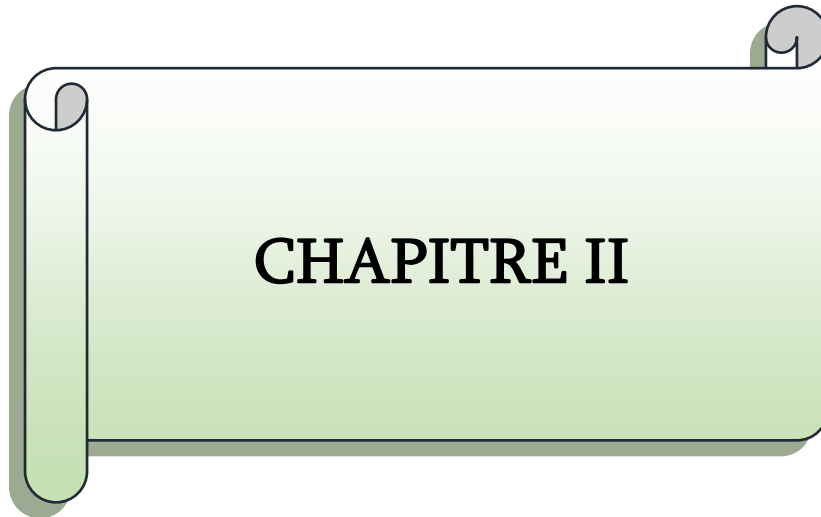


**METHODES DE CALCUL
DU PREMIER PRINCIPE**



PROPRIÉTÉS ÉLASTIQUES DES SOLIDES CRISTALLINS



RESULTATS ET DISCUSSION

Introduction générale

Conclusion Générale

ANNEXES

République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université de Bordj Bou Arreridj
Faculté des Sciences et de la Technologie
Département des Sciences de la Matière

جامعة « برج بوعريريج »
كلية العلوم والتكنولوجيا
قسم علوم المادة



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Master II

Filière : Physique
Option : Matériaux et modélisation numérique

**THÈME : ETUDE THEORIQUE DES PROPRIETES
STRUCTURALES ET ELASTIQUES DU COMPOSE TIP**

Préparé par : ADJNEG YASMINA

Devant le jury : /06/2015

Président: Bioud Nadhira	MCB	Université de Borj Bou Arreridj
Rapporteur : LABGAA Noudjoud	MCB	Université de Borj Bou Arreridj
Co-Rapporteur : DAOUD Salah	MCB	Université de Borj Bou Arreridj
Examineur: BENCHIHEB Nadjjet	MAA	Université de Borj Bou Arreridj
Examineur : MEZOUAR Rabie	MAA	Université de Borj Bou Arreridj

Année Universitaire 2014-2015

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Dédicace

*Je dédie cet humble travail,
A ma très chère mère « Zineb »*

*Affable, honorable, aimable : Tu représentes pour moi le
Symbole de la bonté par excellence, la source de tendresse et
l'exemple du dévouement qui n'a pas cessé de m'encourager et
de prier pour moi.*

*A mon Père « Mouhamed elakhdar »
Aucune dédicace ne saurait exprimer l'amour,
l'estime, le dévouement et le respect que j'ai toujours eu
Pour vous*

*A mes frères : yousef, Rida, Ahmed, Omar, Mansour,
Halim, Aymen, foudil, salah.*

A mes sœurs :Linda , Souhila, Samira.

*A mon prés amis« Ahlam et nacira » pour leur soutien et
Encouragement. A toutes les personnes qui connaissent
de prés ou de loin,
Seulement pour leur existence.*

Remerciements

الحمد لله رب العالمين

Le modeste travail présenté dans ce mémoire a été réalisé à L'UNIVERSITÉ DE BORDJ-BOU-ARRERIDJ, je tiens avant tout à adresser toute mon gratitude à M^{me} LABGAA Noudjoud et M^r DAOUD Salah en tant que Directeurs de ce mémoire, se sont toujours montrés à l'écoute et très disponibles tout au long de la réalisation de ce mémoire, ainsi pour l'inspiration, l'aide et le temps qu'ils ont bien voulu me consacrer, qui ont malgré leurs multiples occupations ont accepté de diriger ce mémoire. Je souhaite à adresser mes remerciements les plus sincères à mes très chers PARENTS qui ont apporté leurs aides au cours d'élaboration de ce mémoire. Mes remerciements s'adressent également à tous les membres DE DEPARTEMENT DE SCIENCES DE LA MATIERE DE L'UNIVERSITÉ DE BORDJ-BOU-ARRERIDJ. J'exprime la grande gratitude à tous LES ENSEIGNANTS rencontrés lors des recherches effectuées et qui ont accepté de répondre à mes questions avec gentillesse. Je voudrai à exprimer ma reconnaissance envers les amies et les collègues qu'elles ont apporté leur support moral et intellectuel tout a long de mon démarche. Merci à tous ceux qui m'ont aidé de près ou de loin dans mon activité de recherche, surtout, notre très chères amies Ahlam, Asai, Nasira, Imene, Fatma et Khalisa ... etc.

SOMMAIRE**Remerciements****Dédicace****Introduction général 1****CHAPITRE I METHODES DE CALCUL DU PREMIER PRINCIPE****I-1. Introduction 2****I.2. Equation de Schrödinger 2****I.2.1.Approximation de Born-Oppenheimer 3****I.2 .2 . Approximation du champ auto –cohérent (self-consistent)..... 5****a. Approximation de Hartree 5****b. Approximation de Hartree-Fock 7****I. 3. Théorie de la fonctionnelle de la densité 8****I. 3.1. Introduction..... 8****I. 3. 2. Formulation de Hohenberg-Kohn..... 9****a - Premier théorème de Hohenberg-Kohn..... 9****b - Deuxième théorème de Hohenberg-Kohn (principe variationnel)..... 10****I. 3. 3. La DFT comme une théorie a un seul corps..... 11****a. Formulation de Kohn-Sham 11****b. Fonctionnelle d'échange et corrélation 15****1-Approximation de la densité locale LDA 15****2- Approximation du gradient généralisé GGA 15****I.4. Méthode de pseudopotentiel 16****I.4.1. Introduction..... 16**

SOMMAIRE

I.4.2. Théorème de Bloch	16
I.4.3. Une base d'onde plane	17
I.4.4. Approximation du cœur gelé	17
Références.....	19

CHAPITRE II :PROPRIETES ELASTIQUES DES SOLIDES CRISTALLINS

II. 1. Introduction.....	20
II. 2. Structure cristalline.....	20
II. 3. Propriétés élastiques	21
II. 3. 1. Tenseur des contraintes	21
II. 3. 2. Tenseur de déformation	22
II. 3. 3. Matrice des constants élastiques	23
II. 3. 4. Module de rigidité, module de cisaillement et facteur d'anisotropie.....	24
Références	26

CHAPITRE III :.....RESULTATS ET DISCUSSION

III-1. Introduction	27
III.2. Test de convergence	27
III. 3. Résultats obtenus à une pression nulle	28
III. 3. 1. Propriétés structurales	28
III. 3. 2. Propriétés élastiques.....	29
a)- Constantes élastiques	29
b)- Module de cisaillement, facteur d'anisotropie et le paramètre de Kleinman.....	30
III. 4. Effet de la pression hydrostatique.....	30
III. 4. 1. Construction de la courbe P-V	30

SOMMAIRE

III.4.2. Densité cristalline.....	31
III. 4. 3. Constantes élastiques	32
Références	33
Conclusion générale	34
Annexes	35

Introduction générale

Les méthodes de calcul des propriétés physique des matériaux mises au point au cours de ces dernières années sont nombreuses. Parmi elles, on trouve la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qu'est une méthode très efficace pour la détermination des propriétés physique des solides cristallins.

Cependant, même si la DFT est une méthode très puissante de simulation, sa mise en œuvre numérique reste coûteuse en temps de calcul. Différentes approximations sont mises en œuvre en DFT dans son application numérique. Parmi ces méthodes d'approximations, la méthode des ondes planes et la méthode des pseudopotentiels qui sont largement utilisée actuellement pour le calcul des propriétés physiques des solides. Cette dernière approximation sépare les électrons de cœur, qui sont traités dans l'approximation du cœur gelé, des électrons de valence qui sont traités explicitement.

Ce mémoire à pour but de contribuer à l'étude des propriétés structurales et élastiques du matériau TIP. Ce mémoire se divise en deux grandes parties :

La première présente le cadre théorique dans lequel a été effectué ce travail et qu'est rédigée dans les deux premiers chapitres. Dans le premier chapitre, on a parlé brièvement sur certaines approximations, ainsi que sur les différentes méthodes de calcul des propriétés physiques des semiconducteurs, notamment la DFT et la théorie du pseudopotentiel.

Dans le deuxième chapitre, on a donné en détail certaines notions de base sur les propriétés élastiques des solides cristallins.

La deuxième partie de ce mémoire rédigée dans lequel nous présentons les résultats de nos calculs Ab-initio des propriétés structurales et élastiques du matériau (TIP) dans sa phase zincblende. Les résultats obtenus sont ensuite confrontés et comparés avec les valeurs théoriques d'autres chercheurs.

Finalement, nous terminons ce modeste travail par une conclusion générale.

I.1. Introduction

Le calcul des propriétés physiques des matériaux cristallins est une discipline qui est née au cours du dernier siècle. De nombreux physiciens et chimistes ont contribué à cet essor depuis l'avènement de la mécanique quantique. Le point de départ de tous ces développements est l'équation de Schrödinger [1].

I.2. Equation de Schrödinger

Les solides sont constitués par des ions et des électrons, le problème majeur de la physique des solides est de comprendre l'organisation intime de ces particules à l'origine de leurs propriétés, mais dans ce cas la mécanique classique peut être insuffisante de résoudre ces types de problèmes, donc il est nécessaire de faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$H \Psi (\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Psi (\mathbf{R}, \mathbf{r}) \quad (\text{I.1})$$

\mathbf{R} et \mathbf{r} : sont les coordonnées des noyaux et des électrons respectivement, et E : représente ici l'énergie totale du système.

Et $\Psi ((\mathbf{R}, \mathbf{r}))$: c'est la fonction d'onde du système, une fonction des coordonnées des noyaux et des électrons, et qui contient toute l'information du système considéré.

Où : H est l'Hamiltonien du système et qui contient tous les termes d'énergie :

$$H_{\text{total}} = T_Z + T_e + U_Z + U_e + U_{ez} \quad (\text{I.2})$$

➤ L'énergie cinétique totale de noyaux peut être s'écrit comme suit:

$$\hat{T}_z = \sum_{\alpha} \hat{T}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\alpha}} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_{\alpha}}{2 M_{\alpha}} \right) \quad (\text{I.3})$$

Avec, \hbar représente la constante de Planck, et M_{α} , représente la masse du noyau, N_{α} représente le nombre d'atome.

➤ L'énergie cinétique totale des électrons peut être donnée par :

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{N_e} \hat{T}_i = \sum_{i=1}^{N_e} \left(\frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2 m} \right) \quad (\text{I.4})$$

Avec : m ici c'est la masse de l'électron, N_e représente le nombre des électrons.

- L'énergie d'interaction des noyaux deux par deux s'écrit comme suit :

$$\hat{U}_z = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta e^2}{|R_\alpha - R_\beta|} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{U}_{\alpha\beta} \quad (I.5)$$

Avec : Z_α et Z_β sont la charge des noyaux α et β

- L'énergie d'interaction des électrons deux par deux peut être donnée par :

$$\hat{U}_e = \frac{1}{2} \sum_{i, j \neq i} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{U}_{ij} \quad (I.6)$$

- L'énergie d'interaction noyaux-électrons est donnée par :

$$\hat{U}_{eZ} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha|} = \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \hat{U}_{i\alpha} \quad (I.7)$$

L'équation de Schrödinger pourra donc être représentée sous la forme suivante:

$$\left(\hat{T}_e + \hat{T}_z + \hat{U}_e + \hat{U}_z + \hat{U}_{eZ} \right) \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) = E \Psi (r_1, r_2, \dots, R_1, R_2, \dots) \quad (I.8)$$

Cette équation contient $3(Z + 1)N_e$ variables, et puisque on trouve dans 1cm^3 , d'un solide cristallin près de 10^{22} atomes, il est plus qu'évident que l'on ne saurait obtenir une solution car il s'agit d'un problème à N corps, qui n'est résolu qu'en moyennant un certain nombre d'approximations.

A l'ordre Zéro on trouve l'approximation de Born Oppenheimer, ou approximation adiabatique. [2]

I.2.1.Approximation de Born-Oppenheimer

Le calcul des niveaux d'énergie et des fonctions d'onde d'une molécule (même de taille modeste) est une tâche extrêmement lourde. L'approximation de Born-Oppenheimer (B-O) permet de la soulager grandement. Cette méthode a été publiée en 1927 par Born et Oppenheimer et est toujours utilisée en chimie quantique.

L'hypothèse de Born et Oppenheimer peut s'exprimer ainsi : on considère que l'on peut découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux, en estimant que leur mouvement est beaucoup plus lent que celui des électrons : on les considère comme fixes dans l'étude du mouvement des électrons de la molécule. On traite alors les distances internucléaires comme des paramètres. Elle a une conséquence calculatoire immédiate, qu'on appelle hypothèse adiabatique. Il s'agit en fait de la même approximation.

Compte tenu de ce que $\hat{T}_z = 0$ et $\hat{U}_z = 0$, nous pouvons définir une fonction d'onde Ψ_e comme fonction d'onde des électrons, et un nouveau Hamiltonien, c'est l'hamiltonien des électrons qui est donnée par :

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{U}_e + \hat{U}_{ez} \quad (\text{I-9})$$

L'équation de Schrödinger électronique peut s'écrire alors comme suit:

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (\text{I-10})$$

$$\left[\sum_{i=1}^{N_e} \frac{-\hbar^2 \Delta_i}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha e^2}{|r_i - R_\alpha^0|} \right] \Psi_e(r, R_\alpha^0) = E_e(R_\alpha^0) \Psi_e(r, R_\alpha^0) \quad (\text{I-11})$$

Dans cette équation comme dans l'expression de Ψ_e , le R_α^0 figure non plus comme une variable mais plutôt comme un paramètre.

E_e : représente l'énergie des électrons qui se meuvent dans le champ créé par des noyaux fixes.

Cette approximation réduit de manière significative le nombre de variables nécessaires pour décrire la fonction Ψ . En outre, tous les termes de l'Hamiltonien impliquant les noyaux sont éliminés. Cette approximation ne suffit cependant pas à elle seule à résoudre l'équation de Schrödinger, à cause de la complexité des interactions électron-électron. C'est pourquoi elle est très souvent couplée à l'approximation de Hartree [1].

I.2 .2 . Approximation du champ auto –cohérent (self-consistent)

a. Approximation de Hartree

Nous avons utilisé dans ces Approximations pour les équations de la mécanique quantique les unités atomiques, c'est-à-dire $\hbar = 1$, $e^2=1$ et $m_e=1$.

La résolution de l'équation (I-10) est impossible du fait d'un grand nombre de particules mis en jeu. Le traitement consiste à réduire le problème de N corps à celui d'une seule particule, ce qui permet de considérer la fonction d'onde du système électronique $\Psi_e(r_i)$ (nous avons omis volontairement la dépendance paramétrique R_N sur les coordonnées nucléaires) comme le produit direct des fonctions d'onde à une particule $\Psi_i(r_i)$

$$\Psi_e(r_1, r_2, \dots, r_N) = \prod_i \Psi_i(r_i) \quad (\text{I-12})$$

Donc :

$$E_e = \sum_i E_i \quad H_e = \sum_i h_i \quad (\text{I-13})$$

E_i : représente l'énergie cinétique des électrons.

h_i : représente l'hamiltonien de système.

Dans cette approximation, on considère les électrons comme indépendants, chacun d'eux se mouvant dans le champ moyen créé par les autres électrons et par les noyaux.

L'équation de Schrödinger à une particule, appelée équation de Hartree [2], s'écrit sous la forme :

$$h_i \Psi_i(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (\text{I-14})$$

Où l'hamiltonien h_i à un électron s'écrit

$$h_i = -\frac{1}{2} \Delta_i + v_{ext}(r) + v_i(r) \quad (\text{I-15})$$

Où $v_{ext}(r)$: représente le potentiel dû aux interactions électrons-noyaux dans le système.

Est le potentiel de Hartree pour le $i^{\text{ème}}$ électron qui remplace l'interaction électrostatique électrons-électrons avec tous les autres électrons, il est donné par :

$$v_i(r) = \int d^3r' \frac{n_i(r')}{|r-r'|} \quad (\text{I-16})$$

La densité d'électrons $n_i(r)$ dans l'équation (I-15) est donnée par :

$$n_i(r) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} |\Psi_j(r)|^2 \quad (\text{I-17})$$

Où la somme est faite sur les N_e états mono électroniques occupés.

En substituant les équations (I-15), (I-16) et (I-17) dans (I-14), on trouve les équations de Hartree pour un système mono électronique :

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta_i + V_{ext}(r)\right) \Psi_i(r) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \int d^3r' \frac{|\Psi_j(r')|^2}{|r-r'|} \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (\text{I-18})$$

Cette équation, dite de **Hartree** est une équation integro-différentielle dont la solution ne peut être trouvée que par approximation successives.

Le potentiel de Hartree $v_i(r)$, qui détermine les fonctions d'ondes mono électroniques $\Psi_i(r_i)$ est exprimé en terme de ces mêmes fonctions d'ondes selon l'équation de (I-18). C'est la raison pour laquelle cette approche est appelée approximation du champ auto cohérent.

Mais, on trouve une solution auto cohérente avec la formulation de Hartree est une tâche très dure, surtout si le nombre d'électrons N_e mis en jeu est très grand. Très souvent on suppose que la densité mono électronique $n_i(r)$ est égale à la densité électronique totale $n(r)$, i.e.

$$n_i(r) = n(r) = \sum_{j=1}^{N_e} |\Psi_j(r)|^2 \quad (\text{I-19})$$

Ainsi, le potentiel subit par chaque électron est le même, mais on introduit une interaction de chaque électron avec lui-même, ce qui est incorrect surtout pour des systèmes localisés tels que les atomes.

b. Approximation de Hartree-Fock

Un système électronique dans l'approximation de Hartree est incomplet. On peut ainsi introduire la différence entre l'énergie du système multiélectronique réel et l'énergie obtenue dans l'énergie de Hartree comme étant celle représentant le reste des interactions électroniques. L'une des interactions qui manque dans le modèle de Hartree est l'échange.

L'échange est d'origine purement quantique. C'est cet effet qui exprime l'antisymétrie de la fonction d'onde par rapport à l'échange des coordonnées de n'importe quels deux électrons menant à décrire le système à N corps (électrons) par l'égalité :

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_{N_e}) = -\Psi_e(\vec{r}_2, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_{N_e}) \tag{I-20}$$

Dans la quelle ont été interverties les positions de i et j .cette fonction est la fonction d'onde du système à N corps résultante de la combinaison linéaire de fonctions mono-électronique. Une telle description obéit donc au principe d'exclusion de Pauli qui impose à deux électrons de mêmes nombres quantiques de ne pouvoir occuper simultanément le même état quantique, ainsi qu'à l'indiscernabilité des électrons. Or, dans la formulation de Hartree de la fonction d'onde, cela n'est pas le cas, car l'électron i occupe précisément l'état i.

Hartree et Fock ont généralisé ce concept en montrant que le principe de Pauli est respecté si l'on écrit la fonction d'onde sous la forme d'un «déterminant de Slater».

$$\Psi_e(\vec{r}_1, \vec{\sigma}_1, \vec{r}_2, \vec{\sigma}_2, \dots, \vec{r}_{N_e}, \vec{\sigma}_{N_e}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1, \vec{\sigma}_1) & \Psi_1(\vec{r}_2, \vec{\sigma}_2) & \dots & \Psi_1(\vec{r}_{N_e}, \vec{\sigma}_{N_e}) \\ \Psi_2(\vec{r}_1, \vec{\sigma}_1) & \Psi_2(\vec{r}_2, \vec{\sigma}_2) & \dots & \Psi_2(\vec{r}_{N_e}, \vec{\sigma}_{N_e}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \Psi_{N_e}(\vec{r}_1, \vec{\sigma}_1) & \Psi_{N_e}(\vec{r}_2, \vec{\sigma}_2) & \dots & \Psi_{N_e}(\vec{r}_{N_e}, \vec{\sigma}_{N_e}) \end{vmatrix} \tag{I-21}$$

Où $\vec{\sigma}$ est le spin.

La fonction Ψ donnée par l'équation (I-21) conduit aux équations de Hartree- Fock pour un système à une particule :

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_i + v_{ext}(r) + \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{N_e} \int d^3r' \frac{|\Psi_j(r')|^2}{|r-r'|} \right) \Psi_i(r) - \sum_{\substack{j=1 \\ (j \neq i)}}^{N_e} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \int d^3r' \frac{\Psi_j^*(r') \cdot \Psi_i(r)}{|r-r'|} \Psi_j(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (\text{I-22})$$

Ces équations de Hartree-Fock sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

On constate que l'approximation de Hartree-Fock constitue la base de la majorité des méthodes de chimie quantique, ab-initio et semi-empirique, grâce à ces réussites confirmées dans ce domaine depuis plusieurs décennies. Tout comme dans l'approche de Hartree, la fonction d'onde d'un système à N électrons est décrite par une combinaison linéaire des fonctions mono-électroniques avec l'ajout de la prise en compte de l'antisymétrie de l'ensemble. Ceci ne peut être obtenu qu'avec un produit de fonctions.

Une généralisation permettant d'incorporer l'antisymétrie est assurée par le remplacement des fonctions d'ondes de Hartree par un déterminant de Slater. Ce déterminant comprend des fonctions d'ondes mono-électroniques construites comme combinaison linéaire de tous les fonctions de Hartree dans laquelle des permutations sont effectuées de manière à obéir la règle d'exclusion de Pauli.

Malheureusement ces équations de Hartree-Fock sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

Les interactions électrons-électrons produisent des termes d'énergie supplémentaires en plus de ceux de l'approximation de Hartree-Fock (AHF), qui sont appelés termes d'énergie de corrélation.

I. 3. Théorie de la fonctionnelle de la densité

I. 3.1. Introduction

C'est une théorie qui utilise la densité électronique en tant que fonction fondamentale au lieu de la fonction d'onde comme c'est le cas dans les autres méthodes d'approximation telles que celles de Hartree et Hartree-Fock.

L'idée d'utiliser la densité électronique a pour origine avec les travaux de Thomas [3] et Fermi [4] qui ont tenté d'exprimer l'énergie totale d'un système en fonction de sa densité électronique en représentant son énergie cinétique selon une fonctionnelle de cette grandeur. Cependant, la précision obtenue était inférieure à celle de Hartree-Fock à cause de l'absence

du terme d'échange. Dirac a amélioré cette théorie en ajoutant au modèle de Thomas et Fermi une énergie d'échange fonctionnelle de la densité électronique. Mais le terme de corrélation électronique était toujours absent dans cette nouvelle approche.

I. 3. 2. Formulation de Hohenberg-Kohn

L'approche développée par P. Hohenberg et W. Kohn est de reformuler la théorie de la fonctionnelle 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 démontrés par Hohenberg et Kohn dans leur article de 1964 [5].

a - Premier théorème de Hohenberg-Kohn: preuve que $E=E[\rho(r)]$

« Pour tout système de particules en interaction dans un potentiel externe $V_{ext}(\mathbf{r})$, le potentiel $V_{ext}(\mathbf{r})$ est uniquement déterminé, à une constante additive près, par la densité $n_0(\mathbf{r})$ de la particule dans son état fondamental »[6].

Si on considère un gaz d'électrons, le potentiel externe agissant sur ces particules détermine l'état fondamental de ce système et la densité de charge correspondante. Ainsi toutes les quantités physiques concernant cet état (comme par exemple l'énergie totale du système) sont des fonctionnelles du potentiel externe. Comme cela a été démontré initialement par Hohenberg et Kohn [9] en raison de la correspondance biunivoque existant entre le potentiel externe $v_{ext}(r)$ et la densité électronique de l'état fondamental $n(r)$ permettant d'exprimer le premier comme une fonctionnelle de la deuxième, et l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique.

Ce résultat constitue le premier théorème de Hohenberg et Kohn. Ce théorème et à la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité et explique l'appellation donnée à cette théorie.

La démonstration du fait que l'énergie totale d'un système à l'état fondamental soit une fonctionnelle de la densité électronique a permis à Hohenberg et Kohn d'exprimer cette fonctionnelle $E[n(r)]$ selon l'expression

$$E[n(r)] = \int v_{ext}(r) n(r) dr + F[n(r)] \quad (\text{I-23})$$

La fonctionnelle $F[n(r)]$ est universelle, vraie pour n'importe quel nombre de particules et n'importe quel potentiel extérieur $v_{ext}(r)$.

$$F[n(r)] = \langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle \quad (I-24)$$

Où:

$$F[n(r)] = T[n(r)] + V_{ee}[n(r)] \quad (I-25)$$

$T[n]$: est la fonctionnelle énergie cinétique.

$V_{ee}[n]$: est la fonctionnelle représentant l'interaction électron-électron.

b - Deuxième théorème de Hohenberg-Kohn (principe variationnel)

« Pour un potentiel extérieur $v_{ext}(r)$ et un nombre d'électrons N donnés, l'énergie totale du système atteint sa valeur minimale lorsque la densité correspond à la densité exacte de l'état fondamental » [5].

Le deuxième théorème de Hohenberg et Kohn et un principe variationnel analogue à celui proposé initialement dans l'approche de Hartree-Fock pour une fonctionnelle de la fonction d'onde $\Psi(r)$ mais appliqué cette fois à une fonctionnelle de la densité électronique $n(r)$.

On va voir maintenant à travers le principe variationnel que le minimum de $E[n(r)]$ est obtenu pour la valeur fondamentale exacte de la densité $n(r)$ [9].

Soit $\Psi(r)$ la fonction d'onde de l'état fondamental, par le principe variationnel de Reileigh-Ritz, on a :

$$E[n(r)] = \langle \Psi(r) | \hat{H} | \Psi(r) \rangle < \langle \Psi'(r) | \hat{H} | \Psi'(r) \rangle = E[n'(r)] \quad (I-26)$$

Donc le minimum de l'énergie est établi par rapport à toutes les densités $n'(r)$ associées avec d'autres potentiels extérieurs $V(r)$, d'où la 2eme partie du théorème :

Une fonctionnelle universelle pour l'énergie $E[n(r)]$ peut être définie pour tout système d'électrons. Pour un $v_{ext}(r)$ donné, l'énergie fondamentale exacte est le minimum absolu par rapport à $n(r)$, et la densité $n(r)$ qui minimise cette fonctionnelle est la densité fondamentale exacte [2].

L'analyse menée ci-dessus a permis de souligner le fait que la connaissance de la fonctionnelle $E[n(r)]$ suffirait à déterminer l'énergie totale du système ainsi que ses propriétés à l'état fondamental. Cependant, cette fonctionnelle demeure inconnue à l'heure actuelle de façon exacte. Il est par conséquent nécessaire de recourir à des approximations qui correspondent à des équations de Kohn-Sham [4] établies dans l'objectif de fournir les fondements nécessaires pour exploiter de façon effective les théorèmes de Hohenberg et Kohn [5].

I. 3. 3. La DFT comme une théorie à un seul corps

a. Formulation de Kohn-Sham

Peu de temps après la formulation des lois de la mécanique quantique, THOMAS et FERMI avaient déjà essayé d'exprimer l'énergie totale en fonction de la densité [3]. Le point faible de cette démarche résidait cependant dans l'expression de l'énergie cinétique en l'absence d'orbitales, il ne leur permettait pas d'atteindre une précision satisfaisante. Après une quarantaine d'années d'efforts, c'est finalement l'approche de Kohn et Sham [6] qui s'est imposée, car le seul terme qu'elle laisse indéterminé est le plus petit de l'énergie totale : le terme d'échange-corrélation. L'idée de Kohn-Sham est d'introduire un système de particules sans interaction et dont l'état fondamental est caractérisé en tout point par la même densité $n(r)$ que celle de l'état fondamental réel.

La démarche de Kohn-Sham comporte deux étapes :

Les orbitales sont réintroduites, afin de traiter le terme d'énergie cinétique de manière exacte.

Le système étudié est redéfini par rapport à un système d'électrons sans interaction de même densité $n(r)$, de façon à faire apparaître les termes d'interaction comme des corrections aux autres termes. C'est à dire ils ont démontré qu'il est possible d'aborder le problème à N corps en interaction en utilisant une base de N orbitales à une particule (les orbitales de Kohn-Sham).

On a vu à partir du théorème de H-K que l'énergie de l'état fondamental d'un système d'électrons en interaction dans un potentiel extérieur $v_{ext}(r)$ peut s'écrire sous la forme (I-23)

Avec $F[n(r)]$ donnée par la relation (I-24), dans cette dernière relation la fonctionnelle représentant l'interaction électron-électron $V_{ee}[n]$ peut se mettre sous la forme:

$$V_{ee}[n] = \iint \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} dr dr' + W_{ee}[n] \tag{I-27}$$

Où l'intégrale représente la répulsion électron-électron classique et $W_{ee}[n]$ est le terme non classique de l'interaction électron-électron.

Si la fonctionnelle universelle $F[n(r)]$ était connue, il serait relativement simple d'utiliser le principe variationnel (la deuxième partie du théorème de H-K) pour déterminer l'énergie et la densité d'électrons de l'état fondamental, quel que soit le potentiel externe considéré. Cependant, ce n'est pas le cas ; car cette fonctionnelle n'est pas connue et toute la complexité du problème à N électrons réside dans sa détermination.

A cette situation, il est utile de noter que les deux parties du théorème sus-cités s'appliquent bien également à un système d'électrons non-interagissant, c.à.d sans terme de répulsion électron-électron. Kohn et Sham [6] ont considéré un tel système (de référence) dont l'Hamiltonien

$$H_s = T_s + V_s \tag{I-28}$$

$$H_s = \sum_{i=1}^N \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 + v_s(r_i) \right] \tag{I-29}$$

La fonction d'onde d'un tel système peut se mettre sous la forme d'un produit de N fonctions individuelles ou encore d'un déterminant de Slater si on veut tenir compte du principe d'exclusion de Pauli. Ces fonctions individuelles permettent de déterminer la densité électronique en tout point de l'espace :

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Phi_i(r)|^2 \tag{I-30}$$

Où $\{\Phi_i(r)\}$ représentent les orbitales mono-électroniques. Dans ce cas, l'énergie cinétique peut se mettre sous la forme:

$$T_s[n] = \sum_{j=1}^N \left(-\frac{1}{2} \int \Phi_j^* \Delta \Phi_j d^3 r_j \right) \quad (I-31)$$

Kohn et Sham ont résolu le problème de façon à faire correspondre $T_s[n]$ à l'énergie cinétique exacte. Ces auteurs ont défini une fonctionnelle $E_{xc}[n]$, qui correspond à l'échange-corrélation, par :

$$F[n] = T_s[n] + \iint \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} dr dr' + E_{xc}[n] \quad (I-32)$$

D'après les équations (I-31), (I-32) on peut écrire :

$$E_{xc}[n] = T[n] - T_s[n] + W_{ee}[n] \quad (I-33)$$

Cela signifie que la fonctionnelle énergie d'échange et de corrélation contient la différence entre $T[n]$ et $T_s[n]$, vraisemblablement assez petite, et la partie non-classique de l'interaction électron-électron.

Donc l'énergie totale du système peut se mettre sous la forme suivante :

$$E_{KS}[n(r)] = T_s[n(r)] + \underbrace{\frac{1}{2} \int \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} dr dr'}_{E_H} + \underbrace{\int v_{ext}(r) n(r) dr}_{E_{ext}} + E_{xc}[n(r)] \quad (I-34)$$

En appliquant le principe variationnel à cette fonctionnelle on trouve :

$$\frac{\delta E_{KS}[n]}{\delta n(r)} = v_{ext}(r) + \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr + \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \quad (I-35)$$

Si on compare l'équation (I-35) ci-dessus à l'équation similaire pour un système d'électrons non-interagissant, se déplaçant dans un potentiel effectif $V_{eff}(r)$ donnée par:

$$\frac{\delta E[n]}{\delta n(r)} = v_{eff}(r) + \frac{\delta T_s[n]}{\delta n(r)} \quad (I-36)$$

On trouve que les deux équations sont identiques à condition que

$$v_{eff}(r) = v_{ext}(r) + \int \frac{n(r')}{|r - r'|} dr' + \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \quad (I-37)$$

Ainsi, la densité d'électrons qui satisfait l'équation (I-37) peut être obtenue en résolvant l'équation type de Schrödinger à un électron, correspondant à des électrons non-interagissant se déplaçant dans le potentiel effectif $v_{eff}(r)$

$$H_s \Phi_i(r) \equiv \left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{eff}(r) \right] \Phi_i(r) = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (I-38)$$

L'opérateur H_s , défini par les équations (I-38), est appelé Hamiltonien de Kohn-Sham.

La densité dans ce cas sera donnée par:

$$n(r) = \sum_{i=1}^N |\Phi_i(r)|^2 \quad (I-39)$$

Où la somme est sur les N états occupés à une particule.

Les équations (I-34) et (I-38) sont appelées équations de Kohn-Sham, elles doivent être résolues de façon auto cohérente, en débutant d'une certaine densité initiale, un potentiel $v_{eff}(r)$ est obtenue pour laquelle l'équation (I-38) est résolue et une nouvelle densité électronique est alors déterminée à partir de cette nouvelle densité, un nouveau potentiel effectif peut être calculé. Ce processus est répété de façon auto-cohérente jusqu'à ce que la convergence soit atteinte jusqu'à ce que la nouvelle densité électronique soit égale ou très proche à la précédente.

L'énergie de l'état fondamental est, donc, donnée par :

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i - \iint \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} dr dr' - \int V_{xc}(r) n(r) dr + E_{xc}[n] \quad (I-40)$$

$$\text{Avec : } V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \quad (I-41)$$

$V_{xc}(r)$ est le potentiel d'échange et de corrélation.

A ce stade, tous les termes de l'énergie, et leur potentiel associé, peuvent être évalués à l'exception du terme d'échange-corrélation. Mais pour résoudre ces équations et obtenir

l'énergie totale qui nous intéresse, il est nécessaire d'introduire une expression pour E_{xc} que l'on ne connaît pas dans le cas général; c'est pourquoi on fait appel à l'approximation de la densité locale LDA (Local Density Approximation).

Les équations de Kohn-Sham sont beaucoup plus pratiques et restent convenables pour encore plus d'amélioration chaque fois qu'une approximation meilleure est utilisée pour E_{xc} . De plus, elles pourraient donner les valeurs exactes de $n(r)$ et de E si E_{xc} était connue avec précision.

b. Fonctionnelle d'échange et corrélation

Pour pouvoir faire le calcul il nous faut maintenant une approximation pour le terme d'échange et corrélation, qui est le dernier terme pour lequel nous ne connaissons pas d'expression en fonction de la densité ou des orbitales. La recherche d'approximation précise pour l'échange et corrélation est toujours d'actualité et nous ne présentons ici que les fonctionnels standards, qui ont déjà été largement utilisés [7].

Approximation de la densité locale LDA

L'idée de l'approximation de la densité locale est de considérer le potentiel d'échange-corrélation comme une quantité locale définie en un point r , dépendant faiblement des variations de la densité autour de ce même point r . L'approximation locale de la densité ou LDA de l'anglais Local Density Approximation doit donc reproduire au mieux les caractéristiques physiques de la moyenne sphérique du trou d'échange-corrélation plutôt que du trou lui-même. Cette approximation est à la base de toutes les fonctionnelles d'échange-corrélation modernes et peut-être définie comme suit [8]:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dV \quad (I.42)$$

Où : $\varepsilon_{xc}(\rho(r))$ représente l'énergie d'échange et corrélation par électron pour un système d'électron uniforme [8].

1- Approximation du gradient généralisé GGA

Dans la LDA, on emploie la connaissance de la densité au point r , alors que dans un système réel, la densité est spatialement inhomogène, et par conséquent, il sera plus convenable d'introduire une correction à cette fonctionnelle qui tiendrait compte du taux de

variation de $\rho(r)$. C'est pour cela, qu'une autre voie est possible, qui consiste à utiliser une fonction de la densité et de son gradient pour l'énergie d'échange-corrélation.

$$E_{xc}[\rho]^{GGA} = \int dr^3 \varepsilon(\rho(r), \nabla \rho(r)) \quad (\text{I.43})$$

Cette modélisation est dénommée Approximation du Gradient Généralisé (GGA en anglais).

I.4. Méthode de pseudopotentiel

I.4.1. Introduction

Les calculs numériques sur l'état fondamental électronique d'un système (dans la formulation de Kohn-Sham) rencontrent des problèmes techniques supplémentaires. En effet, ils deviennent de plus en plus onéreux au fur et à mesure que le système à traiter contient un grand nombre d'électrons, par exemple dans les métaux de transition qui se caractérisent par une localisation des orbitales.

L'emploi du pseudo potentiel dans le formalisme de la DFT a prouvé un succès considérable ces dernières années, dans les calculs et les prédictions des propriétés de l'état fondamental du solide.

I.4.2. Théorème de Bloch

Bloch a démontré un important théorème [10], qui établit que les solutions de l'équation de Schrödinger pour un potentiel périodique peuvent être mises sous la forme d'un produit d'une onde plane par une fonction $u_i(\mathbf{r})$ qui a la périodicité du réseau cristallin [11].

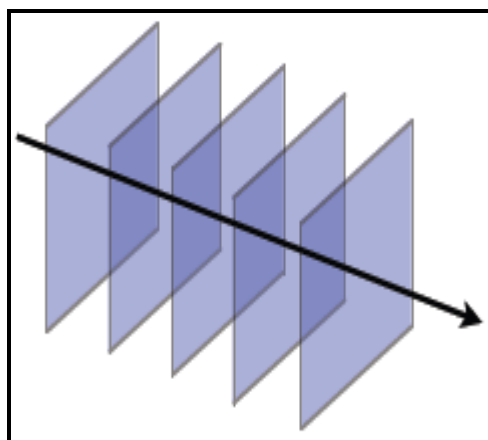


Figure I-1: Schématisation d'une onde plane, les fronts d'onde sont planes.

$$\Psi_i(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r}) \exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{I.44})$$

Avec :

$$u_i(\mathbf{r}) = u_i(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (\text{I.45})$$

\mathbf{k} est vecteur d'onde, i est l'indice de bande, \mathbf{R} est le vecteur du réseau direct.

Pour la fonction $u_i(\mathbf{r})$ on peut toujours écrire [2] :

$$u_i(\mathbf{r}) = \sum_G C_{iG} \exp(iG \cdot \mathbf{r}) \quad (\text{I.46})$$

Où : G est vecteur du réseau réciproque défini par $G \cdot \mathbf{R} = 2\pi m$ (m est un entier).

En remplaçant $u_i(\mathbf{r})$ par son expression, la fonction d'onde peut être donc mise sous la forme d'une somme d'ondes planes, et qui peut s'écrire comme suit :

$$\Psi_{ik}(\mathbf{r}) = \sum_G C_{i, \mathbf{K} + \mathbf{G}} e^{i(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \quad (\text{I.47})$$

I.4.3. Une base d'onde plane

En principe pour représenter la fonction d'onde on a besoin, d'un très grand nombre d'ondes planes. Cependant, les coefficients $C_{i, \mathbf{K} + \mathbf{G}}$ pour les ondes planes de petite énergie cinétique $\frac{\hbar^2}{2m} \left| \mathbf{K} + \mathbf{G} \right|^2$ sont plus importants que ceux associés aux ondes planes avec grande énergie cinétique [12]. En conséquence, la base d'onde plane 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'onde plane conduit à des erreurs dans le calcul de l'énergie totale, l'ordre de grandeur de cette erreur peut être réduite en augmentant la valeur de l'énergie critique [2].

En principe la valeur de E_{cut} 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.

I.4.4. Approximation du cœur gelé

En physique du solide, il est bien connu que la plupart des propriétés physiques 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 [13].

La méthode du pseudopotentiel est basé sur l'idée d'obtenir les états de valence d'un système 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 pseudopotentiel 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 $\psi_i(r)$ représentant les électrons de valence sont remplacés par des pseudo-fonctions d'ondes $\psi^{ps}(r)$ (voir figure I. 2).

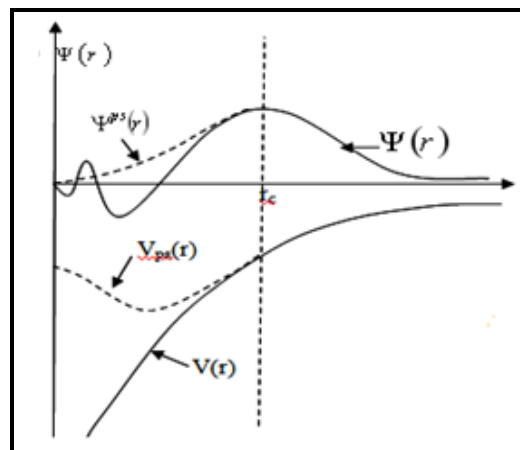


Figure I-2: Pseudisation des fonctions d'onde de valence et du potentiel [14].

L'égalité est $\psi_i(r) = \psi^{ps}(r)$ imposée à l'extérieur d'une sphère de rayon r_c de l'atome et à l'intérieur de cette sphère, la forme de $\psi^{ps}(r)$ est choisie de manière à supprimer les nœuds et les oscillations dues à l'orthogonalité des fonctions d'ondes [12].

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 [15].

Références

- [1] : P. S. Moussounda, Thèse de Doctorat, Université Louis Pasteur (Strasbourg I), France (2006).
- [2] : N. Labгаа, Thèse de Doctorat, Université Ferhat Abbas-Sétif (2011)
- [3] : L. H. Thomas, Proc. Camb. Phil. Soc 23, (1927) 542.
- [4] : E. Fermi, Rend. Accad. Lincei 6, (1927) 602.
- [5] : P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev B. 136 (3), (1964) 864.
- [6]: W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 140, (1965) 1133.
- [7] : V. Trinite, Thèse de Doctorat en physique, Ecole polytechnique, France (2006).
- [8]: A. Mujica, A. Rubio, A. Munoz and R. J. Needs, Rev. of Mod. Phys 75, (2003) 863.
- [9]: The ABINIT computer code, a Common project of the Université Catholique de Louvain, (www.abinit.org/).
- [10]: J. P. Kireev, Physique des semiconducteurs, (2^{ème} éd, Mir, Moscou, 1975).
- [11] : H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composantes électroniques, (Dunod, Paris 2004).
- [12]: M. L. Cohen and J. R. Chelikowsky, in electronic structure and optical proprieties of semiconductors, (Springer series in solid state sciences ed Springer new York, 1988).
- [13] : H. Zenasni, Thèse de magister, Université Aboubakr Belkaid de Tlemcen (2008).
- [14] : M. C. Payne, M. P. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias, J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys 64, (1992) 1045.
- [15] : W. E. Pikett, Computer Phys. Repport 9, (1989) 115.

II. 1. Introduction

Les matériaux semiconducteurs III-V de structure zincblende (GaAs, GaP, BP.....), et wurtzite (AlN, GaN, InN, ZnO) sont devenus, au cours de ces dernières années, des familles importantes pour des applications opto et micro-électroniques de premier plan. Les matériaux de cette dernière famille sont envisagés entre autre pour fonctionner dans des milieux hostiles, du fait de leur bonne résistance (chimique, thermique, comparé à celle des semiconducteurs classiques). Il est nécessaire de connaître les autres différentes propriétés physiques de ces matériaux.

II. 2. Structure cristalline

Il existe deux types d'état solide, le premier c'est l'état dans lequel l'arrangement des atomes est aléatoire (s'appelé état amorphe), le second et celui dans lequel les atomes sont arrangés régulièrement aux nœuds d'un réseau (c'est l'état cristallin).

Les solides cristallins sont obtenus par plusieurs voies : la voie usuelle la plus utilisée c'est la solidification d'un liquide, on trouve aussi deux autres voies, l'évaporation d'une solution ou condensation d'une vapeur. Les solides cristallins se caractérisent par une transition brusque passant d'un état désordonné à un état ordonné. Ce sont des solides polyédriques dont la forme correspond à un des sept réseaux cristallins fondamentaux. L'état cristallin est caractérisé par le fait que les atomes sont rangés aux nœuds d'un réseau périodique. Le résultat est un ensemble ordonné de noyaux et d'électrons liés entre eux par des forces essentiellement coulombiennes [1].

Plusieurs matériaux de type III-V se cristallisent dans la structure zincblende (figure II.1 à gauche), cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V du tableau périodique. Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité $(a/4, a/4, a/4)$, a étant le paramètre cristallin, c-à-d la longueur de l'arête du cube élémentaire [2].

D'autres familles des matériaux semiconducteurs se cristallisent dans la structure NaCl, appelée aussi Rocksalt (figure II.1 à droite). L'observation du réseau cristallin nécessite l'utilisation d'un rayonnement dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance interatomique, soit quelques Angström.

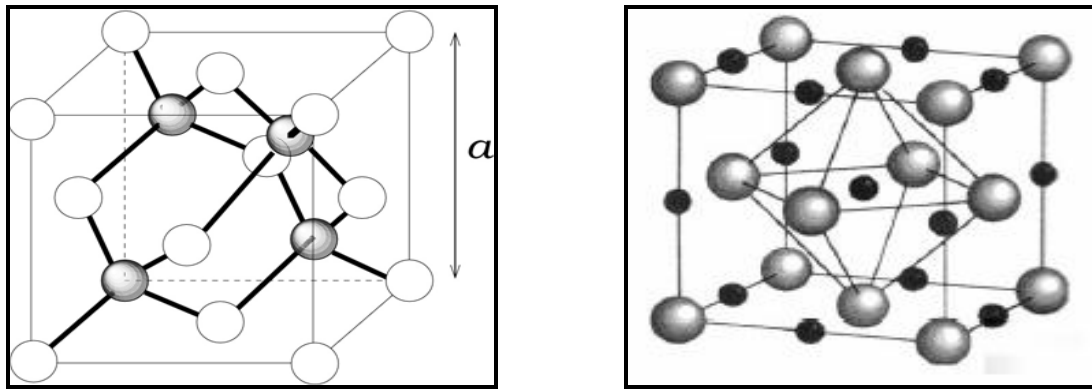


Figure II. 1 : à gauche, structure zincblende des matériaux III-V, à droite, la structure dite NaCl ou Rocksalt, a étant le paramètre de maille.

II. 3. Propriétés élastiques

Les physiciens ont été, depuis des siècles, tentés de mettre en équations, le comportement élastique de la matière. Plus ou moins générales, précises ou robustes, ces modélisations s'appuient sur la représentation du phénomène à l'aide de champs vectoriels et de tenseurs. Ceux-ci décrivent, en particulier, la déformation de l'objet ainsi que les contraintes internes qu'ils subissent. Des lois de comportement viennent lier les contraintes et la déformation qui en résultent. Les idées physiques de base sont simples: La loi de Hooke et la deuxième loi de Newton. Nous donnons les définitions de quelques grandeurs élastiques: tenseur de déformations, tenseurs des contraintes et constantes élastiques [3].

II. 3. 1. 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.

$$\text{Alors :} \quad \sigma = f/s \quad (\text{II.1})$$

Ou : σ : c'est la contrainte, f : est la force exercée, et s : la surface.

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. II.2. Dans cette notation, le premier indice (j) indique la direction de la force et le deuxième indice (i) indique la normale au plan sur lequel s'applique la force [4].

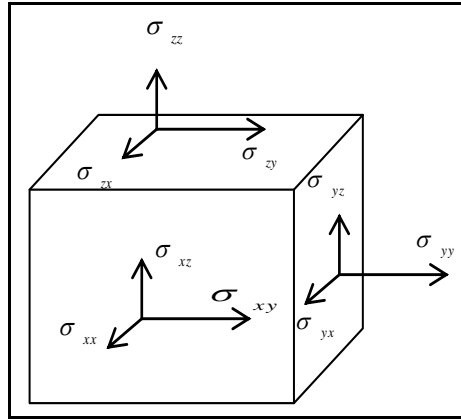


Figure II. 2: Composantes du tenseur des contraintes [3, 4].

Les composantes σ_{ii} sont appelés contrainte normales, car elles agissent perpendiculairement à la face. Les éléments σ_{ij} avec $i \neq j$ sont les contraintes tangentielles puisque elles agissent sur le plan de la surface. Les composantes de la contrainte ont la dimension d'une force par unité de surface ou d'une énergie par unité de volume.

Le tenseur des contraintes est symétrique et il s'écrit [3, 4]:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \tag{II.2}$$

II. 3. 2. Tenseur de déformation

Les déformations d'un objet sont mesurées à partir d'une position initiale, qui est généralement, la position de repos de l'objet dans laquelle aucune force n'est appliquée à l'objet. Le tenseur des déformations, est un tenseur symétrique d'ordre 2 servant à décrire l'état de déformation local résultant de contraintes. Les composantes sont notées ϵ_{ij} , avec :

- Les termes diagonaux ϵ_{ii} sont les allongements relatifs dans la direction i (selon l'axe x_i).
- Les autres termes ϵ_{ij} ($i \neq j$) sont les demi-variations de l'angle droit (en supposant un petit volume de matière cubique avant déformation).

Le tenseur de déformation qui ayant la même forme que le tenseur des contraintes, il s'écrit comme suit [3, 4] :

$$\epsilon = \begin{bmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} & \epsilon_{yz} & \epsilon_{zz} \end{bmatrix} \tag{II.3}$$

II. 3. 3. Matrice des constantes élastiques

La loi de Hooke est une loi de comportement des solides soumis à une déformation élastique de faible amplitude. De cette loi, on observe que le tenseur des déformations d'un cristal est relié au tenseur des contraintes par une loi linéaire au moyen de la matrice des constantes élastiques.

On définit ainsi un tenseur de rang 4, C de composantes C_{ijkl} où i, j, k et l varient de 1 à 3 tel que [4] :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l=1}^3 C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \tag{II.4}$$

Les symétries des tenseurs de contraintes et de déformations font que ce tenseur de rang 4 C_{ijkl} se ramène généralement à une matrice $C_{\alpha\beta}$ 6x6 [4]:

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:

$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \sigma_\alpha = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} = \sigma_1 \\ \sigma_{yy} = \sigma_2 \\ \sigma_{zz} = \sigma_3 \\ \sigma_{yz} = \sigma_4 \\ \sigma_{xz} = \sigma_5 \\ \sigma_{xy} = \sigma_6 \end{bmatrix}; \quad \alpha = 1,2,\dots, 6 \tag{II.5}$$

Le tenseur des déformations devient un vecteur ε_β tel que :

$$\varepsilon = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{bmatrix} \rightarrow \varepsilon_\beta = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} = \varepsilon_1 \\ \varepsilon_{yy} = \varepsilon_2 \\ \varepsilon_{zz} = \varepsilon_3 \\ 2\varepsilon_{yz} = \varepsilon_4 \\ 2\varepsilon_{xz} = \varepsilon_5 \\ 2\varepsilon_{xy} = \varepsilon_6 \end{bmatrix}; \quad \beta = 1,2,\dots, 6 \tag{II.6}$$

La loi de Hooke s'exprime alors :

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta} \quad (\text{II.7})$$

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Les $C_{\alpha\beta}$ représentent les composantes du tenseur des constantes élastiques qui s'est réduit maintenant à une matrice 6×6 , possédant 36 coefficients. Des considérations sur le travail et l'énergie permettent de ramener ce nombre à 21 (cette matrice de 6×6 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 [5] :

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{II.9})$$

II. 3. 4. Module de rigidité, module de cisaillement et facteur d'anisotropie

La variation de volume pour une pression p est inversement proportionnelle à B , qui est appelé Module de rigidité à la compression. Plus B augmente plus le matériau est peu compressible, et si $B = \infty$ le matériau est dit incompressible. 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 [6, 7].

$$B = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (\text{I.10})$$

Pour le système cubique le module de cisaillement C_s et le facteur d'anisotropie A sont aussi peuvent être aussi exprimés comme des combinaisons des constantes élastiques C_{ij} , ils sont donnés respectivement par [7].

$$C_s = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}), \text{ et } A = \frac{2C_{44}}{(C_{11} - C_{12})} \quad (\text{II.11})$$

Pour le système cubique diamant, et zinblende, le paramètre de déformation interne ξ (appelé aussi paramètre de Kleinman) peut être exprimé comme une combinaison des deux constantes élastiques C_{11} et C_{12} , qui est donnée par la formule suivante [8].

$$\xi = \frac{(C_{11} + 8C_{12})}{(7C_{11} + 2C_{12})} \quad (\text{II.12})$$

On peut conclure que les propriétés élastiques d'un solide sont importantes par ce qu'elles se rapportent à diverses propriétés fondamentales à l'état solide comme les potentiels interatomiques, l'équation d'état, les spectres de phonons et les propagations des ondes élastiques.

Références

- [1] : Y Berthaud, Matériaux et propriétés, Université Pierre et Marie Curie (2004)
- [2] : C. Ngô, H. Ngô, Les semiconducteurs de l'électron aux dispositifs, (Dunod, Paris, 2003)
- [3] : L. Hannachi, Thèse de Doctorat en Sciences, Université Ferhat Abbas-Sétif (2010)
- [4] : N. Lebgaa, Thèse de Magister en physique du solide, Université Ferhat Abbas-Sétif (2004)
- [5] : C. Kittel, Introduction à la physique de l'état solide, (3^{ème} Edition, Bordas, Paris 1972).
- [6] : T. Lei, M. Fanciulli, R. J. Molnar, and T. D. Moustakas, Appl. Phys. Lett. 59, (1991) 944.
- [7] : S. Adachi, Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, (John Wiley & Sons, 2005).
- [8] : K. Amara, B. Soudini, D. Rached and A. Boudali, Comp. Mater. Sci. 44, (2008) 635.

III.1. Introduction

Dans ce chapitre, on va présenter les résultats obtenus de notre calcul des propriétés structurales et élastiques du composé TIP dans sa phase zincblende (B3) à l'équilibre et sous l'effet de la pression hydrostatique.

III. 2. Test de convergence

Les calculs ont été effectués en utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et la théorie de la fonctionnelle de densité perturbative (DFPT) combinées avec la méthode du pseudopotentiel implantées dans le code ABINIT [1, 2]. La forme proposée par Hartwigsen-Goedecker-Hutter (HGH) [3] est utilisée pour le pseudopotentiel. Pour le traitement du terme d'échange et de corrélation, en utilisant l'approximation de la densité locale (LDA). Les intégrations dans le réseau réciproque ont été faites en utilisant la méthode de génération des points \mathbf{k} de Monkhorst et Pack [4].

Avant le calcul des différentes propriétés citées précédemment, en faisant des tests de convergence sur deux paramètres essentiels, le premier c'est l'énergie critique "Cut-off Energy" E_{cut} qui joue un rôle très important pour l'obtention de la bonne convergence de l'énergie totale. Les tests montrent qu'une valeur de 80Ha (Figure III. 1 à gauche) est largement suffisante pour obtenir une bonne convergence de l'énergie totale.

Le deuxième test se fait sur le nombre de points \mathbf{k} présent en compte dans l'intégration à travers la zone de Brillouin. Les tests montrent qu'un nombre de 60 points \mathbf{k} (8x8x8) (Figure III. 1 à droite) est suffisant pour obtenir une bonne convergence de l'énergie totale.

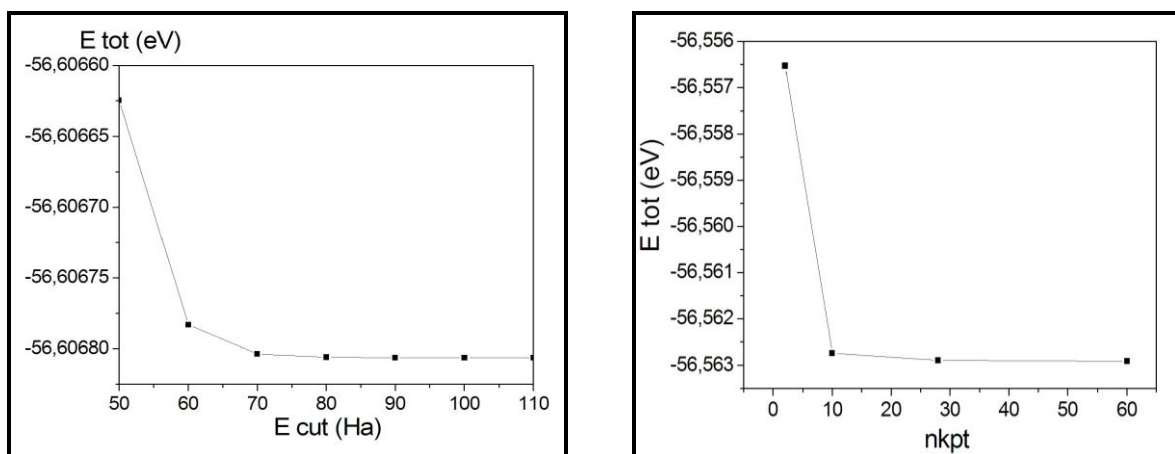


Figure (III.1): Variation de E totale en fonction de E_{cut} et du nkpt du TIP.

Après avoir déterminé l'énergie de cut-off et le nombre de points \mathbf{k} , on les utilise ensuite pour calculer l'énergie totale pour différentes valeurs de la constante de réseau.

III. 3. Résultats obtenus à une pression nulle

III. 3. 1. Propriétés structurales

Les valeurs des énergies calculées pour différentes valeurs du paramètre de réseau sont tracées en fonction du volume de la maille (Figure III. 2). De la courbe $E_{tot}(V)$, on peut déduire les propriétés structurales statiques : la constante de réseau d'équilibre à partir du volume qui donne le minimum d'énergie, le module de rigidité et sa dérivée. La procédure consiste à faire un fit sur les valeurs de E_{tot} en fonction du volume en utilisant l'équation d'état de Murnaghan [5]:

$$E(V) - E(V_0) = \frac{B_0 V}{B_0'} \left[\frac{(V_0/V)^{B_0'}}{B_0' - 1} + 1 \right] - \frac{B_0 V_0}{B_0' - 1} \tag{III.1}$$

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} = \frac{4}{9a} \frac{\partial^2 E}{\partial a^2} \tag{III.2}$$

Où : B c'est le module de rigidité donné par la relation (III.2) à $P = 0$, V_0 : c'est le volume d'équilibre, $E(V_0)$: c'est l'énergie au volume d'équilibre et B_0' : c'est la dérivé du module de rigidité par rapport à la pression P ($B_0' = \partial B / \partial P$ à $P = 0$).

La figure III. 2, montre les variations de E_{tot} en fonction du volume de la maille du matériau (B3) TIP. La valeur du paramètre de maille d'équilibre a_0 est égale 5.96 Å, une valeur de 50.08 GPa pour le module de rigidité, et une valeur de 4.43 pour sa dérivée. Tous ces résultats obtenus, ainsi que les résultats théoriques [6-12] de la constante de réseau, du module de rigidité et de sa dérivée sont portés dans le tableau III.1.

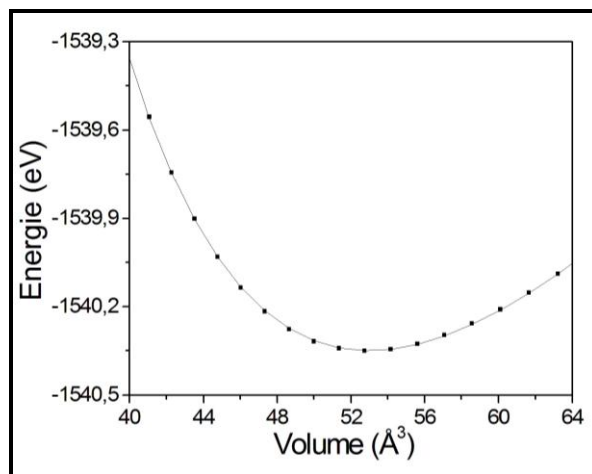


Figure III.2: Evolution de l'énergie totale en fonction du volume de la maille

Notre résultat de la constante de réseau à l'équilibre, $a_0 = 5.96 \text{ \AA}$, elle est égale exactement le résultat théorique de la Réf [11] LDA.

Le module de rigidité obtenu est de l'ordre de 50.08 GPa est aussi raisonnablement en accord les autres valeurs théoriques en particulier la valeur 53.3 GPa de la Réf [10] GGA.

Paramètre	Présent calcul	Autres calculs						
a_0 (Å)	5.96	5.747[6, 7]LDA	6.125[6]GGA	6.124[8, 9]GGA	6.001[10]GGA	5.96[11]LDA		
B_0 (GPa)	50.08	57.536[6]LDA	45.975[6]GGA	71.3[7]	46.75[8, 9]GGA	53.3[10]GGA	57[11]LDA	80.46[12]LDA
B_0'	4.43	4.857[6] LDA	4.401[6] GGA	4.847[7] LDA	4.5 [10] GGA			

Tableau III.1: Constante de réseau, module de rigidité et sa dérivée en comparaison avec d'autres valeurs théoriques [6-12].

La dérivée module de rigidité qu'est de l'ordre de 4.43 est aussi comparable aux valeurs citées dans le tableau III.1 surtout celle de la Réf [6] GGA qu'est de l'ordre de 4.401.

III. 3. 2. Propriétés élastiques

a)- Constantes élastiques

Comme on a déjà vue dans le 2^{ème} chapitre, pour les systèmes cubiques, il n'y en a plus que trois éléments indépendants non nuls : C_{11} , C_{12} et C_{44} . Les valeurs obtenues des constantes élastiques sont portés dans le tableau III.2. Dans le but d'avoir une comparaison, d'autres résultats obtenus par autres calculs [6, 10, 12, 13], des constantes élastiques sont aussi portés dans ce tableau.

Paramètre	Présent calcul	Autres calculs			
C_{11}	82.15	94.63 [6]	75.53[10]GGA	117.85[12]	107.6[13]LDA
C_{12}	47.71	50.75[6]	39.79[10]GGA	61.77[12]	53.2[13]LDA
C_{44}	39.54	38.55[6]	38.77[10]GGA	88.4[12]	53.6[13]LDA

Tableau III.2: Constantes élastiques en GPa en comparaison avec d'autres valeurs théoriques [6, 10, 12, 13].

D'après le tableau III.2, on observe que nos résultats des constantes élastiques sont aussi raisonnablement en accord avec les autres valeurs théoriques et en particulier ceux de la Réf [10] GGA. La déviation entre notre valeur de C_{44} et celle de la Réf [10] GGA est approximativement moins de 2 %.

b)- Module de cisaillement, facteur d'anisotropie et le paramètre de Kleinman:

Comme on a déjà vu dans le 2^{ème} chapitre, pour les systèmes cubiques, le module de cisaillement C_s , le facteur d'anisotropie A et le paramètre interne de déformation ξ sont donnés respectivement par les formules des équations (II.11) et (II.12). Les valeurs obtenues du module de cisaillement, du facteur d' d'anisotropie et du paramètre interne de déformation ξ sont portées dans le tableau III.3. Dans le but d'avoir une comparaison, d'autres résultats obtenus par autres calculs [6, 12, 13] de ces paramètres sont aussi portés dans ce tableau.

Paramètre	Présent calcul	Autres calculs		
C_s	17.22	21.94 [6]	28.0 [12]	27.2 [13]
A	2.30	1.757[6]	3.1526 [12]	1.971 [13]
ξ	0.69	0.599 [13]		

Tableau III. 3: Module de cisaillement en (GPa), facteur d'anisotropie et paramètre de Kleinman en comparaison avec les autres valeurs théoriques [6, 12, 13].

III. 4. Effet de la pression hydrostatique

III. 4. 1. Construction de la courbe P-V

Dans le but d'étudier la dépendance du volume de la maille et la pression hydrostatique du TIP, les volumes de la maille sont calculés pour une série de la pression hydrostatique.

La dépendance du volume de la maille et de la pression hydrostatique du TIP, est représentée sur la figure III.3. A partir de cette figure, on constate que le volume diminue sous forme exponentielle avec l'augmentation de la pression hydrostatique, pour atteindre sa valeur minimale d'environ 49.27 \AA^3 à une pression de 5 GPa.

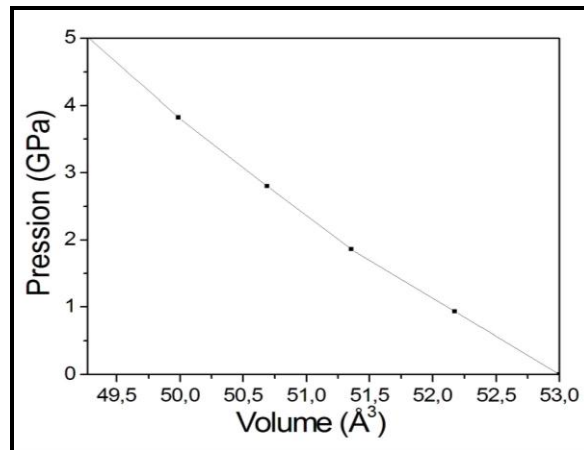


Figure III. 3: Dépendance du volume de la maille et de la pression hydrostatique

III. 4. 2. Densité cristalline

La caractéristique fondamentale d'un matériau dans l'état cristallin est d'être formée d'un arrangement périodique d'atomes ou de molécules. Comme on a déjà vu il ya 4 molécules par maille dans une structure zincblende, la densité cristalline g est donnée par [14]

$$g = \frac{Md_M}{N_A} \quad (\text{III.3})$$

Où : M , c'est la masse moléculaire, d_M c'est la densité moléculaire et $N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ c'est la constante d'Avogadro.

L'évolution de la densité cristalline en fonction de la pression hydrostatique du TIP est présentée sur la figure III.4.

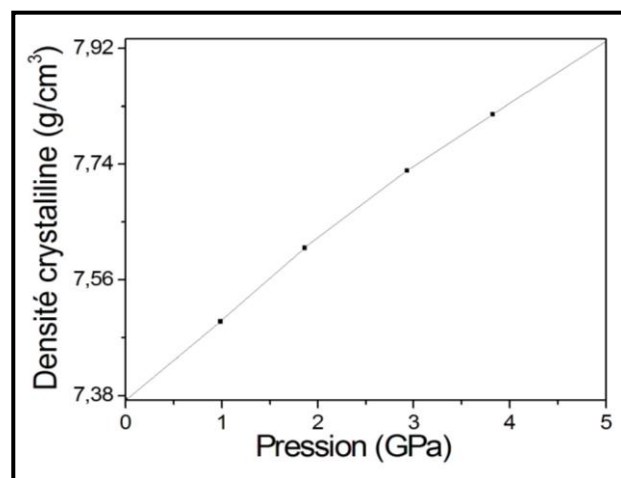


Figure III. 4: Evolution de la densité cristalline en fonction de la pression hydrostatique.

A partir de cette figure, on constate que la densité cristalline augmente avec l'augmentation de la pression hydrostatique, où elle commence avec une valeur de 7.37 g/cm^3 pour pression nulle et atteint sa valeur d'environ 7.94 g/cm^3 à une pression de 5 GPa. On note un manque de données de ce paramètre relatif à ce composé

III. 4. 3. Constantes élastiques

Dans le but d'étudier la dépendance en pression hydrostatique des constantes élastiques C_{ij} , pour ce matériau, on a calculé les variations des C_{ij} en fonction de la pression, ces variations sont montrées sur la figure III.5.

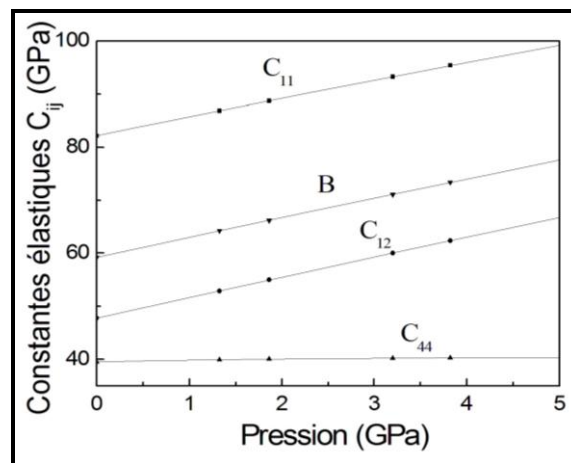


Figure III.5: Evolution des constantes élastiques en fonction de la pression hydrostatique.

À travers cette figure, on constate que les valeurs des constantes C_{11} , C_{12} croissent avec l'augmentation de la pression hydrostatique, alors que les valeurs de la constante C_{44} restent presque invariable avec l'augmentation de la pression.

À travers cette figure, on constate aussi que le module de rigidité varie presque linéairement en fonction de la pression.

Références

- [1]: ABINIT Code, (URL <http://www.abinit.org>).
- [2] : X. Gonze et al. *Z. Kristallogr.*, 220 (2005), 558.
- [3]: C. Hartwigsen, S. Goedecker and J. Hutter, *Phys. Rev. B.* 58(7), 3641 (1998).
- [4]: H. J. Monkhorst and J. D. Pack., *Phys. Rev. B.*, 13 (1976), 5189.
- [5]: F. Murnaghan, *Proc. Nat. Acad. Sci.*, 30 (1944), 244.
- [6]: Y. O. Ciftci, K. Colakoglu and E. Deligoz, *Cent. Eur. J. Phys.*, 6 (4), (2008), 802.
- [7]: S. Q. Wang and H. Q. Ye, *Phys. Rev. B* 66, (2002), 235111.
- [8]: N. Saidi-Houat, A. Zaoui and M. Ferhat, *J. Phys. Condens. Matter.* 19 (10), (2007) 106221.
- [9]: M. Ferhat and A. Zaoui, *Appl. Phys. Lett.*, 88 (16), (2006) 161902.
- [10]: L. Shi, Y. Duan & L. Qin, *Comput. Mater. Sci.*, 50, (2010), 203.
- [11]: M. Van Schilfgaarde, An-Ban Chen, S. Krishnamurthy and Arden Sher, *Appl. Phys. Lett.*, 65 (21), (1994), 2714.
- [12]: S. Singh and M. Sarwan, *J. Phys. Chem. Sol.*, 74, (2013), 487.
- [13]: S. Q. Wang and H. Q. Ye, *Phys. Status Solidi B* 240, (2003) 45.
- [14]: S. Adachi, *Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors*, (John Wiley & Sons, 2005).

Conclusion générale

Ce mémoire a pour but de contribuer à l'étude de certaines propriétés physiques de l'un des matériaux III-V, c'est le composé TIP dans sa phase zincblende. L'essentiel des résultats obtenus sont les suivants :

La constante de réseau, le module de rigidité et la dérivé du module de rigidité sont en bon accord avec les autres résultats théoriques de la littérature.

Les constantes élastiques, le module de cisaillement, le facteur d'anisotropie ainsi que le paramètre de Kleinman, sont aussi obtenus, ils sont en général en accord avec les autres résultats théoriques de la littérature.

Les effets de la pression hydrostatique sur la réduction en volume de la maille, sur les variations des constantes élastiques et sur la densité cristalline, sont ainsi étudiés.

I. Utilisation du code ABINIT

➤ Fichiers de données

Il faut préparer un dossier qui contiendra les noms des fichiers de données et de sortie, ainsi que le chemin et les noms des fichiers contenant les pseudopotentiels.

On l'appelle "test.files". Il se présente comme suit :

```
test.in
test.out
testi
testo
test
81t1.13.hgh
15p.5.hgh
```

Le fichier d'entrée qu'on va utiliser dans cette étape, représente la partie axiale de notre étude.

➤ Le lancement d'un calcul en interactif :

En mode séquentiel : *abinis<test.files> log*

II. Procédure de simulation :

Pour exécuter un code Abinit, nous aurons besoin de 4 types de fichiers :

Fichier d'entrée (.in), fichier de type (.files), fichier exécutable tel que : (abinis.exe), et les fichiers des pseudopotentiels des atomes du matériau à étudier.

Il est à noter que le code abinit contient dans son répertoire « Tutorial » des fichiers typiques de type (.in) et de type (.files). En effet, nous nous sommes basés dans le présent travail sur les fichiers qui sont conçus spécialement pour le cristal du silicium. Par conséquent, nous avons fait tous les changements nécessaires pour les adoptés à notre matériau en question (TIP)

II-1. Etude de convergence :

A-L'énergie de coupure :

- 1^{ère} étape : on a besoin de 4 fichiers : fichier d'entrée nommé "tlpcut.in", fichier files nommé "tlpcut.files", les deux fichiers des pseudopotentiels des atomes Tl et P, et le fichiers exécutable (abinise.exe).
- 2^{ème} étape : pour effectuer la convergence par rapport à Ecut, il suffit d'ajouter les instructions suivantes sur le fichier "tlpcut.in"

Ces instructions montrent que le calcul sera effectué 6 fois avec un pas de 10.

- **3^{ème} étape** : exécuter le code, par l'instruction :
`abinis<tlpcut.files>log.`

```
ndtset 6
acell 3*10.18

rprim 0.0 0.5 0.5
      0.5 0.0 0.5
      0.5 0.5 0.0

ntypat 2
znucl 81 15
typat 1 2
ecut: 50.0 ecut+10
ngkpt 8 8 8
nstep 100
```

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

B-Le nombre de point k :

- **1^{ère} étape** : on a besoins de 4 fichiers : fichier d'entrée nommé "tlpkpt.in", fichier files nommé " tlpkpt.files" successivement, les deux fichiers des pseudo potentiels des atomes Tl et P et le fichier exécutable (abinis.exe).

- **2^{ème} étape** : on fait les changements suivants sur le fichier "tlpkpt.in".

Après avoir exécuté le code, par l'instruction :

`abinis<tlpkpt.files> log`

```
ndtset 4
acell 3*10.18
ntypat 2
znucl 81 15
natom 2
typat 1 2
ecut: 80.0
ngkpt1 4 4 4
ngkpt2 6 6 6
ngkpt3 8 8 8
ngkpt4 10 10 10
nstep 100
```

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

II-2. Optimisation de paramètre de maille :

Après avoir déterminer l'énergie de coupure critique ainsi que le nombre de point spéciaux, qui donnent la meilleure convergence possible de l'énergie totale pour le matériau TIP, nous pouvons maintenant passer à la détermination du paramètre de maille.

- **1^{ère} étape** : on a besoin de 4 fichiers :

Fichier d'entrée "t1pa.in" fichier files nommé "t1pa.files ", les deux fichiers des pseudo potentiels des atomes Tl et P et le fichier exécutable (abinis. exe).

- **2^{ème} étape :** on fait les changements suivants sur le fichier "t1pa.in" :

abinis<t1pa.files> log

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

```
ndtset 11
acell      3*10.2
acell+0.2  0.2  0.2
rprim 0.0  0.5  0.5
          0.5  0.0  0.5
          0.5  0.5  0.0
ntypat 2
znucl 81  15
natom 2
typat 1 2
ecut 80.0
ngkpt 8 8 8
nstep 100
```

II-3. Propriétés élastique :

- **1^{ère} étape :** on a besoin de 4 fichiers : fichier d'entrée " telast2.in", fichier files "telast2.files", qui sont renommer " elatlp.in" et "elatlp.files" successivement, les deux fichiers des pseudopotntiels des deux atomes Tl et P, et les fichiers exécutables (abinis.exe).

Après avoir exécuté le code, par l'instruction :

abinis<elatlp.files> log

- **2^{ème} étape :** après la réalisation de la première étape, on fait lancer le calcul de la 2^{ème} étape, on fait exécuter le code, par l'instruction : *anaddb<telast_3.files> log*.

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

```
ndtset3
rfatpol3 1 2
acell 3*11.25
rprim 0.0  0.5  0.5
          0.5  0.0  0.5
          0.5  0.5  0.0
ntypat 2
znucl 81  15
natom 2
typat 1 2
xred
          0.0  0.0  0.0
          0.25 0.25 0.25
ecut 80.0
ngkpt 8 8 8
nline 20
nstep 100
```

Résumé

Dans ce mémoire, nous avons étudié les propriétés structurales et élastiques d'un composé (TIP) 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 de pseudopotentiel. Les équations de Kohn-Sham ont été résolues d'une manière self consistante en utilisant une base d'ondes planes implantée dans le code ABINIT. Dans le traitement du terme d'échange et de corrélation, nous avons utilisé l'approximation de la densité locale LDA. Nos résultats sont en bon accord avec les valeurs calculées par d'autres techniques ab-initio.

Abstract:

In this work, we present a first principle study on the structural and elastic properties of (TIP) compound, which crystallize in the zincblende structure. In all the study, we have used ab-initio calculations based on the Density Functional Theory DFT combined with the pseudopotential method. The resolution of the Kohn-Sham equations is performed self-consistently by using a plane wave basis as implemented in the ABINIT code. For the exchange and correlation potential term, we have used Local Density Approximation (LDA) scheme. Our obtained values are in good agreement with the previous theoretical Ab-initio calculations.

ملخص:

في هذا العمل قدمنا دراسة عامة حول الخواص البنيوية و المطاطية و للمركب TIP التي تتبلور على الشكل البلوري ZnS . في كل الدراسة قمنا باستعمال حساب من المبدأ الأول الذي استخدمنا فيه نظرية DFT مركبة مع طريقة الكمون الكاذب . معادلات كوهن و شام حلت بطريقة التناسق الذاتي باستعمال الأمواج المستوية المدخلة في الشفرة ABINIT. لقد استخدمنا في هذه الدراسة التقريب LDA من اجل تمثيل التفاعل التبادلي و التداخلي. حصلنا على نتائج متفقة إلى حد كبير مع النتائج النظرية الأخرى.

ف