



République Algérienne Démocratique et Populaire



Université Laarbi Ben Mehidi Oum El Bouaghi  
Faculté des Sciences Exactes et Sciences de La Nature et de La Vie

Département Des Sciences de la Matière

N° d'ordre :M... / 2019

## MEMOIRE

Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option : Physique des matériaux

**Propriétés structurales et élastiques de LiMgN, LiMgP et LiMgAs**

Présenté Par : - Merzouk Romaissa

-Titou Rawiya

Sous la direction de : **Dr. Abdallah Mellouki**

Soutenu le : 29 -06 – 2019

Devant le jury de soutenance suivant :

**-Dr. Goumeidane Fayçal**

**Université Laarbi Ben Mehidi OEB**

**-Dr.Bouaicha Faiza**

**Université Laarbi Ben Mehidi OEB**

Année universitaire : 2018-2019



## Remerciement

Avant tout ; Nous devons remercier Dieu le tout puissant qui m'a donnée la force, le courage de mener à terme ce travail.

Nous remercions particulièrement notre encadreur **Mellouki Abdallah** pour avoir proposé le sujet et pour avoir dirigé ce travail, il a toujours par sa modestie été à l'écoute ; très disponible qu'il veuille trouver ici l'expression de nos sincère gratitude pour ces conseils, sa gentillesse et sa patience son encouragement durant la réalisation de ce mémoire ainsi pour le temps précieux qu'il a bien voulu nos consacrer et sans lui ce mémoire n'aurait jamais vu le jour.

Un grand merci aux membres de jury qui ont bien voulu accepter d'examiner et juger notre travail de recherche «**Dr Goumeidane Fayçal et Dr.Bouaicha Faiza**».

Nous remercions tous les enseignants de la faculté de **SM** et **SNV** de l'université d'Oum El Bouaghi.

A tous les membres des organismes extra-universitaire qui ont participé chacun pour sa part à la réalisation de ce mémoire.

Un grand merci spécialement à tous mes collègues pour la bonne ambiance, qui a régné au sein de département, leur respecte leur esprit solidaire.

Merci à ceux qui m'ont tout donné

Sans rien en retour

# Table des matières

Introduction générale.....	1
<i>Références Introduction:</i> .....	4
Chapitre I.....	5
Cadre théorique.....	5
I.1 Introduction .....	5
I.2 L'équation de Schrödinger .....	5
I.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer.....	6
I. 2.2 Approximation de Hartree.....	6
I.2.3 Approximation de Hartree-Fock.....	7
I.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) .....	8
I.3.1 La DFT comme une théorie de plusieurs corps : Le théoreme de Hohenberg-Kohn..	8
I.3.2 Méthode de Kohn et Sham.....	9
I.3.3 La fonctionnelle de l'échange-corrélation .....	10
I.3.3.1 Approximation de la densité locale (LDA) .....	10
I.4 La théorie de la perturbation du la fonction de la densité .....	10
I.5 Pseudo potentiels.....	11
I.5.1 Le pseudopotentiels à norme conservée.....	12
I.5.2 Les pseudopotentiels de Trouilier et Martins .....	14
I.6 Référence I.....	16
Chapitre II .....	17
Propriétés élastiques .....	17
II.1 Introduction.....	17
II.2Tenseur de contrainte et de déformation .....	17
II.3 loi de Hooke .....	18
II.4 quelques définitions.....	19

<b>a/ Module de compressibilité(B)</b> .....	19
<b>b/ Module de cisaillement(G)</b> .....	20
<b>c/ Module de Young (E)</b> .....	20
<b>d/ Coefficient de poisson</b> .....	20
<b>e/ Température de Debye</b> .....	20
<b><i>II-5 Références II</i></b> .....	22
<b>Chapitre III</b> .....	23
<b>Résultats et discussions</b> .....	23
<b>III-1 Détails de calcul</b> .....	23
<b>III-2 Propriétés structurales</b> .....	23
<b>III-3 Propriétés élastiques :</b> .....	30
<b><i>III-4 Références III</i></b> .....	37
<b>Conclusion</b> .....	39
<b>Résumé</b> .....	40

## Liste des Tableaux

<b>Tableau 3.1:</b> Paramètre structuraux ; paramètre de réseau $a_0$ en (Å), module de compression B en (GPa) et sa dérivé B' de LiMgN, LiMgP et LiMgAs dans les trois phases. ....	30
<b>Tableau 3.2:</b> Constantes élastiques (en GPa), module de compressibilité de l'équation II-12 (en GPa) pour les 3 composés et dans les 3 phases. ....	31
<b>Tableau 3.3:</b> Vitesse du son (en Km/s) dans les différentes directions de propagation pour les 3 composés. ....	33
<b>Tableau 3. 4:</b> Module de cisaillement G (en GPa), module de Young E (en GPa), Coefficient de poisson $\nu$ et le rapport B/G pour les 3 composés (Les valeurs de B de l'équation II-13). ....	34
<b>Tableau 3. 5:</b> Vitesse longitudinale VL (Km/s), vitesse transversale VT (Km/s), vitesse moyenne $V_{moy}$ (Km/s) et température de Debye $\theta_D$ (K°) de LiMgX. ....	34
<b>Tableau 3.6 :</b> Fréquence de Debye (en $cm^{-1}$ ) pour LiMgX dans les lignes de haute symétrie de la première zone de Brillouin. ....	35

## Table des figures

3.1	Structure cristalline d'un semiconducteur à liaison tétraédrique.....	24
3.2	Energie totale en fonction de volume pour LiMgX.....	26
3.3	Enthalpie en fonction de la pression pour LiMgX.....	29
3.4	Les branches acoustiques des composés LiMgX.....	36

## Tableau des indices

DFT : La théorie de la fonctionnelle de la densité.

DFPT : La théorie de la fonctionnelle de la perturbation de la densité.

PP-PW : Méthode Pseudopotentiel-ondes planes.

LDA : L'approximation de la densité locale.

$\sigma_{ij}$ : Tenseur de contrainte.

$\varepsilon_{ij}$ : Tenseur de déformation.

$S_{ij}$  : Constantes d'élasticité.

$C_{ijkl}$ : Constantes élastiques.

B : Module de rigidité.

G : Module de cisaillement.

$G_V$  : Module de cisaillement de Voigt.

$G_R$ : Module de cisaillement de Reuss.

E : Module de Young.

$\sigma$  : Coefficient de Poisson.

$\theta_D$ : Température de Debye.

$\hbar$ : est la constante de planck.

$K_B$ : est la constante de Boltzman.

$\omega_D$ : Fréquence de Debye.



## Introduction générale

Les semiconducteurs ont acquis une importance considérable dans la société, ils sont à la base de tous les composants électroniques et optoélectroniques qui entrent dans les dispositifs informatiques, de télécommunication et de télévision.....etc, à ce moment toute une ingénierie s'appuyant sur le progrès des techniques de fabrication et des connaissances acquises sur les propriétés fondamentales des semiconducteurs.

Par définition en classe deux familles des semiconducteurs, la première, sont les semiconducteurs élémentaires ; sont des cristaux constitués d'un seul élément chimique de la colonne IV de la classification périodique (Si, Ge, Se.....) où les liaisons chimiques sont covalentes. La deuxième famille est formée de plusieurs éléments par exemple : des composés binaires peuvent être constitués par deux éléments différents de la colonne IV (SiC, SiGe...), des éléments des colonnes III et V (zinc-blende) tels que AlN, GaAs, InP....., ou encore des éléments des colonnes II et VI (ZnS, CdS.....), on peut également trouver des alliages de type ternaires (AlGaAs) et quaternaire (InGaAsP).

Parmi les semiconducteurs ternaires de la deuxième famille, les composés  $A^I B^{II} C^V$  ( $A^I=Li$ ,  $B^{II}=Mg$  et  $C^V=N, P, As$ ) qui sont connus sous le nom Nowotny-Juuzza [1,2] appartient à la classe des composés à liaison tétraédrique remplie synthétisés au milieu vingtième siècle (1940-1950).

Ces composés peuvent être caractérisés comme des matériaux binaires hypothétiques ( $A^I B^{II}$ ) remplis par les ions  $Li^+$ . L'intérêt de ces composés a été renouvelé par la prédiction de Wood et al. [3] et Carlsson et al. [4] et d'autres travaux expérimentales [5-7].

Les composés  $LiMgX$  ( $X=N, P, As$ ) des membres de cette classe des semiconducteurs montrent leur stabilité dans la structure cubique [8-10], leur propriétés électroniques ont été étudiées expérimentalement par Kuriyama et al. [9,11] et théoriquement par Yu et al. [12,13].

Utilisant le premier principe (*ab-initio*) les propriétés structurales et élastiques dans les phases possibles ( $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ ) de la structure cubique des deux composés  $LiMgP$  et  $LiMgAs$  sont calculées par Soyalo et al. [14].

Nous présentons dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité en conjonction avec la méthode du pseudopotentiel et les ondes planes (PP-PW) implémenté

dans le code abinit [15,16] une étude des propriétés structurale et élastiques des semiconducteurs LiMgN, LiMgP et LiMgAs dans les trois phases  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ .

Ce mémoire contient trois chapitres, le premier contient la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et la théorie de la perturbation de la fonctionnelle de la densité (DFPT) ainsi que l'approximation de la densité locale (LDA), le deuxième chapitre présente une notion générale de la loi de Hooke et les propriétés élastiques et une définition de quelques grandeurs mécaniques liées, et dans le dernier chapitre une discussion et interprétation des résultats obtenus et finalement une conclusion est donnée.

### ***Références Introduction:***

- [1] H. Nowotny and K. Backmayer, *Monatsh. Chem.* 81, 488 (1950).
- [2] R. Juza, K. Langer and K. Von Benda, *Angew. Chem. Int. Ed. Eng.* 7 360 (1968).
- [3] D. M. Wood, A. Zunger and R. de Groot, *Phys. Rev. B* 31,2570 (1985).
- [4] A.E. Carlsson, A. Zunger, D.M. Wood, *Phys. Rev. B* 32 1386 (1985).
- [5] K. Kuriyama and K. Kushida, *J. appl. Phys.* 87, 2303 (2000).
- [6] R. Bacewicz and T. F. Ciszek, *Appl. Phys. Lett.* 52,1150 (1988).
- [7] R. Bacewicz and T. F. Ciszek, *Mat. Res. Bull.* 23, 1247 (1988).
- [8] S.-H. Wei, A. Zunger, *Phys. Rev. Lett.* 56 528 (1986).
- [9] K. Kuriyama, K. Kushida, R. Taguchi, *Solid State Commun.* 108 429 (1998).
- [10] K. Kuriyama, T. Katoh, *Phys. Rev. B* 37- R7140 (1988).
- [11] K. Kuriyama, K. Nagasawa, K. Kushida, *J. Cryst. Growth* 237 (2002) 2019.
- [12] L.H. Yu, K.L. Yao, Z.L. Liu, *Physica B* 353 278 (2004).
- [13] L.H. Yu, K.L. Yao, Z.L. Liu, *Solid State Commun.* 135 124 (2005).
- [14] F. Soyalt, G. Uğur, H.c. Şen and M.R. Ellialtıođlu, *J. Allo and comp.* **551**, 108 (2013).
- [15] X. Gonze, J. M. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G. M. Rignanese, L. Sindic, M. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, Ph. Ghosez, J. Y. Raty and D. C. Allan, *Comput. Mater. Sci.* 25, 478 (2002).
- [16] 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 and D. C. Allan, *Z. Kristallogr.* 220, 558 (2005).

# Chapitre I

## Cadre théorique

### I.1 Introduction

Nous commençons ce chapitre par un rappel sur l'équation de Schrödinger qui est le point de départ de tous les développements des méthodes de calcul ab-initio et décrire brièvement l'approximation de Born-Oppenheimer, la théorie de Hartree et la théorie de Hartree-Fock. Par la suite nous présentons les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**). Pour le traitement de l'interaction électron-électron nous avons utilisé l'approximation de la densité locale **LDA** et pour le traitement de l'interaction électron de cœur-électron de valence nous avons utilisé la théorie du pseudo potentiel (**PP**).

### I.2 L'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est l'équation de base de la physique théorique des solides. Elle permet de trouver les énergies et les fonctions d'onde associées aux régimes stationnaires d'un système unique composé par des particules légères (électron) et lourds (noyaux) l'état stationnaire des particules est décrit par l'équation de Schrödinger suivante :

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad (\text{I.1})$$

Ou  $\hat{H}$  est l'Hamiltonien du cristal  $\psi$ : est la fonction d'onde du système et  $E$ : l'énergie propre du cristal.

Le problème général peut être posé sous la forme d'une équation du mouvement de toutes les particules présentées dans le cristal. L'Hamiltonien exacte du cristal (non relativiste) résulte de la présence des forces électrostatique d'interaction ; répulsion suivant la charge des particules (ions-électrons).

$$\hat{H}_{tot} = \hat{T}_N + \hat{T}_e + \hat{V}_{N-N} + \hat{V}_{N-e} + \hat{V}_{e-e} \quad (\text{I.2})$$

$$\hat{T}_N = \sum_{\alpha} \hat{T}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}} : \text{L'énergie cinétique totale de noyaux.}$$

$$\hat{T}_e = \sum_{i=1}^{Ne} \hat{T}_i = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{Ne} \nabla_i^2 : \text{L'énergie cinétique totale des électrons.}$$

$$\hat{V}_{\alpha-\beta} = \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha-\beta}} : \text{L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.}$$

$\hat{V}_{\alpha-e} = - \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{\alpha=1}^{N_\alpha} \frac{Z_\alpha}{\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha}$  : L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électron.

$\hat{V}_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{ij=1} \frac{1}{\vec{r}_i - \vec{r}_j}$  : L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

La solution d l'équation (I.1) avec  $\hat{H}_{tot}$  conduit à la résolution d'un problème à N corps.

Il est simple décrire l'Hamiltonien  $\hat{H}$  d'un cristal par contre il est impossible de résoudre exactement l'équation de Schrödinger. Il faut donc passer à des approximations.

### I.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer

Selon Born et Oppenheimer [1] l'équation de Schrödinger peut être simplifié du faite que la masse des électrons est très faible (négligeable) devants celle des noyaux. L'énergie cinétique des noyaux et ainsi négligée et l'énergie d'interaction des noyaux deviennent constante. Cette énergie peut être choisie comme une nouvelle origine des énergies.

L'Hamiltonien est réécrire sous cette forme :

$$\hat{H}_{el} = \hat{T}_e + \hat{V}_{n-e} + \hat{V}_{e-e} \quad (I.3)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer est adiabatique car elle consiste a séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau.

Cette approximation ne suffit pas à résoudre l'équation de Schrödinger à cause de la complexité des interactions électrons-électrons. C'est pourquoi elle souvent couplée à l'approximation de Hartree [2].

### I. 2.2 Approximation de Hartree

Le traitement consiste à résoudre le problème de N corps à celui d'une seule particule, dans cette approximation, on considère les électrons comme indépendants, chacun d'eux se mouvant dans le champ moyen crée par les autres électrons et par les noyaux.

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

$$\hat{H}_i \cdot \psi(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (I.4)$$

Ou l'Hamiltonien  $\vec{H}_i$  à un électron s'écrit :

$$\vec{H}_i = -\frac{1}{2} \nabla_i + \hat{V}_{ext}(\vec{r}) + \hat{V}_i(\vec{r}) \quad (I.5)$$

Où :  $\widehat{V}_{ext}(\vec{r})$  représente à la fois le potentiel dû aux interactions noyaux-noyaux et celles des autres électrons-noyaux dans le système, et

$$\widehat{V}_i(\vec{r}) = \int \frac{\rho_i(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3\vec{r}' \quad (I.6)$$

L'équation (I.6) représente le potentiel de Hartree pour le i ème électron qui remplace l'interaction électrostatique électrons-électrons avec tous les autres électrons.

La densité d'électrons  $\rho_i(\vec{r})$  dans l'équation (1.6) est donnée par :

$$\rho_i(\vec{r}) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{Ne} |\psi_j(\vec{r})|^2 \quad (I.7)$$

Où : la somme est faite sur les Ne états mono-électronique occupés.

En substituant les équations (1.5), (1.6) et (1.7) dans (1.4), on trouve l'équations de Hartree pour un système mono-électronique:

$$\left[ \frac{1}{2} \nabla_i + \widehat{V}_{ext}(\vec{r}) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{Ne} \int \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3(\vec{r}') \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (I.8)$$

Le potentiel de Hartree  $\widehat{V}_i(\vec{r})$  donnée par l'équation (I.6), qui détermine les fonctions d'ondes mono-électronique  $\psi_i(\vec{r})$  est exprimé en terme de ces meme fonctions d'ondes selon l'équation (I.7).

C'est la raison pour laquelle cette approche est appelée approximation du champ auto cohérent.

L'équation de Hartree obtenue sera simple à résoudre, mais ne donnera pas de très bons résultats. Le défaut principal est que la fonction d'onde de Hartree ne satisfait par le principe d'exclusion de Pauli. E si on fait intervenir le principe de Pauli on aboutit à l'équation de Haetree-Fock [3].

### I.2.3 Approximation de Hartree-Fock

Afin de tenir compte du principe d'antisymétrie imposant à la fonction d'onde  $\psi$  de changer de signe au cours de la permutation de deux électrons, Haetree 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 Salter » [4].

$$\psi(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1, \dots, \vec{r}_{Ne}\vec{\sigma}_{Ne}) = \frac{1}{\sqrt{Ne!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_1(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \dots & \psi_1(\vec{r}_{Ne}\vec{\sigma}_{Ne}) \\ \psi_2(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_2(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \dots & \psi_2(\vec{r}_{Ne}\vec{\sigma}_{Ne}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_{Ne}(\vec{r}_1\vec{\sigma}_1) & \psi_{Ne}(\vec{r}_2\vec{\sigma}_2) & \dots & \dots & \psi_{Ne}(\vec{r}_{Ne}\vec{\sigma}_{Ne}) \end{vmatrix} \quad (I.9)$$

Où :  $\vec{\sigma}_i$  représente le spin.

La fonction  $\psi$  donnée par l'équation (I.9) conduit aux équations de Hartree-Fock pour un système à une particule :

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \hat{V}_{ext}(\hat{r}) + \sum_{\substack{j=i \\ j \neq i}}^{Ne} \int \frac{|\psi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d^3(\vec{r}') - \sum_{\substack{j=i \\ j \neq i}}^{Ne} \delta_{\sigma_{ij}} \int \frac{|\psi_j(\vec{r}')\psi_i(\vec{r}')|}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] \quad (I.10)$$

$$\psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\vec{r})$$

Avec :  $\delta_{\sigma_{ij}}$  représente le symbole de Kronecker.

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 [5].

### I.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle la densité [5-9] est basée sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn, qui stipulent que l'énergie totale E d'un système d'électrons en interaction non spin-polarisés sous l'influence d'un potentiel externe est donnée de la manière exacte par une fonctionnelle de la densité électronique à l'état fondamental.

#### I.3.1 La DFT comme une théorie de plusieurs corps : Le théorème de Hohenberg-Kohn

Le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est basé sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn[6].

- Pour un système d'électrons en interaction, le potentiel externe  $V_{ext}(\vec{r})$  est déterminé de façon unique, par la densité électronique de l'état fondamental  $\rho_0(\vec{r})$ . Toutes les propriétés du système sont déterminées par la densité électronique à l'état fondamental  $\rho_0(\vec{r})$ .

- L'énergie totale du système peut alors s'écrire comme une fonctionnelle de la densité électronique,  $E = E[\rho(\vec{r})]$ , et l'énergie de l'état fondamental est égale au minimum global de cette fonctionnelle pour lequel  $\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r})$ .

$$E[\rho_0(\vec{r})] = \min E[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.11})$$

La fonctionnelle de l'énergie totale de l'état fondamental s'écrit comme suit

$$E[\rho(\vec{r})] = F[\rho(\vec{r})] + \int \hat{v}_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3\vec{r} \quad (\text{I.12})$$

Ou :  $\hat{v}_{ext}(\vec{r})$

représente le potentiel externe agissant sur les particules,

Et représente la fonctionnelle universelle de Hohenberg et Kohn, avec :

$$F[\rho(\vec{r})] = \langle \psi | \hat{T} + \hat{V} | \psi \rangle \quad (\text{I.13})$$

La connaissance de cette fonctionnelle permet de déterminer l'énergie totale et la densité de charge de l'état fondamental pour un potentiel externe donné, en utilisant le principe variationnel.

Malheureusement, le théorème de Hohenberg et Kohn ne donne aucune indication de la forme de cette fonctionnelle universelle  $F[\rho(\vec{r})]$ .

### I.3.2 Méthode de Kohn et Sham

La théorie de Kohn-Sham proposée en 1965 [5] est basée sur l'hypothèse qu'il est possible de reproduire la densité d'état fondamental d'un système de particules en interaction par un système auxiliaire constitué de particules indépendantes.

Kohn et Sham ont proposé d'écrire l'énergie comme une fonctionnelle de la densité de la façon suivante :

$$E_{DFT}[\rho] = T_s[\rho] + E_{ne}[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (\text{I.14})$$

Ou  $T_s[\rho]$  est l'énergie cinétique d'un gaz d'électron sans interaction (dont l'expression analytique est connue).

$E_{ne}[\rho]$  est l'énergie d'interaction entre les noyaux et la densité électronique.

$J[\rho]$  est l'intégrale de coulomb et  $E_{xc}[\rho]$  est appelé la fonctionnelle d'échange-corrélation. C'est une fonctionnelle universelle (car elle ne dépend pas de position des noyaux), qui représente les effets négligés dans les autres termes de l'équation (I.14). Elle est donnée par :



$$E_{xc}[\rho] = (T[\rho] - T_s[\rho]) + (E_{ee}[\rho] - J[\rho]) \quad (\text{I.15})$$

Où :  $T[\rho]$  est l'énergie cinétique exacte du système.

$E_{ee}[\rho]$  Est l'énergie d'interaction électronique exacte.

Les trois premiers termes de l'équation (I.14) sont des expressions analytiques simples de la densité électronique. Pour faire un calcul **DFT**, on se donne alors une expression apportée de la fonctionnelle d'échange-corrélation.

### I.3.3 La fonctionnelle de l'échange-corrélation

Le but de la méthode de la fonctionnelle de la densité est la détermination de la fonctionnelle d'échange-corrélation. C'est le dernier terme pour lequel nous ne connaissons pas d'expression en fonction de la densité ou les orbitales. La recherche d'approximation précise pour l'échange -corrélation est toujours d'actualité et nous ne présentons ici que les fonctionnels standards, qui ont déjà été largement utilisés.

#### I.3.3.1 Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale consiste à traiter un système inhomogène [10-12], comme localement homogène (gaz uniforme d'électrons en interaction où  $\rho$  est constante) ; par suite l'énergie d'échange et de corrélation dépend uniquement de la densité électronique en un point  $\mathbf{r}$ , négligeant toute influence de l'inhomogénéité du système (on considère que la densité varie très lentement).

Elle s'exprime en fonction de l'énergie d'échange et de corrélation par particule.

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \varepsilon_x[\rho(r)] \rho(r) d^3r \quad (\text{I.16})$$

La **LDA** suppose que la fonctionnelle de  $\varepsilon_{xc}$  est purement locale. Cette énergie est divisée en :

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \quad (\text{I.17})$$

### I.4 La théorie de la perturbation du la fonction de la densité

Supposons qu'on a résolu les équations de Kohn-Sham pour un cristal caractérisé par un potentiel  $\hat{V}_i(\vec{r})$ , ajoutons maintenant à  $\hat{V}_i(\vec{r})$  une perturbation de périodicité donnée  $\mathbf{q}$ . Le potentiel auto cohérent sera :  $V_{scf} \rightarrow V_{scf} + \Delta V_{scf}^q$

Si on suppose que  $\Delta V_{scf}^q$  est connu, la variation linéaire de la densité électronique  $\Delta n$  est obtenue par la théorie de la perturbation au premier ordre :

$$\Delta \tilde{n}(q + G) = \frac{4}{N\Omega} \sum_{\mathbf{K}} \sum_{c,v} \frac{\langle \psi_{v,k} | e^{-i(q+G)r} | \psi_{c,k+q} \rangle \langle \psi_{c,k+q} | \Delta V_{scf}^q | \psi_{v,k} \rangle}{\epsilon_{v,k} - \epsilon_{v,k+q}} \quad (\text{I.18})$$

Où  $\Delta \tilde{n}(q + G)$  est le transformé de Fourier de  $\Delta n(\mathbf{r})$ ,  $\Omega$  est le volume de la cellule élémentaire, v et c indiquent respectivement les bandes de valence et de conduction, et la somme sur  $\mathbf{K}$  couvre la première zone de Brillouin. Dans ce cas on assume que le cristal à des bandes de valence doublement occupées et des bandes de conduction vides.

Ces bandes de valence et de conduction sont séparées par un gap. D'autre part, si  $\Delta n$  est connue,  $\Delta V_{scf}$  peut être obtenu par linéarisation de l'équation :

$$\Delta V_{scf}^q(r) = \Delta V_{bare}^q(r) + e^2 \int \frac{\Delta n(r')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dr' + \Delta n(r) \left[ \frac{dv_{xc}}{dn} \right]_{n=n_0} \quad (\text{I.19})$$

Où  $n_0$  est la densité non perturbée, il faut remarquer que la réponse linéaire à une perturbation de  $q$  donné contient seulement les composantes de Fourier des vecteurs d'ondes  $q+G$ . les équations (I.18) et (I.19) forment un système qui peut être résolu par une méthode itérative.

## I.5 Pseudo potentiels

Les pseudopotentiels ont été créés en partant du constat que les fonctions d'onde ont des comportements très différents en fonction de la région dans laquelle on les considère, elles présentent des variations très rapides près du noyau, plus loin de celui-ci, par exemple, les fonctions d'ondes atomiques 3s, ont une partie radiale qui présente deux nœuds. Elles oscillent donc beaucoup près du cœur. Pour bien décrire ces fonctions d'onde un grand nombre d'ondes planes est nécessaire.

Les pseudopotentiels sont utilisés pour contourner ce problème, on sépare les électrons de l'atome en électrons de cœur et en électrons de valence. Les électrons de valence sont les électrons des couches les plus externes qui interviennent dans la liaison chimique, les électrons de cœur sont les électrons des couches internes, plus proche du noyau et donc peu sensibles à l'environnement chimique de l'atome ; ils peuvent être donc considérés comme gelés. On a alors un ion rigide formé du noyau et des électrons de cœur, en interaction avec les électrons de valence.

En plus de cette séparation entre électrons de cœur et de valence l'idée des pseudopotentiels est de construire des potentiels pour les électrons de valence de telle sorte que les pseudo-fonctions d'onde associées varient le moins possible dans la région de cœur. La fonction d'onde non pseudo est appelée fonction d'onde « all-electron », pour la distinguer de la pseudo-fonction d'onde.

Les pseudopotentiels ont les caractéristiques suivantes :

- 1) Les valeurs propres de l'Hamiltonien construit à partir des pseudopotentiels doivent être les mêmes que les valeurs propres de l'Hamiltonien « all-electron » (pour les énergies des états de valence).
- 2) A l'extérieur de la région de cœur, les pseudo-fonctions d'onde coïncident.

Ces pseudo-fonctions (des fonctions propres aussi régulières que possible en accord avec les fonctions d'ondes atomiques au-delà d'un certain rayon choisi appelé rayon de coupure  $r_c$ ) possèdent les mêmes propriétés de diffusion (les mêmes dérivées logarithmique) que les fonctions d'ondes réelles. On leur demande d'avoir la plus grande transférabilité possible c'est-à-dire qu'ils soient utilisables dans le plus grand nombre possible de systèmes c'est-à-dire dans des environnements thermodynamique différents.

Il existe trois grands types de pseudo potentiels, qui ont chacun leurs avantages et leurs inconvénients.

- Les pseudo-potentiels à norme conservée introduits par Haman et al. [13]
- Les pseudo-potentiels ultra-lisses introduits par Vanderbilt et al. [14]
- Les pseudo-potentiels « dual –spaceb Gaussien » introduit par Geodecker et al.[15,16]

Nous avons choisi utiliser les pseudopotentiels à norme conservée pour leur simplicité conceptuelle d'utilisation et de mise en œuvre numérique.

### **I.5.1 Le pseudopotentiels à norme conservée**

L'efficacité et la sophistication des pseudopotentiels se sont développées considérablement depuis la construction de phillips-kleiman. Cette évolution a été motivée en vue des buts suivants :

1. décrire les pseudo-fonctions d'ondes par un nombre fini d'ondes planes avec les quelles une bonne convergence est obtenue.

2. Augmenter leur transférabilité ; qui signifie qu'un pseudopotentiel généré pour une configuration atomique donnée doit reproduire les autres avec exactitudes.

3. Reproduire avec la pseudodensité de la charge (la densité de charge construite en utilisant les pseudofonctions d'onde) la densité de charge de valence aussi exactement que possible.

Le concept de la norme conservée [16], Starkloff et Joannopoulos [17] a permis la réconciliation du conflit de ces deux derniers buts. Avec les pseudopotentiels à norme conservée, les pseudopotentiels d'onde (et potentiel) sont construites de façon à être égales aux fonctions d'ondes de valence exactes (et potentiel) en dehors d'un certain rayon du cœur  $r_c$ . A l'intérieur de  $r_c$ , les pseudofonctions d'onde diffèrent des vraies fonctions d'onde, mais la norme est contrainte d'être la même. Ceci se traduit par :

$$\int_0^{r_c} dr r^2 \varphi^{ps}(r) = \int_0^{r_c} dr r^2 \varphi^*(r) \varphi(r) \quad (I.20)$$

Où les fonctions d'onde se rapprochent aux références atomiques et où la symétrie sphérique est imposée. Bien sûr, la fonction d'onde et la valeur propre sont différentes pour les différents moments  $l$ . Une mesure de la transférabilité est conditionnée par les dérivées logarithmiques à  $r_c$  de tous les électrons et par les pseudofonctions d'onde,  $\varphi$  et  $\varphi^{ps}$ .

L'égalité imposée pour  $r < r_c$  assure que les dérivées logarithmiques à  $r_c$  sont aussi égales pour la configuration atomique d'origine :

$$\frac{-\partial}{\partial E} \frac{\partial}{\partial r} \ln \varphi(r_c, E) = \frac{1}{\varphi(r_c, E)} \frac{d\varphi(r_c, E)}{dr} \quad (I.21)$$

La transférabilité est alors définie pour la gamme de l'énergie  $E$  pour laquelle l'équation précédente est prise. Cependant, en utilisant le théorème de Green nous avons,

$$\frac{-\partial}{\partial E} \frac{\partial}{\partial r} \ln \varphi(r_c, E) = \frac{1}{r_c^2 \varphi^*(r_c, E)} \int_0^{r_c} dr r^2 \varphi^*(r, E) \varphi(r, E) \quad (I.22)$$

Cette méthode a été établie par Haman en 1979 [13] et affinée par Bachelet, Haman Schluter (BHS) en 1982 [18]. Ces derniers calculent les pseudopotentiels exacts de tous les éléments du tableau périodique. En 1980, Kerker [19] présente une autre approche qui donne les pseudopotentiels de qualité comparable. Cette approche donne des simples représentations analytiques des pseudofonctions d'onde à l'intérieur du rayon  $r_c$ .

La méthode de calcul de BHS a été très efficace, car elle a séparé les calculs ab initio de la génération des pseudopotentiels. La procédure de base BHS utilisée pour la construction des pseudopotentiels à norme conservée. L'exactitude, la transférabilité et l'efficacité du pseudopotentiel,  $V^{ps}$ , sont testées en comparant les calculs atomiques effectués par le pseudopotentiel et avec ceux utilisant l'ensemble des électrons dans plusieurs configurations.

La transférabilité du pseudopotentiel doit être vérifiée avant toute utilisation. La façon la plus simple d'augmenter la transférabilité d'un pseudopotentiel est de réduire le rayon de coupure des fonctions d'onde.

### 1.5.2 Les pseudopotentiels de Trouilier et Martins

N. Trouilier et J.L Martins [20] ont proposé une paramétrisation pour les pseudopotentiels à norme conservées. Tout d'abord, ils prolongent la pseudofonction d'onde à l'intérieur du rayon de coupure avec analytique qui se comporte comme  $r^l$  pour les petits  $r$  et ne possède pas des nœuds :

$$R_l^{ps}(r) = \begin{cases} R_l^{AE} & r \geq r_{cl} \\ r^l \exp(p(r)) & r \leq r_{cl} \end{cases} \quad (I.23)$$

Où  $p(r) = c_0 + c_2 r^2 + c_4 r^4 + c_6 r^6 + c_8 r^8 + c_{10} r^{10} + c_{12} r^{12}$ .

Les sept coefficients du polynôme  $p(r)$  sont déterminés à partir des sept conditions suivantes :

1\_ conservation de la norme à l'intérieur du rayon de coupure :

$$2c_0 - \ln \int_0^{r_{cl}} r^{2l+1} \exp[2p(r - 2c_0)] dr = \ln \int_0^{r_{cl}} |R_l^{AE}(r)|^2 r^{2l} dr \quad (I.24)$$

2\_ la continuité de pseudofonction d'onde et de quatre premières dérivées à  $r_{cl}$  :

$$p(r_{cl}) = \ln \left[ \frac{p(r_{cl})}{r_{cl}^{l+1}} \right] \quad (I.25)$$

$$p'(r_{cl}) = \frac{p'(r_{cl})}{p(r_{cl})} - \frac{l+1}{r_{cl}} \quad (I.26)$$

$$p''(r_{cl}) = 2V''_{AE}(r_{cl}) - 2\epsilon_l - \frac{2(l+1)}{r_{cl}} p'(r_{cl}) - [p'(r_{cl})]^2 \quad (I.27)$$

$$p^{(3)}(r_{cl}) = 2V'_{AE}(r_{cl}) + \frac{2(l+1)}{r_{cl}^2} p'(r_{cl}) - \frac{2(l+1)}{r_{cl}} p''(r_{cl}) - 2p'(r_{cl})p''(r_{cl}) \quad (I.28)$$

$$p^{(4)}(r_{cl}) = 2V''_{AE}(r_{cl}) - \frac{4(l+1)}{r_{cl}^3}p'(r_{cl}) + \frac{4(l+1)}{r_{cl}^2}p''(r_{cl}) - \frac{2(l+1)}{r_{cl}^2}p^3(r_{cl}) - 2[p''(r_{cl})]^2 - 2p'(r_{cl})p^{(3)}(r_{cl}) \quad (\text{I.29})$$

3\_ la courbure nulle du pseudopotential écrané à l'origine

$$V''_{scr,l} = 0$$

$$c_2^2 + c_4(2l + 5) = 0 \quad (\text{I.30})$$

Ces sept conditions pour le but d'obtenir un pseudo potentiel bien lisse.

## I.6 Référence I

- [1] M. Born, and J. R. Oppenheimer, *Ann, Phys.* **87**, 457 (1927).
- [2] D.R. Hartree, *Proc. Combridge Philos. Soc.* **24**, 89 (1928).
- [3] V. A. Fock, *Z. Phys.* **15**, 126 (1930).
- [4] J.C. Slater, *Quantum Theory of Molecules and Solids*. Vol. **4** (Mc. Graw. Hill Newe-York 1974).
- [5] W. Kohn and L. J. Sam, *Phys. Rev.* **140** A, 1133 (1965).
- [6] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **140** A, (1965).
- [7] R. M. Dreizler and E. K. U. Gross, *Density Functional theory*, (Springer, Berlin, 1990).
- [8] M. Sahimi, *Heterogeneous Materials*, (Springer-Verlag, New York, 2003).
- [9] D. S. Sholl and J. Steckel: *Density functional theory*, (John Wiley, 2009).
- [10] D. M. Ceperly and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [11] R. O. Jones and O. Gunnarsson, *Rev. Of Mod. Phys.* **61**, 689 (1989).
- [12] J. Kubler and V. Evert, *Electronic structure calculation dams*, K. H. Bushow (VCH Verlags chaft, einheim, 1992).
- [13] D. R. Hamman, M. Shülter and C. Chiang, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 1494 (1979).
- [14] D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **41**, 7892 (1990).
- [15] S. Goedecker, M. Teter and J. Hutter, *Phys. Rev. B* **58**, 1703 (1996).
- [16] C. Hartwigsen, S. Goedecker and J. Hutter, *Phys. Rev. B* **58**, 3641 (1998).
- [17] W. C. Topp and J. J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev. B* **7**, 1295 (1974).
- [18] G. B. Bachelet, D. R. Hamman, and M. Schluter, *Phys. Rev. B* **26**, 4199 (1982).
- [19] G. P. Kerker, *J. Phys. C* **13**, L189 (1980).
- [20] N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. B* **43**, 1993 (1991).

# Chapitre II

## Propriétés élastiques

### II.1 Introduction

Dans l'étude des forces mécaniques, l'élasticité des solides (la réponse des matériaux aux forces appliquées) doit être prise en compte. Les forces sont décrites par les tenseurs des contraintes qui déterminent la direction des forces et le plan sur lequel elles s'appliquent. Le rapport contrainte/ déformation est appelé constante élastique. Les constantes élastiques peuvent être déduites par l'application des petites contraintes à la maille à l'équilibre suivi par la détermination des changements résultants dans l'énergie totale.

La connaissance des propriétés élastiques d'un matériau permet d'estimer et d'évaluer sa stabilité mécanique, sont aussi essentiellement reliées à des nombreuses propriétés comme par exemple la chaleur spécifique, le coefficient de dilatation thermique, la température de Debye.

### II.2 Tenseur de contrainte et de déformation

Un milieu est dit élastique s'il ne subit que des déformations réversibles, si en supprimant les forces responsables de ces déformations, le milieu retrouve sa forme initial, cette déformation linéaire par rapport à une contrainte  $\sigma_{ij}$ , l'indice  $i$  correspond à la normale au plan sur lequel s'applique la force, par exemple la contrainte  $\sigma_{xy}$  est la force appliquée dans la direction  $x$  sur une surface unitaire d'un plan dont la normale est  $y$ , les neuf composantes  $\sigma_{ij}$  constituent un tenseur de contrainte d'ordre deux :

$$\sigma = \begin{vmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{vmatrix} \quad (\text{II.1})$$

Lorsque le solide change de configuration subit une modification de volume sans changement de masse; c'est donc un processus dans lequel varie la distance entre certains points du corps, les formes les plus simples de la déformation sont la traction, la compression, la flexion, le cisaillement.



Le tenseur de déformation décrit la déformation propre du corps, c'est un tenseur symétrique par rapport à la diagonale principale sont égales entre elles ( $e_{ij} = e_{ji}$ ).

$$T_d = \begin{vmatrix} e_{11} & 1/2(e_{12} + e_{21}) & 1/2(e_{13} + e_{31}) \\ 1/2(e_{21} + e_{12}) & e_{22} & 1/2(e_{23} + e_{32}) \\ 1/2(e_{31} + e_{13}) & 1/2(e_{32} + e_{23}) & e_{33} \end{vmatrix} \quad (\text{II.2})$$

On note par  $T_d$  et  $\varepsilon$  on écrit

$$\varepsilon = \begin{vmatrix} \varepsilon_{11} & \varepsilon_{12} & \varepsilon_{13} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} & \varepsilon_{23} \\ \varepsilon_{31} & \varepsilon_{32} & \varepsilon_{33} \end{vmatrix} \quad (\text{II.3})$$

Les composantes  $\varepsilon_{ii}$  décrivent les allongements ou les compressions les autres composants représentent la déformation de cisaillement.

### II.3 loi de Hooke

R.Hooke a été le premier à étudier expérimentalement les lois principales du comportement des matériaux dans le domaine élastique, il a établi qu'en traction d'un corps isotrope (pour un corps isotrope toute les directions sont identiques) lorsque les déformations et les contraintes sont assez faibles, la déformation est proportionnelle à la contrainte appliquée, cela implique que le tenseur de déformation peut être relié au tenseur du contrainte par une loi linéaire (loi de Hooke) [1].

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{k,l} S_{ijkl} \sigma_{kl} \quad (\text{II.4})$$

Où  $i,j,k,l=1$  à  $3$ .

Les symétries des tenseurs de contrainte et de déformation font qu'on se ramène généralement à une matrice  $6 \times 6$  (notation de Voigt [2]).

Alors le tenseur de contrainte est :

$$\sigma = \begin{vmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{vmatrix} \quad (\text{II.5})$$

De meme pour le tenseur de déformation

$$\varepsilon = \begin{vmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{xz} & \varepsilon_{yz} & \varepsilon_{zz} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \varepsilon_1 & 1/2\varepsilon_6 & 1/2\varepsilon_5 \\ 1/2\varepsilon_6 & \varepsilon_2 & 1/2\varepsilon_4 \\ 1/2\varepsilon_5 & 1/2\varepsilon_4 & \varepsilon_3 \end{vmatrix} \quad (\text{II.6})$$

En notation contracté de Voigt, la relation entre déformation et contrainte s'écrit :

$$\varepsilon_j = \sum_j S_{ij} \sigma_j \quad (\text{II.7})$$

Ou  $i,j=1,6$ .

Les constantes  $S_{ij}$  [ $i,j=1\text{à}6$ ] sont appelées constantes d'élasticité. Et inversement, chaque composante des contraintes est liée linéairement à toutes les composantes du tenseur de déformation par relation :

$$\sigma_{ij} = \sum_{k,l} C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad (\text{II.8})$$

Ou  $i,j,k,l=1\text{à}3$ .

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

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

## II.4 quelques définitions

Les propriétés élastiques nous permettent de déterminer la réponse du cristal à des forces extérieures. Ils se caractérisent par des constantes élastiques, le module de Young, et le coefficient de poisson. Ils jouent un rôle important dans la déformation de la résistance des matériaux.

### a/ Module de compressibilité(B)

C'est une compression sous une pression  $P$ , on peut l'appeler Module de rigidité, qui peut être s'exprimé comme suit [3]:

$$B = -V \frac{dP}{dV} \quad (\text{II.10})$$

Ou  $V$  le volume du matériau.

Pour un système cubique,  $B$  peut être exprimé comme une combinaison linéaire de  $C_{11}$  et  $C_{12}$

$$B = 1/3(C_{11} + 2C_{12}) \quad (\text{II.11})$$

#### ***b/ Module de cisaillement( $G$ )***

Appelé aussi module de glissement. Est une grandeur physique propre à chaque matériau qui intervient dans la caractérisation des déformations causées par des efforts de cisaillement. L'expression de  $G$  dans la structure cubique :

$$G = (G_V + G_R)/2 \quad (\text{II.12})$$

Tel que  $G_V$  : module de cisaillement de Voigt[4].

$G_R$  : module de cisaillement de Reuss[5].

Avec: 
$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad \text{et} \quad G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})}$$

#### ***c/ Module de Young ( $E$ )***

Ou le module d'élasticité longitudinale, est la constante qui relie la contrainte de traction ou de compression et la déformation pour un matériau élastique isotrope.

$$E = \frac{9GB}{3B+G} \quad (\text{II.13})$$

#### ***d/ Coefficient de poisson***

Est défini comme le rapport de la déformation latérale et la déformation axiale. Il mesure la stabilité d'un cristal contre le cisaillement.

$$\sigma = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (\text{II.14})$$

#### ***e/ Température de Debye***

La température de Debye  $\theta_D$  définie la valeur maximale des énergies des vibrations, cette grandeur physique peut être déterminé à partir de chaleur spécifique ou bien à partir des coefficients élastiques.

Les vitesses de l'onde sonore transversale et longitudinale sont données par les expressions :

$$v_l = \sqrt{\frac{B+4G/3}{\rho}} \quad (\text{II.15})$$

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (\text{II.16})$$

Où  $\rho$  est la densité de masse du matériau.

La vitesse du son moyenne est la température de Debye peuvent être calculé à partir des relations :

$$v_{moy} = \left[ \frac{3v_t^3 v_l^3}{2v_l^3 + v_t^3} \right]^{1/3} \quad (\text{II.17})$$

$$\theta_D = \frac{\hbar}{K_B} (6\pi^2 n/V)^{1/3} v_{moy} \quad (\text{II.18})$$

$\hbar$ : est la constante de planck.

$K_B$ : est la constante de Boltzman.

$V$ : volume de la maille élémentaire.

$n$  : nombre d'atomes

## ***II-5 Références II***

- [1] Daniel Royer, Ondes élastique dans les solides. Masson (1996).
- [2] J.F Nye, Physical properties of crystals, Oxford University Press, Oxford, (1957).
- [3] S. Adachi, Properties of Group-IV, III-V and II-VI Semiconductors, (John Wiley & Sons, New York, (2005).
- [4] W. Voigt, Lehrbuch der Kristallphysik, Taubner, Leipzig, (1928).
- [5] A. Reuss, Z. Angew. Math. Mech. 9, 49 (1928).

## Chapitre III

### Résultats et discussions

#### III-1 Détails de calcul

Nous avons calculé les propriétés structurales et élastiques des semiconducteurs **LiMgN**, **LiMgP** et **LiMgAs** en utilisant la méthode des ondes planes avec un pseudopotentiel (PP-PW) implémentée dans le code *abinit* [1], dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**) et aussi la théorie de la fonctionnelles de la perturbation de la densité (DFPT) [2-5], nous avons utilisé l'approximation de Perdew-Wang [6] pour traiter l'énergie d'échange et de corrélation.

Dans la méthode (PP-PW), il existe deux paramètres essentiels, le premier ; est l'énergie de coupure (*cutoff*) qui limite le nombre d'ondes planes employées pour la description des fonctions d'ondes électroniques, le deuxième paramètre est le nombre de points spéciaux  $k$  pour l'intégration dans la zone de Brillouin, en utilisant la méthode standard de Monkhorst et Pack [7].

Nous avons utilisé dans ce travail une énergie de coupure égale à 30 Ha pour les trois composés et 8x8x8 des points  $k$ , et pour calculer les constantes élastiques une  $K$ -grid 10x10x10 et un *cutoff* de 40Ha.

Les configurations électroniques de valence des atomes constituant les composés étudiés sont :

-Li  $2s^1$

-N  $2s^2 2p^3$

-P  $3s^2 3p^3$

-Mg  $3s^2$

-As  $3d^{10} 4s^2 4p^3$

#### III-2 Propriétés structurales

L'étape la plus importante dans un calcul premier principe est la détermination des propriétés structurales du matériau étudié. La connaissance de ces informations nous permet d'accéder par la suite à d'autres propriétés physiques (élastiques, électroniques, optiques,.....).

Dans la structure zinc-blende  $D^{III}-C^V$ , le cation  $D$  occupe le site  $T_1 = (0,0,0)a$ , et l'anion  $C^V$  occupe  $T_2 = (1,1,1)a/4$ , et les deux sites interstitiels  $T_3 = (1,1,1)a/2$  voisin de l'anion, et le site  $T_4 = (1,1,1)3a/4$  voisin du cation  $D$ , sont vacants.

Pour obtenir les composés de Nowotny-Juza  $A^I B^{II} C^V$  [8,9] on remplace le cation  $D^{III}$  par un pair d'atomes ( $A^I + B^{II}$ ) dont le nombre d'électrons de valence est conservé c'est-à-dire Al ( $3s^2 3p^1$ ) qui nous donne 3 électrons de valence, la somme des électrons de valence de Mg ( $3s^2$ ) et Li ( $2s^1$ ) donne 3 électrons.

Il existe trois possibilités pour remplir les sites  $T_3$  et  $T_4$ , le site  $T_1$  est toujours occupé par l'atome Mg.

- (i) Si l'atome Li occupe  $T_3$  et l'atome  $C^V$  (N, P ou bien As) occupe le site  $T_2$ , on obtient la phase  $\alpha$ .
- (ii) Si l'atome Li occupe  $T_4$  et l'atome  $C^V$  dans  $T_2$ , on obtient la phase  $\beta$ .
- (iii) Si l'atome Li occupe  $T_2$  et  $C^V$  occupe  $T_3$ , on obtient la phase  $\gamma$ .

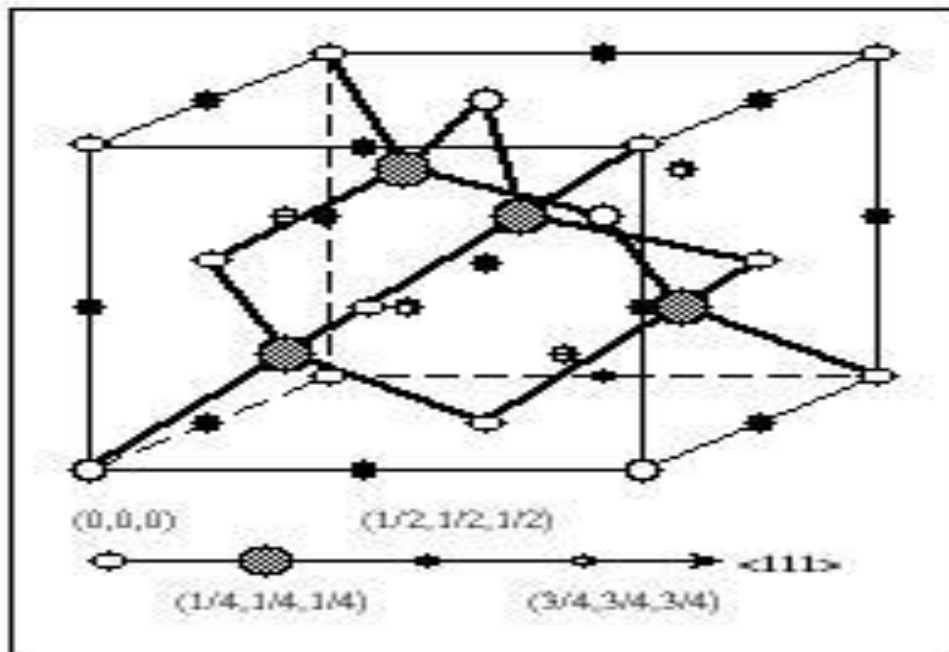


Fig.3.1 : Structure cristalline d'un semiconducteur à liaison tétraédrique.

Le groupe d'espace de LiMgX est F-43m (n°, 216) ; la structure cristalline est cubique à face centrée avec liaison tétraédrique rempli, ces composés sont caractérisés par le paramètre de maille cubique  $a$ , pour obtenir la valeur optimale de ce paramètre ainsi que le module de compressibilité ( $B$ ) et sa dérivé par rapport à la pression  $B'$ , l'énergie totale est calculée pour plusieurs valeurs de volume puis ajustée à l'équation de Murnaghan [10] :

$$E(V) = E_0 + \frac{B}{B'(B'-1)} \left( V \left( \frac{V_0}{V} \right) - V_0 \right) + \frac{B}{B'} (V - V_0), \quad (\text{III.1})$$

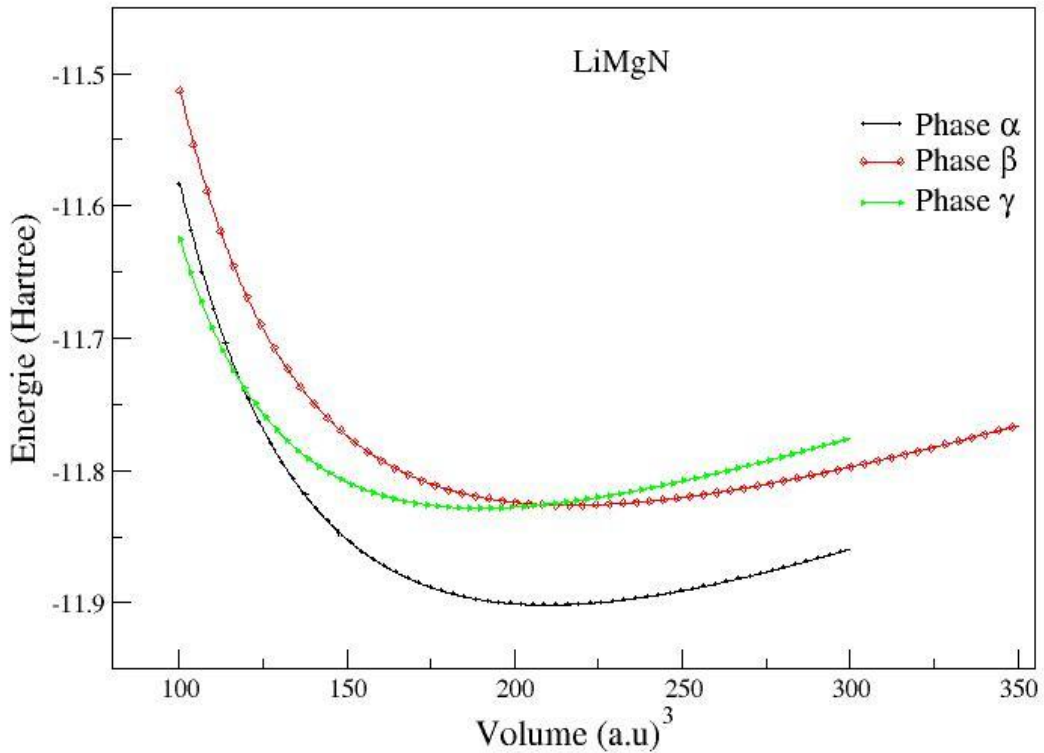
Avec

$$V = V_0 \left( 1 + \frac{B'P}{B} \right)^{-1/B'}.$$

Et le module de compressibilité  $B$  est déterminé par : (III-2)

$$B = V \frac{d^2E}{dV^2}. \quad (\text{III-3})$$

$B'$  est la première dérivée de  $B$  par rapport à la pression.





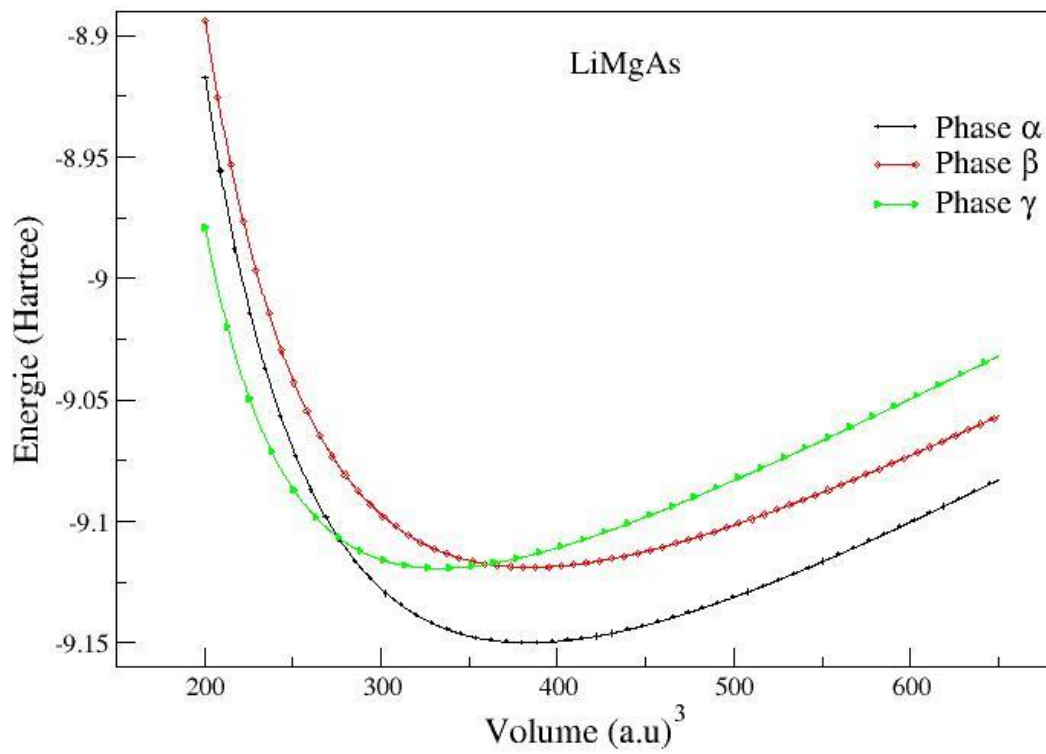
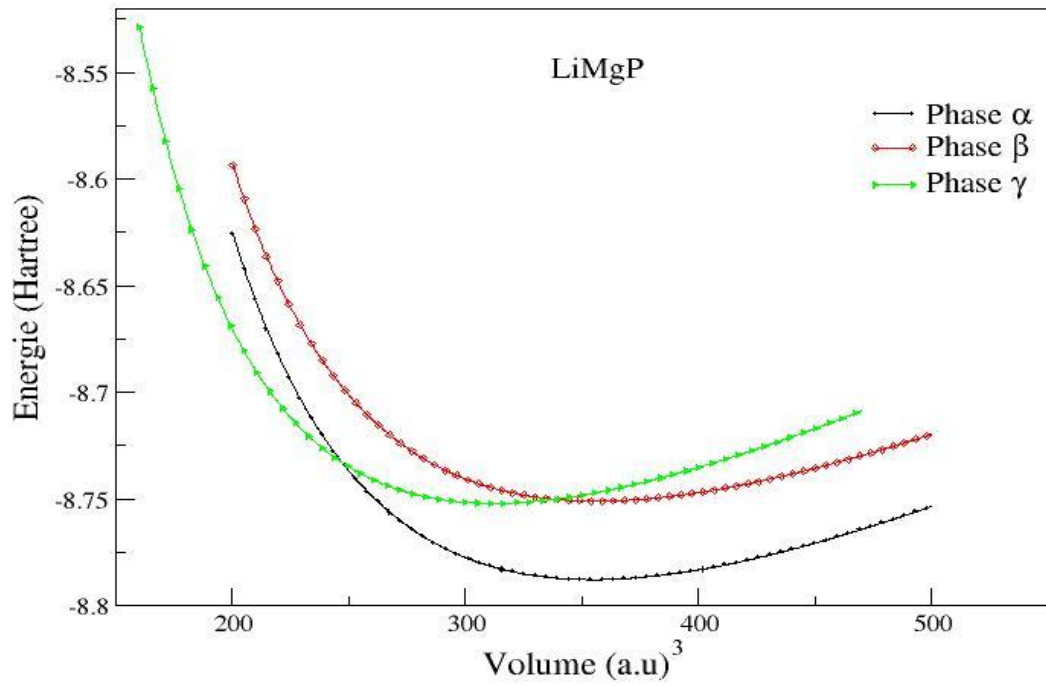


Fig3.2. Energie totale en fonction du volume pour LiMgX dans les trois phases.

La figure 3.2 montre la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour les semiconducteurs LiMgN, LiMgP et LiMgAs, la figure représente clairement que la phase  $\alpha$  est la plus stable, est bien indiquée par le calcul de différence des énergies totales  $E_\alpha - E_\gamma$  ( $E_\alpha - E_\beta$ ) qui est donnée respectivement en Hartree, pour LiMgN -0,0733 (-0.0755), pour LiMgP -0.358 (-0.0369) et pour LiMgAs -0.0307 (-0.0312).

On remarque aussi dans cette figure la présence d'une tangente commune entre la phase  $\alpha$  et la phase  $\gamma$ , donc il-y-a une possibilité de transition de phase, la pression de transition de chaque composé est donner à travers la variation de l'enthalpie avec la pression (la figure 3.3).

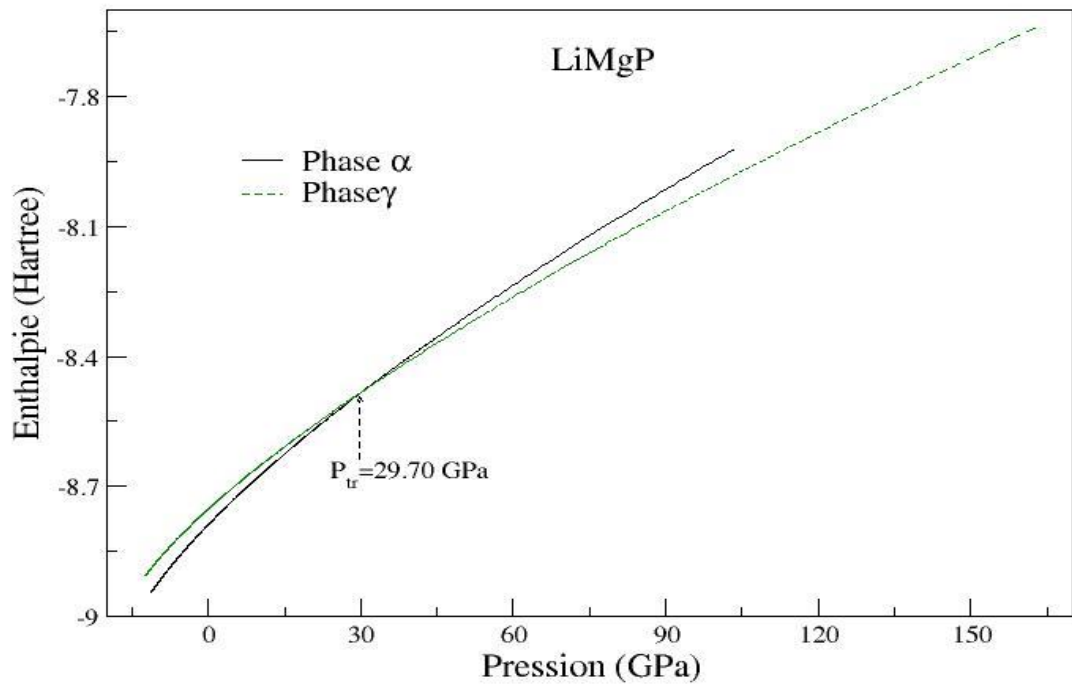
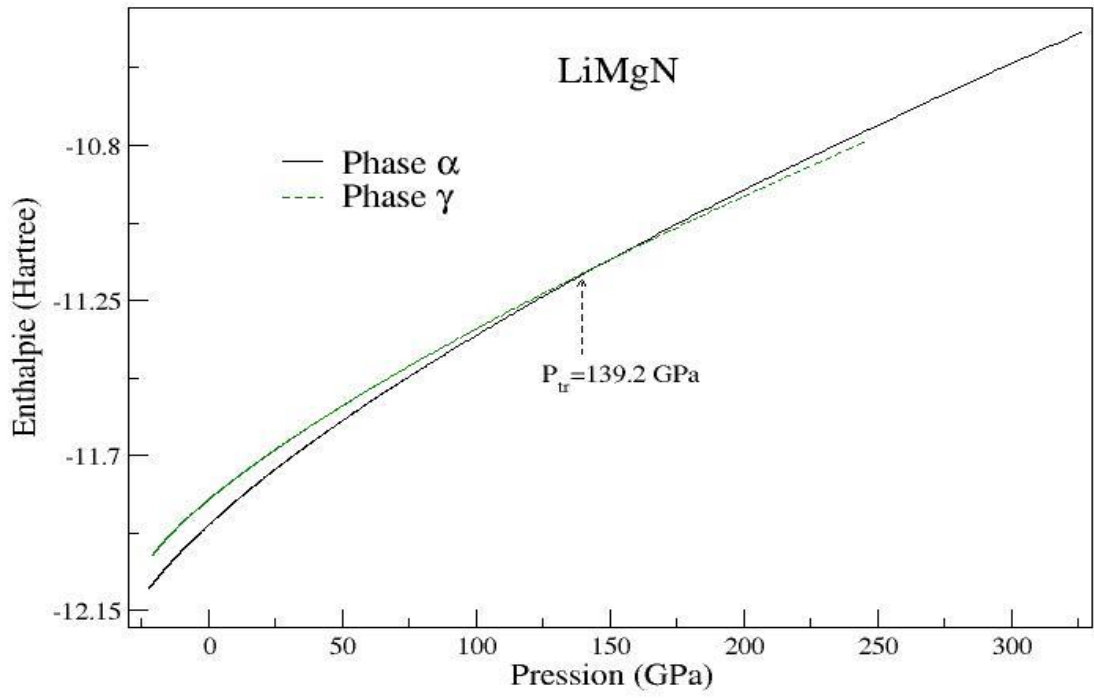
Les trois semiconducteurs subissent à une transition de phase de la structure  $\alpha$  la plus stable vers la structure  $\gamma$  à pression de transition  $P_{tr}=139,2$  GPa pour LiMgN,  $P_{tr}=29,7$  GPa pour LiMgP et  $P_{tr}=23,85$  GPa pour LiMgAs.

Ces valeurs de pression sont très élevées, en réalité des travaux très récents découvrent que les semiconducteurs type AgMgAs ( $A^I B^{II} C^V$ ) peut aller sous une pression hydrostatique de quelques GPa à une structure orthorhombique type MgSrSi (Pnma) puis une autre transition vers une structure hexagonale type LiGaGe ( $P6_3/mc$ ) [11-13].

Les paramètres structuraux de l'état fondamental des trois phases sont récapitulés dans le tableau 3.1 avec d'autres résultats théoriques et expérimentaux.

En particulier la phase  $\alpha$ , la plus favorable pour étudier les différentes propriétés, notre calcul du paramètre de réseau  $a$  de (4,93Å) LiMgN, (5,94Å) LiMgP et (6,10Å) LiMgAs est seulement 0,51%, 1,08% et 1,31% inférieur à la valeur expérimentale 4,955Å [17], 6,005Å [19] et 6,181Å [20], respectivement, et en bonne accord avec les autres calculs théoriques.

Prenons l'ordre de la masse atomique de  $C^V$ : N ...P.....As, on note une augmentation de valeur de  $a$  de LiMgN à LiMgAs, effectivement, une diminution de  $B$  dans la même allure.



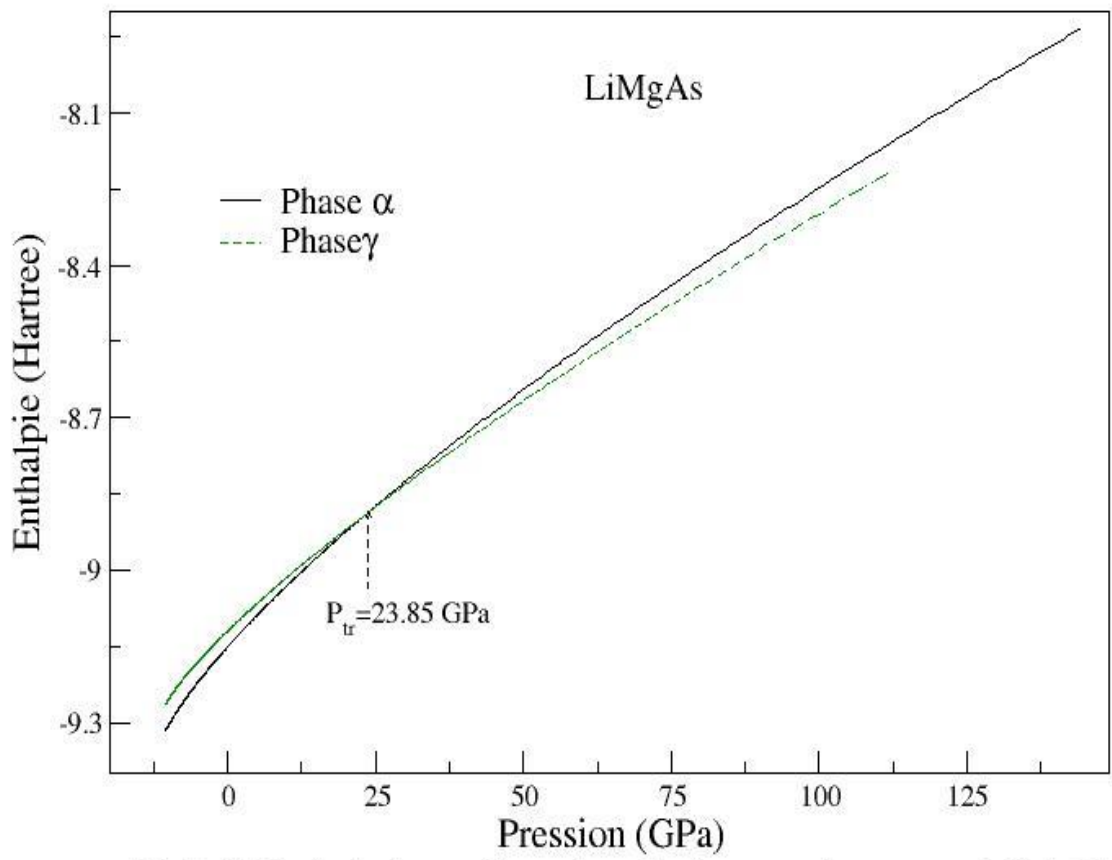


Fig3.3 Enthalpie en fonction de la pression pour LiMgX

**Tableau 3.1:** Paramètre structuraux ; paramètre de réseau  $a_0$  en (Å), module de compression  $B$  en (GPa) et sa dérivé  $B'$  de LiMgN, LiMgP et LiMgAs dans les trois phases.

	Paramètre de réseau (Å)			B(GPa)		B'	
	Ce travail	Autres	Exp.	Ce travail	Autre	Ce travail	Autre
$\alpha$ -LiMgN	4,93	5,009 <sup>a</sup> 5,72 <sup>b</sup> , 4,9123 <sup>c</sup>	4,955 <sup>d</sup>	104	97,66 <sup>a</sup> 110 <sup>c</sup> , 80,1 <sup>b</sup>	3,27	3,99 <sup>a</sup>
$\gamma$ -LiMgN	4,82			95,02		3,68	
$\beta$ -LiMgN	5,02			84 ,54		3,40	
$\alpha$ -LiMgP	5,94	6,028 <sup>b</sup> 6,01 <sup>e</sup> , 5,9053 <sup>c</sup> 5,916 <sup>f</sup>	6,005 <sup>g</sup>	55,91	49,6 <sup>b</sup> 58 <sup>c</sup> , 52,9 <sup>e</sup> 58,4 <sup>f</sup>	3,53	3,88 <sup>e</sup> 3,55 <sup>f</sup>
$\gamma$ -LiMgP	5,68	5,664 <sup>f</sup>		57,99	62,4 <sup>f</sup>	3,62	3,62 <sup>f</sup>
$\beta$ -LiMgP	5,95	5,927 <sup>f</sup> 6,027 <sup>e</sup>		52,28	55,2 <sup>f</sup> 48,42 <sup>e</sup>	3,58	3,61 <sup>f</sup> 3,91 <sup>e</sup>
$\alpha$ -LiMgAs	6,10	6.218 <sup>b</sup> 6,073 <sup>c</sup> , 6,09 <sup>f</sup>	6,181 <sup>h</sup>	47,61	42,9 <sup>b</sup> 52 <sup>c</sup> , 51,5 <sup>f</sup>	3,95	3,80 <sup>f</sup>
$\gamma$ -LiMgAs	5,84	5,838 <sup>f</sup>		52,01	54,6 <sup>f</sup>	4,76	3,95 <sup>f</sup>
$\beta$ -LiMgAs	6,11	6,097 <sup>f</sup>		44,73	48,6 <sup>f</sup>	3,99	3,85 <sup>f</sup>

<sup>a</sup>Ref.[14],<sup>b</sup>Ref.[15],<sup>c</sup>Ref.[16],<sup>d</sup>Ref.[17],<sup>f</sup>[18],<sup>g</sup>[19],<sup>h</sup>[20],<sup>e</sup>[21]

### III-3 Propriétés élastiques :

Le tenseur élastique des cristaux cubiques à seulement trois constantes indépendantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  [22]. Les valeurs des constantes élastiques calculées sont données dans le tableau 3.2, ainsi que les valeurs du module de compressibilité évaluées à partir des  $C_{ij}$  à

travers la relation II-11. Un matériau ne peut être stable dans une structure cubique sauf si les constantes  $C_{ij}$  satisfont les critères de stabilité suivantes:

$$\begin{aligned} C_{11}+2C_{12} &> 0 \\ C_{11}-C_{12} &> 0 \\ C_{44} &> 0 \end{aligned} \quad \text{(III-4)}$$

Les résultats obtenus des trois composés dans la phase  $\alpha$ ; la plus stable sont en bon accord avec ceux calculés par Bouhmadou et al.[16] et Soyalp et al.[18] qui ont utilisé la même approximation (**LDA**) dans le même cadre (**DFT**).

**Tableau 3.2:** Constantes élastiques (en GPa), module de compressibilité de l'équation II-12 (en GPa) pour les 3 composés et dans les 3 phases.

		<b>C<sub>11</sub></b>	<b>C<sub>12</sub></b>	<b>C<sub>44</sub></b>	<b>B</b>	<b>C<sub>11</sub>-C<sub>12</sub></b>
<b><math>\alpha</math>-LiMgN</b>	Notre-calc.	269,47	26,47	75,28	107,47	243
	Autre [16]	280	24	68	110	
<b><math>\gamma</math>-LiMgN</b>		84,54	110,53	73,01	101,86	-25,99
<b><math>\beta</math>-LiMgN</b>		67,12	102,73	15,39	90,86	-35,61
<hr/>						
<b><math>\alpha</math>-LiMgP</b>	Notre-calc.	116,48	29,42	46,06	58,44	87,06
	Autre [16]	117	29	48	58	
	Autre [18]	116,96	28,52	53		
<b><math>\gamma</math>-LiMgP</b>	Notre-calc.	77,78	53,87	68,54	61,84	23,91
	Autre [18]	80,358	51,516	82,7254		
<b><math>\beta</math>-LiMgP</b>	Notre-calc.	55,14	55,45	39,95	55,34	-0,31
	Autre [18]	52,702	55,062	72,02		
<hr/>						
<b><math>\alpha</math>-LiMgAs</b>	Notre-calc.	100,15	27,45	40,74	51,68	48,47
	Autre [16]	102	27	40	52	
	Autre [18]	101,62	26,72	48,21		
<b><math>\gamma</math>-LiMgAs</b>	Notre-calc.	69,61	47,06	60,16	54,57	22,55
	Autre [18]	72,14	45,76	72,71		
<b><math>\beta</math>-LiMgAs</b>	Notre-calc.	48,33	48,96	33,36		-0,63
	Autre [18]	46,30	47,99	64,54		

On note que notre calcul est parfaitement similaire pour les deux phases  $\gamma$  et  $\beta$  de LiMgP et LiMgAs avec les résultats de Soyalp [18], d'après les valeurs de  $C_{ij}$  dans le tableau 3.2 on voit que LiMgN dans ces deux phases  $\gamma$  et  $\beta$  ne satisfait pas les critères de stabilité, telle que  $C_{11}-C_{12} < 0$ , la même chose pour la phase  $\beta$  concernant LiMgP et LiMgAs.

Dans le reste du travail on intéresse uniquement de la phase la plus favorisé ( $\alpha$ ) des trois semiconducteurs LiMgN, LiMgP et LiMgAs.

La loi de Hooke établit que la déformation élastique est suffisamment faible, il désirait obtenir la théorie des ressorts, en soumettant ces derniers à des forces croissantes successives, ce qui signifie « *l'allongement est proportionnel à la force* », c'est-à-dire on obtient par la suite des équations du mouvement des particules où les solutions possibles sont des ondes élastiques (matériels) longitudinales et transversales de vecteur d'onde  $K=2\pi/\lambda$ , et de fréquence  $\omega=2\pi\nu$ .

Sur l'optique de cette notion, on peut calculer les vitesses du son dans les différentes directions [23], par exemple une onde longitudinale dans la direction [100] est une solution possible de l'équation du mouvement, cette solution nous offre la relation suivante:

$$\omega^2=C_{11}K^2. \quad (\text{III-5})$$

Et la vitesse du son

$$V_s= \omega/K \quad (\text{III-6})$$

Alor en déduire la vitesse du son par:

$$V_L(100)=(C_{11}/\rho)^{1/2}. \quad ((\text{III-7}))$$

En utilisant les constantes élastiques pour évaluer les vitesses du son. Le tableau 3.3 illustre les valeurs de ces derniers par l'intermédiaire des expressions suivantes [23]:

$$\begin{aligned} V_T(100)&=(C_{44}/\rho)^{1/2}. & V_L(100)&=(C_{11}/\rho)^{1/2}. \\ V_T(110)&=[1/2(c_{11}-C_{12})/\rho]^{1/2}. & V_L(110)&=[1/2(C_{11}+C_{12}-2C_{44})/\rho]^{1/2}. & \text{III-8} \\ V_T(111)&=[1/3(c_{11}-C_{12}+C_{44})/\rho]^{1/2}. & V_L(111)&=[1/2(C_{11}+2C_{12}+4C_{44})/\rho]^{1/2}. \end{aligned}$$

**Tableau 3.3:** Vitesse du son (en Km/s) dans les différentes directions de propagation pour les 3 composés.

	$V_T^{100}$	$V_L^{100}$	$V_T^{110}$	$V_L^{110}$	$V_T^{111}$	$V_L^{111}$
LiMgN	5,94	11,08	7,34	10,2	6,9	9,9
LiMgP	4,83	7,67	4,7	7,77	4,75	7,80
LiMgAs	3,62	5,68	3,42	5,80	3,49	5,84

Les approximations de Voigt-Reuss-Hill [24-26] fournissent une estimation du comportement élastique d'un matériau. Le module de Reuss  $G_R$  et de Voigt  $G_V$  représente les limites inférieures et supérieures du module de cisaillement  $G$ , pour un composé cubique  $G$  est donné dans l'équation II-12. Les valeurs calculées de module de cisaillement, module de Young et coefficient de Poisson pour les trois semiconducteurs sont récapitulées dans le tableau 3.4.

En termes d'élasticité on distingue deux types de matériaux ; ductiles et fragiles [27]. La ductilité désigne la capacité d'un matériau à se déformer plastiquement sans ramper, c'est l'aptitude qu'un matériau à résister à une déformation. S'il résiste bien, il est dit *ductile*, sinon il est dit *fragile*.

Une relation simple a été proposée par Pugh [28] qui relie les propriétés plastiques avec les modules élastiques  $G$  et  $B$ , le module de cisaillement  $G$  représente la résistance à la déformation plastique, tandis que, une valeur importante correspond à la ductilité et une faible valeur correspond à la nature fragile, si  $B/G > 1,75$  le matériau est ductile, si l'inverse le matériau est fragile.

Nos valeurs des modules d'élasticités sont en bon accord avec les autres calculs théoriques [16], nous avons trouvé les trois composés sont fragiles car le rapport  $B/G$  est un inférieur de 1,75 dans les 3 cas.



**Tableau 3. 4:** Module de cisaillement  $G$  (en GPa), module de Young  $E$  (en GPa), Coefficient de poisson  $\nu$  et le rapport  $B/G$  pour les 3 composés (Les valeurs de  $B$  de l'équation II-13).

	$G$	$E$		$\nu$		$B/G$
		Ce travail	autre [16]	Ce travail	autre [16]	
<b>LiMgN</b>	105,09	247,30	277	0,18	0,0793	1,023
<b>LiMgP</b>	45,03	107,48	106	0,19	0,1986	1,30
<b>LiMgAs</b>	38,92	93,33	91	0,7	0,2086	1,33

À Basse température les excitations de vibrations découlent uniquement des vibrations acoustiques, simple à dire que cette température est étroitement liée aux constantes élastiques, qui est appelé température de Debye.

La connaissance de cette valeur numérique est très importante pour connaître les caractéristiques thermiques des matériaux, et essentielle pour le développement et la fabrication de dispositifs électroniques.

La Température de Debye  $\theta_D$  des semiconducteurs considérés est estimée à partir la vitesse moyenne du son  $V_m$  selon l'équation II-18, les valeurs des vitesses longitudinale, transversale et moyenne et la température de Debye sont montrée dans le tableau 3.5.

**Tableau 3. 5:** Vitesse longitudinale  $V_L$  (Km/s), vitesse transversale  $V_T$  (Km/s), vitesse moyenne  $V_{moy}$  (Km/s) et température de Debye  $\theta_D$  (K°) de LiMgX.

	$V_L$	$V_T$	$V_{moy}$	$\theta_D$
<b>LiMgN</b>	10,33	6,47	7,12	430
<b>LiMgP</b>	7,76	4,81	5,27	264
<b>LiMgAs</b>	5,77	3,54	3,91	191

De l'expression de la température de Debye écrite dans l'équation II-18 associée avec l'équation III-6 on peut déduire la fréquence de Debye  $\omega_D$  qui décrit uniquement les phonons de basses énergies (le phonon c'est le quantum de l'onde élastique), ces phonons appelés les phonons (branches) acoustiques. Pour un système cubique la fréquence de Debye écrite sous cette forme :

$$\omega_D = \frac{1}{a} V_s (6\pi)^{1/3} \quad (\text{III-9})$$

$a$  : paramètre de maille.

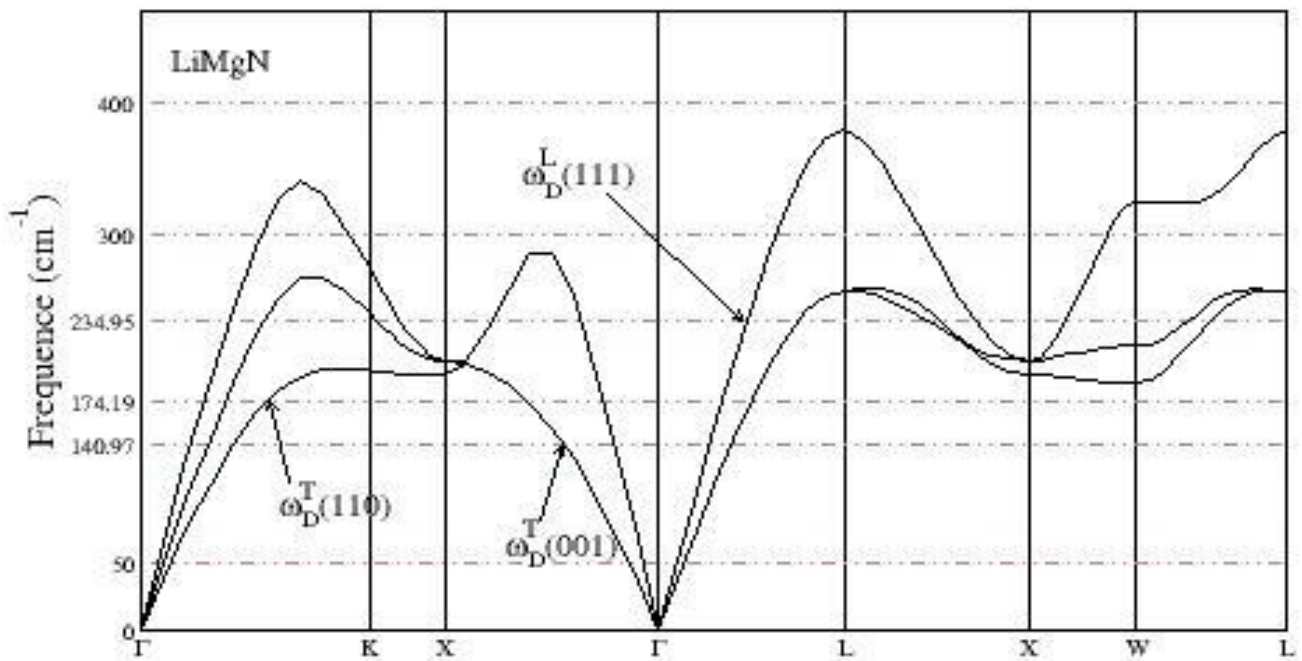
$V_s$  : vitesse du son longitudinale ( $V_L$ ) ou bien transversale ( $V_T$ ).

les valeurs de  $\omega_D$  pour les trois composés sont données dans le tableau 3.6

**Tableau 3.6** : Fréquence de Debye (en  $\text{cm}^{-1}$ ) pour LiMgX dans les lignes de haute symétrie de la première zone de Brillouin.

	$\omega^T(100)$	$\omega^L(100)$	$\omega^T(110)$	$\omega^L(110)$	$\omega^T(111)$	$\omega^L(111)$
<b>LiMgN</b>	140,97	262,95	174,19	242,07	163,75	234,95
<b>LiMgP</b>	95,14	151,08	92,58	153,05	93,56	153,63
<b>LiMgAs</b>	69,43	108,94	65,60	111,25	66,94	112,00

Le phonon par définition est le quantum de l'onde élastique (mécanique) dans chaque matériau il-y-a trois phonons de basses énergies appelés les branches acoustiques, la figure 3.4 montre quelques fréquences de Debye calculés pour les trois semiconducteurs sur les lignes de haute symétrie (100), (110) et (111) qui sont  $\Delta$  ( $\Gamma$ -X),  $\Sigma$  ( $\Gamma$ -K) et  $\lambda$  ( $\Gamma$ -L); respectivement.



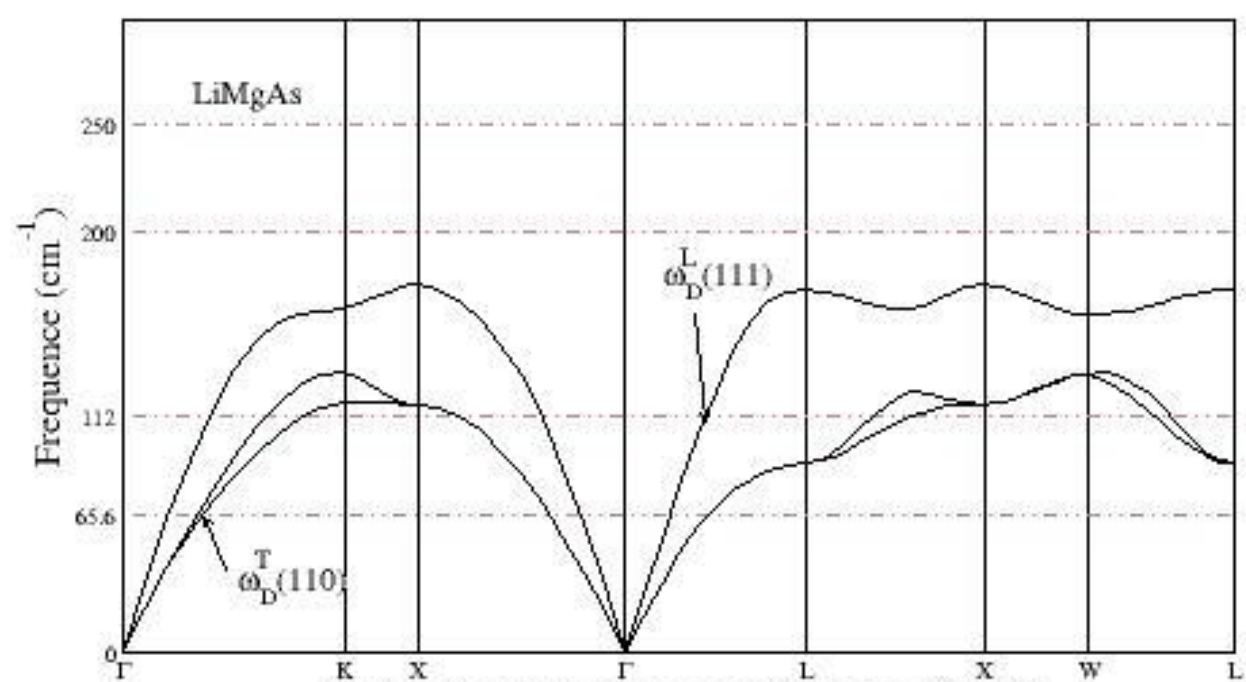
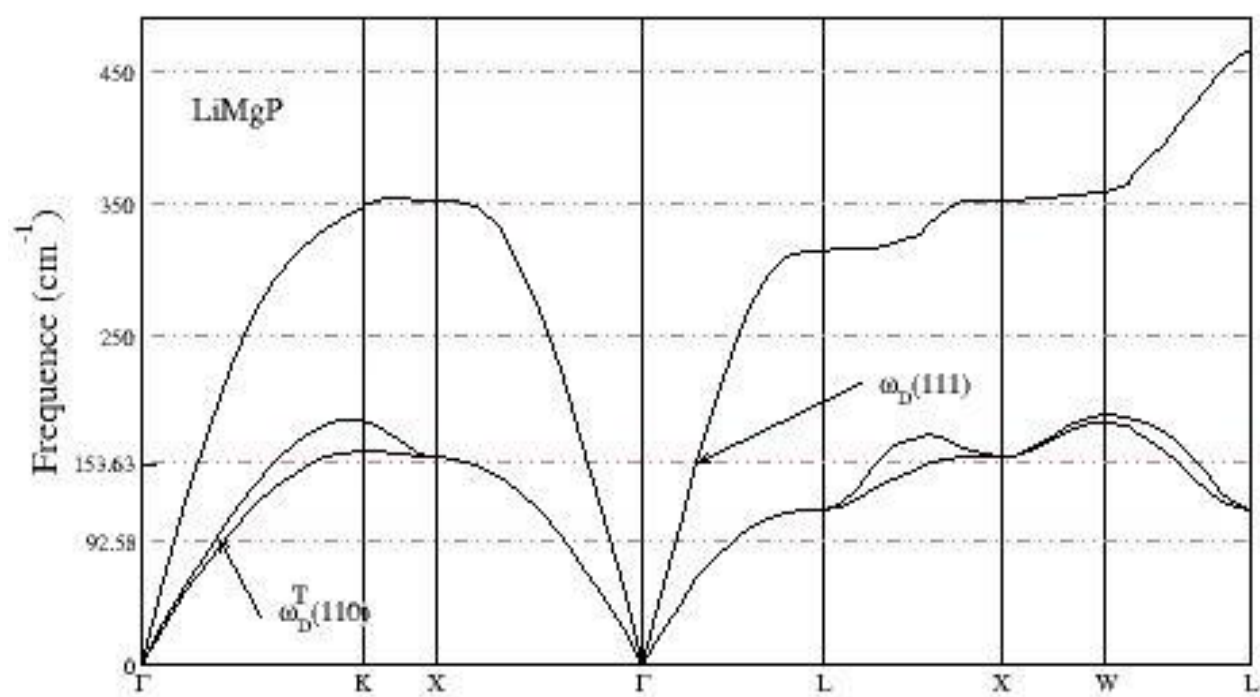


Fig.3.4 Les branches acoustiques des LiMgX

### ***III-4 Références III***

- [1] See URL <http://www.abinit.org>
- [2] P. Giannozzi, S. deGironcoli, P.Pavone and S. Baroni, Phys. Rev. B **43**, 7231 (1991).
- [3] X. Gonze: Phys. Rev. B **55**, 10337 (1997).
- [4] X. Gonze and C. Lee: Phys.Rev. B **55**, 10355 (1997).
- [5] Ph. Ghosez, J.P. Michenaud and X. Gonze, Phys. Rev. B **58**, 6224 (1998).
- [6] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B **45**, 13244 (1992).
- [7] H. J. Monkhorst and J.D. Pack, Phys. Rev. B **61**, 7877 (2000).
- [8] H. Nowotny and K. Bachmayer, Monatsh. Chem. **80**, 734 (1949).
- [9] R. Juza, F. Hundi and Z. Anorg, allg. Chem. **257**, 1 (1948).
- [10] F.D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. **30**, 244 (1944).
- [11] A. Roy, J. W. Bennett, K. M. Rabe and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **109**, 037602 (2012).
- [12] J. W. Bennett, K. F. Garrity, K. M. Rabe and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **109**, 167602 (2012).
- [13] J. W. Bennett, K. F. Garrity, K. M. Rabe and D. Vanderbilt, Phys. Rev. Lett. **110**, 017603 (2013).
- [14] L. H. Yu., K. L. Yao and Z. L. Liu, Physica B **353**, 278 (2004).
- [15] H.C. Kandpal, C. Felser and R.J. Sechardi, Phys. D: Appl. Phys. **39**, 776 (2006).
- [16] A. Bouhmadou and R. Khenata, J. Phys. And Chem. Solid. **68**, 549 (2007).
- [17] Li Hui-Ping, Hou Zhu-Feng, Haung Mei-Chun and Zhu Zi-Zhong, Chinese. Phys. Lett. **20**, 114 (2003).
- [18] F. Soyalp, G. Uğur, H.c. Şen and M.R. Ellialtıoğlu, J. Allo and comp. **551**, 108 (2013).
- [19] K. Kuryama, K. Kushida and R. Taguchi, Solid. State commun. **108**, 429 (1998).
- [20] K. Kuryama and K. Kushida, J. Appll. Phys. **87**, 2303 (2000).
- [21] L. H. Yu., K. L. Yao and Z. L. Liu, Solid. Stat. Commun. **135**, 124 (2005).

- [22] Peter Y. Yu and Manuel Cardona, "*fundamental of semiconductors*", SpringerVerlage, Berlin (1999).
- [23] C. Kittel, "*Introduction to Solid State Physics*", fourth ed., John Wiley & Son, New York, (1971).
- [24] W. Voigt, Lehrbuch der Kridtallphysik, Taubner, Leipzig, (1928).
- [25] A. Reuss, Z. Angeww, Math, Mech. **9** 55 (1929).
- [26] R.Hill, Proc. Phys. Soc. London, Sect. A **65** 350 (1952).
- [27] J. Lubilner: "Plasticity Theory". University of California, Berkeley, (2008).
- [28] S.F. Pugh, Philos. Mag. **45** 823 (1954).

## Conclusion

Dans ce travail on a étudié les propriétés structurales de quelques semiconducteurs Nowotny-juza ; LiMgX (X=N, P et As) dans les trois phases  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , le calcul de l'équation d'état montre que la phase  $\alpha$  est la plus stable et la plus favorisé pour étudier les propriétés élastiques des trois composés, à cette effet, nous avons utilisé une méthode des ondes planes et pseudopotentiel (PP-PW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et la méthode de la réponse linéaire dans de la théorie de la perturbation de la fonctionnelle de la densité (DFPT).

Les paramètres structurales telles que le paramètre de réseau  $a$ , le module de compressibilité  $B$  et sa dérivé  $B'$  sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et théoriques disponibles dans les littératures.

Nous avons calculé les constantes élastiques  $C_{ij}$  dans les trois phases des composés étudiées, le calcul de  $C_{ij}$  dans les trois phases montre que LiMgN dans ces deux phases  $\gamma$  et  $\beta$  ne satisfait pas les critères de stabilité avec  $C_{11}-C_{12} < 0$ , aussi la phase  $\beta$  concernant LiMgP et LiMgAs.

Le calcul de ces constantes nous ont permis de déterminer d'autres grandeurs mécaniques telles que; le module de cisaillement  $G$ , le module de Young  $E$  ainsi que le coefficient de Poisson  $\nu$ .

Les valeurs du rapport  $B/G$  pour les trois semiconducteurs sont inférieur à la valeur critique qui sépare un comportement fragile et ductile, par conséquent, ces composés sont fragiles.

Les vitesses du son transversal et longitudinale dans les différents directions  $\Delta$ ,  $\Sigma$  et  $\lambda$  sont déterminées, aussi la vitesse du son moyenne, qui nous permise de calculer la température de Debye, puis on a estimé la fréquence de Debye qui est liée avec les phonons à basse fréquences qui sont connus sous le nom branches acoustiques.

## Résumé

### Résumé

Dans ce travail on a étudié les propriétés structurales et élastiques de quelques semiconducteurs Nowtny-Juza, LiMgN, LiMgP et LiMgAs utilisant la méthode des ondes planes-pseudopotentiel dans le cadre de la théorie de la densité de la fonctionnelle. On a calculé les paramètres structuraux de LiMgX dans les trois phases  $\alpha$ ,  $\beta$  et  $\gamma$ , le paramètre de réseau  $a$ , le module de compressibilité  $B$  et sa dérivé  $B'$  sont en bon accord avec d'autres données théoriques et des valeurs expérimentales. Dans la phase la plus stable  $\alpha$  on a calculé les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$  et les propriétés mécaniques liées, module de Young  $E$  et coefficient de Poisson  $\nu$  sont similaires avec d'autre calcul, le rapport  $B/G$  montre que tous les composés étudiés sont fragiles, les vitesses du son, la température de Debye et la fréquence de Debye sont aussi calculées.

**Mots-clés :** Semiconducteur- DFT- Constante élastique- abinit- Pseudopotentiel.

### Abstract

In the work we have studied the structural and the elastic properties of few members of the Nowotny-Juza semiconductors, LiMgN, LiMgP and LiMgAs by employing the plane wave pseudopotential based on density functional theory. The structural parametrs of LiMgX in three phases  $\alpha$ ,  $\beta$  and  $\gamma$  were calculated, lattice parameter  $a$ , bulk modulus  $B$  and its pressure derrivative  $B'$  were found in good agreement with the laterature data. In the favorite  $\alpha$ -phase the elastic constants  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  and  $C_{44}$  are calculated, and we have also evaluated the other mecanical properties relies, the Young modulus  $E$  and Poisson coefficient  $\nu$  in good agreement with the other theritical cauculation, the  $B/G$  report show all the studied compounds are fragile. The sound speeds, the Debye tmperature  $\theta_D$  and Debye frequency  $\omega_D$  are calculated.

**Keywords :** semiconductors-DFT- elastic constants-abinit- pseudopotential.

### الملخص

قمنا بدراسة الخواص البنوية و المرونية لبعض المركبات LiMgN, LiMgP, LiMgAs Nowtny-Juza. باستعمال الأمواج المستوية و شبه الكمون من خلال نظرية كثافة الدوال. قمنا بحساب الأبعاد البنوية ل المسلمات

LiMgX في ثلاث حالاته  $\alpha$  و  $\beta$  و  $\gamma$ .

قيمة معامل الشبكة  $a$  و معامل الانطغاط  $B$  و مشتقته الأولى  $B'$  على توافق تام مع قيم أعمال أخرى تجريبية و نظرية.

في الحالة  $\alpha$  قمنا بحساب الثوابت المرورية  $^{11}\text{C}$  و  $^{12}\text{C}$  و  $^{44}\text{C}$  الخواص الميكانيكية المرتبطة بها قيم معامل Young و معامل Poisson متماثلان مع أعمال نظرية أخرى.

النسبة تمثل B/G مقدار هشاشة المركبات بالنسبة ل  $\text{LiMgX}$  فهي مركبات هشّة السرعات الصوتية و حرارة Debye\* و تواتر  $(D\omega)$  Debye قمنا أيضا بحسابها.

**الكلمات المفتاحية** اشباه النواقل -نظرية كثافة الدوال- الثوابت المرورية - شبه الكمون