

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université LARBI TEBESSI-Tébessa-

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département des Sciences de la Matière



MEMOIRE DE MASTER



Domaine: Sciences de la Matière

Filière : Physique

Option: Physique de la matière condensée

Thème:

# Etude du composé ScN par le calcul du premier principe

Présenté par:

Charef Khawla & Mecheri kenza

Devant le jury

MANSOURI Mohamed El Hadi	M.C.B	Université de Tébessa	Président
El HASSASNA Amira	M.A.A	Université de Tébessa	Rapporteur
BELGHIT Hana	M.A.A	Université de Tébessa	Examineur

Date de soutenance 25/06/2019



### Déclaration sur l'honneur de non-Plagiat

(À joindre obligatoirement au mémoire; Remplie et signée)

Nous soussignons

Nom, prénom: Charef Khawla & Mecheri Kenza

N° de carte d'étudiant: (1) 14/34018863/2014 (2) 14/34018992/2014

Régulièrement inscrits (es) en **Master au Département Sciences de la Matière**

Année universitaire: **2018/2019**

Domaine: **Sciences de la matière**

Filière: **Physique**

Spécialité: condamnce'

Intitulé du mémoire:

Etude du composé  $SN$  par le calcul du premier principe

Attestons que notre mémoire est un travail original et que toutes les sources utilisées ont été indiquées dans leur totalité. Nous certifions également que nous n'avons ni recopié ni utilisé des idées ou des formulations tirées d'un ouvrage, article, ou mémoire, en version imprimée ou électronique, sans mentionner précisément leur origine et que les citations intégrales sont signalées entre guillemets.

Sanctions en cas de plagiat prouvé:

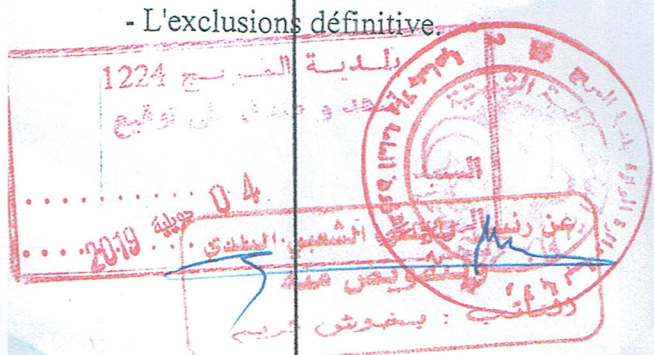
Les étudiants seront convoqués devant le conseil de discipline, les sanctions prévues selon la gravité du plagiat sont:

- L'annulation du mémoire avec possibilité de le refaire sur un sujet différent.
- L'exclusion d'une année du master.
- L'exclusions définitive.

Fait à Tébessa, le: 03/7/2019

Signature des étudiants (es):

(1): Charef (2): Mecheri



2017 717

الطالبان :

- شارف خولة ~~Al Sharaf~~

- مسزى نيرة ~~Al Masri~~ الموضوع : طلب تصحيح المذكرة

أشكر ويسرني أن لجنة المناقشة أنه تم تصحيح

الأخطاء الوحيدة من طرفكم للمذكرة الخارج

لديتها تحت عنوان :

" Etude du composé  $ScN$  par  
le calcul du premier principe "

الأستاذ المزيان  
لجنة المناقشة  
~~Al Mziyan~~

الأستاذ الرئيسي  
منصور محمد المادي  
Al Mansour

الأستاذ المساعد  
الحسانة أميرة  
Al Hassanat

**République Algérienne Démocratique et Populaire**  
**Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique**  
**Université LARBI TEBESSI-Tébessa-**

Faculté des Sciences Exactes et des Sciences de la Nature et de la Vie

Département des Sciences de la Matière



**MEMOIRE DE MASTER**

**Domaine: Sciences de la Matière**

**Filière : Physique**

**Option: Physique de la matière condensée**

**Thème:**

# **Etude du composé ScN par le calcul du premier principe**

**Présenté par:**

**Charef Khawla & Mecheri kenza**

**Devant le jury**

<b>MANSOURI Mohamed El Hadi</b>	<b>M.C.B</b>	<b>Université de Tébessa</b>	<b>Président</b>
<b>El HASSASNA Amira</b>	<b>M.A.A</b>	<b>Université de Tébessa</b>	<b>Rapporteur</b>
<b>BELGHIT Hana</b>	<b>M.A.A</b>	<b>Université de Tébessa</b>	<b>Examineur</b>

**Date de soutenance 25/06/2019**

## Remerciement

*Avant tout, nous remercions **ALLAH** tout puissant qui nous a aidé à réaliser ce travail.*

*Nous remercier notre encadreur Madame **El-HASSASNA Amira**, Maitre Assistante « A » à l'université de Tébessa, pour nous avoir suivis durant notre travail de mémoire, pour ses conseils précieux et la compétence de son encadrement.*

*Il nous est aussi très agréable de remercier Monsieur **MANSOURI Mohamed El Hadi**, Maitre de Conférences à l'université de Tébessa, qui nous a fait l'honneur de présider le jury de notre mémoire*

*Nos remerciements les plus élogieux à Madame **BELGHIT Hana**, Maitre Assistante « A » à l'université de Tébessa, qui a bien voulu accepter de faire partie du jury et d'examiner notre travail*

*Enfin, je voudrais remercier ma famille et tous nos amis avec qui on a divisé tant de moments de la vie et surtout mes parents pour leur soutien moral .que ce travail rende hommage à leur dévouement et à leur affection.*

## Dédicace

*Grâce à mon dieu qui est toujours présent avec moi dans les moments faciles et difficiles de  
la vie*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*Les plus chères personnes dans ma vie : Ma mère et mon père.*

*Je demande à Dieu de leur offrir du bien.*

*Mes chers frères et sœurs :*

***Oussema, Nour el Houda, Hichem, Mohamed el arbi, Sajed, Adouma, Jaloula (rouza),  
Radja.***

*Toute ma famille.*

*Mon cher ami qui m'a accompagné et soutenu **BiBO**.*

*Mon amie, ma sœur et ma collègue **Kenza**.*

*Mes amis et collègues et tous ceux qui m'ont encouragé :*

***Chaima, Sabrina, Nesrin, Marwa, Jarwa, Khawla, Halouma, Zahia, Hajura, Saliha, Nawa,  
Rym, Sabrin.***

**Khawla**

## Dédicace

*Grâce à mon dieu qui est toujours présent avec moi dans les moments faciles et difficiles de la vie*

*Je dédie ce modeste travail à :*

*Mon père **Khmessi** et ma mère **Arem***

*Ma sœur **Randa***

*Mon époux **Ahmed**.*

*Mon amie, ma sœur et ma collègue **Khawla***

*Toute ma famille **Mecheri** et **Abidi**.*

*Mes amis et collègues et tous ceux qui m'ont encouragé :*

***Sabrina, Nesrine, Souda, Haloum, Chokha, Jarwa, Chaima, Marwa, Roumaissa, Sabrina, Rym, Khawla***

*kenza*

## **Abstract**

In this work, we studied the structural, electronic and elastic properties of ScN, using the FP-LAPW linear plane wave method based on the density functional theory (DFT). The exchange correlation potential was determined by two approximations: the local density approximation (LDA) and Wu-Cohen generalized gradient approximation (WC-GGA), implemented in the wien2k code.

The structural properties are determined from the lattice parameter, the bulk modulus and its pressure derivative. The results are in good agreement with the theoretical and experimental available results.

The band structure and the density of state (DOS) show that binary compound ScN has an Indirect gap ( $\Gamma \rightarrow X$ ) obtained from the application of MBJ approximation which works to modify the energy rings. The obtained values are in perfect agreement with the theory.

Obtained results of the marinate study of the compound have yielded acceptable and reasonable results from the calculation of the elastic constants.

### **Key Words:**

ScN, FP-LAPW, structural properties, structural électronic, structural élastic



## **Résumé**

Dans notre travail nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et élastiques de Scandium de nitrogène (ScN), en utilisant la méthode linéaire des ondes planes augmentées à potentiel totale (FP-LAPW) qui est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). On a déterminé la potentiel d'échange et de corrélation par deux approximations : L'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation Wu-Cohen du gradient généralisé (WC-GGA) implémentées dans le code wien2k.

Les propriétés structurales sont déterminées à partir du paramètre de réseau, les résultats obtenus du paramètre de maille et du module de compressibilité et sa dérivée sont en bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux disponible.

Les structures de bandes et la densité d'états DOS montrent que le composé ScN a un gap indirect ( $\Gamma \rightarrow X$ ) par l'utilisation de l'approximation MBJ.

L'étude des propriétés élastiques de ce composé nous a mené à de bons résultats qui sont en bon accord avec ceux disponibles dans la littérature.

### **Mots clé :**

ScN, FP-LAPW, propriétés structurales, propriétés électronique, propriétés élastique

## ملخص

في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص البنيوية و الالكترونية و المرونية للمركب سكانديوم النتروجين (ScN) وذلك باستخدام طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا في كيون كلي (FP-LAPW) اعتمادا على نظرية دالية الكثافة (DFT) المدمجة في برنامج wien2k. ثم حساب كيون التبادل و الارتباط (كثافة المحلية) حيث استعملنا تقريب كثافة الموضع (LDA) و تقريب التدرج المعمم (WC-GGA).

تم تحديد الخصائص البنيوية من ثابت الشبكة ومعامل الانضغاطية و مشتقته. النتائج المحصل عليها متوافقة مع النتائج النظرية والتجريبية المتاحة.

من خلال تحديد بنية عصابات الطاقة وكثافة الحالة (DOS) حيث استطعنا معرفة طبيعة المركب اين وجدنا ان المركب ScN لديها فجوة غير مباشرة ( $\Gamma \rightarrow X$ ) تم الحصول عليها من خلال التقريب MBJ . فالنتائج المحصل عليها في توافق مع النتائج النظرية.

دراسة الخواص المرونية لهذا المركب اعطت نتائج مقبولة و معقولة مع النتائج النظرية المتاحة انطلاقا من حساب ثوابت المرونة.

## كلمات مفتاحية :

سكانديوم النتروجين, طريقة الامواج المستوية الخطية , الخصائص البنيوية, الخصائص الالكترونية , الخصائص المرونية

## **Table des matières**

Liste des figures	i
Liste des Tableaux	ii
Liste des symboles	iii
Introduction générale	1

### **Chapitre I : La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)**

I.1.Introduction	4
I.2.L'approximation de Born-Oppenheimer.....	4
I.3.L'approximation de Hartree (les électrons libres).....	5
I.4.L'approximation de Hartree-Fock.....	6
I.5.La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	7
I.5.1.Les équation de Kohn et Sham.....	7
I.5.1.1.L'approximation de la densité local (LDA).....	9
I.5.1.2. L'approximation du gradient général(GGA).....	10
I.6. La résolution des équations de Kohn et Sham.....	10

### **Chapitre II :La méthode des ondes planes augmentées linéarisées**

#### **(FP-LAPW)**

II.1. Introduction	13
II.2. La méthode des ondes planes augmentées(APW).....	13
II.3. La méthode linéaire des ondes planes augmentées(LAPW).....	15
II.3.1. La synthèse de fonction de base de la méthode LAPW.....	16
II.3.1.1. Les fonctions radiales non relativistes.....	16
II.3.1.2. Les fonctions radiales relativistes.....	18
II.3.2. Les coefficients $A_{ml}$ et $B_{ml}$ .....	23

II.4. Représentation de la densité de charge et du potentiel.....	25
II.4.1. Potentiel d'échange et de corrélation.....	25
II.4.2. Le potentiel coulombien.....	26
II.5. le code Wien2k.....	26

### **Chapitre III : Résultats et discussions**

III.1. Introduction	30
III.2. Détails de calcul.....	30
III.3. Les propriétés structurales.....	32
III.4. Les propriétés électroniques.....	34
III.4.1. Les structures de bandes.....	34
III.4.2. La densité d'états totale et partielle.....	36
III.5. Propriétés l'élastiques.....	39
Les Références	41
Conclusion générale	44

Liste des figures

<i>Figure</i>	<i>Titre</i>	<i>Page</i>
<b>Chapitre 1</b>		
<b>Figure I-1</b>	Le schéma de calcul self-consistent de la fonctionnelle de la densité pour la résolution des équations de Kohn et Sham	<b>11</b>
<b>Chapitre II</b>		
<b>Figure II-1</b>	Le potentiel muffin-tin	<b>13</b>
<b>Figure II-2</b>	Les programmes du calcul auto-cohérent du code WEIN2K	<b>28</b>
<b>Chapitre III</b>		
<b>Figure III-1</b>	La variation de l'énergie totale en fonction de nkpt pour le composé ScN	<b>31</b>
<b>Figure III-2</b>	La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre $R_{MT}K_{MAX}$ pour le composé ScN	<b>31</b>
<b>Figure III-3</b>	La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé ScN avec l'approximation LDA	<b>33</b>
<b>Figure III-4</b>	La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé ScN avec l'approximation WC-GGA	<b>33</b>
<b>Figure III-5</b>	La structure de bande du composé ScN avec les approximations LDA et mBJ	<b>35</b>
<b>Figure III-6</b>	La structure de bande du composé ScN avec les approximations WC-GGA et mBJ	<b>36</b>
<b>Figure III-7</b>	La densité d'états totale du ScN par LDA et mBJ	<b>37</b>
<b>Figure III-8</b>	La densité d'états totale du ScN par WC-GGA et mBJ	<b>37</b>
<b>Figure III-9</b>	La densité d'états partielle de ScN par LDA et mBJ	<b>38</b>
<b>Figure III-10</b>	La densité d'états partielle de ScN par WC-GGA et mBJ	<b>38</b>

**Liste des Tableaux**

<b><i>Tableau</i></b>	<b><i>Titre</i></b>	<b><i>Page</i></b>
<b><i>Chapitre III</i></b>		
<b><i>Tableau III-1</i></b>	Le paramètre du réseau $a_0$ et le module de compressibilité B et sa dérivée B' pour le composé ScN	<b>34</b>
<b><i>Tableau III-2</i></b>	Les constantes élastiques (en GPa) du composé binaires ScN	<b>39</b>

Liste des symboles

<p><math>\hbar</math> : Constante de Planck réduite (appelée aussi constante de Dirac).</p> <p>H : l'Hamiltonien du système.</p> <p><math>\psi</math> : la fonction d'onde du système.</p> <p><math>E_{tot}</math> : l'énergie totale du système.</p> <p><math>m_k</math> : la masse de noyau k.</p> <p><math>Z_k</math> : la charge de noyau k.</p> <p><math>m_i</math> : la masse de l'électron i.</p> <p><math>r_i</math> : le vecteur de position de l'électron.</p> <p><math>r_k</math> : le vecteur de position de noyau.</p> <p><math>H_i</math> : l'Hamiltonien de chaque électron.</p> <p><math>U_i(r_i)</math> : potentiel produit par les noyaux.</p> <p><math>V_i(r_i)</math> : le potentiel moyen produit par les autres électrons.</p> <p><math>\psi_{el}</math> : Fonction d'onde électronique.</p> <p><math>V_{ext}(r)</math> : potentiel externe unique.</p> <p>T : la somme des énergies cinétique de tous les électrons effectifs.</p> <p><math>V_{eff}(r)</math> : potentiel effectif.</p> <p><math>V_c(r)</math> : Le potentiel coulombien.</p> <p><math>V_{xc}(r)</math> : Le potentiel d'échange et corrélation.</p> <p><math>\varepsilon_{xc}</math> : La densité d'énergie d'échange corrélation.</p> <p><math>E_{xc}^{LDA}[\rho(r)]</math> : Energie de XC, LDA du système</p>	<p><math>E_{xc}^{GGA}</math> : Energie de XC, GGA du système.</p> <p><math>R_{MT}</math> : le rayon de la sphère MT.</p> <p><math>\Omega</math> : Le volume de la cellule élémentaire.</p> <p><math>C_G, A_{lm}</math> : Les coefficients du développement.</p> <p><math>Y_{lm}</math> : les harmoniques sphériques</p> <p><math>E_l</math> : l'énergie linéarisation.</p> <p><math>V(r)</math> : le potentiel Muffin-Tin</p> <p>c : la vitesse de la lumière.</p> <p>p : l'impulsion.</p> <p>m : la masse des électrons.</p> <p><math>\sigma</math> : la matrice de Pauli.</p> <p>k : le numéro quantique relativiste donné par l et j.</p> <p><math>\chi_{k\mu}</math> : l'opérateur de spin.</p> <p><math>\chi_s</math> : l'opérateur de spin non relativiste (spin-haut, spin-bas).</p> <p>k : le vecteur d'onde.</p> <p><math>k_n</math> : un vecteur du réseau réciproque.</p> <p><math>V_0</math> : le volume d'équilibre.</p> <p><math>B'</math> : la dérivé du module de rigidité.</p>
--	---

## Introduction général

L'étude des propriétés de matériaux à un intérêt particulier sur le progrès technologique et industriel dans les différents domaines de la physique. Elle dépend du développement de nouveaux matériaux intéressants qui sont les semi-conducteurs [1,2]

Les semi-conducteurs sont des matériaux qui possèdent une conductivité électronique entre les métaux et les isolants. Il existe plusieurs matériaux des semi-conducteurs comme les semi-conducteurs de Nitrure III, qui ont démontré leurs nombreux avantages pour les dispositifs optoélectronique, et électronique (les diodes, laser (LD)...), le Nitrure d'aluminium (AlN), et les autres Nitrure du groupe III (GaN, InN) et ScN.

Dans ce travail nous avons déterminé les propriétés structurales, électroniques et élastiques du composé binaire qui est le Scandium de nitrure (ScN), qui se cristallise dans la structure NaCl. Le choix de Nitrure de Scandium (ScN) est dû à ses propriétés qui sont proches de celles des nitrures d'éléments III traditionnels. Ces propriétés ont lui a donné un grand intérêt pour son utilisation dans de nouveaux alliages de nitrure et pour les solutions solides de Sc-A-N, où A est Al, Ga ou In, principalement destiné aux applications optiques et électroniques.

Le Scandium de Nitrogène ou de nitrure (ScN) est un matériau de transition, il partage certaines propriétés physique : sa haute dureté ( $H=21\text{Gpa}$ ) [2], sa résistance mécanique et sa stabilité à haute température ( $2600\text{c}^\circ$ ) [3]. Le ScN cristallise dans plusieurs structures, parmi ces structures : NaCl (B1), CsCl (B2), NiAs ZB (B3) et Wurzite (B4), mais la structure la plus stable de ce composé est la structure NaCl.

Les premiers travaux théoriques ont suggéré que le ScN était un semi métal [3- 5] mais d'autres travaux de Abou-Jaferet al [4] ont montré que le ScN est un semi -conducteur du gap indirect qui est calculé l'énergie du gap de ScN dans la phase de rocksalt est utilisant la méthode FP-LAW (la méthode de linéaire des ondes planes augmentées) avec les approximations suivant : l'approximation de la densité locale (LDA), l'approximation des gradients généralisé (GGA).

Ce travail a pour but de contribuer à la détermination des propriétés structurales, électroniques et élastiques du Scandium de Nitrogène (ScN) et comprend trois chapitres :



Une introduction générale permettant de se localiser dans le contexte d'études. Dans le premier chapitre nous présentons les concepts de base de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Le deuxième se focalisera sur le formalisme de la méthode linéaire des ondes planes augmentées à potentiel total (FP-LAW) et se termine par une brève étude de la littérature sur le code WIEN2K.

Dans le dernier chapitre nous exposons les résultats concernant les propriétés structurale, électronique et élastique du composé étudié ScN.

Nous terminons et résumons l'essentiel de cette étude par une conclusion générale.

**Références :**

***Chapitre I :***  
***La Théorie de la Fonctionnelle de***  
***la Densité (DFT)***

**I.1.Introduction:**

Un système cristallin est constitué de plusieurs particules où il y a des interactions entre les charges positives et les charges négatives, en principe ce système peut être déterminé à l'aide de la résolution de l'équation de Schrödinger qui s'écrit sous la forme[6]

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

$$H = T_e + T_n + V_{e-n} + V_{e-e} + V_{n-n} \quad (\text{I - 2})$$

Où:

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2} \sum \frac{\nabla_i^2}{m_i}$$

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum \frac{\nabla_k^2}{m_k}$$

$$V_{e-n} = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|}$$

$$V_{e-e} = -\sum_{i,k} \frac{Z_k e^2}{|r_i - r_k|}$$

$$V_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{k,l} \frac{e^2 Z_k Z_l}{|r_k - r_l|}$$

i; j: coordonnées des électrons, k et l coordonnées des noyaux,  $m_k$  la masse des noyaux considéré.  $m_i$  est la masse des électrons,  $r_i$  et  $r_k$  sont respectivement les distances entre noyau, électron.

La résolution de l'équation de Schrödinger est complexe et très difficile pour un système de plusieurs corps en interaction donc pour traiter ce problème il faut faire des approximations.

**I.2. L'approximation de Born-Oppenheimer :**

Max Born et Robert Oppenheimer [7] ont proposé une approximation pour résoudre l'équation Schrödinger qui se base sur le fait que la masse d'un noyau quelconque est

nettement supérieur à celle de l'électron, c'est-à-dire qu'elle néglige l'énergie cinétique du noyaux et l'énergie potentielle noyaux-noyaux devienne une constante (le mouvement des noyaux par rapport aux électrons peut être négligé)

Alors nous donnons un nouveau Hamiltonien :

$$H = T_e + V_{n-e} + V_{e-e}$$

Où est :

$$V_{n-n} = C^{cst}$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_k \frac{e^2 Z_k}{|r_i - r_k|} \quad (\text{I - 3})$$

Donc l'équation de Schrödinger s'écrite sous la forme suivante :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_i^2}{m_i} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{i,k} \frac{e^2 Z_k}{|r_i - r_k|} \right] \psi_{el} = E_{el} \psi_{el} \quad (\text{I - 4})$$

Mais cette approximation ne suffit pas pour résoudre l'équation de Schrödinger à cause de la dépendance des mouvements des électrons.

### ***1.3. L'Approximation de Hartree (les électrons libres) :***

Cette approximation a proposé en 1927 par Hartree [8] qui est basée sur l'hypothèse d'électron libre qui ne tenir pas compte les interactions entre les électrons et les états de spin.

L'Hamiltonien de chaque électron est :

$$H_i = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + U_i(r_i) + V_i(r_i) \quad (\text{I - 7})$$

Où :

$$U_i(r) = \iiint \frac{q^2 \rho_i(r')}{|r - r'|} d^3 r' \quad (\text{I - 8})$$

$$\rho_i(r) = \sum_{i \neq j} |\psi_j(r)|^2 \tag{I-9}$$

$U_i(r_i)$ : Potentiel produit par les noyaux.

$V_i(r_i)$ : Le potentiel des noyaux produit par les autres électrons.

$$E = \sum_{i=1}^N \varepsilon_i \tag{I-10}$$

E : L'énergie total du système

Donc l'équation de Schrödinger s'appelle l'équation de Hartree dans cette partie de proche

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_k}{|r_i - r_k|} + e^2 \sum_{i \neq j} \frac{|\psi_j(r)|}{|r_i - r_j|} dr \right] \psi_i(r) = \varepsilon \psi_i(r) \tag{I-11}$$

L'équation de Hartree est simple mais elle ne respecte pas le principe d'exclusion de Pauli[9], ce qui impose à la fonction d'onde d'être antisymétrique par rapport à l'échange des coordonnées de particule mise en jeu.

#### 1.4. L'approximation de Hartree-Fock :

Hartree et Fock ont montré qu'en exprimant la relation de Hartree à l'aide d'un déterminant de Slater.

$$\psi_i(r) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(r_1) & \psi_1(r_2) & \dots & \psi_N(r_N) \\ \psi_2(r_1) & \psi_2(r_2) & \dots & \psi_N(r_N) \\ \psi_3(r_1) & \psi_3(r_2) & \dots & \psi_N(r_N) \end{vmatrix} \tag{I-12}$$

Où :  $\frac{1}{\sqrt{N!}}$  est la constante de normalisation.

Alors l'équation de Hartree-Fock s'écrit :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{i,k} \frac{e^2 Z_k}{|r_i - r_k|} + e^2 \sum_{i \neq j} \int \frac{|\psi_j(r)|^2}{|r_i - r_j|} dr \right] \psi_i(r) - e^2 \sum_a \int \frac{\psi_j^*(r_i) \psi_j(r_i) \psi_a(r)}{|r_i - r_j|} dr = \varepsilon \psi_i(r) \tag{I-13}$$

Dans cette approximation l'énergie total du système est définie comme une fonctionnel de fonction d'onde antisymétrique, elle prend en compte l'échange et aussi l'interaction coulombienne dans l'hamiltonien. Mais malgré le terme d'échange cette approximation ignore la corrélation qui existe entre les électrons. L'inclusion de cette corrélation est faite par la théorie de la fonctionnel de la densité.

### ***1.5. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :***

Cette théorie fut introduite au milieu des années soixante par Hohenberg et Kohn [10] qui est basée sur les deux théorèmes ou toutes les propriétés de l'état fondamental d'un système sont des fonctions d'une seule densité électronique.

- Le premier théorème de Hohenberg et Kohn prouve que pour tout système de particules en interaction l'énergie totale de l'état fondamental  $E$  est une fonctionnelle unique de la densité de particules  $\rho(r)$ ; avec un potentiel extérieur  $V_{ext}(r)$  donné.

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

$$E = E[\rho(r)] \quad (\text{I-14})$$

$$E[\rho(r)] = T + e^2 \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dr dr' - e^2 \sum_k \int \frac{Z_k \rho(r)}{|R_k - r|} dr + E_{xc}[\rho(r)] \quad (\text{I-15})$$

15)

$T$  : est la somme des énergies cinétique de tous les électrons effectifs qui se déplacent indépendamment dans un potentiel effectif

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_i n_i \int \psi_i^* \nabla^2 \psi_i(r) dr \quad (\text{I-16})$$

- Le deuxième théorème de Hohenberg et Kohn découle du fait que, la fonctionnelle de l'énergie total de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental et à la densité de particules de l'état fondamental.

Alors :

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{I-17})$$

#### ***1.5.1. Les équations de Kohn et Sham :***

Kohn et Sham [11] ont montré que pour tout système réel composé de  $N$  électrons en interaction il existe un système de  $N$  électrons non interagissant soumis chacun à un potentiel

extérieur effectif  $V_{eff}(r)$  qui remplace à potentiel extérieur  $V_{ext}(r)$  mais générant la même densité.

Le potentiel effectif  $V_{eff}(r)$  s'écrit sous la forme :

$$V_{eff}(r) = V_c(r) + V_{xc}(r) \tag{I-18}$$

Où :

$V_c(r)$ : Le potentiel coulombien.

$V_{xc}$  : Le potentiel d'échange et corrélation des électrons.

$$V_c(r) = -e \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + e^2 \sum_k \frac{Z_k}{|R_k-r|} \tag{I-19}$$

$$V_{xc} = \frac{\delta E_{xc}[\rho(r)]}{\delta \rho(r)} \tag{I-20}$$

Alors l'hamiltonien du système s'écrit comme suivant :

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \nabla_{ri}^2 + \sum_{i=1}^n V_{eff}(r_i) \tag{I-21}$$

H : ne contient pas le terme d'interaction électron-électron.

La fonction d'onde de l'état fondamental se décrit exactement par une fonction d'onde  $\psi$  antisymétrique par rapport à l'échange, donnée par un déterminant de Slater des spins orbitales mono électroniques  $\varphi_i(r)$  appelées orbitales de Kohn-Sham, Donc l'équation de Schrödinger résultante à une particule s'écrit alors sous la forme de l'équation de Kohn et Sham

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - e \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' + e^2 \sum_k \frac{Z_k}{|R_k-r|} + V_{xc}(r)[\rho(r)] \right] \psi_i(r) = \varepsilon_i \psi_i(r) \tag{I-22}$$

Où :  $i=1, \dots, N$



La densité électronique de l'état fondamental s'écrit :

$$\rho(r) = \sum_n^N |\psi_n(r)|^2 \quad (\text{I-23})$$

A partir du système fictif et des deux théorèmes de Hohenberg et Kohn nous écrivons la fonctionnelle de l'énergie de Kohn et Sham sous la forme suivante:

$$E_{KS}[\rho] = E_{HK}[\rho] + \int \rho(r) \mathcal{V}_{est}(r) dr \quad (\text{I-24})$$

$$E_{HK}[\rho] = T[\rho] + \frac{1}{2} \int V_H(r) \rho(r) dr + E_{xc}[\rho] \quad (\text{I-25})$$

Avec :  $T(\rho)$  l'énergie cinétique du système et  $V_H$  le potentiel de Hartree qui permet de calculer l'énergie d'interaction entre les électrons.

$E_{xc}(\rho)$ : la fonctionnelle d'échange et corrélation.

On remarque que les équations (I-18) et (I-21) et (I-22) sont connues sous le nom des équations de Kohn et Sham avec l'énergie total  $E_{KS}$  résultante. Ces équations sont indépendantes de toute approximation sur la fonctionnelle  $E_{xc}[\rho(r)]$  donc il est impossible de donner exactement l'énergie d'échange et de corrélation. Alors il est très important de faire des approximations en donnant des formes simples à  $E_{xc}$  [12]

### 1.5.2.1. L'approximation de la densité Local (LDA) :

L'idée de l'approximation de la densité local [13] est de considérer l'échange-corrélation comme une quantité local définie en un point r. dépendant faiblement des variations de la densité autour de ce même point r. cette approximation est la base de toutes les fonctionnelles d'échange -corrélation moderne et peut- être définie comme suit :

$$E_{xc}^{LDA} = \int dr^3 \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r)] \quad (\text{I-26})$$

Il existe également une version de LDA qui permet de prendre en compte le spin électronique, c'est l'approximation de la densité de spin local LSDA ou l'énergie d'échange et de

corrélation  $E_{xc}$  devient une fonctionnelle des deux densités de spin haut et bas [14]

$$E_{xc}^{LSDA}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho_{\uparrow}(r), \rho_{\downarrow}(r)) dr^3 \quad (I-27)$$

Avec :

$$\varepsilon_{xc}(r) = \varepsilon_{xc}[\rho(r)] \quad (I-28)$$

$E_x$  : est la densité d'énergie d'échange – corrélation.

### 1.5.2.2. l'approximation du gradient général (GGA) :

La plus grande source d'erreur de la LDA provient de l'énergie d'échange qui est souvent sous- estimée tendus que l'énergie de corrélation est souvent surestimée même si en valeur absolue (sa contribution à l'énergie total est plus petite).les corrections introduites a la LDA reposent sur l'idée qui consiste à tenir en compte la variation locales de la densité. Pour cette raison le gradient de la densité électronique a été introduit conduisant à l'approximation des gradients généralisé (GGA) dans le quelle l'énergie d'échange et de corrélation est une fonction de la densité électronique et son gradient [15]

$$E_{xc}^{GGA} = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}[\rho(r), |\nabla \rho(r)|] dr^3 \quad (I-29)$$

$$E_{xc}^{GGA}(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}) = \int f(\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}, \nabla \rho_{\uparrow}, \nabla \rho_{\downarrow}) dr^3 \quad (I-30)$$

### 1.6. La résolution des équations de Kohn et Sham :

La résolution des équations de Kohn et Sham se fait d'une manière interactive (self-consistante) en utilise un schéma d'interaction auto- cohérent illustré par l'organique de figure (I-1).

On commence par injecter la densité de charge initial  $\rho_{int}(r)$  ensuit la nouvelle densité de charge  $\rho_{sort}(r)$  qui est construite avec les valeurs propres de l'équation séculaire en utilisant la densité de charge totale  $\rho(r)$  et calculer le potentiel pour résoudre les équations de Kohn – Sham et déterminer  $E_f$  et calculer  $\rho_{sort}(r)$  comme le schéma ci-dessous.





***Chapitre II***  
***La méthode linéaire des ondes  
planes augmentées (FP-LAPW)***

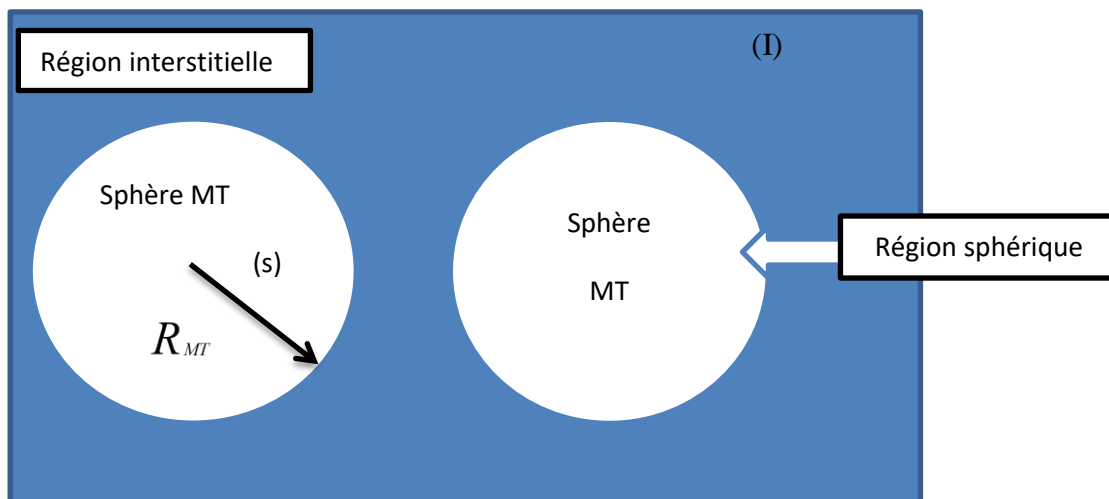
### II.1. Introduction :

L'étude des différentes propriétés de la matière, comme l'énergie de cohésion la densité de charge et la détermination des structures de bandes ..... etc. est l'un des problèmes les plus ardues. Cependant, il y a plusieurs méthodes de calculs avec lesquelles on arrive à simuler ces propriétés et notamment la structure électronique des solides

### II.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW) :

La méthode des ondes planes augmentées (APW) [16,17] a été développée par Slater en 1937 [18]. Le but de cette méthode est : la solution de l'équation de Schrödinger pour un potentiel constant est une onde plane, tandis que pour un potentiel sphérique une façon de décrire un potentiel cristallin de type Muffin-Tin (M-T) (les figure (II-1) et (II-2) est donc de diviser l'espace en deux régions) :

- Une première région (S) constituée de sphères centrées sur chaque site atomique dans la quelles les fonctions d'onde seront basée sur des fonctions radiales
- Une seconde région (I) dite interstitielle, se situant entre les atomes et pour laquelle les fonctions de bases sont des ondes planes



**Figure (II-1):** le potentiel muffin-tin [19].

Donc le potentiel Muffin – Tin prend la forme suivante :

$$V(r) = \begin{cases} V(r) & r > R_{MT} \\ C^{cte} & r < R_{MT} \end{cases} \quad (\text{II-1})$$

Les fonctions d'onde du cristal sont développées dans des bases différentes, selon la région considérée. Des solutions radiales de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère MT et des ondes planes dans la région interstitielle.

Donc les deux régions sphérique et interstitielle sont définies par la fonction d'ondes suivante :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) \end{cases} \quad (\text{II} - 2)$$

$\Omega$ : le volume de la cellule élémentaire.

$C_G$  et  $A_{lm}$  : sont les coefficients de développement en ondes planes et en harmoniques sphériques  $Y_{lm}$  respectivement.

$R$  : la position en coordonnées polaire à l'intérieur de la sphère.

$K$ : le vecteur d'onde de zone de Brillouin irréductible.

$G$ : le vecteur de l'espace réciproque.

$Y_{lm}$  : les harmoniques sphériques.

$\{lm\}$  : L'index du moment angulaire.

$U_l(r)$ : une solution numérique de la partie radiale de l'équation de Schrödinger qui s'écrit sous la forme

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r) = 0 \quad (\text{II} - 3)$$

$E_l$ : l'énergie de linéarisation.

$V(r)$ : le potentiel Muffin-Tin.

Les coefficients  $A_{lm}$  doivent être développés en fonction des coefficients  $C_G$  des ondes planes existantes dans la région interstitielle :

$$A_{lm} = \frac{4\pi^l}{\Omega^{1/2}U_l(R_a)} \sum_G C_G j_l(k+g|R_a) Y_{lm}^a(k+G) \quad (\text{II} - 4)$$

$j_l$  : sont les fonctions de Bessel à l'ordre  $l$ .

### II.3. La méthode linéaire des ondes planes augmentées (LAPW) :

La présence d'asymptotes dans la méthode APW était le principal inconvénient néanmoins elle fonctionne au mieux pour les systèmes simples avec seulement peu de valeurs propres. En 1975, Ander [20] a proposé la méthode dans laquelle il a utilisé des combinaisons linéaires des fonctions radiales  $u_l$  et leurs dérivées  $\dot{u}_l$  par rapport à l'énergie à l'intérieur des sphères.

Les fonctions  $U_l$  sont définies comme dans la méthode APW. Par contre la fonction  $\dot{u}_l$  doit satisfaire l'équation suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = r\dot{U}_l(r) \quad (\text{II} - 5)$$

On définit les fonctions d'ondes comme des ondes planes augmentées linéairement (LAPW) elles s'écrivent :

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(g+k)r} & r > R_{MT} \\ \sum_{lm} \left[ A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r) \right] Y_{lm}(r) & r < R_{MT} \end{cases} \quad (\text{II} - 6)$$

Où les coefficients  $B_{lm}$  correspondent à la fonction  $U_l$  ils sont de même nature que les coefficients

$A_{lm}$ . Alors, la fonction  $U_l$  peut être développée en fonction de sa dérivée  $\dot{U}_l$  et de l'énergie  $E_l$

$$U_l(r) = U_l(\varepsilon_l, r) + (\varepsilon - E_l) r \dot{U}_l(r) + O((\varepsilon - E_l)^2) \quad (\text{II} - 7)$$

Le dernier terme définit l'erreur quadratique énergétique.



Avec cette procédure est moins bonne que celle de la méthode des APW. Les erreurs introduites dans le calcul de la forme des fonctions d'onde et de l'énergie de bande sont de l'ordre  $(\varepsilon - E_l)^2$ ,  $(\varepsilon - E_l)^4$  respectivement.

Malgré cet ordre d'erreur, les fonctions LAPW forment une bonne base qui permet avec une seule  $E_l$  d'obtenir toutes les bandes de valence dans un grand intervalle d'énergie.

- Dans la méthode LAPW l'énergie des bandes aux points K est obtenue par une simple diagonalisation.
- Le problème de l'asymptote est éliminé par l'introduction de la dérivée de la fonction par rapport à l'énergie qui garantit le non découplent des ondes planes avec les fonctions radiales.
- La base de la méthode LAPW est plus flexible car il y a plus de liberté variation el que dans la méthode APW.

### II. 3.1. La synthèse de fonction de base de la méthode LAPW :

La synthèse des fonctions de base LAPW consiste à :

- 1- La détermination des fonctions radiales  $U_l(r)$  et leurs dérivées  $\dot{U}_l$  par rapport à l'énergie.
- 2- La détermination des coefficients  $A_{lm}$  et  $B_{lm}$  en imposant la continuité de la fonction d'onde et sa dérivée à limite de la sphère Muffin-Tin.

#### II.3.1.1. Les fonctions radiales non relativistes :

Dans ce cas, les fonctions radiales  $U_l(r)$  sont des solutions de l'équation de Schrödinger avec un potentiel sphérique et pour une énergie de linéarisation  $E_l$

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (\text{II} - 8)$$

Avec

$V(r)$ : est la composante sphérique du potentiel dans la sphère MT pour  $l=0$ .

La condition aux limites  $rU_l(r) = 0$  ayant été appliquée, la dérivée par rapport à l'énergie  $E_l$  est

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r \dot{U}_l(r) = r U_l(r) \quad (\text{II} - 9)$$

Les solutions radiales doivent être normalisées dans la sphère MT

$$\int_0^{R_a} r^2 U_l^2(r) dr = 1 \quad (\text{II} - 10)$$

$U_l$  est une solution homogène de l'équation inhomogène (II-9) de la forme :

$$h \dot{U}_l - E U_l = U_l \quad (\text{II} - 11)$$

En utilisant la condition de normalisation (II-11) il apparait immédiatement que la fonction  $U_l$  et sa dérivée sont orthogonales :

$$\int_0^{R_a} r^2 U_l^2(r) \dot{U}_l(r) dr = 1 \quad (\text{II} - 12)$$

La fonction  $\dot{U}_l$  est normalisée

$$N_l = \int_0^{R_a} [r \dot{U}_l(r)]^2 dr = 1 \quad (\text{II} - 13)$$

La fonction de normalisation peut être remplacée par l'équation suivant :

$$R_a^2 \left[ U_l'(R_a) \dot{U}_l(R_a) - U_l(R_a) \dot{U}_l'(R_a) \right] = 1 \quad (\text{II} - 14)$$

Où

$$U_l'(E, r) = \left\{ \frac{\partial U_l(E, r)}{\partial r} \right\} \quad (\text{II} - 15)$$

$$\dot{U}_l(E, r) = \left\{ \frac{\partial U_l(E, r)}{\partial E} \right\} \quad (\text{II} - 16)$$

Cette équation sert à déterminer numériquement les fonctions  $U_l(r)$  et  $\dot{U}_l(r)$  avec cette normalisation on peut développer  $U_l$  sous la forme :

$$U_l(E, \delta) = U_l(r) + \delta U_l(E) + \dots \quad (\text{II} - 17)$$

Avec ce choix la norme de  $\dot{U}_l(r)$ , soit  $\|U_l(r)\|$ , indique l'ordre de grandeur de l'énergie  $E_l, E_n$  les erreurs sur l'énergie de linéarisation sont acceptables selon Andersen quand :

$$\|U_l(r)\| |E_l - E| \leq 1 \quad (\text{II} - 18)$$

Si un tel choix n'est pas disponible, plusieurs options sont disponibles :

- diviser le domaine d'énergie en fenêtres, et traiter chaque fenêtre séparément avec une énergie  $E_l$  appartenant à chaque état
- utiliser un développement sous la forme d'orbitales locales (méthode quadratique)
- réduire la taille des sphères ce qui revient à réduire la norme du dérivé de  $U_l(r)$

Les deux premières options sont les plus utilisées et seront exposées dans la suite

### II.3.1.2. les fonctions radiales relativistes :

Dans la méthode FP-LAPW, les corrections relativistes sont importantes uniquement lorsque la vitesse de l'électron est du même ordre de grandeur que la vitesse de la lumière. Les effets relativistes sont pris en compte à l'intérieur. Et dans la région interstitielle la vitesse de l'électron est limitée par le cutoff dans l'espace de K [21] . Par conséquent les fonctions radiales sont les composantes de l'Hamiltonien correspondant :

$$H_D = c\alpha p + (\beta - 1)mc^2 + V(r) \quad (\text{II} - 19)$$

Où:

C : est la vitesse de la lumière

p : est l'impulsion

$m$ : la masse des électrons

$\alpha$  et  $\beta$  : sont deux matrices données par :

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} ; \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{II} - 20)$$

$\sigma$  : est la matrice de Pauli.

$\varphi$  sont les vecteurs propres de  $H_D$  , ils s'écrivent à l'aide des deux fonctions  $\phi$  et  $\chi$

$$\psi = \begin{pmatrix} \phi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{II} - 21)$$

$\phi$  : est appelé la grande composante de la fonction d'onde et  $\chi$  la petite.

Avec l'équation de Schrödinger conduit à :

$$c(\sigma p)\chi = (\varepsilon - V)\phi \quad (\text{II} - 22)$$

$$c(\sigma p)\phi = (\varepsilon - V + 2mc^2)\chi \quad (\text{II} - 23)$$

A partir de ces deux équations, on obtient :

$$\frac{1}{2m} \left( \sigma p \left( 1 + \frac{\varepsilon - V}{2mV^2} \right)^{-1} \right) (\sigma p)\phi + V\phi = \varepsilon\phi \quad (\text{II} - 24)$$

En utilisant l'approximation :

$$\left( 1 + \frac{\varepsilon - V}{2mV^2} \right)^{-1} \approx 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \quad (\text{II} - 25)$$

Où :

$$pV = Vp - i\hbar\nabla V \quad (\text{II} - 26)$$

On obtient l'équation différentielle vérifiée par  $\phi$  :

$$\left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \right) \frac{p^2}{2m} - V \right] \phi - \frac{\hbar^2}{2m^2c^2} (\nabla \nabla \nabla \phi) + \frac{\hbar^2}{4m^4c^2} (\sigma [\nabla V, p] \phi) = \varepsilon \phi \quad (\text{II} - 27)$$

Lorsque le potentiel possède une symétrie sphérique l'équation (II\_27) devient :

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V - \frac{P^4}{8m^4C^2} - \frac{\hbar^2}{4m^2C^2} \frac{dV}{dr} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2C^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \left( L, \vec{S} \right) \right] \phi = \varepsilon \phi \quad (\text{II} - 28)$$

Les deux premiers termes correspondent à l'équation de Schrödinger non relativiste

Les deux dernières proviennent respectivement de la correction de masse de Darwin, le dernier terme il correspond au couplage spin orbite. À cause de ce dernier terme,  $\psi$  n'est pas plus une fonction propre du moment de spin.

La solution de l'équation de Dirac à l'intérieur de la sphère MT devient

$$\psi_{nk} = \begin{bmatrix} g_k \chi_{nk} \\ -f_k \sigma_r \chi_{k\mu} \end{bmatrix} \quad (\text{II} - 29)$$

Et les fonctions  $g_k$  et  $f_k$  vérifient les équations radiales suivantes :

$$\frac{df_k}{dr} = f'_k = \frac{1}{c} (V - E) g_k + \left( \frac{k+l}{r} \right) f_k \quad (\text{II} - 30)$$

$$\frac{dg_k}{dr} = g'_k = - \left( \frac{k+l}{r} \right) g_k + 2Mcf_k \quad (\text{II} - 31)$$

Où

$$M = m + \frac{1}{2c^2} (E - V) \quad (\text{II} - 32)$$

$k$  : est le numéro quadratique relativiste donné par i, j.

$\chi_{k\mu}$  : L'opérateur de spin.

m et C sont la masse et la vitesse de la lumière le traitement des deux équation couplées (II-30) et (II-31) donne :

$$\left(\frac{-1}{2M}\right)\left[g_k'' + \frac{2}{r}g_k' - \frac{l(l+1)}{r}g_k\right] - \frac{V'g_k'}{4M^2c^2} + Vg_k - \frac{k+1}{r}\frac{V'g_k'}{4M^4c^2} = E g_k \quad (\text{II-33})$$

Le dernier terme qui représente le couplage spin – orbite et qui dépend de la valeur de  $k(k=1)$  ou  $(k=-(1+1))$  est négligeable dans un premier temps et sera pris en compte par la suite.

Ainsi, Koelling et Harmon [22] on présente une technique pour résoudre ces équations avec un potentiel sphérique, dans cette technique on utilise une nouvelle fonction :

$$\phi_k = \frac{1}{2Mc} g_k' \quad (\text{II-34})$$

et donner compte tenu de l'équation (II-30)

$$f_k = \phi_k + \frac{1}{2Mcr}(k+1)g_k' \quad (\text{II-35})$$

On négligeant le dernier terme dans l'équation (II-33) et en remplaçant  $g_k'$  par sa valeur on obtient l'expression :

$$\phi_l' = \frac{-2}{r}\phi_l' + \left[\frac{l(l+1)}{2Mcr^2} + \frac{1}{c}(V-E)\right]g_l \quad (\text{II-36})$$

On remplace l'indice k par l. les équations (II-34) et (II-35) forment un système d'équation couplée, on peut le résoudre de la même façon que l'équation radiale standard de Dirac

Donc l'équation ( II-29 ) devient

$$\psi_{k\mu} = \begin{bmatrix} \tilde{\varphi} \\ \tilde{\chi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_l \chi_{l\mu} \\ -i\left(-\varphi_l + \frac{k+1}{2Mcr} g_l\right) \sigma_r \chi_{l\mu} \end{bmatrix} \quad (\text{II-37})$$

Et l'équation (II-27) s'écrit avec le nombre quantiques  $l, m$  :

$$\psi_{lms} = \begin{bmatrix} g_l Y_{lm} \chi_s \\ \frac{i}{2mc} \left(-g_l' + \frac{1}{r} g_l \sigma L\right) Y_{lm} \chi_s \end{bmatrix} \quad (\text{II-38})$$

$\chi_s$  : est l'opérateur de spin non relativiste (spin-haut, spin-bas)

Pour faciliter la résolution des équations séculaires relativistes (II-35) et (II-36) Louks [23] définit les fonctions suivantes :

$$\begin{cases} P_l = rg_l \\ Q_l = rc\phi_l \end{cases} \quad (\text{II} - 39)$$

Alors

$$P_l' = 2MQ - \frac{1}{r}P_l \quad (\text{II} - 40)$$

$$Q_l' = \frac{1}{r}Q_l \left[ \frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E) \right] P_l \quad (\text{II} - 41)$$

Ces équations peuvent être résolues être numériquement de la même façon que pour l'équation de Schrödinger non relativiste à l'aide de conditions à limites suivantes :

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Q}{P} = c \frac{\left[ l(l+1) + 1 - \left( \frac{2Z}{C} \right)^2 \right]^{1/2} - 1}{\left( \frac{2Z}{C} \right)} \quad (\text{II} - 42)$$

Le terme de spin-orbite  $\left( \frac{V'}{4M^2c^2} \right) (k+l)p$  est alors ajouté à l'équation (II-41). La dérivée par rapport à l'énergie conduit à des équations semblables à celles du cas non relativiste, soit :

$$P_l' = 2 \left[ MQ_l + M \dot{Q}_l \right] + \frac{1}{r} p_l \quad (\text{II} - 43)$$

$$\dot{Q}_l = \frac{-1}{r} \dot{Q}_l + \left[ \frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l) \right] P_l - \left[ \frac{l(l+1)M}{2M^2r^2} + 1 \right] P_l \quad (\text{II} - 44)$$

On détermine les composantes  $g_l$  et  $f_l$  à partir des solutions de  $P_l$  et  $Q_l$ , ces mêmes composantes vont être utilisées pour le calcul de la densité de charge et de l'élément de matrice.

Ainsi, la quantité  $U^2$  est remplacée dans l'équation (II-12) par  $g_l^2 + f_l^2$  cependant à la surface de la sphère, le composante  $f_l$  disparaît et il ne reste plus que le composante  $g_l$  et sa dérivée. Les effets de spin – orbite sont pris en compte, donc l'équation séculaire de l'Hamiltonien s'écrit à l'aide des fonctions de base initiales sous la forme :

$$\langle lms|H|l'm's'\rangle = \varepsilon_{lms} \langle lms|l'm's'\rangle + \delta_{\mu'} \int d^3r \frac{g_l^2}{(2Mc)^2} \left( \frac{1}{r} V' \right) (\chi_s^+ Y_{lm}^* \sigma L Y_{l'm'} \chi_{s'}) \quad (\text{II - 45})$$

Où

$$N_l = \int dr r^2 \left\{ g_l^2 + \frac{1}{(2Mc)^2} \left[ g_l' + \frac{l(l+1)}{r^2} g_l^2 \right] \right\} \quad (\text{II - 46})$$

$$S_l = \int dr r^2 \frac{1}{(2Mc)^2} \left[ 2g_l g_l' + \frac{1}{r^2} g_l^2 \right] \quad (\text{II - 47})$$

Le deuxième terme dans les équations ( II-42) et (II-44) provient de l'interaction spin– orbite.

### II.3.2. Les coefficients $A_{ml}$ et $B_{ml}$ :

Les fonctions de base et leurs dérivées sont continuées aux limites des sphères MT, ceci permet de déterminer les coefficients  $A_{lm}$  et  $B_{lm}$  pour chaque vecteur d'onde plane et pour chaque atome.

Dans la région interstitielle les fonctions de base sont des ondes planes.

$$\phi(K_n) = \frac{1}{\Omega^{1/2}} e^{(ik_n.r)} \quad (\text{II - 48})$$

Où :  $K_n = k + K_n$

Alors

$$\phi(K_n) = \sum_{lm} \left[ A_{lm} U_{lm}(E_l) + B_{lm} U(E_l) \right] Y_{lm}(r) \quad (\text{II - 49})$$

Les conditions aux limites à la surface de la sphère MT permet d'utiliser un développement en ondes planes de Rayleigh.



$$\phi(K_n, R_a) = \frac{4\pi}{\Omega^{1/2}} \sum_{lm} i^l j_l(K_n R_a) Y_{lm}^*(k_n) Y_{lm}(R_a) \quad (\text{II - 50})$$

En tenant compte de la continuité du moment angulaire, on obtient

$$A_{lm}(K_n) = \frac{4\pi}{\Omega^{1/2}} R_a^2 i^l Y_{lm}^*(K_n) a_l(K_n) \quad (\text{II - 51})$$

Où:

$$a_l = \frac{\dot{U}_l \left( \frac{d}{dr} \right) j_l(K_n R_a) - \left( \frac{d \dot{U}}{dr} \right) j_l(K_n R_a)}{R_a^2 \left[ \left( \frac{dU_l}{dr} \right) U - U_l \left( \frac{d \dot{U}}{dr} \right) \right]} \quad (\text{II - 52})$$

Et

$$B_{lm}(k_n) = \frac{4\pi}{\Omega^{1/2}} R_l^2 i^l Y_{lm}^*(K_n) b_l(k_n) \quad (\text{II - 53})$$

Où :

$$b_l = \frac{\left( \frac{dU_l}{dr} \right) j_l(k_n R_a) - U_l \left( \frac{d}{dr} \right) j_l(k_n R_a)}{R_a^2 \left[ \left( \frac{dU_l}{dr} \right) \dot{U}_l - U_l \left( \frac{d \dot{U}}{dr} \right) \right]} \quad (\text{II - 54})$$

Et compte tenu de l'équation (II-14). Les équations (II-51), (II-53) et (II-54) deviennent :

$$A_{lm}(k_n) = \frac{4\pi}{\Omega^{1/2}} R_a^2 i^l Y_{lm}^*(k_n) a_l(k_n) \quad (\text{II - 55})$$

$$a_l(k_n) = \left[ \dot{U}_l j_l'(n) - U_l' j_l(n) \right] \quad (\text{II - 56})$$

$$B_{lm}(k_n) = \frac{4\pi}{\Omega^{1/2}} R_a^2 i^l Y_{lm}^*(k_n) b_l(k_n) \quad (\text{II - 57})$$

$$b_l(k_n) = \left[ U_l j_l(n) - U_l' j_l'(n) \right] \quad (\text{II} - 58)$$

#### **II.4. Représentation de la densité de charge et du potentiel :**

La solution des équations de Kohn –Sham obtenue par la méthode LAPW se base sur l'utilisation de la double représentation des fonctions d'ondes, de la charge et du potentiel. Pour simplifier la synthèse de la charge et la matrice Hamiltonienne, la symétrie est exploitée dans le but de réduire cette matrice. L'utilisation des symétries du réseau est nécessaire. Dans la méthode LAPW on ne considère que la densité de charge :

- A l'intérieur des sphères, la densité possède la symétrie du site
- La densité dans la région interstitielle possède la symétrie du groupe d'espace dans la région interstitielle.
- Les densités sont identiques à l'intérieur des atomes.

##### **II.4.1. Potentiel d'échange et de corrélation :**

Dans les deux approximations LDA (approximation de la densité locale) et GGA (l'approximation du gradient généralisé), le potentiel d'échange et de corrélation est linéaire contrairement au potentiel coulombien. Il doit donc être calculé dans l'espace réel ou il est diagonal.

A chaque point de la maille le potentiel d'échange et de corrélation est calculé, en utilisant la transformation de la Fourier rapide (FFT) [24] pour obtenir la représentation de la charge interstitielle et par la suite pour transformer  $V_{xc}$  de l'espace réel à la représentation d'onde plane.

La même procédure est appliquée avec des valeurs différentes de  $\rho$  et un potentiel à symétrie sphérique à l'intérieur des sphères.

##### **II.4.2. Le potentiel coulombien :**

La somme du potentiel de Hartree et du potentiel nucléaire le terme coulombien  $V_c(r)$  est déterminé par l'équation de poisson à partir de la densité de charge.

$$\nabla^2 V_c(r) = 4\pi(r) \quad (\text{II} - 59)$$

La résolution de cette équation se fait avec la méthode dit la pseudo charge [25], basée sur deux remarques :

- La densité de charge est continue elle varie rapidement dans la région sphérique et lentement dans la région interstitielle.
- Dans la région interstitielle le potentiel coulombien dépend à la fois de la charge interstitielle et des multiples de la charge.

### **II.5. Le code wien2k :**

Historiquement le code Wein2k a été développé par Peter Balha et Kartheinz Schuratz [26] de l'institut de chimie des matériaux d'université de vienne (Autriche), ce code a été distribué pour la première fois en 1990 les versions suivantes ont été Wien 93, Wien 97 et Wien 2k.

Une application réussite de la méthode FP-LAPW est le programme Wien2k. il a été appliqué avec succès pour le gradient du champ électrique [27,28] , les systèmes supraconducteurs à haute température, les minéraux, les surfaces des met aux de transition [32] les oxydes non ferromagnétiques [29] et meme les molécules [30]. Le code Wien2k [31] consiste en différence programmes indépendants qui sont liés par le C-SHEL.SCRIPT

Les principaux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-coherent sont :

- La création du fichier case.struct qui contient le paramètre du réseau, les rayons Muffin-tin et la structure cristalline.
- **NN** : c'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de sphère.
- **LSTART** : un programme qui génère les densités atomiques et déterminer comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bandes comme des états du cœur et états de valence, avec ou sans orbitales local
- **SYMMETRY** : il génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale
- **KGEN** : il génère une maille K dans la zone de Brillouin

- **DSTART** : il génère une densité de départ pour de cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART alors un cycle auto-cohérent et initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence.

Soit vérifié ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW 0 : génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW 1 : calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW 2 : calcul les densités de valence.

LCORE : calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : mélange la densité d'entrée et de sortie, et vérifier le critère de convergence.



# *Chapitre III*

## *Résultats et discussions*

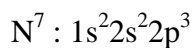
### III.1.Introduction :

Dans ce chapitre, nous présentons et discutons les résultats de nos calculs tels que les propriétés structurales, électroniques et élastiques du composé ScN qui se cristallise dans la structure NaCl. En utilisant la méthode (FP-LAPW). Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par les deux approximations LDA et WC- GGA.

### III.2.Détails de calcul :

Nous avons utilisé la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (FP-LAPW) [33], dans le cadre de la théorie de la fonctionnel de la densité (DFT) [34], implémentée dans le code Wien 2K [35], le potentiel d'échange et de corrélation est déterminé par l'approximation de la densité local (LDA) [36] et l'approximation du gradient généralisé (WC-GGA) développée par Wu-Cohen [37], les densités électroniques les potentiels sont développés en combinaison des harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères muffin-tin jusqu'à  $l_{max}=10$  et en série de Fourier dans la région interstitielle.

Le composé ScN se cristallise dans la structure NaCl, la configuration électronique des atomes est la suivante :



Les rayons Muffin-tin sont choisis de telle sorte que les sphères ne chevauchent pas, ils sont: 2 ,1.7 Bohr pour Sc et N respectivement.

Pour obtenir de bons résultats, nous avons calculé la variation de l'énergie totale du composé en fonction du nombre de points (nkpt) figure (III-1), on a trouvé que la variation de l'énergie est presque négligeable lorsque nkpt=56 dans la zone irréductible de Brillouin qui correspond à (11×11×11) dans la zone de Brillouin.

On a aussi calculé l'énergie total en fonction du paramètre  $R_{MT}K_{max}$  ( $R_{MT}$  est le plus petit des rayons MT et  $K_{max}$  et le vecteur d'onde de coupure des ondes planes qui contrôle la taille des bases) figure (III- 2). On trouve que la valeur  $R_{MT}K_{max}= 8$  donne une bonne convergence pour notre composé étudié. Les résultats sont obtenus avec le paramètre du réseau expérimental.

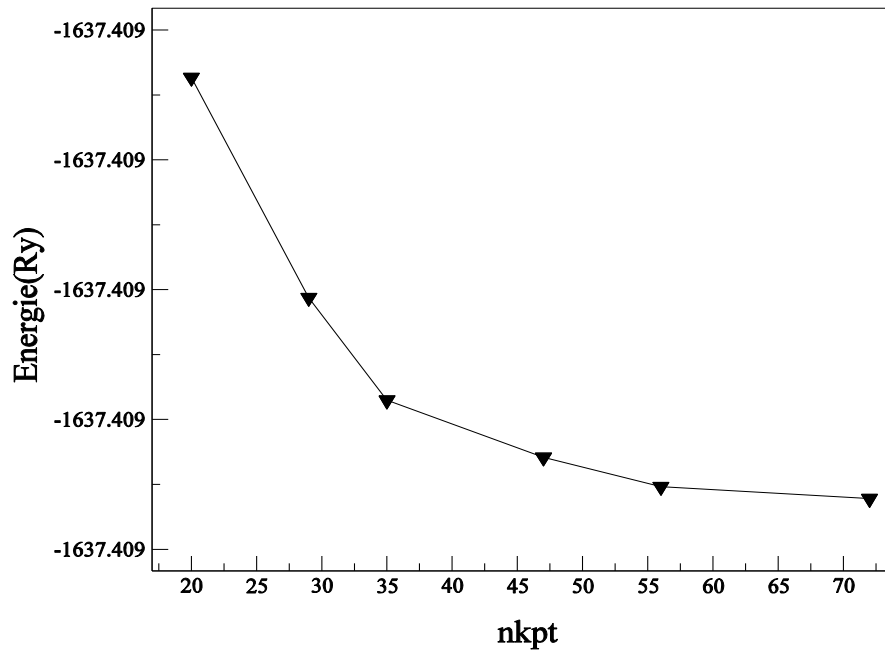


Figure (III-1): la variation de l'énergie totale en fonction de nkpt pour le composé ScN.

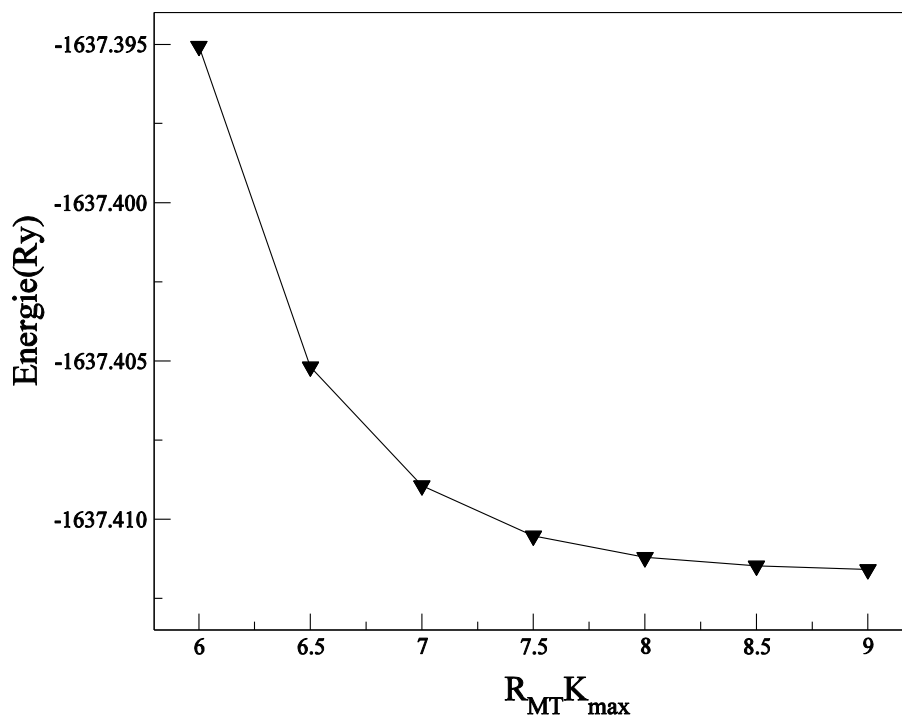


Figure (III-2): La variation de l'énergie totale en fonction de paramètre  $R_{MT} K_{max}$  pour le composé ScN.



### III.3. Les propriétés structurales :

Pour déterminer les propriétés structurales, il faut savoir le paramètre du réseau à l'équilibre  $a_0$ , le module de compressibilité  $B$  et sa dérivé  $B'$ . Ces quantités sont obtenues par l'ajustement de l'énergie totale à l'aide de l'équation d'état de Murnaghan [38]:

$$E_T(v) = \frac{Bv}{B'} \left[ \frac{\left(\frac{V_0}{v}\right)^{B'} - 1}{B' - 1} - 1 \right] + cst \quad (\text{III-1})$$

Le module de compressibilité est donné par la relation :

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III-2})$$

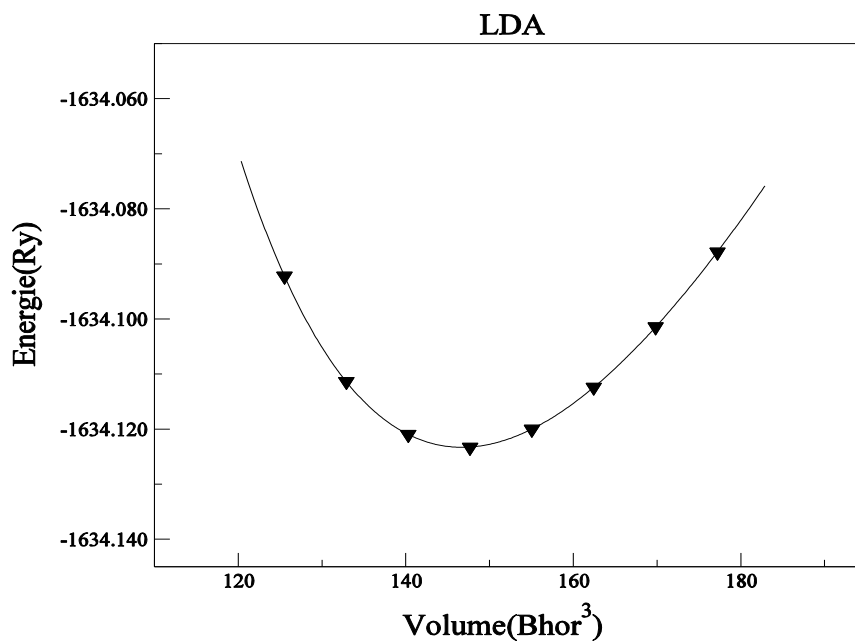
Ou :  $V_0$  est le volume d'équilibre.

Et

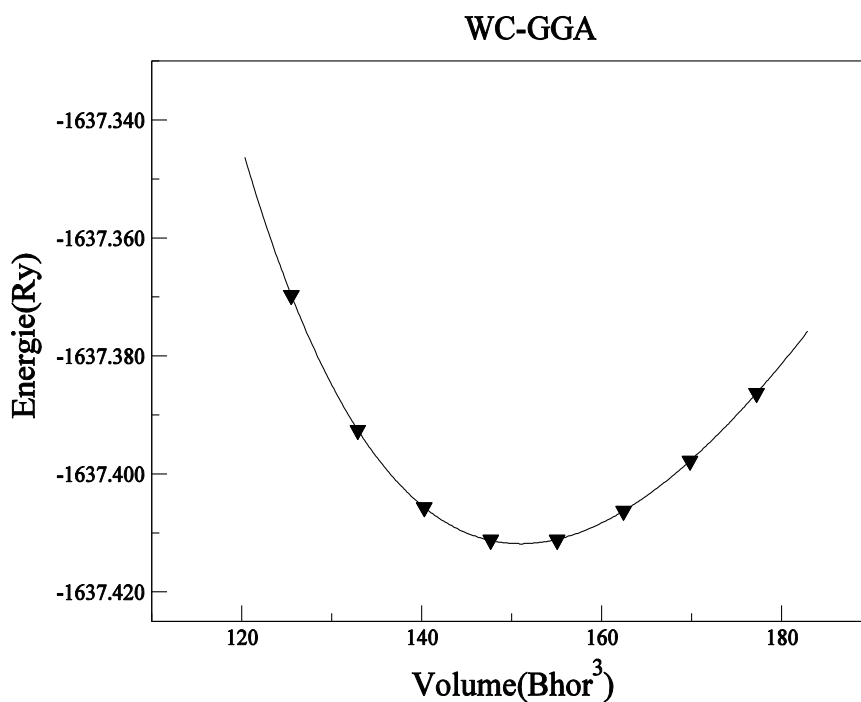
$$v = V_0 \left( 1 + \frac{B'P}{B} \right)^{-\frac{1}{B'}} \quad (\text{III-3})$$

Nous avons utilisé les approximations LDA et WC-GGA pour étudier la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé binaire ScN.

Les résultats sont présentés sur les figures (III-3) et (III-4). Les résultats numériques obtenus sont montrés dans le tableau (III-1). Nous avons comparé nos résultats avec les valeurs expérimentales et avec d'autres calculs théoriques, on remarque que La valeur du paramètre de maille calculé avec l'approximation LDA est sous-estimée par 0.3 % par rapport à la valeur expérimentale, par contre avec l'approximation WC-GGA la valeur du paramètre de maille est surestimé par 0.1% par rapport à celle mesurée expérimentalement.



**Figure (III- 3) :** La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé ScN avec l'approximation LDA.



**Figure (III- 4) :** La variation de l'énergie totale en fonction du volume pour le composé ScN avec l'approximation WC-GGA.

**Tableau (III-1) :** le paramètre du réseau  $a_0$  et le module de compressibilité  $B$  et sa dérivée  $B'$  pour le composé ScN.

ScN	$a_0$ (Å <sup>0</sup> )	$B$ (GPa)	$B'$
Notre calcul	/	/	/
(LDA)	4.430	225.925	4.192
(WC-GGA)	4.473	212.2608	3.832
Expérience	4.44 <sup>a</sup>		
D'autres calculs	4.54 <sup>b</sup>	201 <sup>b</sup>	3.31 <sup>b</sup>
	4.516 <sup>c</sup>	196.958 <sup>c</sup>	3.78 <sup>c</sup>

<sup>a</sup> Référence [39], <sup>b</sup> Référence [40], <sup>c</sup> Référence [41],

En général, on constate que nos résultats sont en bon accord avec les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques disponibles.

### III.4 Les propriétés électroniques :

#### III.4.1. Les structures de bandes :

Le composé ScN est un matériau de transition qui se cristallise dans la structure NaCl, les calculs des structures de bandes de ce composé selon les cinq lignes de haute symétrie incluant les points (W, L, T, X, k) dans la première zone de Brillouin ont été effectués en utilisant le paramètre du réseau d'équilibre.

Nos calculs ont été effectués en utilisant le paramètre du réseau optimisé, et on se base sur les approximations LDA, WC-GGA et (mBJ). Les courbes obtenues sont illustrées sur les figures (III-5) et (III-6).

D'après les courbes des bandes d'énergie, nous remarquons que le composé binaire possède un gap négatif avec les deux approximations LDA et WC-GGA alors on peut dire que ce composé est un semi métal. Par contre lorsque on a utilisé l'approximation mBJ on remarque que le composé binaire étudié devient un semi-conducteur à gap indirect dans la direction  $\Gamma \rightarrow X$ , le maximum de la bande de valence se situe au point  $\Gamma$  et le minimum de la bande de

conduction se situe au point X de valeur 0.878 eV avec l'approximation LDA (mBJ) et de valeur égale à 0.921eV avec l'approximation WC-GGA (mBJ).

Cependant, une nette amélioration du gap est observée lorsque nous avons utilisé la modification de Becke et Johnson (mBJ) [42]

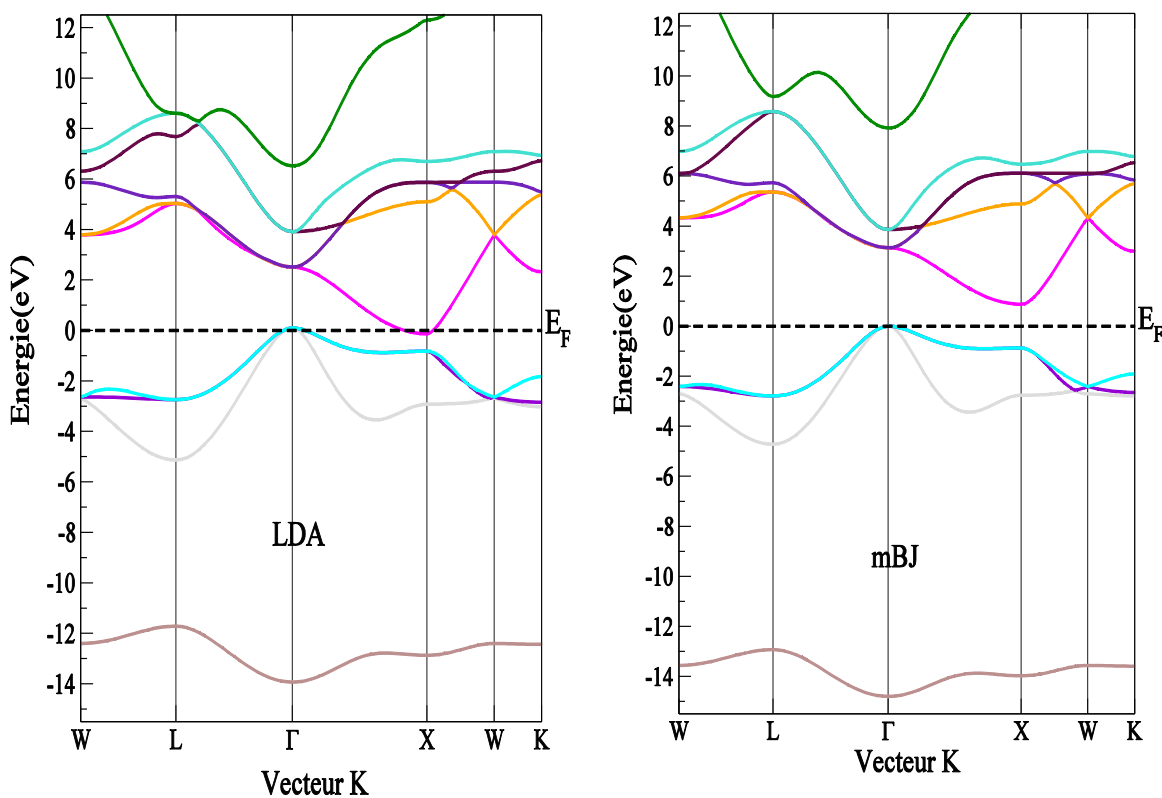
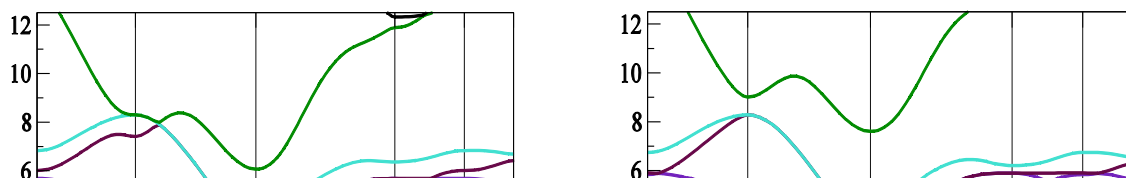


Figure III-5 : La structure de bande du composé ScN avec les approximations LDA et mBJ.



**Figure III-6** : La structure de bande du composé ScN avec les approximations WC-GGA et mBJ

#### **III.4.2. La densité d'états totale et partielle :**

Pour avoir plus de détails sur les structures de bandes nous avons calculé les densités totales et partielles du composé étudié, les résultats sont présentés respectivement par les Figures (III-7) jusqu'à (III-10) avec les différentes approximations utilisées.

On remarque que les figures des densités d'états totales et partielles sont presque similaires, et on observe trois régions :

La première région de valence autour de (-14 eV  $\rightarrow$  -12 eV) est dérivée des états s d'atome (N) avec une faible contribution des états p et d d'atome de (Sc).

La deuxième région de valence autour de (-5 eV  $\rightarrow$  0 eV) correspond aux états p d'atome (N) avec une faible contribution des états p et d de l'atome (Sc).

La troisième région est la bande de conduction qui correspond aux états d de l'atome (Sc) avec une faible contribution des états p de l'atome de (N).

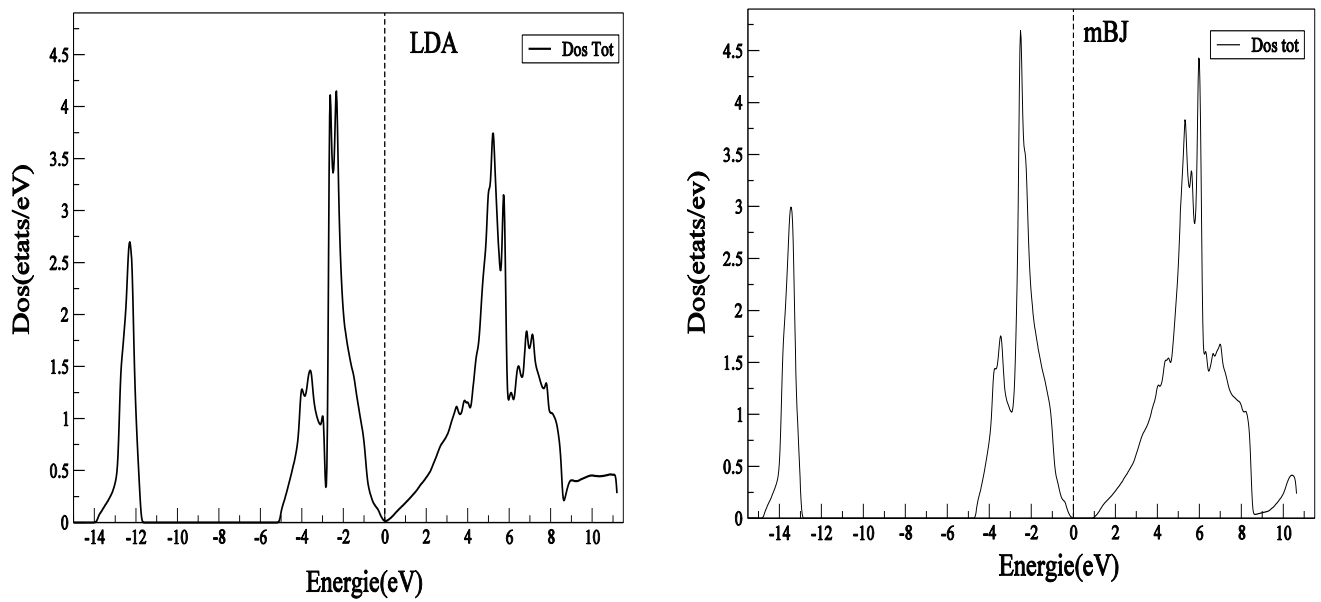


Figure (III-7): la densité d'états totale du ScN par LDA et mBJ.

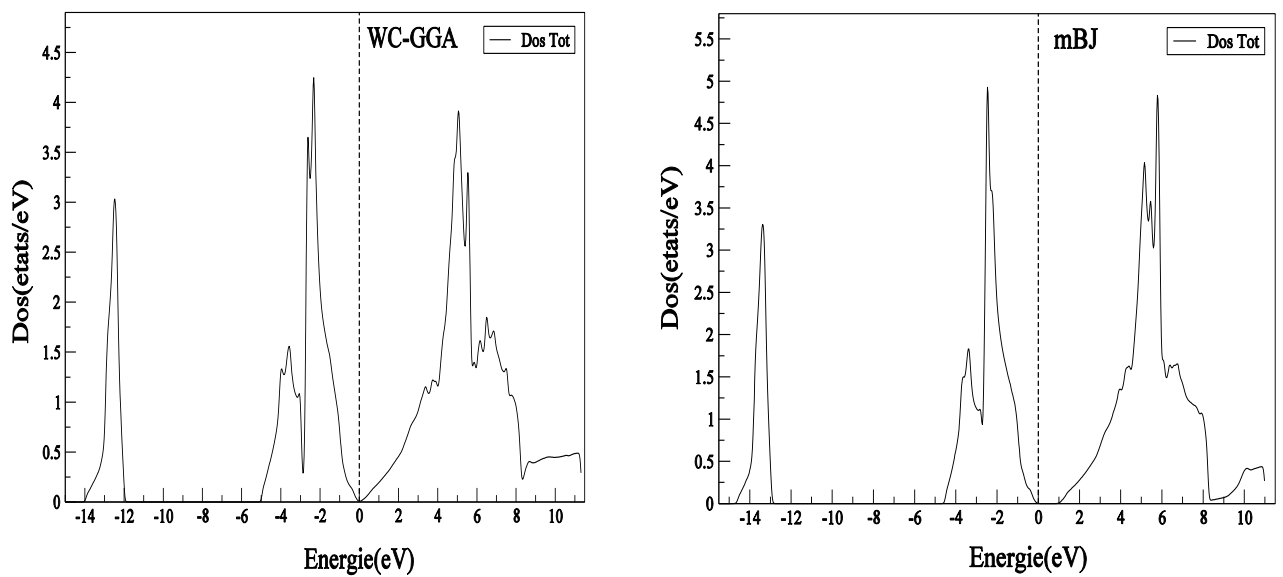


Figure (III-8): la densité d'états totale du ScN par WC- GGA et mBJ.

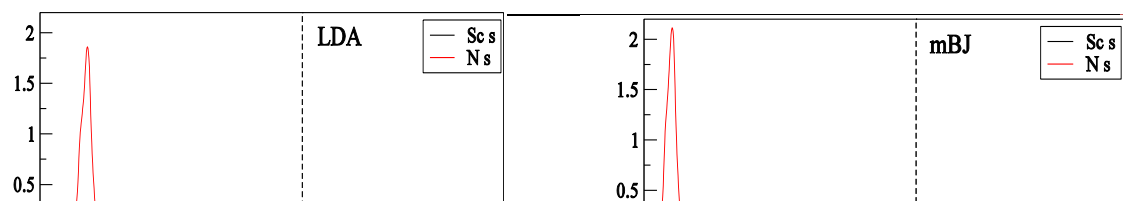


Figure (III-9): la densité d'états partielle de ScN par LDA et mBJ.

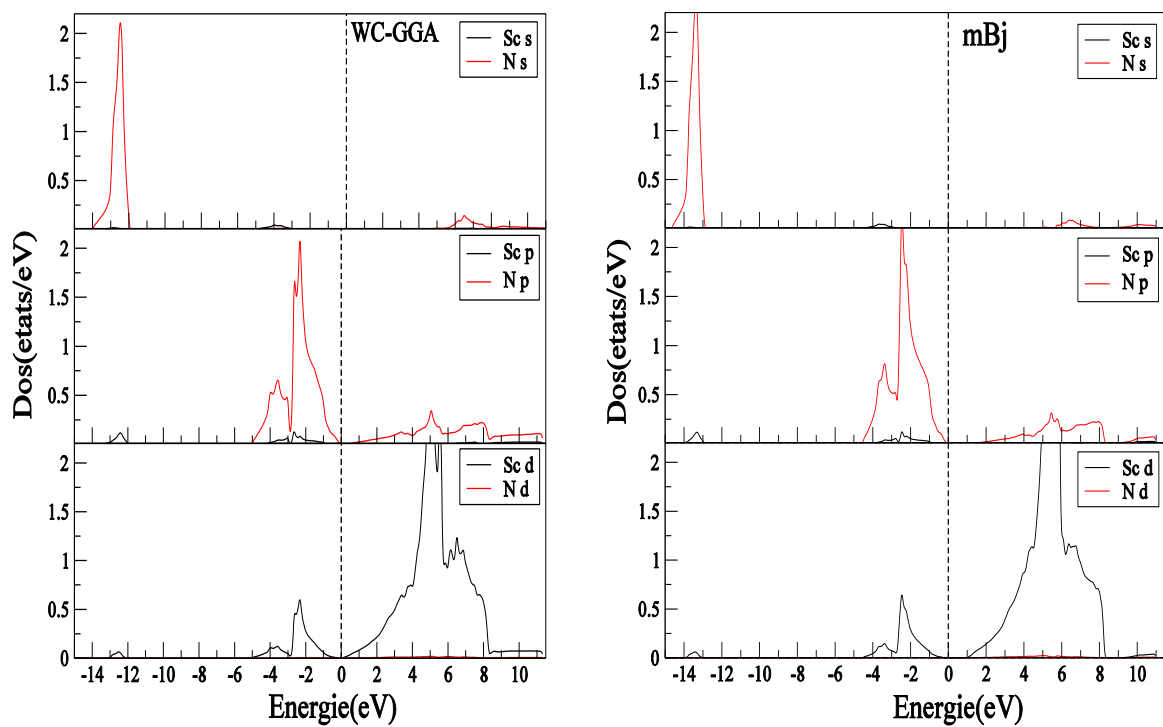


Figure (III-10): la densité d'états partielle de ScN par WC- GGA et mBJ.

### III.5. Propriétés élastiques

Les propriétés élastiques des solides ont un grand intérêt pour connaître des informations importantes sur la mécanique des matériaux (c'est à dire la réponse du matériau aux forces appliquées). Elles jouent un rôle très important dans la détermination de la résistance des matériaux.

Les matériaux cubiques possèdent trois constantes élastiques indépendantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ .

Pour calculer les constantes élastiques  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  et  $C_{44}$ , on a utilisé une déformation tétragonale à volume conservatif et une déformation rhomboédrique pour calculer la constante  $C_{44}$ .

Le module de compressibilité est lié aux constantes  $C_{11}$ ,  $C_{12}$  selon l'équation :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (\text{III-4})$$

Les résultats des constantes élastiques calculées avec les deux approximations LDA et WC-GGA sont montrés dans le tableau III.2 et comparés avec d'autres résultats théoriques disponibles dans la littérature.

**Tableau III.2** : les constantes élastiques (en GPa) du composés binaires ScN.

ScN	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{44}$	B
Notre calcul				
LDA	467.216	110.311	172.243	229.279
WC-GGA	424.930	105.311	172.922	211.850
Autre calcul	380.90 <sup>a</sup>	104.56 <sup>a</sup>	167.18 <sup>a</sup>	196.67 <sup>a</sup>
	299 <sup>b</sup>	128 <sup>b</sup>	120 <sup>b</sup>	185 <sup>b</sup>

<sup>a</sup> Référence [43], <sup>b</sup> Référence [44]

D'après nos résultats on peut conclure que :

- Les constantes élastiques sont positives et satisfont les critères de stabilité mécanique des cristaux cubiques [45]:  $(C_{11}-C_{12})>0$ ;  $(C_{11}+2C_{12})>0$ ;  $C_{11}>0$ ;  $C_{44}>0$ .
- Le module de compressibilité satisfait aussi la condition  $C_{12}<B<C_{11}$ , et par conséquent on peut dire que notre composé est stable.



- Le module de compressibilité  $B$  calculé avec la LDA et la WC-GGA à partir des constantes élastiques concorde bien avec celui obtenu par la minimisation de l'énergie totale.

**Références:**

[1] :F.Lozes Dupuy,S.Bonnefont, H,Martinot J.phy.III France 4 (1994) .

- [2] :M ,de L'abachelorie,C.Latrasse,p.kemssu et P.Gerz J.Phy.III France 2 (1992) .
- [3] :Walter .R L'ambrecht,phy.Rev.B 62 (2000) .
- [4] :C.Stampfl,R,Asashi,A.J.Freeman,phys.Rev.B 65 (2002).
- [5] :M.S.Abu-jafar,A.M.Abu-Labdeh,M.El-Hasan ,Comput.Master.Sci.50 (2010).
- [6] :Mezioni, thèse de doctorat Univ .Annaba . Algerie (2012).
- [7] :M .Born . J. R.oppenhiemer . Ann . phys .87 (1927).
- [8] :D.R.Hartree pro,combridge philos.soc.24(1928).
- [9] :D.R.Hartree .pro, combridge philos.soc.24(1288).
- [10] :P.Hohenber and W.kohn Inhomogeneous electron PGas Phys.Rev.136 :B ,864(1964).
- [11] : P.Hohenberg W.Kohn :phys,Rev.B140(1928) .
- [12] : W.Kohn L J.Sham Phy.Rev.B140(1965)1133.
- [13] :D.Ammi,thèse de doctorat ,Univ Tizi Ouzou ,Algerie , (2013).
- [14] :R.M.Ceperly and B .J.Provincia ,new york(1985).
- [15] :N.Boukhis ,thèse de doctorat ,Univ .Annaba,Algerie (2012).
- [16] : T.louks , the Augmented plane ware méthode (Benjami, NowYork) (1967)
- [17] : I , T sidilkoviski , band structure of sein – coreduction (1982)
- [18] : J.C Slater , the self consistent Field for S .Mobcules and solids (MCGRaw-Hill, New york , 1974)
- [19] :S.DERGAL,thèse de doctorat ,Univ.Tlemcen,Algerie (2013)
- [20] : O. K .Anderson, Phys, rev, B12(1975).
- [21] : A. Maizia, mémoire de magister, Univ .Oran .Algérie (2013)

- [22] :S.Ouendadj , thèse de doctorat Univ. Annaba. Algérie (2010)
- [23] :D. Koelling and B. Harmon, J .Phys .C 10,(1977).
- [24] :T. L. Loucks, « the augmented plane wave méthode » Benjamin , New York (1967)
- [25] :R.C.Singleton,IEEE Trans, Audio Electroacoust.AU.17,AU.17,(1969)
- [26] : F.Elhaj Hassan , thèse de doctorat Univ, Metz France (2000)
- [27] :P.Blaha and .K.Schwarz ,and J.Luitz.wien 97 technical university.vienna (1997)
- [28] :P.Blaha and .K. Schwarz,Hyperf,interact 52(1938).
- [29] :P.Dufk,P,Blaha and K , schwarz,phys.Rev.lett 75 (1995).
- [30] :K.Schwarz ,C ,Ambrosch .draxl, and Blaha ,phys rev, B 42 (1990).
- [31] :B.wenkler, P,Blaha and K Schurcz .Am.Mineralogist 81(1996).
- [32]: W.GUNEZ,N.BOUMAGOUA,Phy,Univ.Tebessa (2017)
- [33] :B Kohler ,P, Ruggerone , S ? wilke and M, Scheffler phys,REv ;lett 74 (1995).
- [34] H. J. F Jansen and A. J. Freeman, Phys. Rev. B 30 (1984) .
- [35] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136 (1964).
- [36] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, and J.Luitz, WIEN2k An Augmented Plane Wave Plus Local Or-bitals Program for Calculating Crystal Properties (Vienna University of Technology, Vienna, 2008).
- [37] J. P. Perdew, Y. Wang, Phy. Rev. B45(1992).
- [38] Z. Wu and R.E. Cohen, Phys. Rev. B73(2006) .
- [39] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 30 (1944) .
- [40] M.G. Brik, C.-G. Ma. Computational Materials Science 51 (2012) .
- [41] N. Takeuchi, Phys. Rev. B 65 (2002) .
- [42] W. Feng, S. Cui, H. Hu, G. Zhang, Z. Lv, Z. Gong , Physica B 405 (2010) .

- [43] Y. Oussaifi, A.B. Fredj, M. Debbichi, N. Bouarissa, M. Said, *Semicond. Sci. Technol.* 22 (2007) .
- [44] W. Feng, S. Cui, H. Hu, G. Zhang, Z. Lv, Z. Gong, *physica B* 405 (2010) .
- [45] G. Grimvall, *Thermophysical Properties of Materials*, enlarged and revised edition, Elsevier/North-Holland+ Amsterdam,( 1999).

## Conclusion générale

L'objectif de ce travail est l'étude des propriétés structurales, électroniques et élastiques du composé binaire ScN qui se cristallise dans la structure NaCl.

On a utilisé dans nos calculs la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées à potentiel total (FP-LAPW), dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) implémentée dans le code wien2k, en utilisant les deux approximations : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisée (WC-GGA)

On a calculé le paramètre de maille, le module de compressibilité et sa dérivée du composé binaire et comparé nos résultats avec les résultats expérimentaux et ceux obtenus par d'autres calculs.

Dans l'étude des propriétés électroniques du composé Scandium nitrogène, on a vu que ce composé a le caractère d'un semi métal à gap négatif. Par contre en utilisant l'approximation mBJ le composé devient un semi-conducteur à gap indirect dans la dérations  $\Gamma \rightarrow X$ .

On a étudié les propriétés élastiques et nos résultats sont en bon accord avec les valeurs théoriques disponibles.