

République Algérienne démocratique et Populaire

Ministère d'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Mouhamed 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 mécaniques de l'alliage
SiGeC**

**Présenté par :
Belhaddad Rima**

Soutenu le : 12/07/2021

Jury de soutenance :

Président	:	Sahnoune Yassine,	MCA,	Université de Bordj Bou Arréridj
Encadreur	:	Lebga Noujoud,	MCA,	Université de Bordj Bou Arréridj
Examineur 1:	:	Benchiheub Nadjet,	MCB,	Université de Bordj Bou Arréridj

2020-2021

Remerciement

Tout d'abord, je remercie Allah le tout puissant qui m'a donné le courage, la santé et la volonté pour réaliser ce travail.

Mes sincères remerciements à l'encadreur Dr. Lebga Noudjoud pour le sujet intéressant qu'elle a proposé et pour tous les conseils et les informations qu'elle m'a donnés.

Je remercie aussi les membres du jury d'avoir accepté d'évaluer ce travail. Mes remerciements s'adressent aussi à mes enseignants du Département de sciences matière.

Dédicace

Je dédie ce modeste travail à :

Mon père Lahcene BELHADDAJ pour ses sacrifices et son soutien tout au long de ma vie et pour ces qualités humaines qui ont été pour moi un exemple précieux,

Ma mère mon ange Messaouda DIAF qui m'a soutenu et qui m'a beaucoup aidé, sans elle, tout cela ne serait qu'un rêve.

Mes frères : Ilyas, Fakher-Eddine.

Ma sœur très chère: Hanane.

Mon neveu : Taym Allah.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés mécaniques de l'alliage ternaire $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{C}$ en fonction de la pression en utilisant le calcul Ab-initio (premier principe) basé sur la théorie de la fonctionnelle de densité DFT combinée avec 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.

Abstract :

In this work, we have studied the mechanical properties of the ternary alloy $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}\text{C}$ as a function of the pressure using the ab-initio calculation (first principle) based on the density functional theory DFT Combined with the approximation of the local density LDA. The Kohn-Sham equations have been solved in a self-consistent manner by using a plane wave base implanted in the ABINIT code.

Sommaire

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.a-Premier théorème de Hohenberg et Kohn</i>	3
<i>I.2.1.b-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>	5
<i>I.2.3.a- Approximation de la densité locale (LDA)</i>	5
<i>I.2.3.b- Approximation du gradient généralisé(GGA)</i>	6
<i>I.3- Méthode de pseudo-potentiel</i>	7
<i>I.3.1- Théorème de Bloch</i>	7
<i>I.3.2- Une base d'ondes plane</i>	8
<i>I.3.3-Approximation du cœur gelé</i>	9
<i>I.3.4- Le pseudo-potentiel</i>	9
<i>I.4- Les propriétés élastiques</i>	10
<i>I.4.1-Le tenseur</i>	10
<i>I.4.1.1-Le tenseur de déformation</i>	11
<i>I.4.1.2- Le tenseur des contraintes</i>	12
<i>I.4.1.3- Relation contrainte-déformation</i>	13
<i>I.4.1.4- Les propriétés mécaniques</i>	14
<i>a. Module de compressions et le module de cisaillement</i>	14
<i>b. Module d'Young E et le coefficient de poisson ν</i>	15

Sommaire

Chapitre II : Résultats et discussions

II.1-Introduction.....	16
II.2- Théorie des alliages semi-conducteurs.....	16
II.2.1- Définition des semi-conducteurs IV-IV.....	16
II.2.2- Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs.....	17
II.2.3- L'approximation du cristal virtuel (V.C.A).....	17
II.4.4- Constante du réseau de l'alliage ternaire.....	17
II.3-Méthode de calculs ab- initio	18
II.4-propriétés mécanique.....	19
II.4.1-Les constantes élastiques.....	19
a. L'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$	20
b. L'alliage $\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$	21
c. L'alliage $\text{SiGe}_{0.6}\text{C}_{0.4}$	22
d. L'alliage $\text{SiGe}_{0.8}\text{C}_{0.2}$	23
II.4.2- Critères de stabilité.....	24
II.4.3- Les modules élastiques	27
a. Le module de rigidité B, le module de cisaillement G, le module de Young E	27
b. Le coefficient de poisson.....	30
Conclusion générale.....	33
Références bibliographie	

Inroduction générale

Introduction générale :

L'électronique occupe une place prépondérante dans la société contemporaine et ses multiples usages ont un impact considérable sur la vie quotidienne. Cependant, la croissance exponentielle des besoins en performance des composants à semiconducteur se heurte, de plus en plus souvent, aux limites imposées par la technologie du silicium (Si). Pour pallier à ce désagrément et permettre, de surcroît, d'explorer de nouveaux champs d'applications, le recours à des matériaux plus performants s'est promptement révélé inéluctable.

Le Matériau SiGe amène de nombreux avantages par rapport à la technologie tout silicium. Cependant Les fortes teneurs en germanium nécessaires pour améliorer les performances des transistors peuvent également conduire à la relaxation des couches SiGe suivant l'épaisseur déposée. C'est pour ces raisons que l'alliage ternaire silicium-germanium-carbone (ou SiGeC) a été (et est toujours) étudié.

L'addition d'une forte concentration de carbone dans des films SiGe est reconnue pour apporter plusieurs effets avantageux. Par exemple le principal intérêt de l'incorporation d'atomes de carbone dans les transistors bipolaires à hétérojonction Si/SiGe/Si, est une réduction significative de la diffusion du bore. L'obtention de profils de bore très abrupts et fortement dopés est possible, permettant aux dispositifs bipolaires d'atteindre de meilleures performances dynamiques.

Dans ce mémoire, nous nous sommes intéressés d'étudier les propriétés mécanique du semi-conducteurs ternaires $\text{SiGe}_x\text{C}_{(1-x)}$. Le travail est numérique et utilise les méthodes de calculs de premier principe implémentées dans le code d'accès public ABINIT.

Ce manuscrit est divisé en deux chapitres essentiels :

Dans le premier chapitre, on présente les outils théoriques utilisés pour effectuer l'étude des propriétés mécaniques et des propriétés élastiques de matériaux semiconducteurs formés d'alliages ternaires. Les calculs sont basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) combinée à la théorie des pseudopotentiels pour le traitement de l'interaction électron de cœur-électron de valence. L'approximation de la densité Local (LDA) est utilisée pour le traitement de l'interaction électron-électron.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons les résultats de nos calculs Ab-initio des propriétés élastiques du semi-conducteurs $\text{SiGe}_x\text{C}_{1-x}$ dans la phase zinc blend. Finalement, nous terminons notre manuscrit par une conclusion générale de cette étude 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 [1]. Ces codes utilisent des méthodes Ab-initio ou des principes premiers, on utilisant des constantes atomiques pour résoudre l'équation de Schrödinger. La DFT (théorie fonctionnelle de la densité) implantée avec ces codes est considérée comme la meilleure méthode de calcul quantique de la structure de la matière. L'objectif principal de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique de la charge.

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

La théorie fonctionnelle de la densité (DFT) proposée par Thomas et Fermi en 1926 est l'une des méthodes quantiques les plus couramment utilisées en physique Chimie solide et quantique, utilisée pour déterminer la structure électronique de la matière. C'est la méthode dite de premier principe. En fait, elle repose sur la base de la mécanique quantique et n'implique qu'un nombre limité de données d'entrée indépendantes des mesure expérimentale: pour un système donné avec plusieurs objets, elle peut résoudre l'équation de Schrödinger sans introduire de paramètres ajustés expérimentalement. Pour faire ça, on utilise des approximations, telles que l'approximation de Born-Oppenheimer. La DFT repose sur un certain nombre de résultats formels, essentiellement le théorème de Hohenberg, Kong et Sham et elle peut gérer de grands systèmes avec une grande précision, dans la mesure où cela permet une excellente prise en compte des interactions électroniques.[2]

Par conséquent, le principe de la DFT consiste à reformuler le problème quantique à N corps comme un problème à corps unique avec la densité électronique comme paramètre (ou, à proprement parler, si nous considérons l'effet de spin, il s'agit d'un problème à deux corps). L'idée centrale de la DFT est que la densité électronique de l'état de base du système détermine complètement la valeur moyenne des valeurs observables, telles que l'énergie.[3].

I.2.1- Les théorèmes de Hohenberg et Kohn:

L'approche développée par Pierre Hohenberg et Walter Khon est de reformuler la théorie de la densité proposée par Thomas et Fermi par une théorie exacte d'un système à plusieurs corps. La formulation est applicable pour tout système de particules en interaction évoluant dans un potentiel externe et repose sur deux théorèmes essentiels qui furent énoncés et démontré par Hohenberg et Kohn dans leur article de 1964 [4].

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 $\rho(\mathbf{r})$ pour un potentiel externe $V_{ext}(\mathbf{r})$ donné.

Le premier théorème de Hohenberg et Kohn énonce que toute observable d'un état fondamental stationnaire non-dégénéré peut être calculée, exactement en théorie, par le biais de la densité électronique de cet état fondamental. En effet, l'Hamiltonien d'un système ne dépend que du nombre d'électrons considéré et du potentiel extérieur V_{ext} , qui représente l'interaction entre les électrons et les noyaux.[5]. La fonctionnelle énergie s'exprime:

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

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

Où:

- $T_e[\rho(\mathbf{r})]$: la fonctionnelle d'énergie cinétique.
- $V_{ee}[\rho(\mathbf{r})]$: le potentiel d'interaction qui représente l'interaction entre électrons-électrons.
- $V_{ext}[\rho(\mathbf{r})]$: Le potentiel externe qui représente l'interaction entre les électrons et les noyaux.

Avec $F_{HK} = T_e[\rho(\mathbf{r})] + V_{ee}[\rho(\mathbf{r})]$, qui est la fonctionnelle de Hohenberg-Kohn contenant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle dues à l'interaction répulsive électron-électron [6].

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

La fonctionnelle de l'énergie totale de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental et à la densité de particules de l'état fondamental. Ce théorème sous-tend le principe variationnel.[4]

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

ρ_0 : Densité de l'état fondamental.

«Une fonctionnelle universelle pour l'énergie $E[\rho(\mathbf{r})]$ peut être définie pour tout système d'électrons. Pour un $V_{ext}(\mathbf{r})$ donné, l'énergie fondamentale exacte est le minimum absolu par rapport à $\rho(\mathbf{r})$, et la densité $\rho(\mathbf{r})$ qui minimise cette fonctionnelle est la densité fondamentale exacte»[7].

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 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 [8].

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 [2] :

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

Où : $T_s[\rho(\vec{r})]$: L'énergie cinétique du gaz d'électrons non interagissant.

$E_H[\rho(\vec{r})]$: Le terme de Hartree

$E_{xc}[\rho(\vec{r})]$: Energie d'échange-corrélation est une fonctionnelle additionnelle qui décrit l'interaction interélectronique .

Kohn et Sham, ont montré que la vraie densité est donnée par la solution auto cohérente (self consistent) de l'ensemble des équations à une particule de type Schrödinger, appelées équations de Kohn et Sham[4]:

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

$i=1, \dots, N$; N est le nombre totale des électrons.

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2 \quad (\text{I.6})$$

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \quad (\text{I.7})$$

Avec :

$\varphi_i(r)$ et ε_i sont appelés respectivement orbitales et énergies de Kohn et Sham.[9].

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

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

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

La résolution des équations de Kohn-Sham est montrée sur cet organigramme ci-dessous.

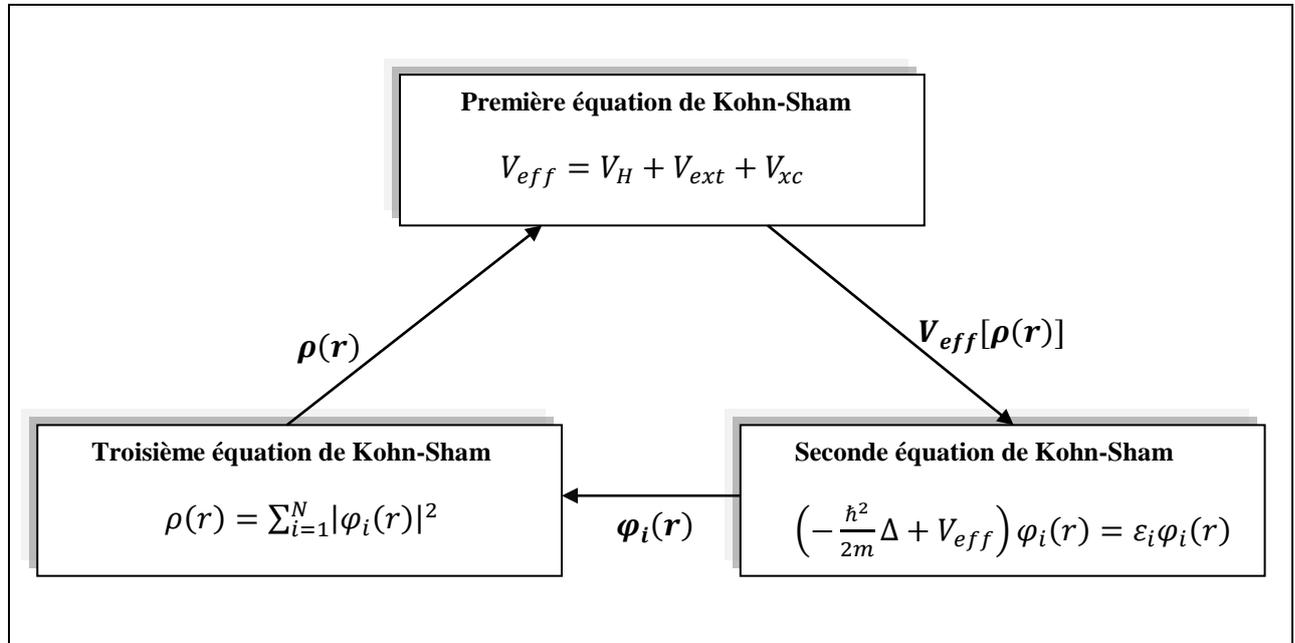


Figure (I.1) : Interdépendance des équations de Kohn et sham.[10]

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

La fonctionnelle d'échange-corrélation doit tenir compte, en plus de ce qui a été énoncé, 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 deux types d'approximations existent : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).[11]

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

L'approximation de la densité locale LDA (local density approximation), est basée sur le modèle du gaz uniforme d'électron. Elle constitue l'approche la plus simple pour exprimer l'énergie d'échange et corrélation. Elle énonce que la densité électronique d'un gaz d'électrons inhomogène est localement identique à celle d'un gaz uniforme (homogène) d'électrons de même densité[9]. L'énergie d'échange-corrélation (LDA) peut être écrite sous la forme :

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

où la fonction $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ désigne l'énergie d'échange-corrélation par électron de densité $\rho(\vec{r})$ d'un gaz homogène d'électrons. Elle peut être considérée comme la somme d'une contribution d'échange $\varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ et de corrélation $\varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})]$:

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

A partir de $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(r)]$, le potentiel d'échange-corrélation $V_{xc}^{LDA}(\vec{r})$ peut être obtenu d'une façon variationnelle selon l'équation [11] :

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

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

Dans l'approximation du gradient généralisé (GGA), le gradient de la densité $\nabla\rho(\vec{r})$ est introduit afin de rendre compte du non homogénéité de la densité électronique réelle. 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 [4]. Cette définition de la fonctionnelle GGA implique qu'elle soit de la forme :

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

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

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 [11].

L'approche du pseudopotentiel est actuellement l'approche la plus utilisée pour la détermination des structures de bandes électroniques et d'autres propriétés.

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 [7].

I.3.1- Théorème de Bloch:

Le théorème de Felix Bloch a été proposé en 1928, permet d'exploiter les propriétés de symétrie du système cristallin des solides, sur les calculs des fonctions d'ondes. On dit que la fonction d'onde d'un électron dans un réseau périodique est une onde de Bloch, et a fait énoncer le théorème suivant: la fonction d'onde d'un électron dans un potentiel externe périodique peut être écrite comme le produit d'une onde plane $e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r})}$ et d'une fonction $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ ayant la périodicité du réseau cristallin [5] :

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

$$\text{Où: } u_{n,\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}) = u_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \quad (\text{I.13})$$

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

\vec{R} : est le vecteur position de noyau

\vec{r} : est le vecteur position de l'électron

\vec{k} : est un vecteur d'onde

Et $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$: est une fonction qui a la périodicité du réseau cristallin étudié, associé à une bande n [12].

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 $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ [5].

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 :

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

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.

En remplaçant $u_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ par son expression, la fonction d'onde peut être mise sous la forme d'une somme d'ondes planes [12] :

$$\varphi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} C_{n,\vec{k}}(\vec{G}) e^{i(\vec{G} + \vec{k}) \cdot \vec{r}} \quad (\text{I.15})$$

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. 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 [13].

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 [12].

Les solutions pour ces deux problèmes sont l'approximation du cœur gelé et la méthode du pseudo-potentiel.

I.3.3- Approximation du cœur gelé:

En physique du solide, il est bien connu que la plupart des 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 [7].

I.3.4- Le pseudo-potentiel :

L'emploi du pseudo-potentiel dans le formalisme de la DFT a prouvé à démontré son efficacité ces dernières années, dans les calculs et les prédictions des propriétés de l'état fondamental du solide. L'idée de base de la méthode du pseudo-potentiel est d'obtenir les états de valence d'un système (atome, molécule, cristal) sans avoir recours à calculer les états du cœur qui ne sont pas nécessaires pour la description des propriétés physiques, c'est-à-dire le concept de base du pseudo-potentiel est l'approximation du cœur gelé qui suppose que les états électroniques des électrons du cœur sont insensibles à la configuration électronique voisine.

En pratique, les fonctions d'onde $\psi(\vec{r})$ représentant les électrons de valence sont remplacées par des pseudo-fonctions d'onde $\psi^{ps}(\vec{r})$ (figure I.2). L'égalité $\psi^{ps}(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$ est imposée à l'extérieur d'une sphère de rayon r_c autour de l'atome et à l'intérieur de cette sphère, la forme de $\psi^{ps}(\vec{r})$ est choisie de la sphère de manière à supprimer les nœuds et les oscillations dues à l'orthogonalité des fonctions d'onde [13].

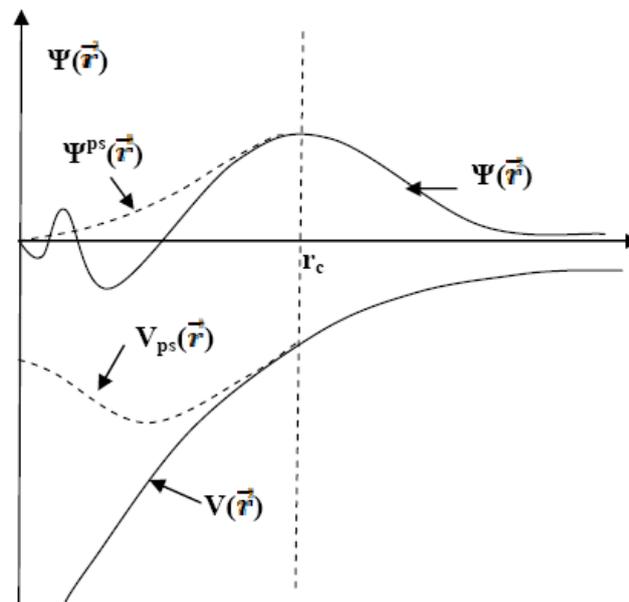


Figure I.2 : Pseudo-fonctions d'onde de valence et pseudo-potential.

Ces pseudo-fonctions d'onde ainsi obtenues offrent l'avantage d'être représentées dans l'espace de Fourier par un nombre très réduit d'ondes planes, et cela réduirait considérablement les calculs numériques. Le potentiel subit un traitement similaire. La forme du pseudo potentiel est choisie de manière à ce que les pseudo-fonctions d'onde et les fonctions d'onde de valence aient les mêmes énergies propres. L'interaction entre les électrons de valence et les ions comprend l'interaction coulombienne des électrons de valence avec les noyaux écrantés par les électrons de cœur, la répulsion cœur-valence due au principe de Pauli et le phénomène d'échange-corrélation. Cette dernière est prise en compte par l'introduction d'une dépendance par rapport au moment orbital du pseudo-potential.

Le rayon r_c est le rayon qui délimite la région du cœur, plus ce rayon sera élevé, et plus les pseudo-fonctions d'ondes et le pseudo potentiel seront lisses. [12]

I.4- Les propriétés élastiques :

La théorie de l'élasticité traite le comportement des matériaux qui ont la propriété de reprendre leur dimensions et leur formes lorsque les forces qui produisent les déformations sont supprimées. [7]

I.4.1- 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} . [12]

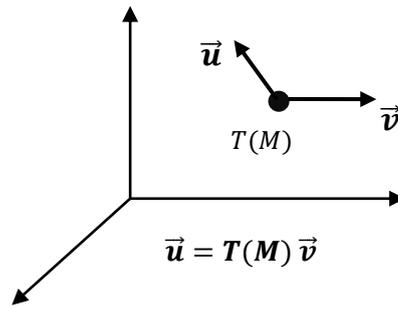


Figure I.3: Tenseur $T(M)$ liant deux grandeurs physiques (\vec{u} et \vec{v}) dans un repère donné [12].

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.4.1.1-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.[11].

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

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

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 :

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

Le tenseur des déformations, est un tenseur symétrique d'ordre 2 servant à décrire l'état de déformation local résultant de contraintes [12].

Les composantes sont notées ε_{ij} , avec :

- $\varepsilon_{ij}(i = j)$: Définissent des déformations d'allongement (ou les compressions) selon les axes principaux.
- $\varepsilon_{ij}(i \neq j)$: Définissent des déformations de cisaillement. [5]

I.4.1.2- 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.3 [12].

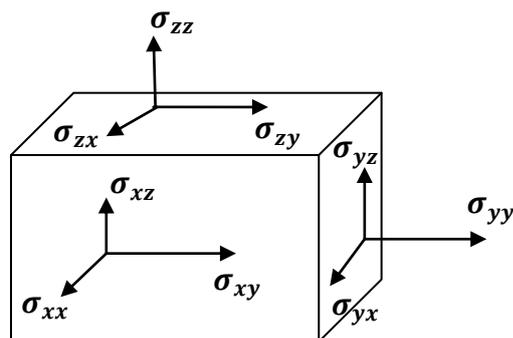


Figure I.3 : Composantes normales et tangentielles d'un tenseur des contraintes.

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

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

Les composantes σ_{ii} sont appelés contrainte 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.

I.4.1.3- 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 [11]:

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

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 [7] :

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

Le tenseur des déformations devient un vecteur ε_β tel que

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

La loi de Hooke s'exprime alors :

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

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

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 $[C]$ s'écrit dans ce cas [12].

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

I.4.1.4- Les propriétés mécaniques :

a. Module de compressions 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 hydrostatique externe [12].

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 :

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

On définit le module de cisaillement C_s pour un cristal cubique par [14]:

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

b. Module d'Young E et le coefficient de poisson ν

Dans le cas courant d'un matériau *isotrope*, deux constantes d'élasticité (Module d'Young E et le coefficient de poisson ν par exemple) suffisent à caractériser son comportement élastique.

Les constantes E , ν , G et B ne sont donc pas indépendantes, mais peuvent toutes s'exprimer en fonction de deux d'entre elles grâce aux relations :

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (\text{I.28})$$

$$B = \frac{E}{3(1 - 2\nu)} \Rightarrow \nu = \frac{3B - E}{6B} \quad (\text{I.29})$$

$$G = \frac{3}{2} \cdot B \cdot \frac{(1 - 2\nu)}{(1 + \nu)} \quad (\text{I.30})$$

$$E = \frac{9B \cdot G}{G + 3B} \quad (\text{I.31})$$

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 [14].

Dans ce chapitre, on a fait des calculs de premier principe, dites : Ab-initio, basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité, combinée avec la méthode de pseudo-potential afin d'étudier les propriétés mécanique de l'alliage $Si_xGe_{(1-x)}C$.

II.2- 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 [13].

II.2.1- Définition des semi-conducteurs IV-IV :

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

Les matériaux semi-conducteurs IV-IV sont des corps composés formés à partir d'un élément de la IV^{ème} colonne et d'un élément de la IV^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev.

L'intérêt pratique des semi-conducteurs IV-IV 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.

I.2.2- Les méthodes utilisées pour l'étude des alliages semi-conducteurs :

Plusieurs approches théoriques ont été élaborées pour l'étude des propriétés physiques (optique, électronique, structural, etc...) des alliages ternaires. L'approximation du cristal virtuel (VCA) a cause de sa simplicité est restée la méthode la plus préférée pour le traitement du désordre chimique des alliages semi-conducteur [13].

I.2.3- 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.

Un semi-conducteur ternaire est supposé uniforme, cependant, l'effet des fluctuations dû à la composition (x) est inévitable. Généralement, on considère ces fluctuations comme une perturbation qui est calculée par le second ordre de l'approche V.C.A [13].

Dans l'approximation du cristal virtuel (Virtual-Crystal Approximation VCA), on considère que les atomes des 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 la superposition des potentiel atomique de chaque type A et B en proportion de leurs concentration En terme mathématique :

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

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. Les valeurs propres (énergies) et les vecteurs propres de ce Hamiltonien représentent donc l'alliage complètement désordonnés [8].

I.2.4- 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) formant l'alliage ABC.

Notons $a(x)$: La constante du réseau de l'alliage ABCet 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 :

$$a(x) = \overline{a(x)} = xa_{AC} + (1 - x)a_{BC} \quad (\text{II.2})$$

II.3- Méthode de calculs ab-initio :

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 fondé sur la méthode (DFT), il est développé en premier lieu par Xavier Gonze, Jean-Michel Beuken[15] de l'unité Physico-Chimie, et de Physique des Matériaux de l'Université Catholique de Louvain, en Belgique.

ABINIT est basée sur un développement d'ondes planes des fonctions d'onde électroniques, avec une représentation du système périodique dans une cellule, dans des conditions limites périodiques (Bloch). Cette représentation est particulièrement adaptée pour les études de cristal.

Dans notre calcul, on a utilisé la forme du pseudo-potentiel proposée par Trouiller Martins, qui donne des pseudo-potentiels à conservation de norme très transférable. La forme proposée par Teter et Pade est utilisé pour le traitement du terme de l'énergie d'échange et de corrélation dans le cadre de l'approximation de la densité locale (LDA). Cette forme reproduit celle de Perdew et Wang qui reproduit à son tour celle 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 [16].

Pour le calcul des propriétés mécaniques de l'alliage $\text{SiGe}_x\text{C}_{1-x}$ nous avons utilisé une énergie de coupure E_{Cut} de 90 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 $6 \times 6 \times 6$ points k spéciaux de la zone de Brillouin.

Et pour faire les calculs on a commencé par les paramètres de maille pour l'alliage $\text{SiGe}_x\text{C}_{(1-x)}$, qui sont classés dans le tableau (II.1) suivant :

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

Pourcentage (x)	L'alliage	a optimisé (Bohr)
0.2	$\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$	9.0280
0.4	$\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$	9.6196
0.6	$\text{SiGe}_{0.6}\text{C}_{0.4}$	9.9784
0.8	$\text{SiGe}_{0.8}\text{C}_{0.2}$	10.197

II.4- propriétés mécaniques :

La détermination des constantes élastiques nous permet d'aborder les propriétés mécaniques de notre matériau telles que le module de compressibilité, module de cisaillement, l'anisotropie, le module de Young et le coefficient de Poisson.

II.4.1 - Les 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 suivis les étapes suivantes :

- ❖ 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 pseudopotentiel 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 : exécuté 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 : exécuté le code, par l'instruction anaddb<telast_3.files >log.

Maintenant les variations des constantes élastiques (C_{11} , C_{12} , C_{44}) en fonction de la pression est représentée sur les figures (II.1, II.2, II.3, II.4) :

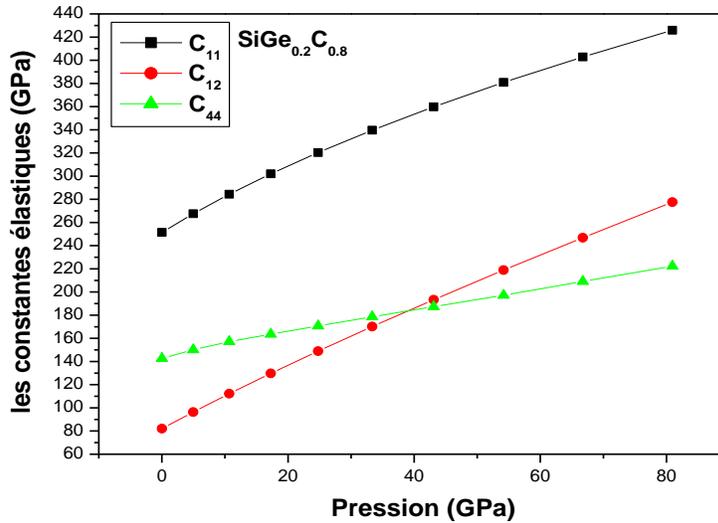
a. L'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$ 

Figure II.1 : Variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$

La Figure II.1 représente la variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$. À partir de cette figure, On peut constater que lorsque la pression augmente les constantes C_{11} , C_{12} augmente aussi presque de la même façon, alors que C_{44} augmente d'une façon différente, ça variation n'est pas aussi importante que C_{11} , C_{12} .

Les expressions analytiques obtenues pour les constantes élastiques en fonction de P sont :

$$C_{11}(P) = -0.00979 P^2 + 2.91019 P + 253.29 \quad (\text{II.3})$$

$$C_{11}(P = 0) = 253.29 \text{ GPa} \quad (\text{II.4})$$

$$C_{12}(P) = -0.00458 P^2 + 2.77083 P + 82.74 \quad (\text{II.5})$$

$$C_{12}(P = 0) = 82.74 \text{ GPa} \quad (\text{II.6})$$

$$C_{44}(P) = -0.0015 P^2 + 1.07266 P + 144.53 \quad (\text{II.7})$$

$$C_{44}(P = 0) = 144.53 \text{ GPa} \quad (\text{II.8})$$

b. L'alliage $\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$

La Figure II.2 représente la variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage $\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$ ou la concentration en carbone a diminuée est celle de germanium a augmentée par rapport à l'alliage précédent. À partir de cette figure, On peut constater que lorsque la pression augmente les constantes C_{11} , C_{12} augmente aussi presque de la même façon, alors que C_{44} augmente d'une façon différente, on constate aussi que les valeurs des constante élastiques sont inférieur à celles de l'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$. On remarque aussi dans cette figure que la pression, à partir duquel les valeurs des constantes élastiques C_{44} deviennent inférieures aux valeurs des constantes élastiques C_{12} , a diminuée à presque 20 GPa.

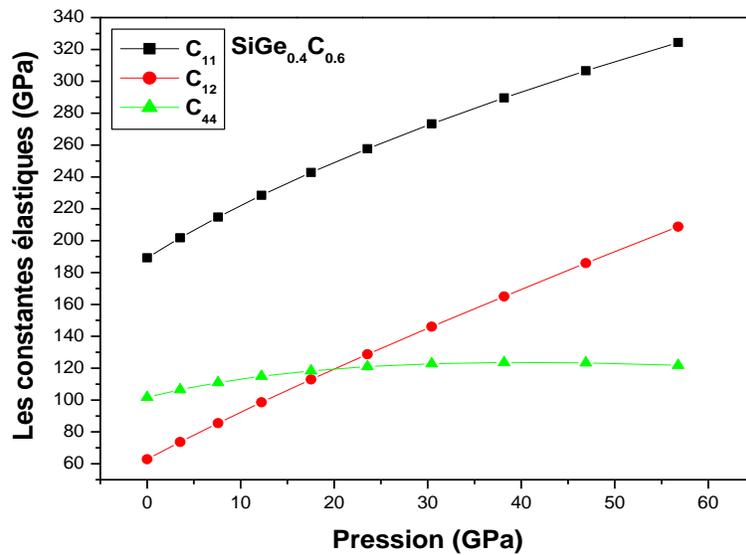


Figure II.2 : Variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage $\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$

Les expressions analytiques obtenues pour les constantes élastiques en fonction de P sont :

$$C_{11}(P) = -0.0151P^2 + 3.19533P + 190.67 \quad (\text{II.9})$$

$$C_{11}(P = 0) = 190.67 \text{ GPa} \quad (\text{II.10})$$

$$C_{12}(P) = -0,00643P^2 + 2,91858P + 63,43 \quad (\text{II.11})$$

$$C_{12}(P = 0) = 63,43 \text{ GPa} \quad (\text{II.12})$$

$$C_{44}(P) = -0,01332P^2 + 1.07441P + 102,89 \quad (\text{II.13})$$

$$C_{44}(P = 0) = 102,89 \text{ GPa} \quad (\text{II.14})$$

c. L'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4}

Maintenant la Figure II.3 représente la variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4}. À partir de cette figure, On peut constater que lorsque la pression augmente les constantes C_{11} , C_{12} augmente aussi presque de la même façon, alors que C_{44} augmente d'une façon différente, ça variation n'est pas aussi importante que C_{11} , C_{12} .

Aussi avec la diminution de la concentration en carbone la diminution des valeurs des constantes élastiques continue. On remarque aussi dans cette figure que la pression, à partir duquel les valeurs des constantes élastiques C_{44} deviennent inférieures aux valeurs des constantes élastiques C_{12} , a diminuée à presque 15 GPa.

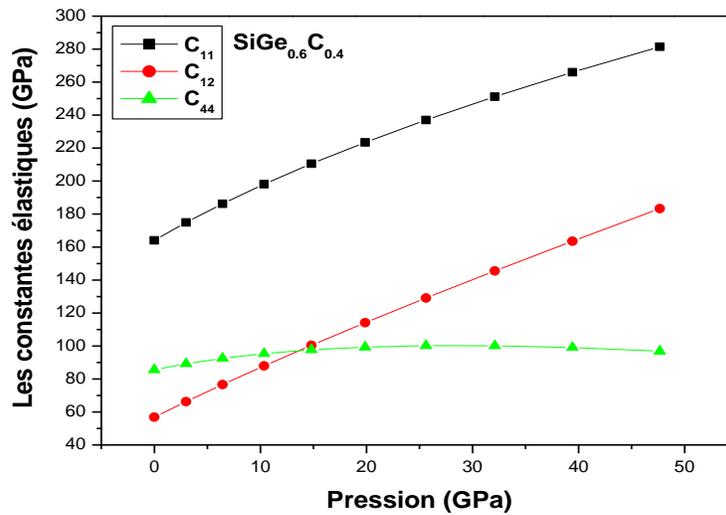


Figure II.3 : Variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4}

Les expressions analytiques obtenues pour les constantes élastiques en fonction de P sont :

$$C_{11}(P) = -0,01809 P^2 + 3,28452 P + 165,22 \quad (\text{II.15})$$

$$C_{11}(P = 0) = 165,22 \text{ GPa} \quad (\text{II.16})$$

$$C_{12}(P) = -0,00783 P^2 + 3,00926 P + 57,33 \quad (\text{II.17})$$

$$C_{12}(P = 0) = 57,33 \text{ GPa} \quad (\text{II.18})$$

$$C_{44}(P) = -0,01571 P^2 + 0,95004 P + 86,56 \quad (\text{II.19})$$

$$C_{44}(P = 0) = 86,56 \text{ GPa} \quad (\text{II.20})$$

d. L'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2}

La Figure II.4 représente la variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2}. À partir de cette figure, on remarque la même variation des différentes constantes élastiques avec une diminution toujours par rapport aux valeurs précédentes. On remarque aussi dans cette figure que la pression à partir duquel les valeurs des constantes élastiques C_{44} deviennent inférieures aux valeurs des constantes élastiques C_{12} a diminué à presque 10 GPa.

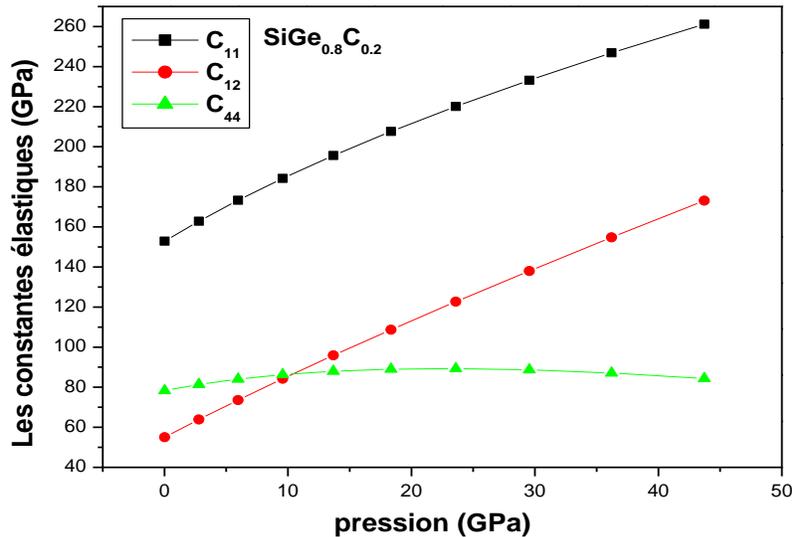


Figure II.4 : Variation des constantes élastiques en fonction de la pression de l'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2}

Les expressions analytiques obtenues pour les constantes élastiques en fonction de P sont :

$$C_{11}(P) = -0,01925 P^2 + 3,27955P + 153,85 \quad (\text{II.21})$$

$$C_{11}(P = 0) = 153,85 \text{ GPa} \quad (\text{II.22})$$

$$C_{12}(P) = -0,00849 P^2 + 3,056 P + 55,44 \quad (\text{II.23})$$

$$C_{12}(P = 0) = 55,44164 \text{ GPa} \quad (\text{II.24})$$

$$C_{44}(P) = -0,01678 P^2 + 0,83875 P + 79,14414 \quad (\text{II.25})$$

$$C_{44}(P = 0) = 79,14414 \text{ GPa} \quad (\text{II.26})$$

II.4.2- Critères de stabilité mécanique :

Les critères de stabilité sont ensuite généralisés pour donnés un ensemble de conditions valables a pression non nulle, et qui se ramènent aux conditions de Born à pression nulle. Ces critères généralisés pour le système cubique sont donnés maintenant par les équations suivantes [12].

$$K = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12} + P) > 0 \quad (\text{II.27})$$

$$G = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12} - 2P) > 0 \quad (\text{II.28})$$

$$G' = (C_{44} - P) > 0 \quad (\text{II.29})$$

Afin d'étudier la stabilité mécanique des alliages considérés sous l'effet de la pression, on trace les évolutions des trois critères de stabilité en fonction de la pression, ils sont représentés sur les figures suivantes (II.5, II.6, II.7,II.8) :

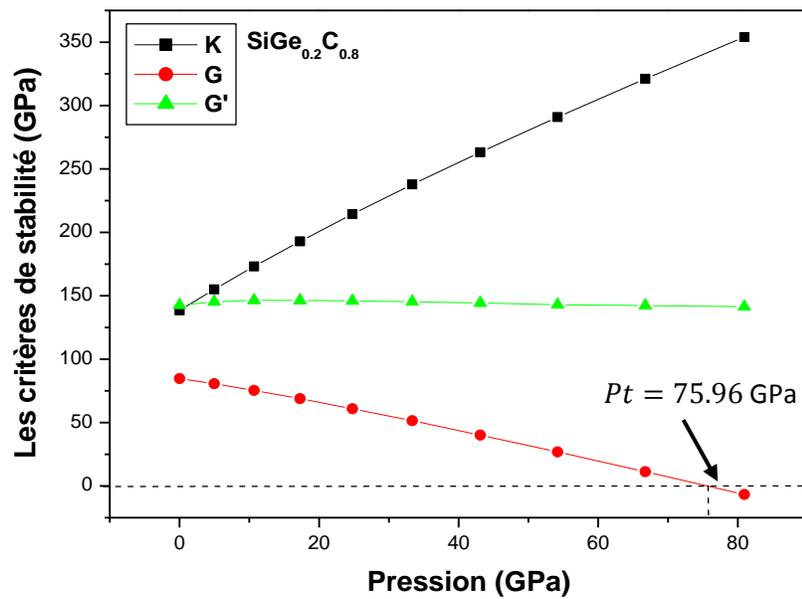


Figure II.5 : Variation des critères de stabilité mécanique K, G, G' en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.2}C_{0.8}

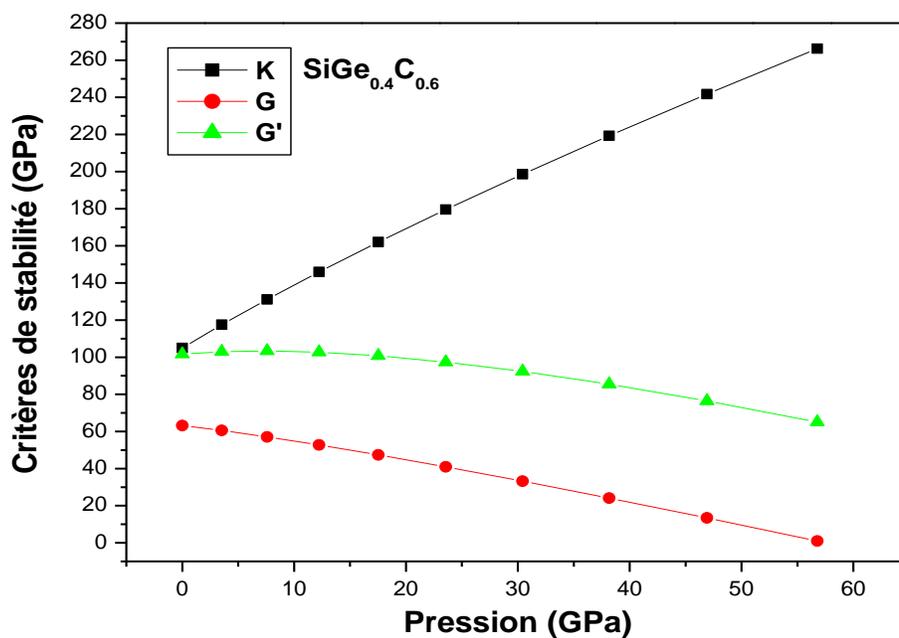


Figure II.6 : Variation des critères de stabilités mécanique K, G, G' en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.4}C_{0.6}

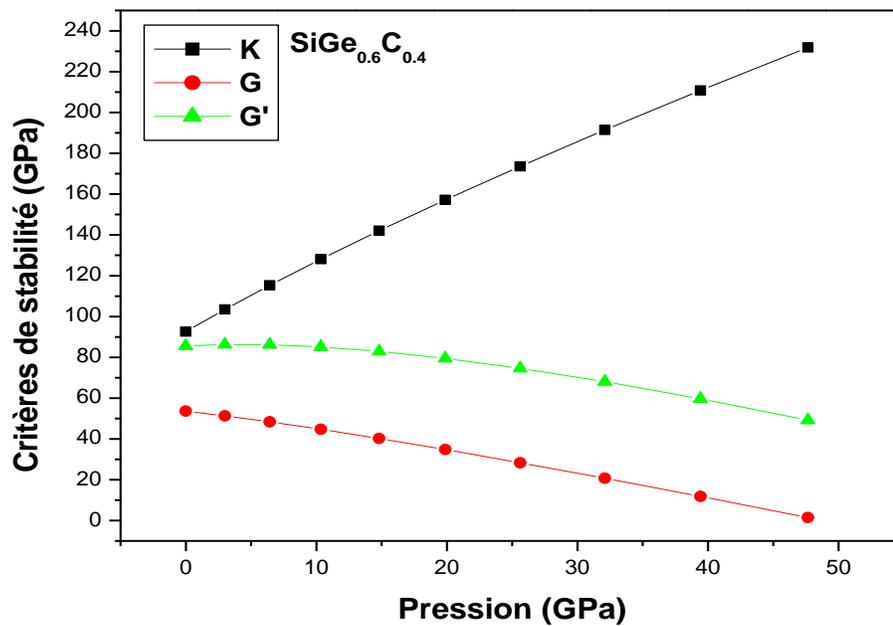


Figure II.7 : Variation des critères de stabilité mécanique K, G, G' en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4}

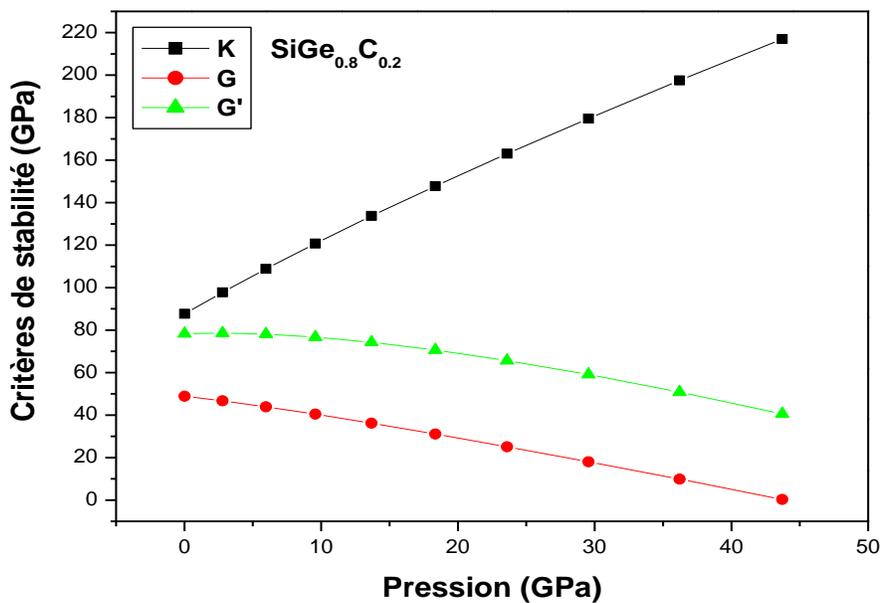


Figure II.8 : Variation des critères de stabilité mécanique K, G, G' en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2},

La Figure II.5 représente la variation des critères de stabilités mécanique K, G, G' en fonction de la pression pour l'alliage : SiGe_{0.8}C_{0.2}. À partir de cette figure, On voit que les critères de stabilités mécanique K et G sont positive, alors que G' s'annule au point P=75.96 GPa c'est la pression de transition de phase. A partir de cette pression la structure CFC n'est plus stable pour cet alliage. pour l'alliage SiGe_{0.4}C_{0.6}, l'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4} et l'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2}, à partir des figures II.6, II.7 et la figure II.8 on peut constater que Les critères de stabilité mécaniques K, G et G' sont positives dans l'intervalle de pression considérée. Donc les trois alliages ne présente aucune transition de phase, par conséquence cette phase est stable dans la gamme de pression étudiée.

II.2.3-Les modules élastiques :

Pour le système cubique [16], Les modules élastiques tels que le module de rigidité B, le module de Yong E, cisaillement G et coefficient de poison ν sont calculés à partir des constants élastiques en utilisant les équations suivantes [1].

$$B = \frac{(C_{11}+2C_{12})}{3} \quad (\text{II.30})$$

$$G = \frac{(C_{11}-C_{12})}{2} \quad (\text{II.31})$$

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (\text{II.32})$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (\text{II.33})$$

a. Le module de rigidité B, le module de cisaillement G, le module de Young E :

Les variations du module de rigidité B, le module de cisaillement G, le module de Young E en fonction de la pression pour les alliages (SiGe_{0.2}C_{0.8}, SiGe_{0.4}C_{0.6}, SiGe_{0.6}C_{0.4} et SiGe_{0.8}C_{0.2}) sont illustrées sur les figures (II.9, II.10, II.11 et II.12) respectivement. On constate que les valeurs de module de rigidité B croissent avec l'augmentation de la pression et les valeurs de module de cisaillement G et le module de Young E augmentent légèrement au début, puis leurs valeurs commencent à diminuer presque de la même façon avec l'augmentation de la pression.

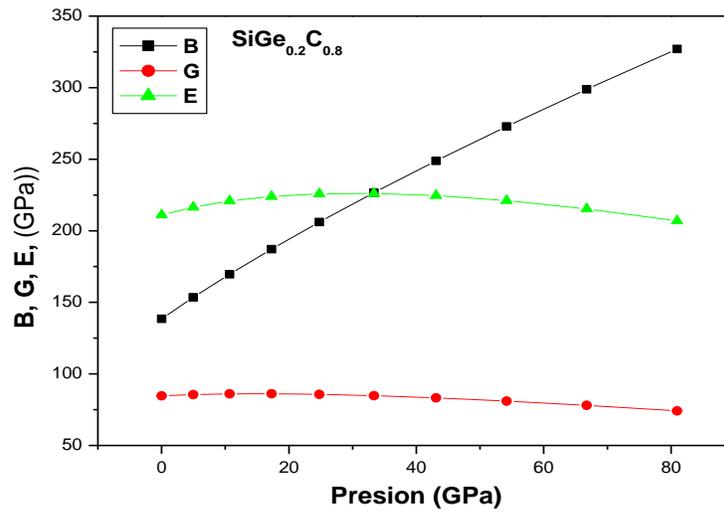


Figure II.9 : Variation des modules B, G, E en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.2}C_{0.8}

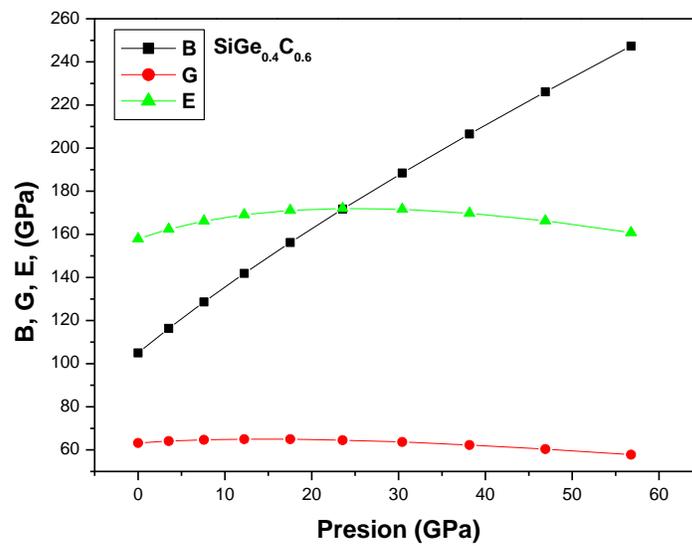


Figure II.10 : Variation des modules B, G, E en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.4}C_{0.6}

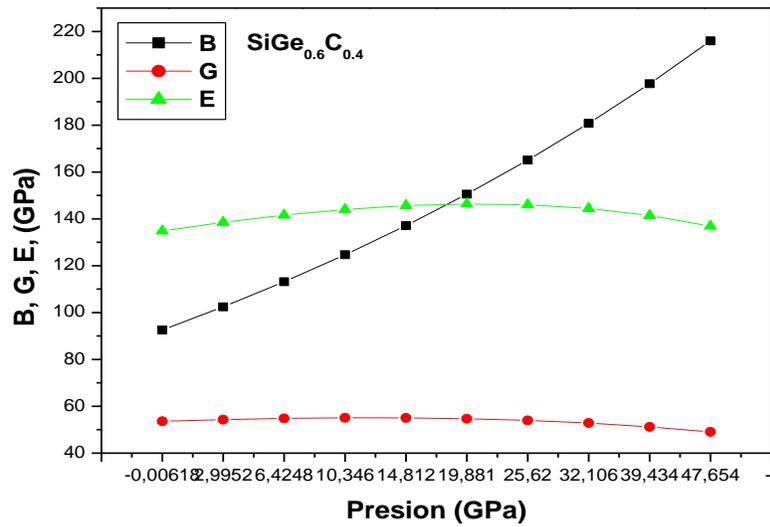


Figure II.12 : Variation des modules B, G, E en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.6}C_{0.4}

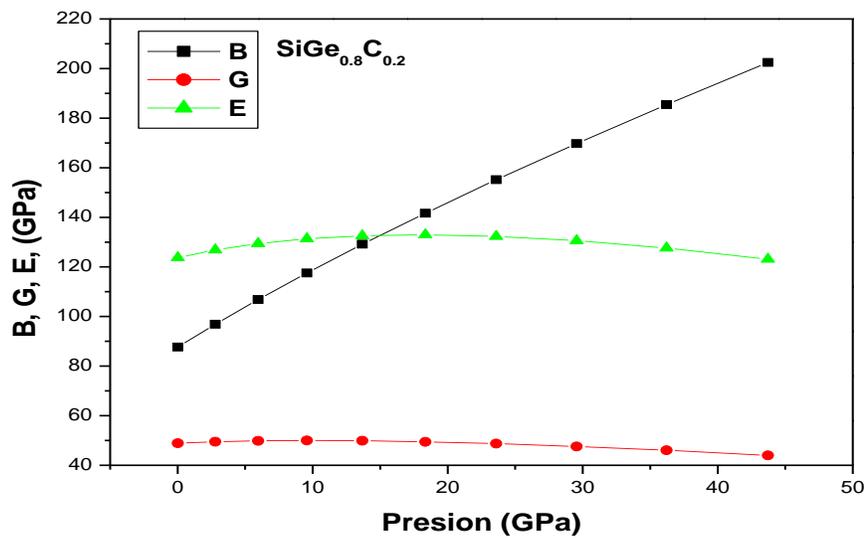


Figure II.13 : Variation des modules B, G, E en fonction de la pression pour l'alliage SiGe_{0.8}C_{0.2}

b. Le coefficient de poisson :

Ce coefficient a été mis en évidence analytiquement par Denis Poisson, mathématicien Français (1781-1840), auteur de travaux sur la physique mathématique et la mécanique, qui en détermina la valeur à partir de la théorie moléculaire de la constitution de la matière.

Le coefficient de Poisson fait partie des constantes élastiques. Il est théoriquement égal à 0,25 pour un matériau parfaitement isotrope et est en pratique très proche de cette valeur. Il est toujours inférieur ou égal à 1/2. S'il est égal à 1/2, le matériau est parfaitement incompressible.

Dans le cas d'un matériau isotrope, le coefficient de Poisson permet de relier directement le module de cisaillement G au module de Young E.

Sur les figures (II.14), (II.15), (II.16) et (II.17) en trace la variation du coefficient de poisson en fonction de la pression pour les quatre alliages considérés.

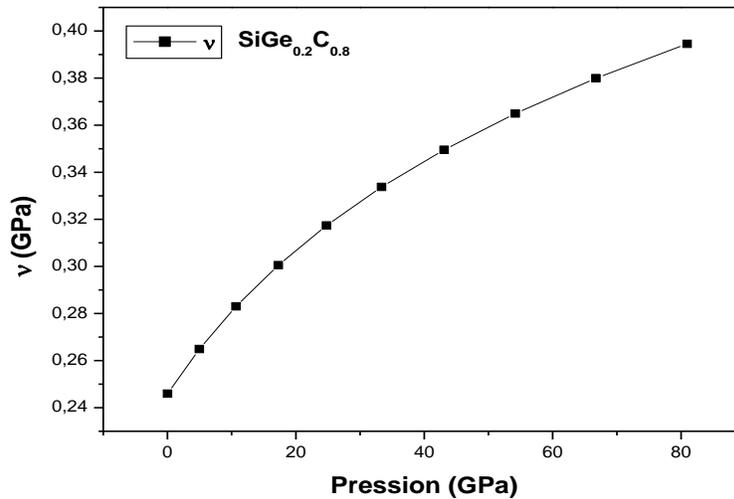


Figure II.14 : Variation du coefficient de poisson en fonction de la pression pour l'alliage $\text{SiGe}_{0.2}\text{C}_{0.8}$

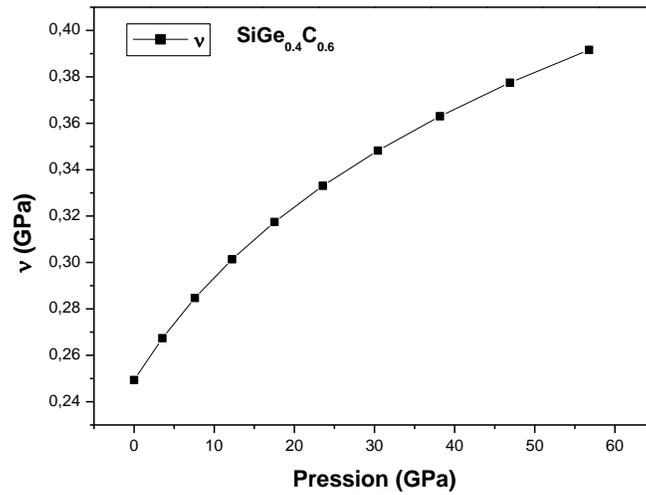


Figure II.15 : Variation du coefficient de poisson en fonction de la pression pour l'alliage $\text{SiGe}_{0.4}\text{C}_{0.6}$

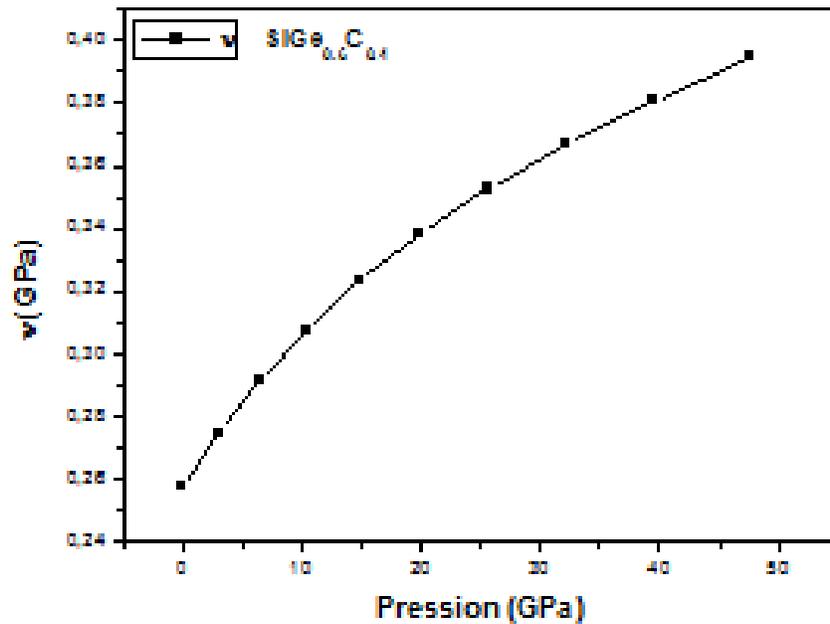


Figure II.16 : Variation du coefficient de poisson en fonction de la pression pour l'alliage $\text{SiGe}_{0.6}\text{C}_{0.4}$

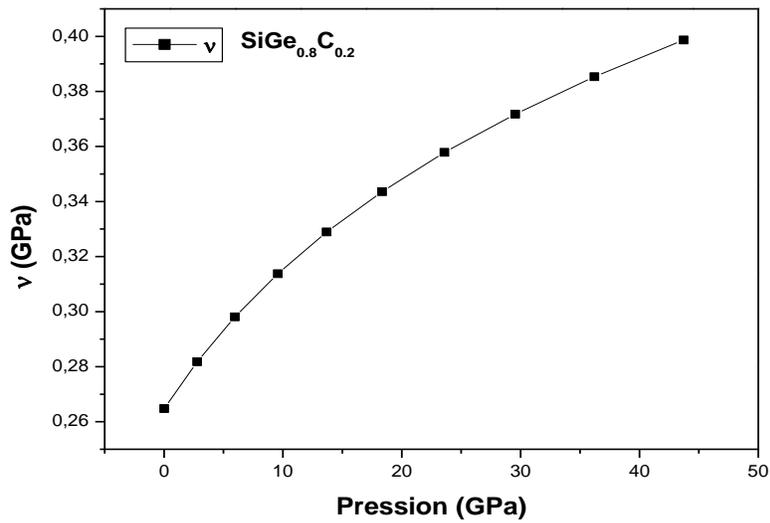


Figure II.17 : Variation du coefficient de poisson en fonction de la pression pour l'alliage $\text{SiGe}_{0.8}\text{C}_{0.2}$

Pour les quatre alliages on voit que la valeur du coefficient de poisson est dans les environs de 0.26 pour les basses pressions, ce qui montre que les alliages sont isotropes. Pour les hautes pressions considérées la valeur de ce coefficient ne dépasse pas la valeur de 0.5.

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans le présent travail, nous avons étudié les propriétés mécaniques de l'alliage ternaire $\text{SiGe}_x\text{C}_{1-x}$ 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 pseudo-potentiels. Pour 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 élastique dans les différents alliages. Et on a trouvé que leurs valeurs augmentent avec l'augmentation de la concentration en carbone 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 zinc blende initiale, la pression de transition à la nouvelle structure cristallographique la plus probable de chaque composé.

On a trouvé que les valeurs de module de rigidité B croissent avec l'augmentation de la pression et les valeurs de module de cisaillement G et le module de Young E augmentent légèrement au début, puis leurs valeurs commencent à diminuer presque de la même façon avec l'augmentation de la pression.

Pour les quatre alliages on voit que la valeur du coefficient de poisson est dans les environs de 0.26 pour les basses pressions, ce qui montre que les alliages sont isotropes. Pour les hautes pressions considérées la valeur de ce coefficient ne dépasse pas la valeur de 0.5.

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

***Références
bibliographiques***

Références

- [1] 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.
- [2] Eric Cancès, Claude Le Bris, Yvon Maday, Méthodes Mathématiques en Chimie Quantique. Springer, 2006
- [3] Boudalia Abdelkader, Thèse de doctorat « Etude des propriétés structurales, élastiques, électroniques et optiques des perovskites cubiques LaAlO_3 et XTiO_3 ($X=\text{Ca}, \text{Sr}, \text{Pb}$) », Université d'Oran, 2010-2011.
- [4] Chouit Fairouz, Thèse de Doctorat en sciences, «Etude ab-initio des différentes propriétés structurales, électroniques, optiques, thermodynamiques et thermiques des composés binaires et ternaires à base de Plomb», Université Badji Mokhtar-Annaba, 2018.
- [5] Missoum Radjia, Thèse de Doctorat en sciences, « Etude Ab-initio des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés de Zintl $\text{B}_{a2} \text{P}_7 \text{X}$ ($X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) », Université Ferhat Abbas de Setif 2020
- [6] Aboub Zahia, Mémoire de Magister, « Etude ab-intio des propriétés structurales et électroniques des systèmes $(\text{Sr}, \text{La}) (\text{Ti}, \text{Ni}) \text{O}_3$ », Université Kasdi Merbah-Ouargla, 2012.
- [7] Lebga Noudjoud, Thèse de Doctorat en sciences, «Propriétés structurales, élastiques et optiques de semi-conducteurs à grand gap : Les composés B-V, les alliages $\text{Zn}_x\text{Cd}_{1-x}\text{Se}$ et $\text{ZnSe}_{1-x}\text{Te}_x$, le $\beta\text{-SiC}$ », Université Ferhat Abbas-Sétif , 2011.
- [8] Benhamida Mohamed, thèse de Doctorat en sciences, « Propriétés structurale, élastiques et électronique d'alliages de nitrure des métaux de transitions », Université Sétif 1-Sétif, 2014.
- [9] Bedjaoui Abdelhak, Mémoire Magister, «Contribution à l'étude des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés AlX ($X=\text{N}, \text{P}$ et As) », Université Ferhat Abbas-Sétif, 2011.
- [10] Bouafia Hamza, thèse de Doctorat en sciences, «Etude théorique des propriétés structurales, mécaniques et électroniques des matériaux pérovskites de type KAX_3 et NaAX_3 ($X= \text{F}, \text{O}$) », Université Mohamed Boudiaf Oran , 2014
- [11] Gatt Fayrouz, Mémoire Magister, «Étude ab initio des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques des composés III- P », Université Med Khider Biskra, 2013-2014.

- [12] Daoud Salah, Thèse de 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.
- [13] Benyettou Samia, Thèse de Doctorat en sciences, « Calcul de premier principe de quelques propriétés physiques de quelques alliages semi-conducteurs », Université Mohamed Khider de Biskra, 2016.
- [14] Daoud Khadidja, Thèse de Doctorat en sciences, «Propriétés électroniques et élastiques des semi-conducteurs anorganiques », Université Ferhat Abbas-Sétif, 2014.
- [15] X. Gonze, G.M. Rignanese, M. Verstraete, J.M. Beuken, Y. Pouillon, R. Caracas, F.Jollet, M. Torrent, G. Zerah, M. Mikami, Ph. Ghosez, M. Veithen, J.Y. Raty, V. Olevano, F. Bruneval, L. Reining, R. Godby, G. Onida, D.R. Hamann, D.C. Allian, Z. Kristallogr. 220, 558 (2005).
- [16] H. J. Monkhorst , J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5189 (1976)