent les coefficients de développement pour les orbitales occupées.

D'où l'expression de la fonction d'onde totale [1]:

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}}(\vec{G}) e^{i(\vec{G}+\vec{k})\cdot\vec{r}} \quad (I.14)$$

I.3.2- Une base d'ondes planes:

Suite au théorème de Bloch, la fonction d'onde en chaque point \mathbf{k} peut être représentée en utilisant une base discrète d'ondes planes. En principe pour bien représenter la fonction d'onde on a besoin d'un très grand nombre d'ondes planes. Cependant, les coefficients $C_{n,\vec{k}+\vec{G}}$ pour les ondes planes de petite énergie cinétique $\frac{\hbar^2}{2m} |\vec{k} + \vec{G}|^2$ sont plus importants que ceux associés aux ondes planes avec grande énergie cinétique [1]. En conséquence, la base d'ondes planes peut être limitée aux ondes planes qui ont une énergie cinétique inférieure à une valeur critique "cut-off energy" E_{cut} . La limitation de la base d'ondes planes conduit à des erreurs dans le calcul de l'énergie totale. L'ordre de grandeur de cette erreur peut être réduit en augmentant la valeur de l'énergie critique. En principe la valeur de l'énergie critique doit être augmentée jusqu'à ce que l'énergie totale converge, ce qui signifie que le choix de E_{cut} détermine le degré d'exactitude du calcul [3].

La représentation de la fonction d'onde dans une base d'onde plane, présente deux problèmes majeurs, même avec l'utilisation de l'énergie critique. Premièrement, les calculs deviennent de plus en plus coûteux (en temps) au fur et à mesure que la taille des atomes augmente. Deuxièmement, le fait que les orbitales de Kohn-Sham doivent être orthogonales entre elles, induit une augmentation importante de l'énergie cinétique maximale. Dans ce cadre, certains éléments du tableau périodique vont pouvoir être modélisés avec beaucoup d'efficacité, tandis que d'autres, comme les éléments lourds ou les métaux de transition, vont nécessiter des moyens de calculs extrêmement importants [1].

I.3.3- Approximation du cœur gelé:

Les propriétés physiques et chimiques d'un matériau sont déterminées par la nature des liaisons chimiques qui assurent sa cohésion. Ces liaisons sont formées principalement par les électrons de valence car ceux du cœur, localisés autour des noyaux sont presque inertes, car ils sont très peu sensibles au changement de l'environnement et ne participent pas aux liaisons chimiques. Nous pouvons donc considérer que la configuration des électrons de cœur dans le solide est équivalente à celle des atomes isolés: c'est l'approximation du cœur gelé [10].

À noter que cette séparation entre électrons de cœur et électrons de valence n'est pas toujours très claire : tout dépend de l'atome, de son environnement et du degré d'approximation considéré [11].

I.3.4- Le pseudo-potentiel:

L'idée du pseudo-potentiel est de considérer que seuls les électrons de valence contribuent aux liaisons chimiques du système. La technique consiste à remplacer le vrai potentiel coulombien et

les effets des électrons de cœur par un potentiel effectif agissant uniquement sur les électrons de valence. Le pseudo potentiel et la pseudo fonction d'onde des électrons ont la même forme que le vrai potentiel et les vrais fonctions d'ondes, au de la d'un certain rayon de coupure [4].

En pratique, les fonctions d'onde réelles $\psi(\vec{r})$ représentant les électrons de valence qui sont appelées fonctions d'onde de valence «tous électrons», sont remplacés par des «pseudo-fonctions d'onde» $\psi^{ps}(\vec{r})$ (figure I.1). Ces pseudo-fonctions d'onde sont plus lisses ou *douces* que celles des fonctions d'onde réelles, et elles peuvent de ce fait être représentées avec nombre d'ondes planes très inférieur à celui nécessité dans le traitement des fonctions d'onde réelles. On définit le rayon de coupure r_c , le rayon de la sphère qui délimite la région du cœur. À l'extérieur de cette sphère ($r > r_c$) l'égalité $\psi^{ps}(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ est imposée. À l'intérieur ($r < r_c$), la forme de $\psi^{ps}(\vec{r})$ est choisie de manière à supprimer les nœuds et les oscillations dus à l'orthogonalisation des fonctions d'onde avec les états de cœur [10].

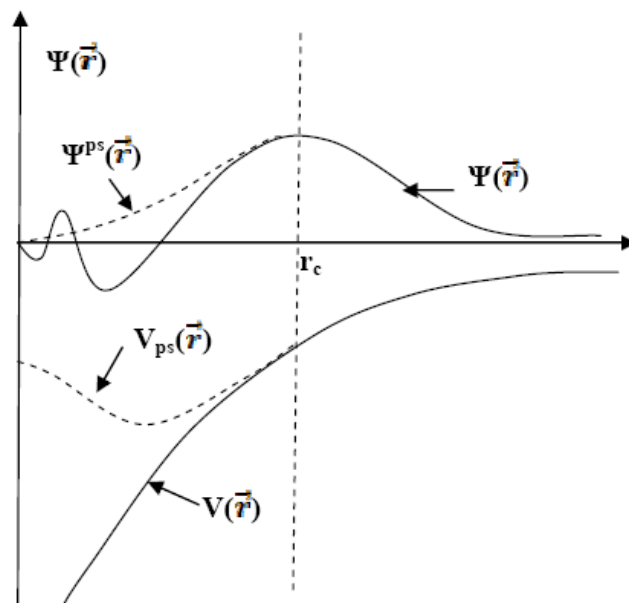


Figure I.1: Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel [1].

I.4- Théorie des alliages semi-conducteurs :

Par alliage, on entend un mélange homogène de deux ou plusieurs matériaux. Il fut un temps où le mot alliage était uniquement réservé aux métaux, pourtant cette définition s'est très vite associée à d'autres matériaux, notamment le céramique et les polymères.

Peu après le développement des techniques modernes de la croissance cristalline et la purification des semi-conducteurs, il a été réalisé plusieurs alliages binaires, ternaires et

quaternaires. L'utilisation de ces derniers dans les domaines de la microélectronique et l'optoélectronique a encouragé les chercheurs à développer le côté théorique ainsi que l'expérimental [12].

I.4.1- Définition des semi-conducteurs III-V :

Les semi-conducteurs sont des matériaux dont la conductivité électrique intermédiaire entre celle des conducteurs ($\sim 10^6 \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$) et des isolants ($\sim 10^{-22}$ à $\sim 10^{-14} \Omega^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$). Cette conductivité varie sous l'effet de la température, l'éclairement et la présence d'impuretés (dopage, défauts du réseau).

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeliev [13].

I.4.2- Les composés ternaires :

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait obtenir des alliages ternaires, qui sont identifiés de la façon suivante :

S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit, $A_x A'_{(1-x)}$
Exemple: $BN_x Sb_{(1-x)}$ lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court BNSb [2].

I.4.3- Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs :

Différentes méthodes ont été appliquées pour l'étude optique et électronique des alliages semi-conducteurs (III-V, II-VI, ...), ceci inclut les méthodes basées sur le modèle des liaisons fortes semi-empiriques, modèle semi-empirique pseudo-potentiel et le modèle self-consistant de l'approximation de la densité locale (L.D.A), la C.P.A et l'approche du cristal virtuel (V.C.A) etc... [12].

I.4.4- L'approximation du cristal virtuel (V.C.A) :

La V.C.A considère que l'alliage est approximativement représenté par un réseau périodique monoatomique (virtuel) avec un potentiel atomique moyen [12].

Le semi-conducteur est supposé macroscopiquement uniforme, cependant, les fluctuations microscopiques de la composition $A_x B_{1-x}$ sont inévitables et elles viennent du fait que la substitution d'un atome A est plus probable qu'un atome B.

La différence entre les potentiels intrinsèques des substituants (A et B) se traduit par des distorsions locales et les paramètres du nouveau matériau ainsi obtenus dépendront de l'amplitude de ces distorsions [12].

Dans l'approximation du cristal virtuel (*Virtual-Crystal Approximation VCA*), on considère que les alliages construits par plusieurs types d'atomes A et B par exemple est aléatoirement distribuée sur les sites d'un réseau cristallin. Le potentiel représentatif de l'alliage par site est considéré comme la superposition des potentiels atomiques de chaque type A et B en proportion de leurs concentrations. En terme mathématique :

$$V_{VCA} = xV_A + (1 - x)V_B \quad (\text{I.15})$$

L'hamiltonien considéré dans la VCA est donné par :

$$H(x) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (\text{I.16})$$

Où x est la concentration atomique de l'atome de type A et V_A, V_B est le potentiel atomique de l'atome A, B respectivement. Ainsi on construit un Hamiltonien effectif où le potentiel est remplacé par V_{eff} . Les valeurs propres (énergies) et les vecteurs propres de ce Hamiltonien représentent donc l'alliage complètement désordonné [9].

Les pseudo-potentiels élémentaires ioniques de B et A sont combinés pour construire le pseudo-potentiel virtuel de l'alliage A_xB_{1-x} [3].

I.4.5- Constante du réseau de l'alliage ternaire :

Il a été montré expérimentalement que la constante du réseau obéit à la loi de Vegard à l'exception de certains alliages où très petites déviations ont été observées. La constante est une moyenne pondérée linéairement en fonction de la composition sur les constantes du réseau des composés binaires (AC et BC) lui formant l'alliage.

Notons $a(x)$: La constante du réseau de l'alliage et a_{AC}, a_{BC} les constantes du réseau des composés binaires AC et BC respectivement, la constante du réseau de l'alliage est donnée par [12] :

$$a(x) = \overline{a(x)} = xa_{AC} + (1 - x)a_{BC} \quad (\text{I.17})$$

avec a_{AC} : paramètre du réseau du composé binaire AC.

a_{BC} : paramètre du réseau du composé binaire BC.

I.5- Les propriétés élastiques :

L'élasticité des solides c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquer des déformations réversibles (retour à l'état initial). La loi de Hooke s'applique seulement aux faibles déformations et établit que dans un solide élastique, la déformation est proportionnelle à la contrainte. Les forces sont décrites par des tenseurs ou tenseurs des contraintes. Les réponses sont appelées déformations qui sont données aussi par des tenseurs [2].

I.5.1- Les Tenseurs:

Un tenseur est un opérateur liant dans un même repère deux grandeurs physiques (par exemple \vec{u} et \vec{v} dans la figure. I.2) en un même point d'un espace de dimension d . Ses composantes dans un repère donné ne dépendent que du \mathbf{M} [1].

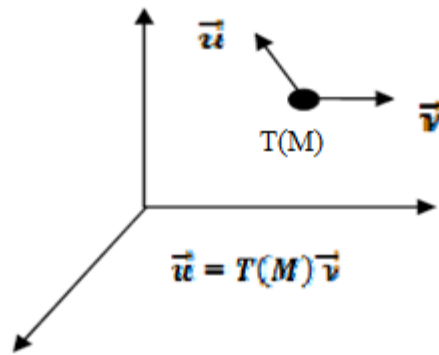


Figure I.2: Tenseur $T(M)$ liant deux grandeurs physiques (\vec{u} et \vec{v}) dans un repère donné [1].

Le Rang d d'un tenseur caractérise son nombre d'indices :

$T^{(0)}$ Tenseur de Rang 0 : Scalaire à d^0 , composante $T(M)$

$T^{(1)}$ Tenseur de Rang 1 : Vecteur à d^1 , composantes $T_i(M)$

$T^{(2)}$ Tenseur de Rang 2 : Matrice à d^2 , composantes $T_{ij}(M)$

$T^{(n)}$ Tenseur de Rang n : Matrice à d^n , composantes $T_{ij\dots n}(M)$.

Où : $d^0, d^1, d^2, \dots, d^n$: sont les dimensions d'ordre l'indice n .

I.5.1.1-Le tenseur de déformation:

Sous l'action de forces extérieures, les corps solides se déforment. Ils changent de forme et de volume. Les déformations d'un objet sont mesurées généralement à partir d'une position initiale, qui est la position au repos de l'objet pour laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Les éléments du tenseur des déformations ε_{ij} sont définis d'une façon générale par la relation suivante [2]:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.18})$$

Avec $(x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z)$ et $(u_1 = u, u_2 = v, u_3 = w)$

Donc : $\varepsilon_{xx} = \frac{\delta u}{\delta x}$, $\varepsilon_{yy} = \frac{\delta v}{\delta y}$, $\varepsilon_{zz} = \frac{\delta w}{\delta z}$,

$$\varepsilon_{yx} = \varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right), \quad \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right), \quad \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right)$$

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.19})$$

Le tenseur des déformations, est un tenseur symétrique d'ordre 2 servant à décrire l'état de déformation local résultant de contraintes.

Les composantes sont notées ε_{ij} , avec :

- Les termes diagonaux ε_{ii} sont les allongements relatifs dans la direction i (selon l'axe x_i).
- Les autres termes ε_{ij} ($i \neq j$) sont les demi-variations de l'angle droit [1].

I.5.1.2- Le tenseur des contraintes :

La contrainte est par définition, la force qui s'exerce sur l'unité de surface du solide .Le tenseur des contraintes, noté $\boldsymbol{\sigma}$, est également représenté par une matrice 3×3 symétrique ,comme le tenseur des déformations[2].

$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.20})$$

Dans cette notation, le premier indice (i) indique la normale au plan sur lequel s'applique la force et le deuxième indice (j) indique la direction de la force (voir **Figure I.3**, ci dessous) [1].

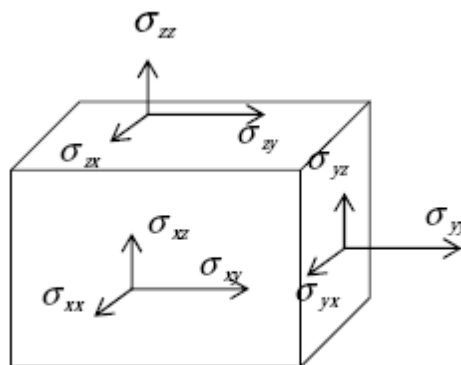


Figure I.3 : Les composantes du tenseur des contraintes [2].

Les composantes σ_{ii} sont appelées contraintes normales, car elles agissent perpendiculairement aux différentes faces du cube (figure I-3). Les éléments σ_{ij} avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent sur les plans des surfaces. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume [1].

I.5.1.3- Relation contrainte-déformation :

Deux tenseurs d'ordre 2 peuvent être définis : le tenseur des contraintes σ_{ij} et le tenseur des déformations ε_{ij} . Ils sont tous les deux symétriques, c'est à dire que $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ et $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$. En théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre σ_{ij} et ε_{ij} donnée par la loi de Hooke généralisée [2]:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.21})$$

C_{ijkl} est un tenseur d'ordre 4 appelé tenseur de rigidité élastique et il définit les constantes élastiques du matériau. Le nombre de combinaisons possibles de quatre indices $ijkl$ est de $3^4 = 81$ éléments. Dans le cas le plus général et par raison de symétrie de σ_{ij} et de ε_{kl} et en appliquant la relation de Maxwell $C_{ijkl} = C_{klij}$, les éléments C_{ijkl} se réduisent à 21 éléments indépendants. En outre, la symétrie du solide cristallin réduit notablement ce nombre. Les constantes C_{ijkl} sont donc notées par une nouvelle notation (notation de Voigt), à savoir $C_{\alpha\beta}$, telles que les indices ij ou kl sont abrégés en remplaçant chaque paire d'indices initialement quadruplés par un seul indice α ou β . Ainsi, les abréviations seront comme suit :

Notation tensorielle	Xx	yy	zz	yz	xz	Xy
Notation matricielle	1	2	3	4	5	6

La relation entre la contrainte et déformation s'écrit [9]:

$$\sigma_{\alpha} = C_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta} \quad (\text{I.22})$$

La loi de Hooke généralisée peut être écrite sous la forme matricielle [2]:

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (\text{I.23})$$

Le nombre total de constantes élastiques est 36, ce nombre se réduit selon la symétrie du cristal, si le cristal possède une symétrie triclinique, par exemple, le nombre total de constantes

élastiques est égal à 21, pour un cristal cubique le nombre de constantes élastique est égal a 3, C_{11} , C_{12} et C_{44} les autres composantes sont nulles, la matrice des constantes élastiques s'écrit; dans ce cas :

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{I.24})$$

Avec C_{11} , C_{12} , C_{44} les 3 composantes indépendantes non nulles [9].

I.5.1.4- Les propriétés mécaniques :

a - Module de compressions , compressibilité et le module de cisaillement:

Le volume du corps ne pouvant diminuer que lorsqu'on augmente la pression, les variations du volume V et de la pression P sont donc inversement proportionnelles. Par ailleurs, une compression sous une pression P permet de définir le module de compressibilité B (B est appelé aussi Module de rigidité à la compression), qui peut être s'exprimé comme suit :

$$B = -V \frac{dP}{dV} \quad (\text{I.25})$$

Où : V est le volume du corps à une pression appliquée P , plus B augmente plus le matériau est peu compressible.

Le module de compressibilité donc, mesure la résistance à une modification du volume dans les solides et donne ainsi une estimation de la réponse élastique d'un matériau à une pression hydrodynamique externe [1].

Pour le système cubique le module de rigidité B peut être exprimé comme une combinaison linéaire des deux constantes élastiques C_{11} et C_{12} donnée par :

$$B = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{I.26})$$

Le module de rigidité peut être calculé aussi par une deuxième méthode qu'est différente, de la 1^{ère}, il est calculé à partir du fit de l'équation d'état de Murnaghan [9].

La compressibilité K est définie par $K = \frac{1}{B}$, plus B augmente plus le matériau est peu compressible.

On définit le module de cisaillement C_s pour un cristal cubique par [6]:

$$C_s = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) \quad (\text{I.27})$$

Tapez une équation ici.

b – Le paramètre de déformation interne ξ

Pour le système cubique le paramètre de déformation interne ξ peut être aussi exprimé comme une combinaison des deux constantes élastiques C_{11} et C_{12} [1]:

$$\xi = \frac{(C_{11}+8C_{12})}{7C_{11}+2C_{12}} \quad (\mathbf{I.28})$$

c - Facteur d'anisotropie A

Pour quantifier l'anisotropie élastique des composés, nous avons calculé le facteur d'anisotropie A à partir des valeurs calculées des constantes élastiques en utilisant l'expression suivante :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11}-C_{12}} \quad (\mathbf{I.29})$$

Pour un matériau isotrope, A est égal à 1, alors que n'importe quelle valeur plus petite ou plus grande que 1 indique l'anisotropie [10].

Chapitre II

Résultats et discussions

II.1- Introduction :

Avec les développements récents dans la physique de la matière condensée, beaucoup d'efforts ont été déployés pour une meilleure compréhension du comportement des matériaux. Comprendre la physique d'un matériau nécessite la connaissance fondamentale de ses propriétés structurales et électroniques. La simulation joue un rôle important dans la détermination de ces propriétés [5].

Dans ce chapitre nous allons présenter les résultats qu'on a obtenu et la discussion sur les propriétés structurales, élastiques d'alliage $BN_xSb_{(1-x)}$, en utilisant le code Abinit basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité et la méthode des pseudo-potentiels .

II.2- Etude des propriétés structurales et élastiques de l'alliage BN_xSb_{1-x} :

Les composés de bore BN et BSb présentent un grand intérêt technologique pour les températures élevées, les applications électroniques et optiques. Ils ont des écarts de large bande, une excellente dureté physique, extrêmement grandes compensations d'hétérojonction, conductivité thermique élevée et haute température de fusion. En outre, ces composés possèdent des caractéristiques intéressantes telles que le rôle inverse entre les cations et anions en termes de transfert de charge et les nouvelles transitions de phase à haute pression.

Le nitrure de bore (BN) est un composé binaire de bore et de l'azote, de formule brute BN; qui existe sous des formes analogues à des allotropies de carbone, dont la plupart sont des polymères inorganiques. L'antimoniure de bore (BSb) est un semi-conducteur III-V binaire, constitué de bore et d'antimoine [14].

Le nitrure de bore BN peut être considéré comme le premier des composés III-V. Il existe sous trois formes allotropiques : hexagonale, wurtzite et blende (**Figure II.1**). Cette dernière forme a été jusqu'ici préparée dans des conditions de hautes pressions et hautes températures. Elle présente un intérêt important du fait de ses applications potentielles liées à ses propriétés physicochimiques exceptionnelles [15].

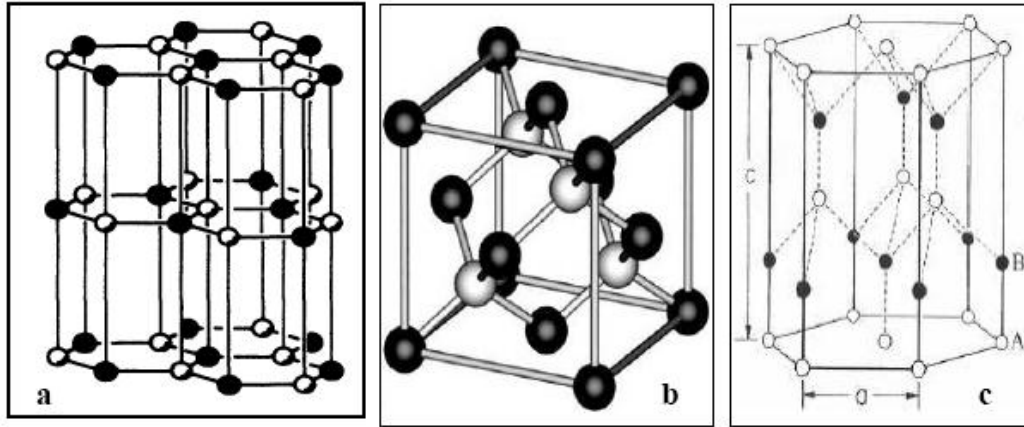


Figure II.1: Structures cristallines du nitrure de bore: **a)**- la phase hexagonale, **b)**- la phase zinc blende, **c)**- la phase wurtzite [1].

Il est possible de combiner deux composés différents avec différents écarts de bandes optiques et différentes rigidités afin d'obtenir un nouveau matériau avec des propriétés intermédiaires. Suite à de telles procédures ; nous avons prédit les résultats des calculs ab-initio pour alliage BN_xSb_{1-x} [16].

Dans ce mémoire, on a fait l'étude des propriétés structurales et élastiques de l'alliage BN_xSb_{1-x} dans la phase zinc blende. On cherche à déterminer la variation des constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) en fonction de la composition (x) de l'alliage BN_xSb_{1-x} .

II.3- Méthode de calculs :

Les calculs sont faits en utilisant le code abinit avec la technique pseudo-potentielle couplée avec la méthode de la base des ondes planes et cela afin de résoudre les équations de Khon-Sham. Cette technique est basée sur le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT en utilisant l'approximation de la densité locale LDA proposé par Teter et Pade, pour décrire l'énergie d'échange et corrélation [6]. Nous avons utilisé les pseudo potentiels de Trouiller Martins [1]. L'intégration dans la zone de Brillouin a été remplacée par une sommation discrète sur un ensemble de points k spéciaux en utilisant la technique standard de Monkhorst et Pack [6].

Les avantages majeurs de cette approche sont: la facilité de calculer les forces et les contraintes; le bon contrôle de la convergence en respectant tous les paramètres computationnels employés; la capacité d'économiser le temps de calculs en négligeant les électrons du cœur [10].

II.4 - Les tests de convergence :

Avant le calcul des différentes propriétés citées précédemment, on a fait des tests de convergence sur deux paramètres essentiels :

- le premier sur l'énergie critique "Cut-off Energy" E_{cut} qui joue un rôle important pour obtenir une bonne convergence de l'énergie totale, ce paramètre (E_{cut}) fixe la taille de la base d'onde plane utilisée dans le calcul, il est important de faire un bon choix de ce paramètre.
- Le deuxième sur le nombre de points k pris en compte dans l'intégration à travers la première zone de Brillouin [1].

II.4.1- Convergence par rapport à l'énergie de coupure :

- ❖ 1^{ère} étape : on a besoins de 4 fichiers : un fichier d'entrée (input) "t31.in", un fichier principal "t3x.files" les fichiers du pseudo-potentiel des atomes (5b.pspnc, 7n.pspnc) et le fichier exécutable (abinis.exe) .
- ❖ 2^{ème} étape : Pour effectuer la convergence par rapport à E_{cut} , il suffit d'ajouter Centaines instructions.

Ces instructions montrent que le calcul sera effectué 12 fois avec un pas de 5 Ha.

- ❖ 3^{ème} étape : exécuté le code, par l'instruction : abinis<t3x.files>log

Les résultats des calculs seront notés dans un fichier de type out.

Le fichier t3x.files est écrit comme suit :

```
t3x.in    nom du fichier input
t3x.out  nom du fichier output
t3xi     nom des autre fichiers input
t3xo     nom des autre fichiers output
t3x      nom du fichier temporel
5b.pspnc nom du fichier pseudo potentiel
7n.pspnc nom du fichier pseudo potentiel
```

Le fichier t31.in est écrit comme suit :

```
ndtset 12
#Definition of the unit cell
acell 3*6.83
rprim  0.0  0.5  0.5
        0.5  0.0  0.5
        0.5  0.5  0.0
```



```

#Definition of the atom types
ntypat 2
znucl 5 7
#Definition of the atoms
natom 2
typat 1 2
xred
0.0 0.0 0.0
1/4 1/4 1/4
#Definition of the planewave basis set
ecut: 40 ecut+ 5 #in Hartree
#Definition of the k-point grid
kptopt 1
ngkpt 6 6 6
nshiftk 4
shiftk 0.5 0.5 0.5
        0.5 0.0 0.0
        0.0 0.5 0.0
        0.0 0.0 0.5
#Definition of the SCF procedure
nstep 100
tol dfe 1.0d-6
diemac 12.0

```

a- Pour BN :

Les résultats obtenus sont donnés dans **le tableau (II.1)** et tracés sur **la figure (II.2)**. Il faut noter que l'énergie totale a été calculée à 10^{-6} Hartree près, c'est à dire que l'itération self-consistante est arrêtée quand les six derniers chiffres de l'énergie totale sont stabilisés.

Tableau (II.1) : La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BN.

Energie de Coupure (Hartree)	Energie totale (Hartree)
4.00000000E+01	-1.3568370851E+01
4.50000000E+01	-1.3568589669E+01
5.00000000E+01	-1.3568735156E+01
5.50000000E+01	-1.3568801199E+01
6.00000000E+01	-1.3568825586E+01
6.50000000E+01	-1.3568832580E+01
7.00000000E+01	-1.3568834714E+01
7.50000000E+01	-1.3568835940E+01
8.00000000E+01	-1.3568837322E+01
8.50000000E+01	-1.3568838871E+01
9.00000000E+01	-1.3568840342E+01
9.50000000E+01	-1.3568841470E+01

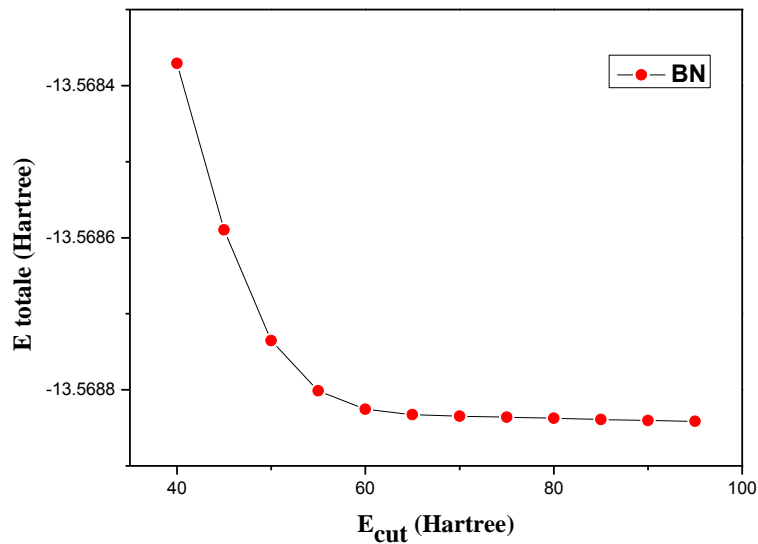


Figure II.2: La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie.

de coupure pour le BN

La figure (II.2) représente la courbe d'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BN. On note que lorsque l'énergie de coupure augmente, l'énergie totale diminue rapidement en suite, elle devient constante à partir de la valeur critique de 70 Hartree (1 Hartree= 27.211396 eV) de l'énergie de coupure. Il est donc raisonnable de choisir une énergie de coupure égale à 70 Hartree qui est largement suffisante pour obtenir une bonne convergence de l'énergie totale.

b- Pour BSb :

Les résultats obtenus sont donnés dans le **tableau (II.2)** et tracés sur la **figure (II.3)**.

Tableau (II.2) : La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BSb.

Energie de Coupure (Hartree)	Energie totale (Hartree)
4.00000000E+01	-1.0168968982E+01
4.50000000E+01	-1.0168996105E+01
5.00000000E+01	-1.0169004133E+01
5.50000000E+01	-1.0169006264E+01
6.00000000E+01	-1.0169007066E+01
6.50000000E+01	-1.0169007462E+01
7.00000000E+01	-1.0169007867E+01
7.50000000E+01	-1.0169008330E+01
8.00000000E+01	-1.0169008679E+01
8.50000000E+01	-1.0169008860E+01
9.00000000E+01	-1.0169008929E+01
9.50000000E+01	-1.0169008976E+01

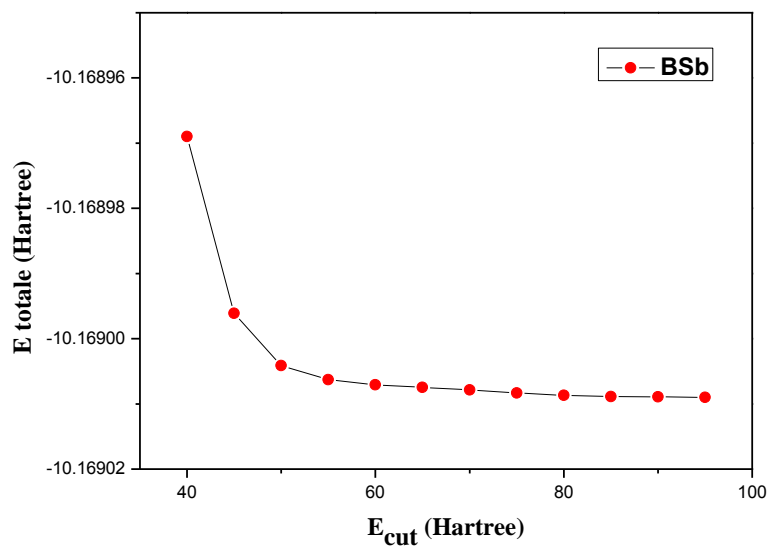


Figure II.3: La variation de l'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BSb

La figure(II.3) représente la courbe d'énergie totale en fonction de l'énergie de coupure pour le BSb. On note que lorsque l'énergie de coupure augmente, l'énergie totale diminue rapidement en suite, elle devient constante avec une bonne approximation (10^{-5}) à partir de la valeur critique de 50 Hartree (1 Hartree= 27.211396 eV) de l'énergie de coupure. Il est donc raisonnable de choisir une énergie de coupure égale à 55 Hartree qui est largement suffisante pour obtenir une bonne convergence de l'énergie totale.

II.4.2 - Convergence par rapport aux nombre de points k :

- ❖ 1^{ère} étape : on a besoin de 4 fichiers : fichier d'entrée "t31.in", le fichier "t3x.files", les fichiers du pseudo-potentiel des atomes (5b.pspnc, 7n.pspnc) et le fichier exécutable "abinis.exe"
- ❖ 2^{ème} étape : on fait les changements sur le fichier "t31.in" et "t3x.files".
- ❖ 3^{ème} étape : Après avoir exécuté le code, par l'instruction abinis<t3x.files >log

Les résultats des calculs seront notés, dans un fichier de type out.

Le fichier t3x.files est écrit comme suit :

```
t3x.in
t3xk.out
t3xki
t3xko
t3xk
5b.pspnc
7n.pspnc
```

Le fichier t31.in est écrit comme suit :

```
#Definition of the unit cell
ndtset 4
acell 3*6.83
rprim 0.0 0.5 0.5
      0.5 0.0 0.5
      0.5 0.5 0.0

#Definition of the atom types
ntypat 2
znucl 5 7
#Definition of the atoms
natom 2
typat 1 2
xred
  0.0 0.0 0.0
  1/4 1/4 1/4
#Definition of the planewave basis set
ecut 70
#Definition of the k-point grid
kptopt 1
ngkpt1 2 2 2
ngkpt2 4 4 4
ngkpt3 6 6 6
ngkpt4 8 8 8
nshiftk 4
shiftk 0.5 0.5 0.5
       0.5 0.0 0.0
       0.0 0.5 0.0
       0.0 0.0 0.5
#Definition of the SCF procedure
nstep 100
toldfe 1.0d-6
diemac 12.0
```

a-pour le BN :

Les résultats obtenus sont donnés dans le **tableau (II.3)** et tracés sur la **figure (II.4)**.

Tableau (II.3) : La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BN.

Energie totale (Hartree)		Ngkpt (points k)	
etotal1	-1.3566510354E+01	ngkpt1	2 2 2 (2)
etotal2	-1.3568829917E+01	ngkpt2	4 4 4 (10)
etotal3	-1.3568834714E+01	ngkpt3	6 6 6 (28)
etotal4	-1.3568834708E+01	ngkpt4	8 8 8 (64)

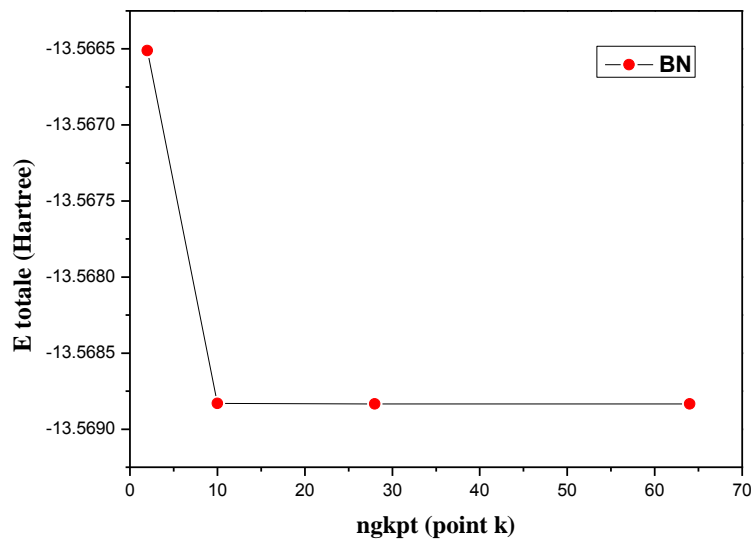


Figure II.4: La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BN.

b- pour le BSb :

Tableau (II.4) : La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BSb.

Energie totale (Hartree)		Ngkpt (points k)	
etotal1	-1.0162544219E+01	ngkpt1	2 2 2 (2)
etotal2	-1.0168908355E+01	ngkpt2	4 4 4 (10)
etotal3	-1.0169006264E+01	ngkpt3	6 6 6 (28)
etotal4	-1.0169008905E+01	ngkpt4	8 8 8 (64)

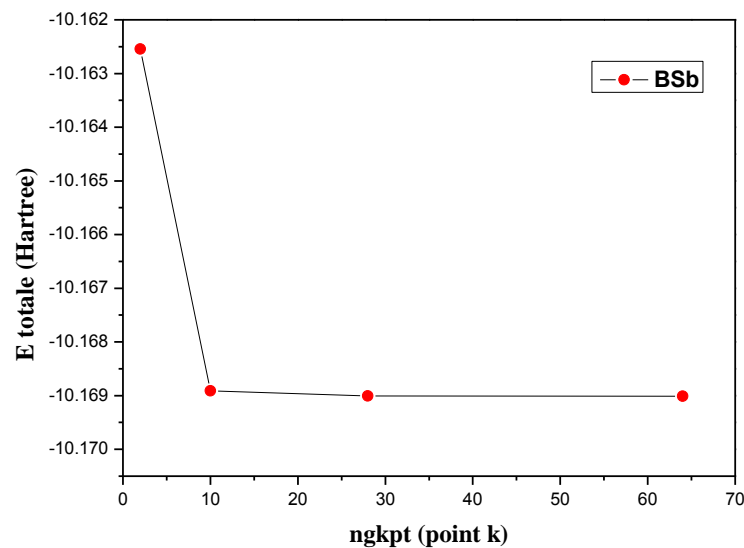


Figure II.5: La variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k dans la 1^{ère} zone de Brillouin pour le BSb.

Les deux **figures (II.4) et (II.5)** représentent la variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points spéciaux k . On voit bien que l'énergie totale n'évolue plus avec l'augmentation des nombres de points au-delà de 6x6x6 points k . Cela s'explique par le fait qu'avec ce nombre de points spéciaux, on aura les mêmes valeurs d'énergie qu'avec d'autres valeurs plus grandes, ce qui signifie qu'un choix d'une mèche de 6x6x6 points pour le nombre de points spéciaux est largement suffisant pour obtenir une très bonne convergence de l'énergie totale.

II.5 - Propriétés structurales :

Dans cette partie, nous sommes intéressés par la caractérisation structurale qui est le premier pas important pour aboutir à différentes propriétés des matériaux [17].

La minimisation de l'énergie totale en fonction du volume de la maille nous permet d'obtenir les propriétés structurales statiques (le paramètre de maille et le module de rigidité) à l'équilibre de l'alliage BN_xSb_{1-x} pour différentes valeurs de la composition $x(1, 0.75, 0.5, 0.25$ et $0)$ ceci est fait par le Fit sur l'ensemble d'énergies totales calculées en fonction du volume donnée par l'équation d'état de Murnaghan [9] :

$$E(V) - E(V_0) = \frac{B_0 V}{B'_0} \left[\frac{(V_0/V)^{B'_0}}{B'_0 - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B'_0 - 1} \quad (\text{II.1})$$

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} = \frac{4}{9a} \frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \quad (\text{II.2})$$

$$B'_0 = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (\text{II.3})$$

Où : B_0 :c'est le module de rigidité donné par la relation (II.2), V_0 :est le volume d'équilibre, $E(V_0)$:est l'énergie au volume d'équilibre, et B'_0 : la dérivée du module de rigidité en fonction de la pression P à une pression nulle [1].

On a calculé aussi le paramètre de maille à l'équilibre par l'optimisation structurale en utilisant la minimisation de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) implanté dans le code ABINIT.

II.5.1 - Les composants BN et BSb :

Les résultats obtenus sont représentés dans le **tableau (II.5)** en comparaison avec les résultats expérimentaux et d'autre résultats de calculs Ab-initio.

A partir de ce tableau, nous remarquons que nos calculs du paramètre de maille de BN sont en excellent accord avec les résultats obtenus expérimentalement [16], et les valeurs théoriques disponibles [18 ,19].

Les valeurs obtenues du paramètre de maille pour BSb sont en bon accord avec l'expérience [1] et les résultats théoriques [16,20] avec une incertitude .

Tableau (II.5) : Le paramètre de maille, le module de rigidité et sa dérivée en comparaison avec les valeurs expérimentales et théoriques. ^a à partir de l'équation de Murnaghan, ^b $B = (C11+2C12)/3$.

Le composant		Paramètre de maille (Bohr)	a par fit (Bohr)	a BFGS (Bohr)	B ₀ (Mbar)	B'
BN	Calcul		6.7998	6.7895	3.7402 ^a 3.9607 ^b	3.44 ^a
	Expérience	6.83 [16]			3.69 [1]	4.00 [1]
	Autres cal	6.81 [18]			3.72 [1]	3.60 [19]
		6.84 [19]			3.66 [16]	3.67 [18]
BSb	Calcul		9.4321	9.424	1.21 ^a 1.266 ^b	3.44 ^a
	Expérience	9.75 [1]			1.03 [20]	3.62 [16]
	Autres cal	9.829 [20]			1.09 [1]	4.03 [18]
		9.748 [16]				

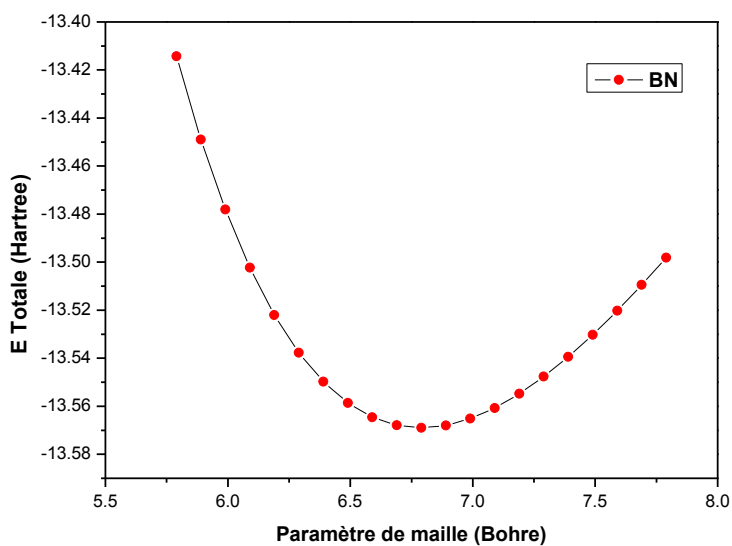


Figure II.6 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille pour le BN.

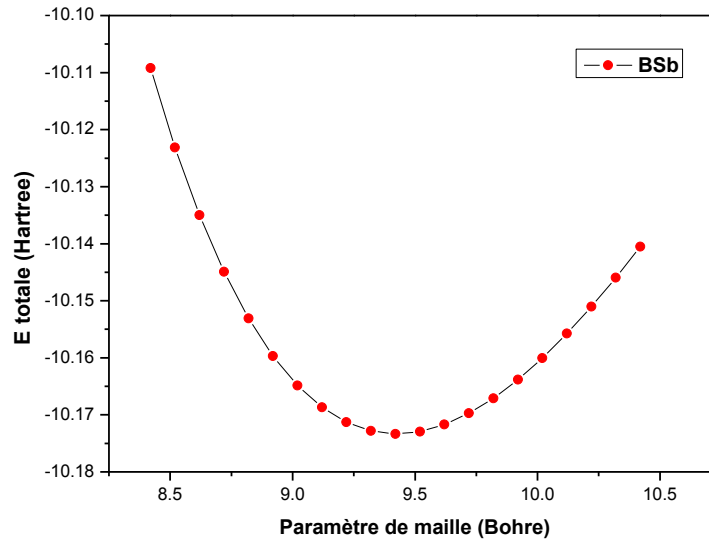


Figure II.7 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille pour le BSb.

II.5.2 - Alliage BN_xSb_{1-x} :

Pour le traitement de l'alliage ternaire BN_xSb_{1-x} , nous avons utilisé l'approximation du cristal virtuelle (VCA) qui est simple et efficace, elle a été utilisée avec succès dans beaucoup de systèmes comme les semi-conducteurs, les supraconducteurs et les matériaux ferromagnétiques.

Le pseudo-potential virtuel de l'alliage BN_xSb_{1-x} est construit par la combinaison des pseudo-potentiels élémentaires de N et Sb et pour chaque composition x on construit un pseudo-potential virtuel de l'atome N_xSb_{1-x} en suivant le schéma de VCA selon [6]:

$$V_{VCA} = xV_{BN} + (1 - x)V_{BSb} \quad (II.4)$$

l'approximation du paramètre de maille de alliage BN_xSb_{1-x} peut se faire par l'interpolation linéaire entre a_{BN} et a_{BSb} par la loi de Vegard [21] :

$$a_{BNSb} = a_{BN}x + a_{BSb}(1 - x) \quad (II.5)$$

Pour le calcul des propriétés structurales (pas de réseau, module de rigidité et sa dérivée) à l'équilibre de l'alliage BN_xSb_{1-x} nous avons utilisé une énergie de cut-off de 70 Hartree pour obtenir une bonne convergence, l'énergie totale a été calculée d'une façon auto cohérente avec 28 points k dans la zone réduite de Brillouin, ce qui correspond à une mèche de 6x6x6 points k spéciaux de la zone de Brillouin.

Le pas de réseau, le module de rigidité et sa dérivée à l'équilibre ont été calculés pour plusieurs concentrations x ($x = [0.75, 0.5, 0.25]$) en minimisant l'énergie totale calculée pour différentes valeurs de la constante de réseau.

Les valeurs de a (le paramètre de maille correspondant à l'état fondamental), du module de rigidité B_0 , ainsi que sa dérivée B' pour le BN_xSb_{1-x} trouvées à partir du programme d'optimisation en utilisant la LDA sont présentées sur le **tableau (II.6)** et tracés sur les **figures (II.8, II.9 et II.10)**.

Tableau (II.6) : Le paramètre de maille, le module de rigidité et sa dérivée pour le BN_xSb_{1-x} .

Pourcentage (x)	Le composant	Loide vegard	a par fit (Bohr)	a BFGS (Bohr)	B_0 (Mbar)	B' (Mbar)
0.75	$BN_{0.75}Sb_{0.25}$	7.56	8.562	8.5612	1.2418	3.92
			8.163[22]		1.88[22]	
0.5	$BN_{0.5}Sb_{0.5}$	8.29	9.136	9.1283	1.068	3.99
			9.014[22]		1.33[22]	
0.25	$BN_{0.25}Sb_{0.75}$	9.02	9.216	9.2085	1.2096	3.93
			9.573[22]		1.08[22]	

A notre connaissance, il n'existe pas de données expérimentales pour comparer nos résultats du paramètre de maille, module de rigidité B_0 , ainsi que sa dérivée B' en fonction du pourcentage (x) pour l'alliage BN_xSb_{1-x} , mais en comparaison avec les calculs de F. El Haj Hassan [22] on trouve un bon accord. La petite différence entre nos valeurs et celles de F. El Haj Hassan est due au fait qu'il utilise le code wien2k et l'approximation GGA.

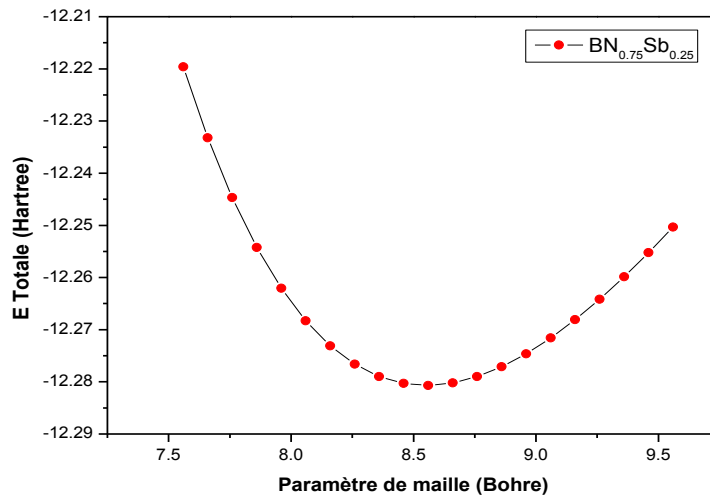


Figure II.8 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille pour le $N_{0.75}Sb_{0.25}$.

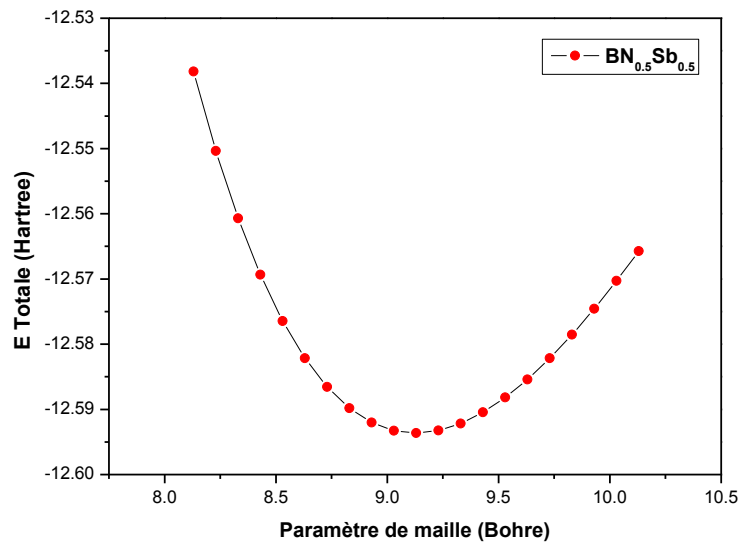


Figure II.9 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille pour le $N_{0.5}Sb_{0.5}$.

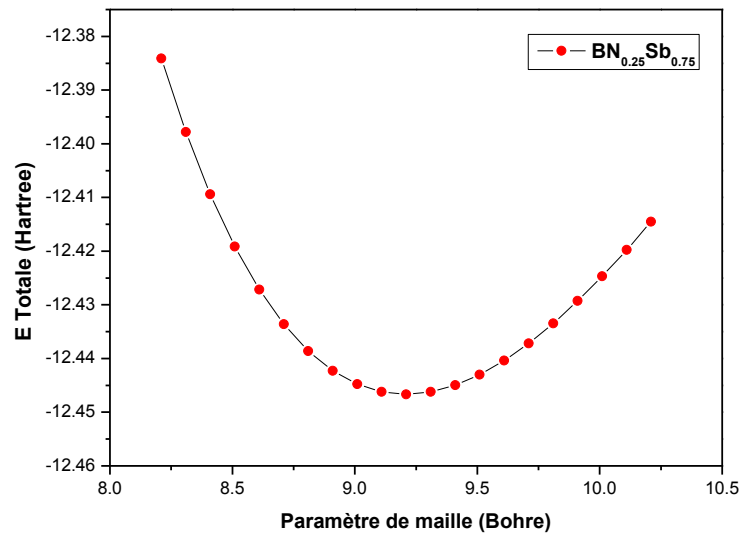


Figure II.10 : La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre de maille pour le $N_{0.25}Sb_{0.75}$.

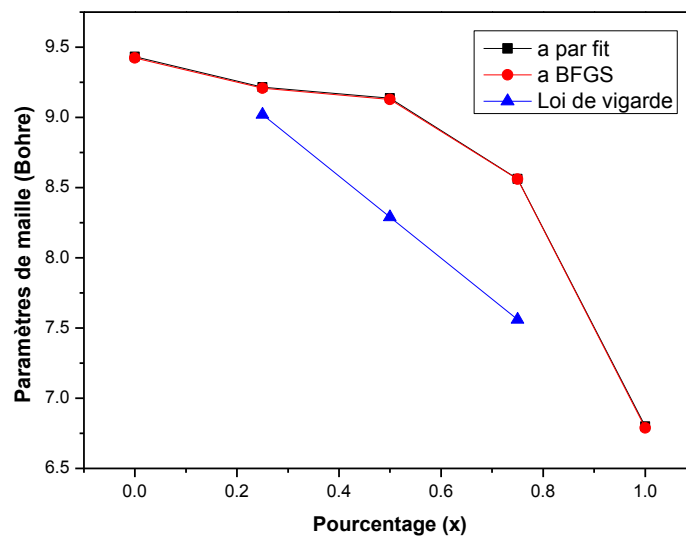


Figure II.11 : La variation de paramètre de maille optimisé en fonction du pourcentage(x).

Rouge notre calcul, bleu loi de Végard

Sur la **figure II.11**, on présente nos résultats avec la VCA (avec un pas de $x= 0.25$) du paramètre de réseau en fonction de la concentration en Nitrure. La variation du pas de réseau en fonction de x peut être donnée par une loi quadratique.

II.6- propriétés élastiques :

Il est très important d'étudier les propriétés élastiques des matériaux, car ils permettent d'exprimer une relation entre le comportement mécanique et dynamique des cristaux, et de donner des informations importantes sur la nature des forces qui agissent dans les solides.

Les constantes élastiques permettent aussi de définir la stabilité mécanique du cristal face aux déformations [23].

II.6.1 - Les constantes élastiques :

Nous avons calculé les constantes élastiques à partir de l'énergie totale [24]. Les constantes élastiques exigent la connaissance de la courbe de l'énergie en fonction de la déformation de la maille élémentaire. Les matériaux à structure cristalline cubique possèdent trois constants élastiques indépendants : C_{11} , C_{12} et C_{44} .

a-Pour le BN :

Nous avons utilisé pour calculer les constantes élastiques 8 fichiers (telast_2.files, telast_2.in, abinis.exe, telast_3.files, telast_3.in et anaddb.exe et les pseudo-potentiels 5b.pspnc et 7n.pspnc).

b-Pour le $BN_{0.75}Sb_{0.25}$:

- ❖ 1^{ère} étape : on a besoins de 9 fichiers : fichier d'entrée "telast_2.in, telast_3.in", fichier de "telast_2.files, telast_3.files", les fichiers du pseudo potentiel des atomes (5b.pspnc, 7n.pspnc et 51sb.pspnc) et le fichier exécutable "abinis.exe" et anaddb.exe.
- ❖ 2^{ème} étape : on fait les changements sur le fichier "telast_2.in" et "telast_2.files".
- ❖ 3^{ème} étape : on exécute le code, par l'instruction abinis<telast_2.files >log.
- ❖ 4^{ème} étape : on fait les changements sur le fichier "telast_3.files".
- ❖ 5^{ème} étape : on exécute le code, par l'instruction anaddb<telast_3.files >log.

Le fichier telast_2.files est écrit comme suit :

```
telast_2.in
telast_2.out
telast_2i
telast_2o
telast_2
5b.pspnc
7n.pspnc
51sb.pspnc
```

Le fichier telast_2.in est écrit comme suit :

```
#Response function calculation for:
#   * rigid-atom elastic tensor
#   * rigid-atom piezoelectric tensor
#   * interatomic force constants at gamma
#   * Born effective charges

ndtset   3

# Set 1 : Initial self-consistent run

      iscf1   5
      kptopt1  1
      tolvrs1 1.0d-18

# Set 2 : Calculate the ddkwf's - needed for
piezoelectric tensor and Born effective
charges in dataset 3

      getwfk2  -1
      iscf2   -3
      kptopt2  2
      nqpt2   1
      qpt2    0 0 0
      rfelfd2  2
      rfdir2  1 1 1
      tolwfr2 1.0d-20

# Set 3 : response-function calculations for
all needed perturbations

      getddk3  -1
      getwfk3  -2
      iscf3   5
      kptopt3  2
      nqpt3   1
      qpt3    0 0 0
      rfphon3  1
      rfatpol3 1 2
```

```
rfstrs3 3
rfdir3 1 1 1
tolvrs3 1.0d-10

# acell COPY RELAXED RESULT FROM PREVIOUS
CALCULATION
acell 3*8.56
rprim0.0 0.5 0.5
0.5 0.0 0.5
0.5 0.5 0.0

#Definition of the atom types and atoms
npsp3
ntypalch 2
mixalch1.0 0.0 0.0
0.0 0.75 0.25
ntypat2
znucl5 7 51
natom2
typat1 2

# xredCOPY RELAXED RESULT FROM PREVIOUS
CALCULATION
xred0.0 0.0 0.0
1/4 1/4 1/4

#Gives the number of bands, expliciteley (do
not take the default)
nband8

#Definition of the plane wave basis set
ecut70
ecutsm0.5

#Definition of the k-point grid
kptopt1
ngkpt6 6 6
nshiftk1
shiftk0.5 0.5 0.5
0.5 0.0 0.0
0.0 0.5 0.0
0.0 0.0 0.5

#Definition of the self-consistency procedure
diemac 9.0
iscf 5
nstep 100
```


Le fichier telast_3 .files est écrit comme suit :

```
telast_3.in
telast_3.out
telast_2o_DS3_DDB
dummy_moldyn
dummy_GKK
```

Le fichier telast_3 .in est écrit comme suit :

```
!the input file for the anadddb code

elaflag 3 !the flag for the elastic
constant
piezoflag 3 !the flag for the
piezoelectric constant
instrflag 1 !the flag for the internal
strain tensor

!the effective charge part
chneut 1 !enforce Born effective charge
neutrality
```

Les valeurs calculées des constantes élastiques C_{ij} en (GPa) sont illustrées dans le **tableau (II.7)** et tracés sur la **Figure (II.12)**

Tableau. (II.7): Constantes élastiques en comparaison avec d'autres résultats obtenus par des calculs Ab-initio [1,19,20] du BN_xSb_{1-x} .

Composition	C11(GPa)	C12 (GPa)	C44 (GPa)
BN	811.86	188.43	470.32
	813 [1]	188[1]	470[1]
	820[19]	190[19]	480[19]
$BN_{0.75}Sb_{0.25}$	266.92	60.96	137.85
$BN_{0.5}Sb_{0.5}$	255.14	78.26	141.58
$BN_{0.25}Sb_{0.75}$	242.76	68.69	135.07
BSb	227.52	75.50	131.95
	205.3[1]	62.8[1]	112.3[1]
	205[20]	62.5[20]	112.1[20]

On peut remarquer que nos résultats pour les constantes élastiques sont en bon accord avec les calculs théoriques faites par [1,19,20] pour BN et BSb.

Lorsqu'on compare les valeurs des constantes élastiques obtenues pour le BN et le BSb, nous pouvons constater que toutes les constantes élastiques pour le BN sont presque le triple de celles du BSb, ce qui indique que le BN est un matériau beaucoup plus dur que le BSb.

A notre connaissance, il n'existe pas de données expérimentales ou de calculs théoriques pour comparer nos résultats de la variation des constantes élastiques en fonction du pourcentage (x) pour l'alliage $N_xSb_{(1-x)}$, donc nos résultats peuvent être pris comme des prédictions.

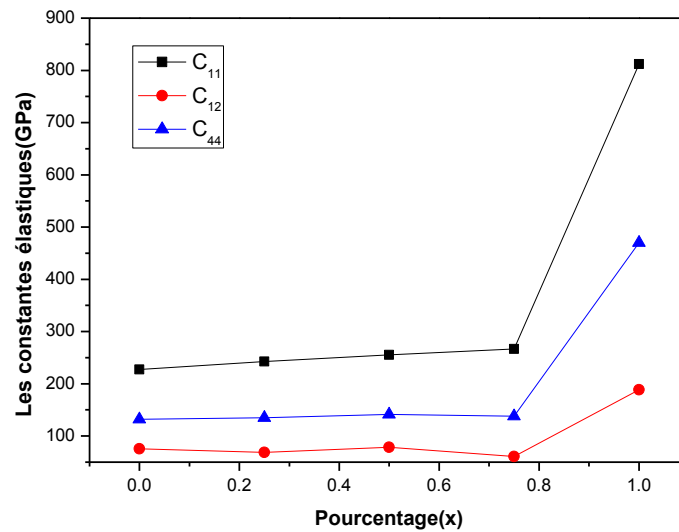


Figure (II.12) : La variation de constantes élastiques en fonction de pourcentage (x).

Nos résultats concernant la compressibilité ($\beta = 1/B$), le facteur d'anisotropie (A), module de cisaillement (G) et Paramètre de déformation (ξ) des composés sont donné dans le **tableau (II.8) .**

Tableau (II.8): Valeurs des paramètres de B , K , A , C_s , ξ et le rapport B/C_s pour l'alliage $BN_xSb_{(1-x)}$.

Composition	BN	$BN_{0.75}Sb_{0.25}$	$BN_{0.5}Sb_{0.5}$	$BN_{0.25}Sb_{0.75}$	BSb
Le module de compression B (GPa)	396.07 376[1]	129.73	135.62	126.53	126.62 109[1]
La compressibilité (K)	0.00252	0.0077	0.00737	0.0079	0.00798
Le facteur d'anisotropie (A)	1.5082	1.3394	1.5936	1.5507	1.7394
le module de cisaillement (C_s)	311.69	102.68	88.24	87.02	76
Paramètre de déformation (ξ)	0.3826 0.12 [1]	0.3794	0.4503	0.4309	0.4781
Le rapport (B/C_s)	1.2707	1.263	1.536	1.454	1.666

On sait que la valeur du rapport B/G est utilisée comme critère qui permet la séparation entre la ductilité et la fragilité des matériaux. Lorsque ce rapport $B/G \geq 1.75$ on peut considérer le matériau comme ductile sinon il est fragile. D'après le **tableau (II.8)**, on peut constater que nos matériaux sont fragiles .

Conclusion générale

Conclusion générale

Nous avons effectué des calculs ab-initio dans l'approximation du cristal virtuel (VCA: Virtual Crystal Approximation), afin d'étudier les propriétés structurales et élastiques de l'alliage $\text{BN}_x\text{Sb}_{(1-x)}$, dans la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) combinée avec la méthode du pseudo-potentiel. Les équations de Kohn et Sham ont été résolues d'une manière auto-cohérente, en utilisant une base d'ondes planes implémentée dans le code ABINIT. Pour le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA). Les formes les plus couramment employées, proposées par Trouiller Martins pour les pseudo-potentiels sont utilisées. Le paramètre de maille calculé et les constantes élastiques en fonction de la composition (x).

Tout d'abord, nous avons étudié les propriétés structurales qui caractérisent l'état fondamental des systèmes considérés, Nous avons fait les tests de convergence et l'optimisation de paramètre de maille de composés étudiés et calculer le module de rigidité et sa dérivée. Les résultats obtenus sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques.

Par ailleurs, nous avons calculé les constantes élastiques de $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$ en fonction des concentrations ($x=0.25, 0.5$ et 0.75) dans l'approximation LDA. On a calculé aussi le module de compression, le module de cisaillement, le facteur d'anisotropie et le paramètre de déformation.

Les calculs faits sur les deux cas limites BN et BSb sont en bon accord avec les données expérimentales existantes. Cependant, il est raisonnable aussi de croire que ces calculs fait en fonction de la composition (x) prévoient le comportement de l'alliage $\text{BN}_x\text{Sb}_{(1-x)}$ où les données expérimentales ne sont pas toujours disponibles.

***Références
bibliographiques***

Bibliographie

[1] : Daoud Salah, Doctorat en sciences, «Etude numérique des propriétés structurales, élastiques et mécaniques des composés binaires III-V à base de bore (BN, BP, BAs et BSb) », Université Ferhat Abbas-Sétif , 2013.

[2] :Gatt Fayrouz, Mémoire ,Magister, «Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés III- P », Université Med Khider Biskra, 2013-2014.

[3] :Lebga Noudjoud, Doctorat en sciences, «*Propriétés structurales, élastiques et optiques de semi-conducteurs à grand gap :Les composés B-V, les alliages $ZnxCd_{1-x}Se$ et $ZnSe_{1-x}Te_x$, le β -SiC*», Université Ferhat Abbas-Sétif , 2011.

[4] :Chellouai Adel, Mémoire de Magister, «Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés à base de Scandium»,Université Med Khider Biskra, 2013-2014.

[5] : Aboub Zahia, Mémoire de Magister, « Etude *ab-initio* des propriétés structurales et électroniques des systèmes $(Sr,La)(Ti,Ni)O_3$ », Université Kasdi Merbah-Ouargla, 2012.

[6] : Daoud Khadidja, Doctorat en sciences, «Propriétés électroniques et élastiques des semi conducteurs anorganiques », Université Ferhat Abbas-Sétif , 2012.

[7] :Boudalia dbelkader, Doctorat en physique, « Etude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des perovskites cubiques $LaAlO_3$ et $XTiO_3$ (X=Ca, Sr, Pb)», Université d'Oran, 2010-2011.

[8] :Mme. Aouatef Sari, Doctorat en physique, « Etude ab-initio des propriétés Structurales, Electroniques etElastiques d'Alliages intermétalliques : Matériaux Prometteurspour le Stockage de l'Hydrogène» ,Université Abou Belkaid de Tlemcen, 2014-2015.

[9] :Mr. Benhamida Mohamed, Doctorat en sciences, « Propriétés structurale, élastiques et électronique d'alliages de nitrure desmétaux de transitions », Université Sétif 1-Sétif, 2014.

[10] : Bedjaoui Abdelhak, Magister, «Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés AIX (X=N, P et As) », Université Ferhat Abbas-Sétif , 2011.

[11] :Chahira Hajlaoui, Doctorat en sciences, « Etude des propriétés structurales et électroniques des nanofils semi-conducteurs III-V »,Université européenne de Bretagne, 05-06-2014.

[12] :Abderrachid Bechiri, Doctorat d'état, « Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliagessemi-conducteurs III-V », Université Mentouri-Constantine, 18-01-2006.

- [13] :Mme Baghdadli Nawel née : Korti, Doctorat en physique, « Évolution du paramètre exciton de Bohr en fonction des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V », Université Abou Belkaid de Tlemcen , 2013.
- [14] :François Aguillon ,francois.aguillon@u-psud.fr, Université Paris-Sud Polytech Paris-Sud Spécialité photonique et systèmes optroniques Année 2015-2016.
- [15] :S. Matar, V. Gonnet, G. Dernazeau. Structure électronique du nitrure de bore cubique dans l'approximation de la densité électronique locale. Journal de Physique I, EDP Sciences, 1994, 4 (2), pp.335-342. <10.1051/jp1:1994141>. <jpa-00246908>.
- [16] : F. El Haj Hassan, H. Akbarzadeh, and M. Zoater, J. Phys.: Condens. Matter 16, 293 (2004).
- [17] : F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci, USA 30, 5390 (1944).
- [18] : A. Zaoui and F. El Haj Hassan, *J. Phys. Cond. Matter.* **13**, 253 (2001).
- [19] : F. EL Haj Hassan, Thèse de Doctorat, *Université de Metz*, (France, 2000)
- [20] :F. El Haj Hassan, First-principles study of $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$, $\text{BP}_x\text{Sb}_{1-x}$ and $\text{BAS}_x\text{Sb}_{1-x}$ alloys, Lebanese University, Article in *physica status solidi (b)* · December 2005, *phys. stat. sol. (b)* 242, No. 15, 3129–3137 (2005) / DOI 10.1002/pssb.200441157.
- [21] :Julien Bouvier, thèse doctorat, «Etude des épitaxies sélectives des alliages SiGe(C) pour électrode de base des transistors bipolaires performants », 2010.
- [22] :F. El Haj Hassan *phys. stat. sol. (b)* 242, No. 15, 3129–3137 (2005) / DOI 10.1002/pssb.200441157.
- [23] :H. Langueur, Doctorat en sciences, « Propriétés structurales, élastiques et dynamiques des semi-conducteurs IV-IV », Université Ferhat Abbes, 2014.
- [24] :A. Meziani, Doctorat« Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés fluoro-pérovskites CsCdF_3 et KZnF_3 », Université Badji Mokhtar-Annaba, 2012.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et les propriétés mécaniques de l'alliage ternaire $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$ en fonction de la fraction atomique x en utilisant le calcul Ab-initio (premier principe) basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT combinée avec la méthode de pseudo-potentiel. Les équations de Kohn-Sham ont été résolues d'une manière self consistent en utilisant une base d'ondes planes implantée dans le code ABINIT.

Les propriétés structurales (Le paramètre de maille), les propriétés élastiques(Les constantes élastiques) sont calculées, et en utilisant l'approximation du cristal virtuel (VCA). Les résultats obtenus par la simulation sont comparés avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles pour l'alliage étudié et s'accordent bien entre eux.

Mots clés : calcul ab-initio, DFT, pseudo-potentiels, VCA, constantes élastiques, $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Abstract :

In this work, we studied the structural properties and the elastic properties of the ternary alloy $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$ as a function of the atomic fraction x using the ab-initio calculation (first principle) based on the density functional theory DFT Combined with the pseudo-potential method. The Kohn-Sham equations were solved in a self-consistent manner by using a planar wave base implanted in the ABINIT code .

The structural properties (the mesh parameter), the elastic properties (the elastic constants) are calculated and using the virtual crystal approximation (VCA). The results obtained by the simulation are compared with the experimental and theoretical results available for the alloy studied and agree well with each other.

Keywords: ab-initio calculation, DFT, pseudo-potential, elastic constants, $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$.