

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère d'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mohammed El Bachir El Ibrahimi de Bordj Bou Arréridj



Faculté des sciences et de la technologie

Domaine des sciences de la matière

Filière : Physique

Spécialité : Physique des matériaux

Mémoire de master

Thème :

**Propriétés élastiques en fonction
de la Pression de l'alliage BNSb**

Présenté par :

Merrouche , Mohammed

Soutenu le : 12/07/2021

Jury de soutenance :

Président	:	Regaigui Gasmi	MAA ,	Université Bordj Bou Arréridj
Encadreur	:	Lebga Noudjoud	MCA ,	Université Bordj Bou Arréridj
Examineur	:	Benchiheb Nadjet	MCB ,	Université Bordj Bou Arréridj

Année Universitaire : 2020-2021



Dédicace

Je dédie ce travail :

À ma mère Adjil Lamria que dieu la protège

À mon père Ahmed paix à son âme

À mon frère Saïd

À tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin, je leur dédie ce modeste travail



REMERCIEMENTS

*Après les louanges à Dieu miséricordieux, guide de l'univers, que son salut et sa
bénédictioin soient portés sur son prophète Mohamed*

*J'adresse mes vifs remerciements à mon encadreur Mme **Lebga Noudjoud**
pour m'avoir constamment guidé tout le long de cette modeste recherche scientifique et
pour les
précieux conseils qu'elle m'avait donnée , et pour sa serviabilité, sa
disponibilité et ses conseils constructifs.*

*Je tiens à remercier, le président de jury, Mr **Regaigui Gasmi** et
l'examineur Mme **Benchiheb Nadjet** , pour l'honneur qu'ils m'ont fait en
acceptant de juger ce travail.*

*Mes remerciements vont également à tous les enseignants du département
de sciences de la matière.*

*Enfin, j'adresse mes plus sincères remerciements à tous ce qui me sont chers et
à tous ceux qui m'ont soutenue.*

*À ma chère mère ,
Et mon frère que dieu les protège .*

Sommaire

<i>Introduction générale</i>	1
Chapitre I: Rappel théorique sur les méthodes de calcul Ab-initio	
<i>I.1 Introduction</i>	2
<i>I.2 La théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)</i>	2
<i>I.2.1 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn</i>	2
<i>I.2.1.1 Premier théorème de Hohenberg et Kohn</i>	3
<i>I.2.1.2 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn</i>	3
<i>I.2.2 Approche Kohn- Sham</i>	4
<i>I.2.3 La fonctionnelle d'échange- corrélation</i>	6
<i>I.2.3.1 Approximation de la densité locale (LDA)</i>	6
<i>I.2.3.2 Approximation du gradient généralisé(GGA)</i>	6
<i>I.3 Méthode de pseudo-potentiels</i>	7
<i>I.3.1 Théorème de Bloch</i>	7
<i>I.3.2 Une base d'ondes planes</i>	8
<i>I.3.3 Approximation du cœur gelé</i>	9
<i>I.3.4 Le pseudo-potentiel</i>	9
<i>I.4 Théorie des alliages semi-conducteurs</i>	10
<i>I.4.1 Définition des semi-conducteurs III-V</i>	11
<i>I.4.2 Les composés ternaires</i>	11
<i>I.4.3 Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs</i>	11
<i>I.4.4 L'approximation du cristal virtuel (V.C.A)</i>	11
<i>I.5 Les propriétés élastiques</i>	12
<i>I.5.1 Les Tenseurs</i>	12
<i>I.5.1.1 Le tenseur de déformation</i>	13
<i>I.5.1.2 Le tenseur des contraintes</i>	14
<i>I.5.1.3 Relation contrainte-déformation</i>	14
Chapitre II :Résultats et discussions	
<i>II.1 Introduction</i>	17

Sommaire

<i>II.2 Méthode de calculs</i>	17
<i>II.3 la dépendance en pression des constantes élastiques</i>	18
<i>a- L'alliage $BN_{0.75}Sb_{0.25}$</i>	21
<i>b- L'alliage $BN_{0.5}Sb_{0.5}$</i>	22
<i>c- L'alliage $BN_{0.25}Sb_{0.75}$</i>	23
<i>II.4 Critères de Stabilité</i>	24
<i>Conclusion générale</i>	27
Références	

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 à pour but d'étudier les propriétés élastiques du semi conducteurs 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 deux chapitres :

Le premier chapitre présente le cadre théorique dans lequel a été effectué ce travail. Les fondements de la D-F-T sont exposés, et on va voir que le résultat le plus important de cette théorie est d'aboutir à une expression de l'énergie totale d'un système comme une fonctionnelle de la densité de charge électronique à l'état fondamental. Nous présentons, aussi la théorie du pseudo-potential pour le traitement de l'interaction électron de coeur-électron de valence. On rappelle aussi succinctement la théorie de l'élasticité.

Dans le deuxième chapitre nous allons présenter les résultats qu'on a obtenu et finalement, on termine par une conclusion 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, 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 (DFT) est l'une des méthodes quantiques les plus couramment utilisées dans les domaines de la physique du solide et de la chimie quantique pour la détermination de la structure électronique de la matière. C'est une méthode dite du premier principe. En effet, elle repose sur les fondements de la mécanique quantique et ne fait intervenir qu'un nombre limité de données d'entrées, indépendantes des mesures expérimentales : pour un système donné à plusieurs corps, elle permet de résoudre l'équation de Schrödinger sans introduction de paramètres ajustés par l'expérience. Pour ce faire, elle a recours à des approximations comme par exemple l'approximation de Born-Oppenheimer et elle repose sur un certain nombre de résultats formels essentiellement les théorèmes de Hohenberg, Kohn et Sham. La DFT permet de traiter des systèmes de taille importante avec une bonne précision dans la mesure où elle permet une excellente prise en compte des interactions électroniques. [5]

Le principe de la DFT consiste donc en une reformulation du problème quantique à N corps en un problème mono corps avec pour paramètre la densité électronique. L'idée centrale de la DFT est que la densité électronique de l'état fondamentale du système détermine entièrement les valeurs moyennes des observables, comme par exemple, l'énergie [6].

I.2.1 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn

Le formalisme de base de la DFT est basé sur le théorème de Hohenberg-Kohn (1964) [7]. Cette approche s'applique pour tout système à plusieurs particules en interaction évoluant dans un potentiel externe. Elle repose sur deux théorèmes :

I.2.1.1 Premier théorème de Hohenberg et Kohn

Le formalisme de base de la DFT est basé sur les théorèmes de Hohenberg-Kohn (1964) [7]. Cette approche s'applique pour tout système à plusieurs particules en interaction évoluant dans un potentiel externe.

Ce théorème montre que la densité électronique $\rho(r)$ est la seule fonction nécessaire pour obtenir toutes les propriétés électroniques d'un système quelconque. En d'autres termes, il existe une correspondance biunivoque entre la densité électronique de l'état fondamental $\rho_0(r)$ et le potentiel externe (r) et donc entre $\rho_{fond}(r)$ et la fonction d'onde de l'état fondamental ψ_{fond} .

$$E = E[\rho_{fond}] = F_{HK}[\rho_{fond}] + \int V_{en}(r)\rho(r)dr \quad (I.1)$$

Avec :

$$F_{HK}[\rho_{fond}] = T[\rho] + V[\rho] \quad (I.2)$$

Où :

$F_{HK}[\rho_{fond}]$: La fonctionnelle de Hohenberg et Kohn.

$T[\rho]$: L'énergie cinétique.

$V[\rho]$: L'interaction électron-électron.

Nous savons que la densité électronique de l'état fondamental est suffisante pour obtenir toutes les propriétés de cet état mais **comment** savoir si une densité quelconque est celle de l'état fondamental..?

Ceci est l'objet du deuxième théorème de Hohenberg et Kohn.

I.2.1.2 Deuxième théorème de Hohenberg et Kohn

Ce théorème montre que la fonctionnelle d'énergie $E[\rho]$ est minimum quand une densité électronique quelconque $\rho[\mathbf{r}]$ correspond à la densité électronique de l'état fondamental $\rho_{fond}(\mathbf{r})$

$$E[\rho_{fond}(\mathbf{r})] = \text{Min}_{\rho} E[\rho] \quad (I.3)$$

C'est-à-dire, d'après le premier théorème, une densité électronique d'essai ρ_{test} définit son propre Hamiltonien et de même sa propre fonction d'onde d'essai ψ_{test} . A partir de là, nous pouvons avoir

une correspondance entre le principe variationnel dans sa version fonction d'onde et dans sa version densité électronique telle que :

$$\langle \psi_{test} | \mathbf{H} | \psi_{test} \rangle = E[\rho_{test}] \geq E_{fond} = \langle \psi_{fond} | \mathbf{H} | \psi_{fond} \rangle \quad (\text{I.4})$$

En résumé : toutes les propriétés d'un système défini par un potentiel externe V_{ext} peuvent être déterminées à partir de la densité électronique de l'état fondamental. L'énergie du système atteint sa valeur minimale si et seulement si la densité électronique est celle de l'état fondamental.

Cependant, il reste un problème de taille à régler, **comment** réécrire une formulation analytique exacte de la fonctionnelle $\mathbf{F}_{HK}[\rho]$ pour un système à N électrons interagissant .. ?

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 [8] 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 $F[\rho(r)] = \mathbf{F}_{HK}[\rho_{fond}]$ pour le système interactif peut être exprimée par l'expression suivante :

$$F[\rho(\vec{r})] = T_s[\rho(\vec{r})] + E_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.5})$$

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 de la forme:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{eff} \right) \varphi_i(r) = \varepsilon_i \varphi_i(r) \quad (\text{I.6})$$

Où le potentiel effectif de Kohn et Sham est donnée par :

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \tag{I.7}$$

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

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

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

Avec Z_K représente la charge du $K^{ème}$ noyau [9], et r et R_K désignant respectivement les vecteurs positions électroniques et nucléaires [8], $k = 1/4\pi\epsilon_0$: constante de Coulomb.

φ_i et ϵ_i sont appelés respectivement orbitales et énergies de Kohn et Sham [9]. Et la densité de Kohn-Sham s'écrit en fonction des N fonctions d'ondes des particules libres [8] :

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2 \tag{I.8}$$

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 [8].

Sur l'organigramme si dessous en représente la relation qui existe entre les équations (I.6), (I.7) et (I.8) dites équations de Kohn Sham.

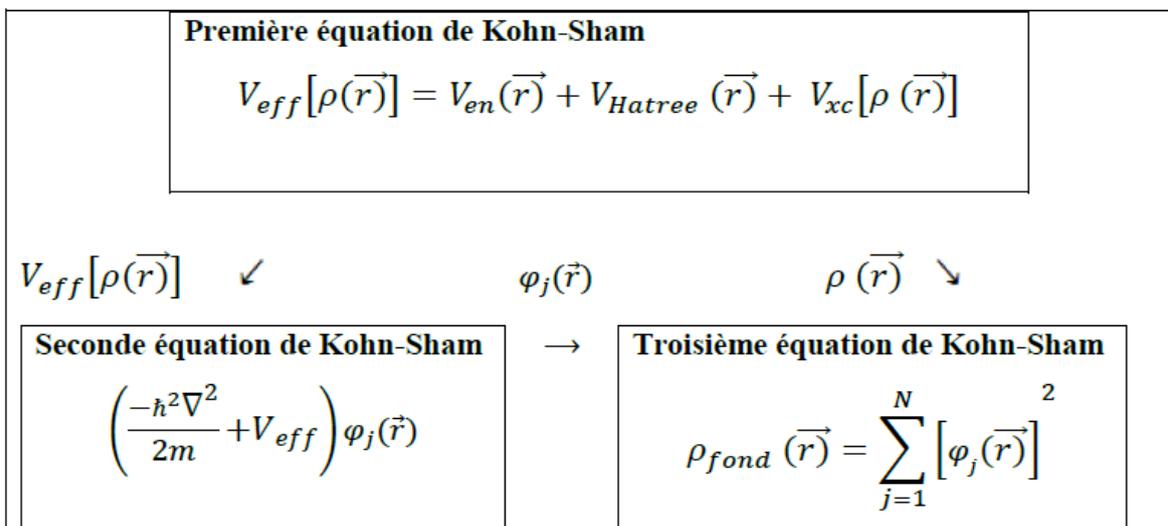


Figure I.1 : Interdépendance des équations de Kohn-Sham .

1.2.3 La fonctionnelle d'échange-corrélation

La fonctionnelle d'échange-corrélation doit tenir compte 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].

1.2.3.1 Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation la plus répandue pour calculer le terme d'échange et de 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 de 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 :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] \rho(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (1.9)$$

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 $\varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ [9] :

$$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})] + \varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})] \quad (1.10)$$

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

$$V_{xc}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta(\rho(\vec{r})\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})])}{\delta\rho(\vec{r})} \quad (1.11)$$

1.2.3.2 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 :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3\vec{r} \quad (I.12)$$

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

I.3.1 Théorème de Bloch

La fonction d'onde a été proposée par Bloch en 1928. On dit que la fonction d'onde d'un électron dans un réseau périodique est une onde de Bloch, sa spécificité réside dans le fait que son amplitude a la même périodicité du réseau [1].

On peut alors exprimer la fonction d'onde du système grâce au théorème de Bloch qui s'énonce : dans tout matériau périodique, toute fonction propre de l'hamiltonien peut s'écrire sous forme du produit d'une fonction ayant la périodicité du réseau et d'une onde plane [1]

$$\varphi_{nB,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i(\vec{k},\vec{r})} U_{nB,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (I.13)$$

Où :

$\varphi_{nB,\vec{k}}(\vec{r})$: est la fonction d'onde du système,

\vec{k} : un vecteur de l'espace réciproque du cristal

$U_{nB,\vec{k}}(\vec{r})$: est une fonction qui a la périodicité du réseau cristallin étudié, associé à une

bande n_B

L'emploi de ce théorème implique que le calcul se fasse dans une cellule étant elle-même une partie du réseau dans l'espace réel. Le réseau réciproque associé est également périodique et sa cellule

élémentaire est appelée première zone de Brillouin (PZB). Et chaque reproduction de la PZB est une zone de Brillouin.

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 :

$$U_{n_B, \vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{g}} C_{n_B, \vec{k}}(\vec{g}) \times e^{i \vec{g} \cdot \vec{r}} \quad , \quad n_B = 1, \dots, N_e$$

Où :

\vec{g} : représente un vecteur du réseau réciproque,

et $C_{n_B, \vec{k}}(\vec{g})$: représentent les coefficients de développement pour les orbitales occupées.

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

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

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 induisent 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

La théorie du pseudopotentiel a été mise au point par Herring en 1940 [1], qui a montré que le cœur n'a aucun effet sur les électrons de valence. Il déduit ensuite que l'énergie totale de l'électron dans le cœur était presque nulle d'une part et, d'autre part, la taille du cœur avait peu d'influence sur l'énergie des électrons de valence.

Aussi en physique du solide, il est bien connu que la plupart des propriétés physiques et chimiques des solides dépendent beaucoup plus des électrons de valence que de ceux du cœur. D'autre part, les électrons de cœur ne participent pas directement dans les liaisons chimiques et ils sont peu affectés par les modifications de l'environnement atomique. Alors il est raisonnable d'approximer la configuration de ces électrons de cœur dans le solide à celle d'un atome isolé. Cette considération permet alors de les regrouper avec les noyaux, pour constituer des ions rigides : c'est l'approximation du cœur gelé [1].

Avec cette approximation, le problème de traiter les électrons de cœur est considéré comme résolu, et l'étude est limitée maintenant à la recherche du comportement des électrons de valence dans le potentiel partiellement écranté par les électrons de cœur. Ainsi tous les systèmes peuvent être traités sur un pied d'égalité, quel que soit le nombre d'électrons des espèces en présence.

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 vraies fonctions d'ondes, au-delà 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.2). 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 un nombre d'ondes planes très inférieur à celui nécessaire 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 [8].

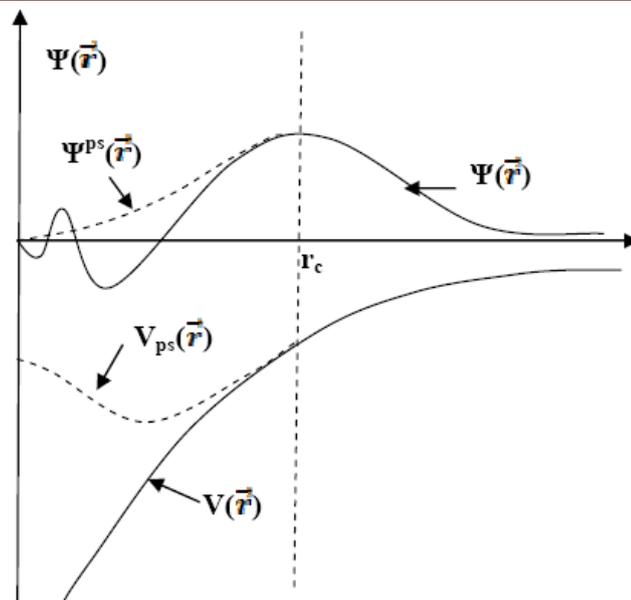


Figure I.2 : Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel [1].

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 les céramiques 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.

En effet, le progrès fait par les chimistes, les physiciens des matériaux et les technologues a contribué d'une manière efficace à l'étude et à la fabrication de nouveaux matériaux [11].

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 [12].

Le tableau ci-dessous regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

Tableau I-1. Extrait de la classification périodique des éléments [7].

III	IV	V
$10.81^{5}B$	$12.01^{6}C$	$14.01^{7}N$
$26.98^{13}Al$	$28.09^{14}Si$	$30.97^{15}P$
$69.74^{31}Ga$	$72.59^{32}Ge$	$74.92^{33}As$
$114.82^{49}In$	$118.69^{50}Sn$	$121.51^{51}Sb$

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 autres éléments de la même colonne.

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 inclue 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... [11].

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 [11].

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 distribue sur les sites d'un réseau cristallin. Le potentiel représentatif de l'alliage par site est considère comme

la superposition des potentiel atomique de chaque type A et B en proportion de leurs concentration

En terme mathématique :

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

Ou 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 ou le potentiel est remplacé par V_{eff} . Les valeurs propres (énergies) et les vecteurs propres de ce Hamiltonien représentent donc l'alliage complètement désordonnés [8].

I.5 Les propriétés élastiques

L'élasticité des solides c'est la réponse du matériau aux sollicitations appliquées, ces sollicitations peuvent provoquées 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 appelés déformations qui sont données aussi par des tenseurs [2]. On a aussi que la théorie de l'élasticité traite le comportement des substances qui ont la propriété de reprendre leurs dimensions et leurs formes lorsque les forces qui produisent les déformations sont supprimées [3].

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.3) en un même point d'un espace de dimension d. Ses composantes dans un repère donné ne dépendent que du \mathbf{M} . [1].

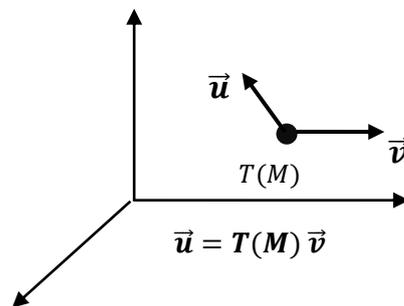


Figure I.3: Tenseur $T(M)$ liant deux grandeurs physiques (\vec{u} et \vec{v}) dans un repère donné [2].

Le Rang 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 [2].

Les éléments du tenseur des déformations ϵ_{ij} sont définis d'une façon générale par la relation suivante:

$$\epsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{I.16})$$

Ou :

u : le vecteur de déplacement

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

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

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

Le tenseur de déformation symétrique s'écrit :

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.17})$$

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 :

- $\epsilon_{ij}(i = j)$: Définissent des déformations d'allongement (ou les compressions) selon les axes principaux.
- $\epsilon_{ij}(i \neq j)$: Définissent des déformations de cisaillement.

I.5.1.2 Le tenseur des contraintes

La notion de contrainte résulte de la considération des forces intérieures qui naissent dans un objet lorsqu'on le déforme. Une contrainte est une force divisée par une surface, est donc homogène à une pression et exprimée en pascals. Le tenseur des contraintes noté σ , est une matrice 3×3 symétrique. Les neuf composantes σ_{ij} du tenseur de contrainte σ sont représentées sur la figure (I.4).

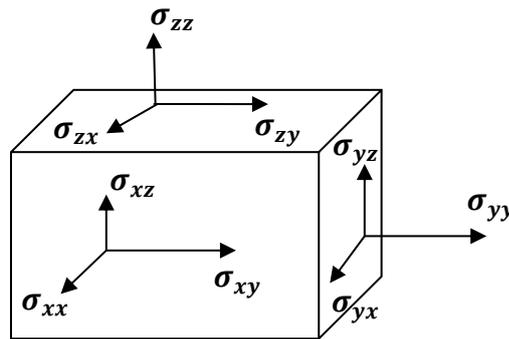


Figure I.4 : Composantes normales et tangentielles d'un tenseur des contraintes.

Le tenseur des contraintes est symétrique et il s'écrit [2] :

$$\sigma_{ij} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.18})$$

Les composantes σ_{ii} sont appelées contrainte normales, car elles agissent perpendiculairement aux différentes faces du cube (figure I.4). 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.

I.5.1.3 Relation contrainte-déformation

En théorie de l'élasticité linéaire, il existe une relation linéaire entre σ_{ij} et ε_{ij} donnée par la loi de Hooke généralisée [1]:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{I.19})$$

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

Le tenseur des contraintes devient un vecteur σ_α tel que [1] :

$$\begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \sigma_\alpha = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} = \sigma_1 \\ \sigma_{yy} = \sigma_2 \\ \sigma_{zz} = \sigma_3 \\ \sigma_{yz} = \sigma_4 \\ \sigma_{xz} = \sigma_5 \\ \sigma_{xy} = \sigma_6 \end{bmatrix}; \alpha = 1, 2, \dots, 6 \quad (I.20)$$

Le tenseur des déformations devient un vecteur ε_β tel que

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \varepsilon_\beta = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} = e_1 \\ \varepsilon_{yy} = e_2 \\ \varepsilon_{zz} = e_3 \\ 2\varepsilon_{yz} = e_4 \\ 2\varepsilon_{xz} = e_5 \\ 2\varepsilon_{xy} = e_6 \end{bmatrix}; \beta = 1, 2, \dots, 6 \quad (I.21)$$

La loi de Hooke s'exprime alors :

$$\sigma_\alpha = \sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \varepsilon_\beta \quad (I.22)$$

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

Les $C_{\alpha\beta}$ représentent les composantes du tenseur des constantes élastiques qui s'est réduit maintenant à une matrice 6x6, possédant 36 coefficients. Des considérations sur le travail et l'énergie permettent de ramener ce nombre à 21 (cette matrice de 6x6 éléments est symétrique).

La symétrie du cristal diminue encore le nombre de paramètres indépendants. Dans les systèmes cubiques, il n'y en a plus que trois éléments indépendants non nuls : C_{11} , C_{12} et C_{44} . La matrice s'écrit dans ce cas [2].

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

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 [1].

Dans ce chapitre nous allons discuter les résultats qu'on a obtenu des propriétés élastiques d'alliage $BN_xSb_{(1-x)}$ qui possède la structure zinc blende.

II.2 Méthode de calcul

Les calculs ont été effectués en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) combinée avec la méthode de pseudopotentiel implanté dans le code ABINIT . Le code ABINIT (URL <http://www.abinit.org>) est un logiciel de chimie quantique, fondé sur la méthode (DFT), il est développé par Xavier Gonze, Jean-Michel Beuken de l'unité Physico-Chimie, et de Physique des Matériaux de l'Université Catholique de Louvain, en Belgique, mais actuellement d'autres contributeurs sont ajoutés, tels que: l'Université de Liège, le Commissariat à l'Energie Atomique, Mitsubishi Chemical Corp., l'Ecole Polytechnique Palaiseau [1].

Les formes proposées par Hartwigzen-Goedecker-Hutter (H-G-H) sont utilisées pour les pseudopotentiels. Pour le traitement du terme d'échange et de corrélation, en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA) dont la forme proposée par Teter et Pade (1993) qui reproduit celle de Perdew et Wang , cette dernière a reproduit à son tour la forme de ceperley Alder , Les intégrations dans le réseau réciproque ont été faites en utilisant la méthode de génération des points k de Monkhorst et Pack [1].

Pour le calcul des propriétés élastique 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 un mèche de 6x6x6 points k spéciaux de la zone de Brillouin .

Les valeurs de a (le paramètre de maille) pour le BN_xSb_{1-x} trouvées dans un travail antérieur à partir du programme d'optimisation en utilisant la LDA sont présentées sur le tableau (II.1).

Tableau (II.1) : Le paramètre de maille pour le $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$.

Pourcentage (x)	Le composant	Loi de vegard	aBFGS (Bohr)
0.75	$\text{BN}_{0.75}\text{Sb}_{0.25}$	7.56	8.5612
0.5	$\text{BN}_{0.5}\text{Sb}_{0.5}$	8.29	9.1283
0.25	$\text{BN}_{0.25}\text{Sb}_{0.75}$	9.02	9.2085

II.3 La dépendance en pression des constantes élastiques

Les matériaux à structure cristalline cubique possèdent trois constants élastiques indépendants : C_{11} , C_{12} et C_{44} . Pour obtenir ces trois constantes élastiques avec le code abinit nous avons utilisé 9 fichiers (telast_2.files, abinis.exe, telast_2.in et anaddb.exe, telast_3.files, telast_3.in, 5B.3.hgh, 7N.5.hgh, 51Sb.5.hgh) .

Le fichier **telast_2.in** est écrit comme suit :

```
ndtset 3

# Set 1 : Initial self-consistent run

iscf1 5
kptopt1 1
tolvrs1 1.0d-18 # #need excellent convergence of GS quantities for RF runs

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

getwfk2 -1
iscf2 -3 #this option is needed for ddk
kptopt2 2 #use time-reversal symmetry only for k points
nqpt2 1 #one wave vector will be specified
qpt2 0 0 0 #need to specify gamma point
rfeldd2 2 #set for ddk wf's only
rfdird2 1 1 1 #full set of directions needed
tolwfr2 1.0d-20 #only wf convergence can be monitored here
```

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

getddk3 -1
getwfk3 -2
iscf3 5
kptopt3 2 #use time-reversal symmetry only for k points
nqpt3 1
qpt3 0 0 0
rfphon3 1 #do atomic displacement perturbation
rfatpol3 1 2 #do for all atoms
rfstrs3 3 #do strain perturbation
rfdir3 1 1 1 #the full set of directions is needed
tolvrs3 1.0d-10 #need reasonable convergence of 1st-order quantities

#Common input data
acell 3* 8.5612
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 51
npsp 3
ntypalch 2
mixalch 1.0 0.0 0.0
0.0 0.75 0.25
#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 # Option for the automatic generation of k points, taking

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
diemac 12.0
#Gives the number of bands, explicetely (do not take the default)
nband 8

#Definition of the self-consistency procedure
iscf 5      # Use conjugate-gradient SCF cycle
```

Le fichier telast_2.files est écrit comme suit :

```
telast_2.in
telast_2.out
telast_2i
telast_2o
telast_2
5b.3.hgh
7n.5.hgh
51sb.5.hgh
```

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 :

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

Pour plus d'information sur les différents variables utilisé on peut soit voir le fichier « list of input variables » ou le fichier « abinis help » qui se trouve dans le code abinit et aussi sur le site du code www.abinit.org

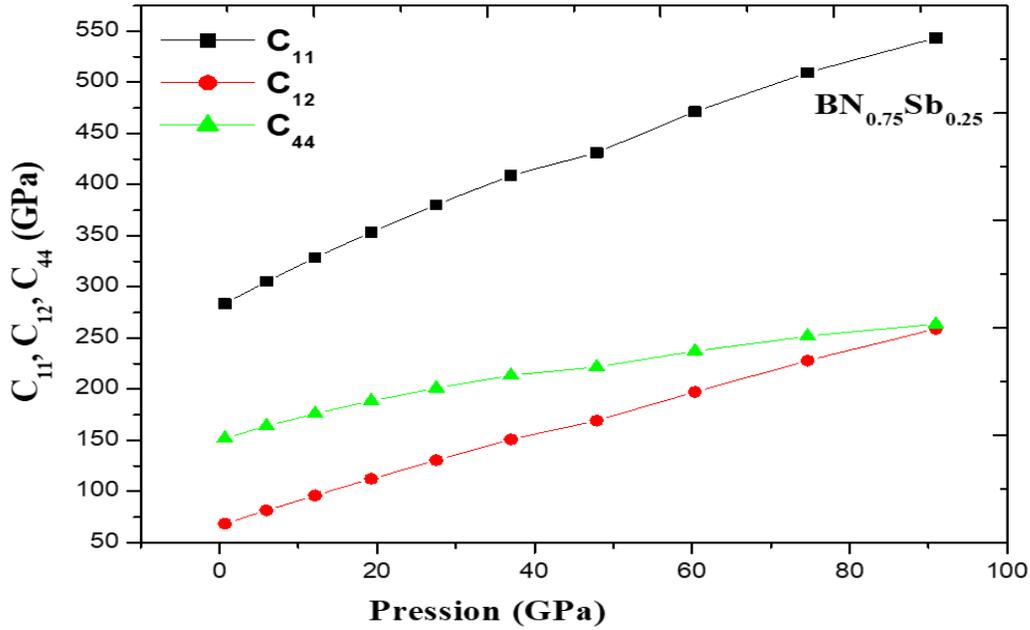
a. L'alliage $BN_{0.75}Sb_{0.25}$ 

Figure II.1 : Évolution des constantes élastiques C_{ij} d'alliages $BN_{0.75}Sb_{0.25}$ en fonction de la pression .

La figure (II.1) représente la variation des constantes élastique en fonction de la pression pour le $BN_{0.75}Sb_{0.25}$. On constate que les valeurs des constantes élastique C_{11} , C_{12} augmentes presque de la même façon avec l'augmentation de la pression, alors que l'augmentation de C_{44} est différente par rapport a C_{11} et C_{12} , on constate aussi qu'elle est peut affectée par la variation de la pression hydrostatique. Le fit quadratique de ces trois courbes a donné les équations suivantes pour la gamme de pression considéré de 0 à 95 GPa :

$$C_{11} = -0.00865P^2 + 3.63808 P + 284.06395 \quad (\text{II.1})$$

$$C_{11}(P = 0) = 284.06395 \text{ GPa}$$

$$C_{12} = -0.00188P^2 + 2.26673P + 68.16198 \quad (\text{II. 2})$$

$$C_{12}(P = 0) = 68.16198 \text{ GPa}$$

$$C_{44} = -0.00865P^2 + 3.63808 P + 284.06395 \quad (\text{II. 3})$$

$$C_{44}(P = 0) = 284.06395 \text{ GPa}$$

Le manque de résultats expérimentaux et théorique ne nous a pas permis une comparaison de nos résultats. Les résultats obtenus à l'équilibre et pour des pressions non nulles sont nouveaux et servent comme des prédictions et comme des références pour d'autres chercheurs. En outre, de nombreux progrès et recherche restent à faire dans l'étude d'autres propriétés, dont les applications pourront confirmer l'avenir de cet alliage.

b. L'alliage $BN_{0.5}Sb_{0.5}$

Dans le but d'étudier la dépendance en pression des constantes élastiques C_{ij} , pour l'alliage $BN_{0.5}Sb_{0.5}$, on a calculé les variations des C_{ij} en fonction de la pression, ces variations sont illustrées sur les figures ci-dessous (Figure II.2):

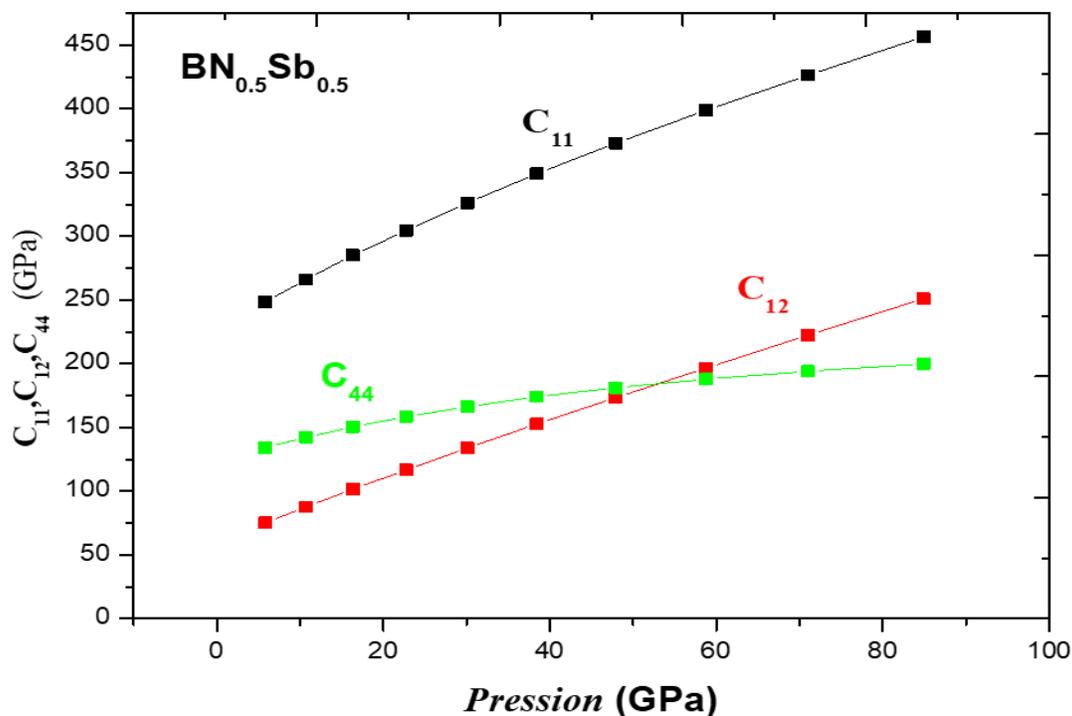


Figure II.2 : Évolution des constantes élastiques C_{ij} , d'alliages $BN_{0.5}Sb_{0.5}$ en fonction de la pression .

on trouve que les valeurs des constantes élastiques C_{11}, C_{12} augmentes avec l'augmentation de pression (P) , alors que l'augmentation de C_{44} est faible par rapport a C_{11} et C_{12} . Aussi on a trouvé que les valeurs des trois constantes élastiques ont diminués par rapport au valeurs trouvé pour l'alliage $BN_{0.75}Sb_{0.25}$. On voie aussi que la valeur de C_{12} devient plus grande que la valeur de C_{44} à partir de la pression $P= 53$ GPa

Le fit quadratiques des trois courbes pour des pression inférieur à 90 GPa, a donné les équations suivantes :

$$C_{11} = -0.00915P^2 + 3.422446P + 230.53 \quad (\text{II.4})$$

$$C_{11}(P = 0) = 230.53 \text{ GPa}$$

$$C_{12} = -0.00303P^2 + 2.48504P + 61.47547 \quad (\text{II.5})$$

$$C_{12} = (P = 0) = 61.47547 \text{ GPa}$$

$$C_{44} = -0.00799P^2 + 1.52626P + 126.89728 \quad (\text{II.6})$$

$$C_{44} = (P = 0) = 126.89728 \text{ GPa}$$

c. L'alliage $BN_{0.25}Sb_{0.75}$

La variation des C_{ij} en fonction de la pression, des constantes élastiques C_{ij} , pour l'alliage $BN_{0.25}Sb_{0.75}$ sont illustrées sur la figure (II.3) dans la gamme de pression allons jusqu'à 115 GPa. quand on observe les courbes on constate que les valeurs des constantes élastique C_{11}, C_{12} augmentes presque de la même façon avec l'augmentation de pression (P), alors que l'augmentation de C_{44} est différente par rapport a C_{11} et C_{12} . On voie aussi que la valeur de C_{12} devient plus grande que la valeurs de C_{44} à partir de la pression $P= 40$ GPa

Le fit quadratiques des trois courbes pour des pressions inférieur à 115 GPa, a donné les équations suivantes :

$$C_{11} = -0.00571P^2 + 2.90971P + 226.50965 \quad (\text{II.7})$$

$$C_{11} = (P = 0) = 226.50 \text{ GPa}$$

$$C_{12} = -0.00196P^2 + 2.48156P + 65.91068 \quad (\text{II.8})$$

$$C_{12} = (P = 0) = 65.91068 \text{ GPa}$$

$$C_{44} = -0.00489P^2 + 1.01563P + 128.10953 \quad (\text{II.9})$$

$$C_{44} = (P = 0) = 128.10953 \text{ GPa}$$

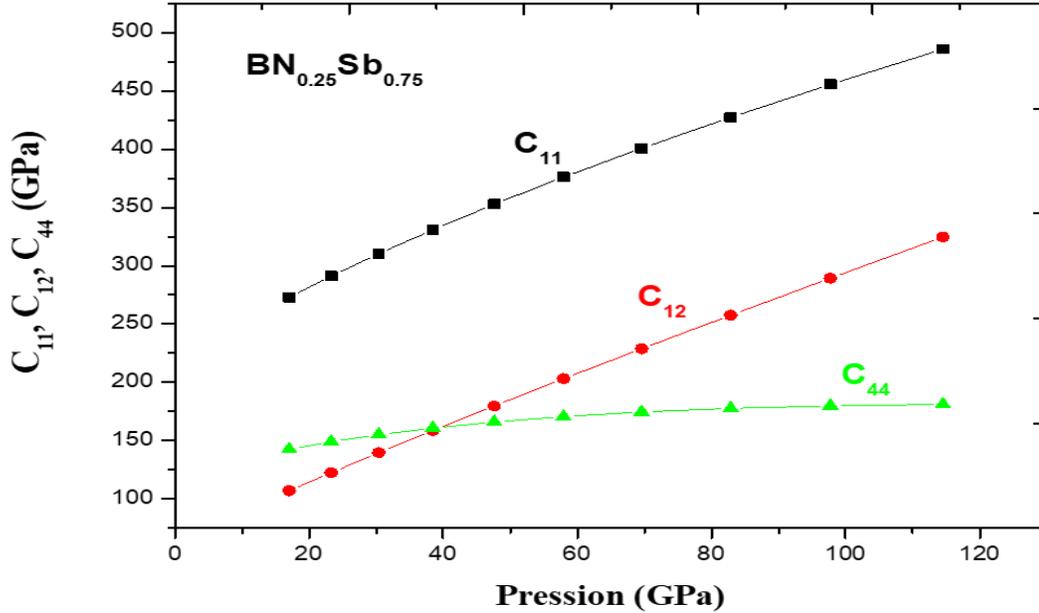


Figure II.3 : Evolution des constantes élastiques C_{ij} , d'alliages $BN_{0.25}Sb_{0.75}$ en fonction de la pression .

II.4 Critères de stabilité

Pour un cristal cubique sous pression, les critères de stabilité généralisés sont donnés par [3] :

$$K = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + P) > 0 \quad (\text{II.10})$$

$$G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} - 2P) > 0 \quad (\text{II.11})$$

$$G' = C_{44} - P > 0 \quad (\text{II.12})$$

L'application des formules des équations (II.10), (II.11) et (II.12) pour le BN_xSb_{1-x} nous permet de tracer sur les figure (II.4), (II.5), (II.6) les courbes des trois critères de stabilité généralisés en fonction de la pression hydrostatique. A partir de ces courbes, on constate que la condition de l'équation (II.11) est violée lorsqu'on applique une pression d'environ 84.32 GPa, ce qui signifie qu'une transition de phase de l'alliage $BN_{0.25}Sb_{0.75}$ a eu lieu à cette pression [1]. Pour les deux

autre alliages les critères de stabilités sont satisfaits dans la gamme de pression considéré donc aucune transition de phase n'est détecté.

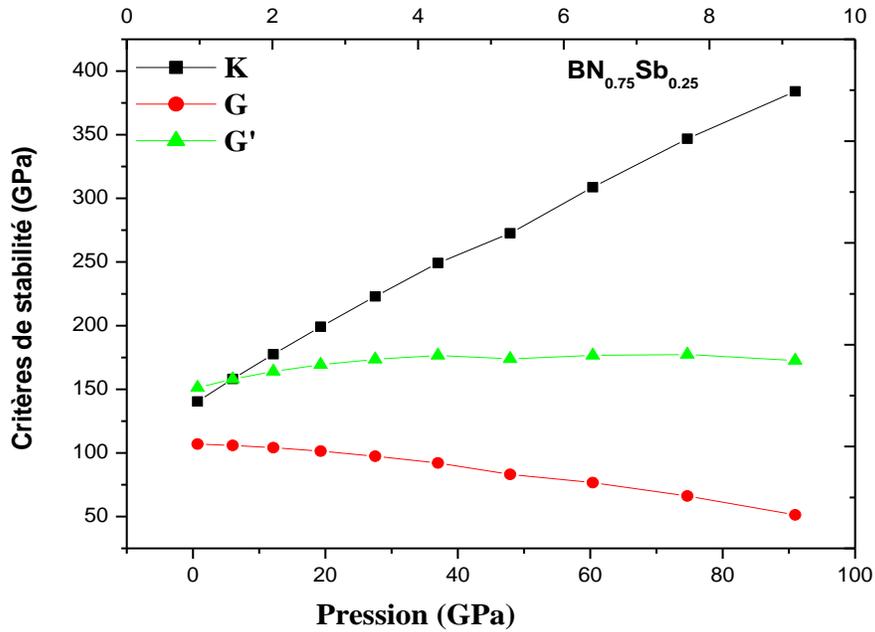


Figure II.4 : Evolution des critères de stabilité en fonction de la pression d'alliages $\text{BN}_{0.75}\text{Sb}_{0.25}$.

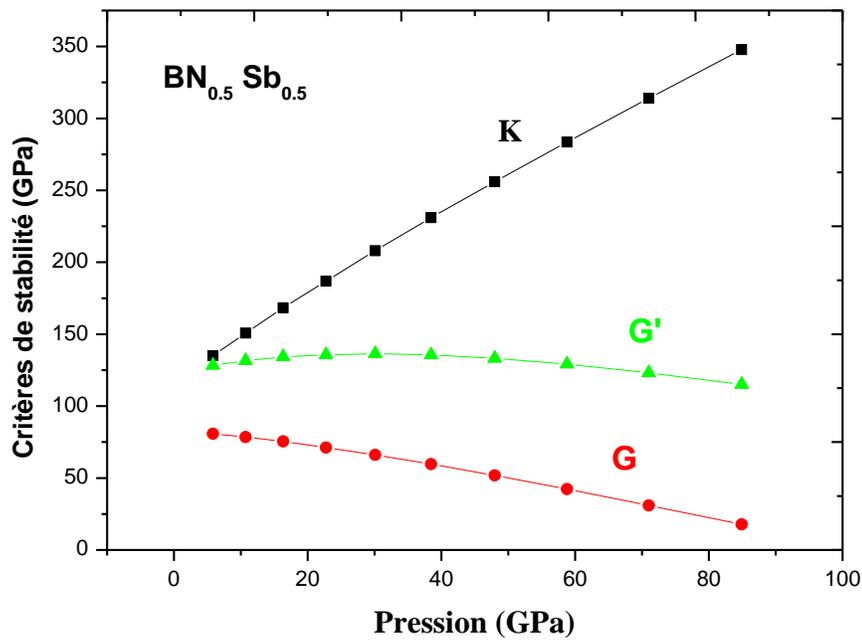


Figure II.5: Evolution des critères de stabilité en fonction de la pression d'alliages $BN_{0.5}Sb_{0.5}$.

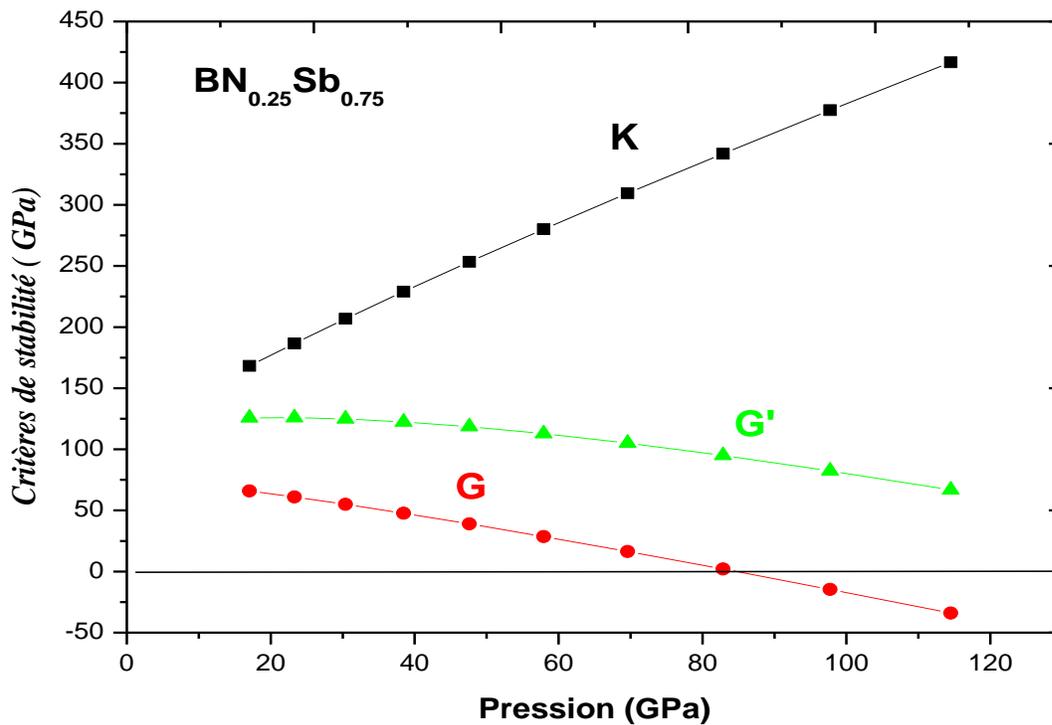


Figure II.6: Évolution des critères de stabilité en fonction de la pression d'alliages $BN_{0.25}Sb_{0.75}$.

Dans le présent travail, nous avons étudié les propriétés élastiques de l'alliage ternaire $\text{BN}_x\text{Sb}_{1-x}$ dans la phase zinc blende. Dans toute l'étude, nous avons utilisé un calcul ab-initio basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT combinée avec la méthode des pseudopotentiels. Dans le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale LDA.

Pour les constantes élastiques on a trouvé la même tendance de variation en fonction de la pression pour les trois constantes élastiques dans les différents alliages. Et on a trouvé que leurs valeurs augmentent avec l'augmentation de la concentration en azote dans l'alliage.

Aussi on a trouvé que la constante C_{44} est peut affectée par la variation de la pression hydrostatique.

Nous avons déterminé, à partir de la structure zincblende initiale, la pression de transition à la nouvelle structure cristallographique la plus probable.

Les résultats obtenus dans ce travail de différents paramètres mécaniques pour des pressions non nulles sont nouveaux et servent comme des prédictions. En outre, de nombreux progrès et recherche restent à faire dans l'étude d'autres propriétés, dont les applications pourront confirmer l'avenir de ces matériaux.

Références

- [1] Daoud Salah, «Etude numérique des propriétés structurales, élastiques et mécaniques des composés binaires III-V à base de bore (BN, BP, BAs et BSb) », Doctorat en sciences, Université Ferhat Abbas-Sétif , 2013 .
- [2] Gatt Fayrouz, «Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés III- P », Mémoire ,Magister, Université Med Khider Biskra, 2013-2014 .
- [3] Lebga Noudjoud, «*Propriétés structurales, élastiques et optiques de semi-conducteurs à grand gap :Les composés B-V, les alliages $ZnxCd1-xSe$ et $ZnSe1-xTex$, le β -SiC*», Doctorat en sciences, Université Ferhat Abbas-Sétif , 2011 .
- [4] Chellouai Adel, «Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés à base de Scandium», Mémoire de Magister, Université Med Khider Biskra, 2013-2014 .
- [5] Eric Cancès, Claude Le Bris, Yvon Maday, *Méthodes Mathématiques en Chimie Quantique*.Springer,2006 .
- [6] Boudali Abdelkader, Thèse de doctorat « 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 .
- [7] Ayad Mohamed,Mémoire de Magister, « Etude par la méthode du premier principe des propriétés physiques des matériaux III-V » ,Université djilali liabes de sidi bel-abes, 2016 .
- [8] Mr. Benhamida Mohamed, Doctorat en sciences, « Propriétés structurale, élastiques et électronique d'alliages de nitrure des métaux de transitions », Université Sétif 1-Sétif, 2014 .
- [9] Bedjaoui Abdelhak, Magister, «Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés AlX (X=N, P et As) », Université Ferhat Abbas-Sétif , 2011 .
- [10] N. Lebga, « Calcul Ab-Initio des propriétés structurales et électroniques des semi-conducteurs III-V » mémoire de magister, Université Ferhat Abbas, 2004 .
- [11] Abderrachid Bechiri, , « Effets du désordre et du substrat sur la structure électronique dans les alliages semi-conducteurs III-V », Thèse doctorat, Université Mentouri-Constantine, 18-01-2006 .
- [12] Mme Baghdadli Nawel née : Korti, « Évolution du paramètre exciton de Bohr en fonction des propriétés optoélectroniques des semi-conducteurs III-V », Thèse Doctorat, Université de Tlemcen , 2013 .

Résumé :

Dans Ce mémoire, nous avons étudié les propriétés élastiques de l'alliage ternaire BN_xSb_{1-x} dans la phase zinc blende. Dans toute l'étude, nous avons utilisé un calcul ab-initio basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT combinée avec la méthode des pseudopotentiels. Dans le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale LDA. 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.

Mots clés : calcul ab-initio, DFT, pseudo-potentiels, VCA, constantes élastiques, BN_xSb_{1-x} .

Abstract :

In This thesis, we have studied the elastic properties of the ternary alloy BN_xSb_{1-x} in the zinc blende phase. Throughout the study, we used an ab-initio computation based on the density functional theory DFT combined with the pseudopotentials method. In the treatment of the term of exchange and correlation, we used the local density approximation LDA. The Kohn-Sham equations have been solved in a self-consistent way using a plane wave base implanted in the ABINIT code.

Keywords : ab-initio calculus, DFT, pseudo-potentials, VCA, elastic constants, BN_xSb_{1-x} .

تلخيص :

ف هذه المذكورة ، درسنا الخصائص المرورية للمزيج الثلاثي BN_xSb_{1-x} الذي يتبلور على الشكل B3, في كل الدراسة قمنا بإستعمال حساب المبدأ الأول المبني على النظرية DFT مركبة مع طريقة الكمون الكاذب بخصوص معالجة التبادل والإرتباط ، إستعملنا التقريب LDA. معادلات كوهن وشام تم حلها بطريقة التناسق الذاتي وهذا بإستعمال الأمواج المستوية المدخلة في الشفرة ABINIT.

الكلمات المفتاحية: حساب المبدأ الأول ، دالة الكثافة الوظيفية , الكمون الكاذب, تقربت البلورة الإفتراضية VCA , الثوابت المرورية , BN_xSb_{1-x} .