

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université 8 Mai 1945 de Guelma
Faculté des mathématiques et de l'informatique et des sciences de la matière
Département de Sciences de la Matière



MEMOIRE

Présenté en vue de l'obtention du diplôme de :

Magister

**Etude de la variation des propriétés structurales et
élastiques en fonction du dopant pour le composé
 $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ (M= Cr, Mn, Fe, Co, Ni).**

Spécialité : Physique

Option : Sciences des Matériaux

Présentée par : Mme Meriem MESSIAD

Devant le jury :

A. Boufelfel	Professeur	Université de Guelma	Président
B. Belfarhi	M.C.A	Université de Guelma	Rapporteur
S. Djeroud	M.C.A	Université de Guelma	Examineur
M.C. Sahour	Professeur	Université de Guelma	Examineur
M.S. Boumaza	Professeur	Université de Guelma	Examineur
K. Zanat	M.C.B	Université de Guelma	Invité

Année 2012



Dédicace

*A mes parents et mon mari pour leur sincère amour, générosité,
sacrifice, et à qui je leurs dois beaucoup sans limites.*

*A la chandelle de ma vie, ma très chère fille **Imane**.
A mes chères sœurs et frères et à toute la famille **Messiad et Chaabnia**.*

*A mes fidèles amis : **Fatima Zahra, Soumaya, Hadjer**.
A la mémoire de mon amie **Fouzia**, qu'elle repose en paix...
Aux gens qui m'aiment et m'estiment...*

Encore à tous un grand merci...

Mme MESSIAD

Remerciements

En premier lieu, je tiens à remercier mon Dieu **ALLAH** qui m'a donné la force, la volonté et le courage pour achever ce travail.

Je tiens à exprimer mon profond respect et ma reconnaissance à mon encadreur Mr. le docteur **B. Belfarhi** de m'avoir encadré et pour ces conseils qui m'ont été d'une grande utilité.

Je suis très reconnaissante envers Monsieur **K. Zanat** pour son aide, sa générosité et la grande patience dont il a su faire preuve malgré ses charges académiques et professionnelles.

J'adresse toute ma reconnaissance à Mr. **A. Boufelfel** Professeur à l'Université 8 mai 1945, pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de cette thèse.

Mes remerciements les plus chaleureux s'adressent à Mme. **S.Djeroud** Maître de conférences, Mr. **Sahour** Maître de conférences et Mr. **M.S. Boumaza** professeur à l'Université 8 mai 1945, de l'attention qu'ils portent à ce travail en acceptant de m'avoir honoré par leur présence au jury en tant qu'examineurs.

Je remercie du fond du cœur mes amies **Saliha** et **Souhir** qui m'ont toujours soutenue et encouragée au cours de la réalisation de ce mémoire.

Un grand merci à Mr. **M. Khelaifia**, pour son aide scientifique, sa gentillesse.

Sans oublier de remercier mon beau frère Mr. **T. Derabla** pour son assistance et ses conseils si précieux.

Finalement, un merci spécial à ma famille : mes parents, mon mari, mes sœurs et mes frères de m'avoir encouragé, soutenu, cru en mes capacités et d'être de tout temps à mes côtés le long de ces années d'études.

Mme **MESSIAD**

Résumé

Les propriétés structurales électroniques et élastiques du semi-conducteur CdTe dans la phase zinc-blende ont été étudiées. Les calculs ont été effectués par la méthode de calcul des ondes planes augmentées (*FP-LAPW*) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour le terme du potentiel d'échange et corrélation (XC). Nous avons étudié aussi les propriétés structurales, électroniques et nous avons calculé le moment magnétique des composés ferromagnétiques $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ ($M=Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni$).

Le calcul de la structure de bandes et les densités d'état des composés à base de (Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni) représentent trois types des matériaux : semi-conducteur, semi-métal et métal.

Nous avons trouvé que l'hybridation p-d réduit les moments magnétiques des atomes (Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni) par rapport à ces espaces libres. et produit des petits moments magnétiques dans les sites non magnétiques de Cd et Te.

Mots clés :

Semi-conducteurs magnétiques, calcul ab-initio, propriétés structurales, électronique élastiques.

Abstract

The structural, electronic and the elastic properties of the semi-conductor *CdTe* in the phase Zinc-Blende have been investigated by using of the full potential Linearized augmented plane-wave method (*FP-LAPW*) within density functional theory.

We employed the local density approximation (*LDA*) and generalized gradient approximation (*GGA*) for the exchange-correlation (*XC*) potential. We have calculated also The structural, electronic and magnetic properties of the ferromagnetic compounds $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ ($M=Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni$). From the calculated results of band structure and density of states, the semiconductor, half-metallic and metallic characters for the materials $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ ($M=Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni$) are determined .

Moreover, we found that p–d hybridization reduces the local magnetic moments of (Cr ; Mn ; Fe ; Co; Ni) from their free spaces and produces small local magnetic moments on the non magnetic Cd and Te sites.

Key words :

Magnetic semi-conductors, ab-initio calculation, structurals, electronic and elastics properties.

الملخص

بواسطة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطيا (*FP-LAPW*) و التي تركز على نظرية كثافة الدالية DFT قمنا بحساب الخواص البنيوية, الالكترونية و المرنة للنصف الناقل (*CdTe*) وقد استعملنا تقريب كثافة الموضع (*LDA*) وتقريب التدرج المعمم (*GGA*) لأجل حساب كمون التبادل-الارتباط (*XC*) بغية حساب الخواص البنيوية (ثابت الشبكة و ثابت الصلابة) و كذلك من اجل حساب الخواص المرنة. و قمنا كذلك بحساب الخواص البنيوية, الالكترونية للمركب $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ (M=Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni)

الكلمات المفتاحية:

أنصاف النواقل المغناطيسية، حساب ab-initio، الخواص البنيوية، الالكترونية و المرنة.

Sommaire

Liste de figures

Liste de tableaux

Introduction générale.....1

Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

I.1 Introduction.....4

I.2 Équation de Schrödinger.....4

I.3 Approximation de Born-Oppenheimer.....5

I.4 Approximation de Hartree -Fock6

I.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)7

I.6 Les équations de Kohn-Sham.....8

I.7 L'approximation de la densité locale (LDA) 9

I.7.1 L'approximation De Ceperly et Alder11

I.7.2 L'approximation de Hedin et Lundqvist11

I.8 L'approximation du gradient généralisé (GGA)12

I.9 L'auto-cohérence dans les calculs de la DFT.....13

Chapitre II : la méthode des ondes planes augmentées linéarisées

(FP-LAPW)

II.1 Introduction.....15

II.2 La méthode des ondes planes augmentées (APW)16

II.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)18

II.3.1 Les bases de la méthode (FP-LAPW)	18
II.4 Les rôles des énergies de linéarisation E_l	19
II.5 Constructions des fonctions radiales	19
II.5.1 Les fonctions radiales non relativistes	20
II.5.2 Les fonctions radiales relativistes	21
II.6 Résolution de l'équation de Poisson	22
II.7 Amélioration de la méthode (FP-LAPW)	23
II.7.1 Les fenêtres d'énergie multiples	24
II.7.2 Développement en orbital local	24
II.8 Traitement des effets de spin-orbit	25
II.9 Wien2k	25

Chapitre III : Résultats et discussions

III.1 Détail de calcul	28
III.2 les propriétés structurales	30
III.3 Les propriétés électroniques	39
III.3.1 Structure de bande	39
III.3.2 La densité d'état	48
III.4 Le moment magnétique	71
III.5 Les Propriétés Élastiques	73
Conclusion	75
Références bibliographiques	77

Liste de figures

Figure (I.1) : Le diagramme de la fonctionnelle de densité (DFT).....	14
Figure (II.2) : Potentiel cristallin d'un réseau carré à deux dimensions :(a) potentiel total , et (b) potentiel muffin-tin.....	15
Figure (II.3) : Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle.....	16
Figure (II. 4) : Les fenêtres d'énergie multiple	24
Figure (II.5): la structure du programme Wien2k	26
Figure (III.1) : Maille élémentaire de la structure de CdTe (Blende de Zinc).....	28
Figure(III.2) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdTe dans les deux approximations : GGA et LDA.....	33
Figure(III.3) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de Cd _{0.5} Co _{0.5} Te Dans les deux approximations : GGA et LDA.....	34
Figure(III.4) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de Cd _{0.5} Cr _{0.5} Te dans les deux approximations : GGA et LDA.....	35
Figure (III.5): La variation de l'énergie totale en fonction du volume du Cd _{0.5} Fe _{0.5} Te dans les deux l'approximations : GGA et LDA.....	36
Figure (III.6): La variation de l'énergie totale en fonction du volume du Cd _{0.5} Mn _{0.5} Te dans les deux l'approximations : GGA et LDA.....	37
Figure(III.7) : La variation de l'énergie totale en fonction du volume du Cd _{0.5} Ni _{0.5} Te dans les deux l'approximations : GGA et LDA.....	38
Figure (III.8) : la structure de bandes du composé CdTe en utilisant l'approximation LDA, GGA.....	42
Figure (III.9) : la structure de bandes du composé Cd _{0.5} Co _{0.5} Te en utilisant l'approximation GGA et LDA.....	43

Figure (III.10) : la structure de bandes du composé $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$ en utilisant l'approximation GGA et LDA.....	44
Figure (III.11) : la structure de bandes du composé $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$ en utilisant l'approximation GGA et LDA.....	45
Figure (III.12) : la structure de bandes du composé $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$ en utilisant l'approximation GGA et LDA.....	46
Figure (III.13) : la structure de bandes du composé $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$ en utilisant l'approximation GGA et LDA.....	47
Figure(III.14) :La densité d'états totale de CdTe et partielle de cd et Te en utilisant la GGA.....	49
Figure(III.15) :La densité d'états totale de CdTe et partielle de cd et Te en utilisant la LDA.....	50
Figure (III.16) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te, Cd, Co, Te$ en utilisant l'aapproximation GGA.....	51
Figure(III.17) :La densité d'états partielle du composé Cd,Co,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	52
Figure (III.18) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te, Cd, Cr, Te$ en utilisant l'aapproximation GGA.....	53
Figure(III.19) :La densité d'états partielle du composé Cd,Cr,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	54
Figure(III.20) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te, Cd, Fe, Te$ en utilisant l'aapproximation GGA.....	55
Figure(III.21) :La densité d'états partielle du composé Cd, Fe, Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	56
Figure(III.22) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te, Cd, Mn, Te$ en utilisant l'aapproximation GGA.....	57
Figure(III.23) :La densité d'états partielle du composé Cd, Mn, Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	58
Figure (III.24) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te, Cd, Ni, Te$ en utilisant l'aapproximation GGA.....	59
Figure(III.25) :La densité d'états partielle deCd,Ni,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	60
Figure(III.26) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te, Cd, Co, Te$ en utilisant l'aapproximation LDA.....	61

Figure(III.26) :La densité d'états partielle du composé Cd,Co, Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	62
Figure (III.27) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Cr_{0.5} Te,Cd,Cr,Te$ en utilisant l'aapproximation LDA	63
Figure(III.28) :La densité d'états partielle du composé Cd,Cr, Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	64
Figure (III.29) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Fe_{0.5} Te,Cd,Fe,Te$ en utilisant l'aapproximation LDA.....	65
Figure(III.30) :La densité d'états partielle du composé Cd, Fe ,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	66
Figure (III.31) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Mn_{0.5} Te,Cd,Mn ,Te$ en utilisant l'aapproximation LDA.....	67
Figure(III.32) :La densité d'états partielle du composé Cd, Mn ,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	68
Figure (III.33) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Ni_{0.5} Te,Cd,Ni,Te$ en utilisant l'aapproximation LDA.....	69
Figure(III.34) :La densité d'états partielle du composé Cd, Ni ,Te en utilisant l'aapproximation GGA.....	70

Liste des tableaux

- Tableau. (III.1) :** les valeurs de $R_{mt} * K_{max}$, K points, R_{mt} de Cd et R_{mt} de Te dans la structure zinc-blende, et de (Cd,Te,Cr,Mn,Fe,Co,Ni) dans la structure tétragonale.30
- Tableau (III.2) :** Les propriétés structurales du CdTe: paramètres du réseau d'équilibre $a(A^\circ)$, le module de compression $B(GPa)$ et la dérivée B' dans la phase zinc-blende.....31
- Tableau (III.3) :** Le paramètre du réseau d'équilibre $a (A^\circ)$, le module de compression $B(GPa)$ et son dérivée B' du $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$32
- Tableau (III.4) :** Gaps énergétiques eV de CdTe et $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$41
- Tableau (III.5) :** les moments magnétiques totales en (μ_B) des composés $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$ 72
- Tableau (III.6) :** Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} pour CdTe (les valeurs sont en GPa).....74

Introduction générale

Introduction générale

Actuellement le progrès technologique et industriel dépend fortement de l'avancement des matériaux.

La conception des matériaux par ordinateur est devenue actuellement le moyen le plus efficace dans la recherche des sciences des matériaux. Ceci reflète les développements récents dans la théorie électronique pour l'explication de plusieurs résultats expérimentaux et la prédiction des propriétés physiques des matériaux qui n'ont pas encore été conçus.

Actuellement on peut fabriquer des matériaux avec des nouvelles propriétés qui ne se trouvent pas dans la nature. Il s'agit de décrire les matériaux par des modèles théoriques qui peuvent expliquer les observations expérimentales, et surtout d'effectuer des simulations ou «des expériences virtuelles » qui peuvent prédire le comportement des matériaux là où l'expérience réelle fait défaut, ou qu'elle soit très coûteuse et parfois difficilement réalisable. Ainsi, l'intérêt de la modélisation et la simulation est d'étudier les diverses possibilités qui se présentent, et d'orienter l'industrie vers les meilleurs choix avec un coût minimum. La connaissance de toutes les propriétés d'un matériau donné est étroitement liée à la détermination de son énergie totale.

Récemment, il y a un intérêt considérable pour les semi-conducteurs II-VI dû à leur application dans les appareils photovoltaïques, comme cristaux électro-optiques et opto-électroniques et de leurs applications à la réalisation récente de diodes lumière (LED à couleur verte basé sur CdTe).

Le semi-conducteur CdTe se cristallise dans la phase zinc blende e. Il est considéré comme un excellent candidat dans la technologie des dispositifs optiques, des mémoires optiques à haute densité, des conducteurs transparents, des dispositifs lasers solides, des photo-détecteurs, des cellules solaires ...etc.,

Ainsi le remplacement des cations dans le CdTe et par les ions des métaux de transitions magnétiques ont un intérêt dans les applications spintronic [1].

Dans ce travail nous avons étudié les propriétés structurales, électroniques et magnétiques de $\text{Cd}_{0.5}\text{M}_{0.5}\text{Te}$ (M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni) en plus les propriétés élastiques CdTe dans la phase zinc blende. Dans notre connaissance il n'existe pas des résultats expérimentaux et théoriques préjudiciaux disponibles ont le même pourcentage de 50% pour comparer les propriétés de $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$, sauf pour le $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$. Mais il existe des recherches dans d'autres différents pourcentages. Des travaux théoriques pour le $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ a été effectué par Touat et al [2] pour $x=0.25$ et par Merad et al [3] pour $x=0.50$ utilisant l'approximation de la densité locale(LSDA).

Le travail effectué par l'utilisation de la méthode des ondes planes augmentées (*FP-LAPW*), elle est basée sur la théorie moderne de la fonctionnelle de densité (*DFT*) qui est basée deux théorèmes de Hohenberg et Kohn [4] sur les et implémentées respectivement dans le code de calcul *WIEN2K* qui nous a permis d'étudier les propriétés structurales, et électroniques, de nos systèmes.

Ce mémoire comprend trois chapitres avec une introduction et une conclusion générale.

Dans le premier chapitre nous présentons la *DFT*, les équations de *Kohn-Sham* [5] ainsi montrons les deux approximations bien connues du potentiel d'échange-corrélation à savoir celle de la densité locale ou (*LDA*) [6] et celle du gradient généralisé (*GGA*) [7]. Le chapitre II contient un rappel sur la méthode utilisée dans le calcul (*FP-LAPW*). Le troisième et le dernier chapitre contient nos résultats numériques obtenus concernant les propriétés structurales, électroniques et élastiques du semi-conducteur CdTe et $\text{Cd}_{0.5}\text{M}_{0.5}\text{Te}$ (M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni) et

leurs interprétations, ainsi leurs comparaisons avec les résultats expérimentaux trouvés. Les grandeurs calculées sont les suivantes : paramètre de maille, énergie totale, structure électronique et constantes élastiques.

Enfin nous présentons une conclusion générale résumant les résultats obtenus.

Chapitre I

Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

Chapitre I: Théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)

I.1.Introduction

La physique de la matière condensée et la science des matériaux sont concernées fondamentalement par la compréhension et l'exploitation des propriétés des systèmes d'électrons et de noyaux atomiques interagissant. Ce développement a permis d'étudier les propriétés des matériaux par des outils de calcul convenable pour résoudre ce problème.

Malheureusement, les électrons et les noyaux qui composent les matériaux constituent un système à plusieurs corps fortement interagissant qui rend la résolution de l'équation de Schrödinger difficile, et comme l'a déclaré *Dirac* (en 1929) le progrès dépend du développement des techniques approximatives suffisamment précises. Parmi ces techniques on a le développement de la théorie de la fonctionnelle de densité (*DFT*) et la détermination de l'approximation de la densité locale (*LDA*) [6]. Pour décrire un matériau, il faut connaître ses propriétés (électroniques, structurales, optiques,...), et cela implique la connaissance des interactions entre les électrons et les ions qui le constituent. Mais dans ce cas, la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger.

I.2 .L'équation de Schrödinger

N'importe quel problème dans la structure électronique de la matière est couvert par l'équation de Schrödinger qui a été proposé par *Autrichien Schrödinger* [8] (en 1929) :

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

Où : ψ est La fonction d'onde.

E : est l'énergie totale de ce système.

H : est l' Hamiltonien exact pour un système qui contient M noyaux et N électrons décrit par la formule suivante:

$$H = - \sum_{k=1}^M \frac{\hbar^2}{2M_k} \nabla_{\vec{R}_k}^2 - \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\vec{r}_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{k_1 \neq k_2=1}^M \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_{k_1} Z_{k_2} e^2}{|\vec{R}_{k_1} - \vec{R}_{k_2}|} + \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2=1}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_{i_1} - \vec{r}_{i_2}|} - \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_k e^2}{|\vec{R}_k - \vec{r}_i|} \quad (\text{I.2})$$

Où : M_k est la masse du noyau.

m_e est la masse de l'électron.

\vec{r}_i est la position des électrons.

\vec{R}_k est la position des noyaux.

Z_{k_1}, Z_{k_2} sont les nombres atomiques des noyaux k_1 et k_2 .

L'Hamiltonien total composé de cinq termes ; l'énergie cinétique des noyaux, l'énergie cinétique des électrons, l'énergie potentielle d'interaction noyau-noyau, l'énergie potentielle d'interaction électron-électron, énergie potentielle d'interaction noyau-électron. En conséquence, on écrit :

$$H = T_{c,n} + T_{c,e} + V_{p,n-n} + V_{p,e-e} + V_{p,n-e} \quad (I.3)$$

L'équation de Schrödinger contient toutes les informations du système. Mais malheureusement, sa résolution devient de plus en plus difficile lorsque le nombre de particules augmente ce qui est pratiquement impossible dans le cas d'un solide.

Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système de particules se trouvant en interaction, on doit obligatoirement faire des approximations.

I.3 .L'approximation de Born-Oppenheimer

L'idée physique de l'approximation de *Born-Oppenheimer* [9] stipule que la masse du noyau est plus grande que celle de l'électron, alors que le noyau se déplace plus lentement que l'électron et plus localisable dans l'espace. Donc nous pouvons éliminer le terme $T_{c,n}$ et considérons que $V_{p,n-n}$ est constante se qui permet d'écrire :

$$H^e \cong T_{c,e} + V_{p,e-e} + V_{p,e-n} \quad (I.4)$$

Alors à l'équation électronique de Schrödinger est réécrite comme suit :

$$\left[- \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{i_1 \neq i_2=1}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_{i_1} - \vec{r}_{i_2}|} - \sum_{k=1}^M \sum_{i=1}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_k e^2}{|\vec{R}_k - \vec{r}_i|} \right] \psi_e = E_e \psi_e \quad (I.5)$$

On a donc réduit la complexité du problème. Mais la solution de l'équation (I.1) reste toujours difficile. Il faut faire d'autres approximations pour résoudre ce problème.

I.4 L'approximation de Hartree-Fock

Cette approximation suppose que chaque électron se déplace de façon indépendante dans le champ moyen créé par les autres électrons et les noyaux. Donc cette approximation réduit le problème de plusieurs électrons en interaction à un problème d'électrons indépendants.

L'hamiltonien peut alors être écrit comme une somme d'hamiltoniens décrivant un seul électron comme suit :

$$H = \sum_i H_i \quad (\text{I.6})$$

Avec

$$H_i = -\frac{\hbar^2 \nabla_{\vec{r}_i}^2}{2m_e} + V_i(\vec{r}_i) + U_i(\vec{r}_i) \quad (\text{I.7})$$

Où

$$V_i(\vec{r}_i) = -\sum_k \frac{Z_k}{|\vec{R}_k - \vec{r}_i|} \quad (\text{I.8})$$

$V_i(\vec{r}_i)$: est l'énergie potentielle de l'électron i dans le champ de tous les noyaux K

$$U_i(\vec{r}_i) = \frac{1}{2} \sum_j^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (\text{I.9})$$

Où : $U_i(\vec{r}_i)$ est le champ effectif de Hartree.

Le potentiel effectif est la somme de ces deux contributions :

$$V_{eff} = V_H(\vec{r}) + V_N(\vec{r}) \quad (\text{I.10})$$

Où: V_H : Le potentiel de Hartree.

V_N : Le potentiel d'interaction électron- toutes autres noyaux.

En introduisant le potentiel effectif dans l'équation de Schrödinger. On trouve:

$$-1/2\nabla_{\vec{r}}^2\psi(\vec{r}_i) + V_{eff}(\vec{r}_i)\psi(\vec{r}_i) = \epsilon_i\psi(\vec{r}_i) \quad (\text{I.11})$$

La fonction d'onde du système électronique a la forme d'un produit de N fonctions d'ondes de chacun des électrons :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots, \dots, \dots, \vec{r}_N) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)\dots\psi_N(\vec{r}_N) \quad (\text{I.12})$$

Et l'énergie de ce système est égale à la somme des énergies de tous les électrons

$$E_e = \sum_{i=1}^N E_i \quad (\text{I.13})$$

L'équation (I-12) est une solution de l'équation (I-11) mais elle ne respecte pas le principe de Pauli. L'approximation de *Hartree-Fock* [10 ,11] a été introduite en prenant compte

pour résoudre l'équation de Schrödinger. La différence entre l'énergie du système multiélectronique réel, et l'énergie obtenue dans l'approximation de Hartree comme étant celle représentant le reste des interactions électroniques. L'une de ces interactions qui manque dans le modèle de Hartree est l'échange et la corrélation.

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

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_a, \vec{r}_b, \dots \dots \dots \vec{r}_N) = -\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_b, \vec{r}_a, \dots \dots \dots \vec{r}_N)$$

ψ doit être antisymétrique. Donc, elle s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater.

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3, \dots \dots \dots \vec{r}_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{bmatrix} \quad (1.15)$$

Les méthodes de *Hartree- Fock* basées sur l'hypothèse des électrons libres. Ces méthodes sont beaucoup utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules, mais elles sont moins précises pour les solides.

Il existe une méthode plus moderne et probablement plus puissante qui est **la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT)** (1964).

I.5 La théorie de la fonctionnelle de la densité

La DFT est basée sur le théorème de *Hohenberg et Kohn* [4]. Ce théorème stipule que l'énergie totale(E) d'un système à spin non polarisé des électrons en interaction dans un potentiel externe (le potentiel coulombien dû au noyau dans un solide) est donnée exactement comme une fonctionnelle de la densité électronique(ρ) à l'état fondamental.

$$E = E[\rho_0] \quad (I.16)$$

Hohenberg et Kohn ont montré que la vraie densité fondamentale est celle qui minimise l'énergie (E) et que les autres propriétés sont aussi fonctionnelles de la densité fondamentale. Pour les systèmes magnétiques, l'énergie (E) et les autres propriétés fondamentales deviennent fonctionnelles des deux densités du spin de l'électron haut et bas :

$$E = E[\rho_\uparrow, \rho_\downarrow] \quad (I.17)$$

L'énergie de l'état fondamental d'un système électronique dans un potentiel extérieur est déterminée par la méthode variationnelle.

I.6 Les équations de Kohn-Sham

En 1965, *Kohn* et *Sham* [5] ont écrit que la densité électronique comme étant la somme des densités des particules indépendantes. Ils ont montré que la densité exacte est donnée par la solution auto-cohérente (self-consistent) d'une série des équations de Schrödinger d'une seule particule, connue comme les équations de *Kohn-Sham* (KS), avec une densité qui dépend du potentiel :

$$[T + V_{ei}(r) + V_H(r) + V_{XC}(r)]\varphi_i(r) = \epsilon_i\varphi_i(r) \quad (I.18)$$

Où la densité est donnée par la somme des orbitales occupées :

$$\rho(r) = \sum_{occup} \varphi_i^*(r)\varphi_i(r) \quad (I.19)$$

Où : φ_i sont les orbitales de la particule.

ϵ_i sont les valeurs propres correspondantes.

T est l'opérateur de l'énergie cinétique.

V_{ei} est le potentiel de coulomb dû au noyau atomique.

V_H est le potentiel de *Hartrée* .

V_{XC} est le potentiel d'échange –corrélation.

Les deux derniers potentiels V_H et V_{XC} s'écrivent en fonction de ρ :

$$V_H(r) = e^2 \int d^3r' \frac{\rho(r')}{|r - r'|} \quad (I.20)$$

Et

$$V_{XC}(r) = \frac{\delta E_{XC}(\rho)}{\delta \rho(r)} \quad (I.21)$$

Dans les solides, le théorème de *Bloch* facilite les calculs de la *DFT*, car la densité de charge a la même périodicité que le réseau, ainsi que l'hamiltonien de *Kohn* et *Sham* pour une seule particule. Les orbitales de *K-S* avec différents moments de *Bloch* sont couplées indirectement la densité, qui dépend du potentiel. Dans les calculs basés sur la *DFT*,

les équations de *K-S* d'une seule particule peuvent être résolues séparément sur un ensemble de point dans la zone de Brillouin, et les orbitales qui en résultent sont utilisées dans la construction de la densité de charge.

Donc, les équations de *Kohn-Sham* peuvent s'écrire sous la forme :

$$H\varphi_i(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \varphi_i(r) = \varepsilon_i\varphi_i(r) \quad (I.22)$$

Où chaque électron subit l'effet du potentiel effectif créé par tous les noyaux et les autres électrons, ce potentiel est donné par :

$$V_{eff}(r) = V_{ext}(r) \int \frac{1}{|r_i-r_j|} \rho(r_j) dr_j + V_{xc}(r) \quad (I.23)$$

Les orbitales de *K-S* sont décrites par l'expression suivante :

$$\varphi_i(r) = \sum C_{i\alpha} \phi_\alpha(r) \quad (I.24)$$

Où $\phi_\alpha(r)$ sont les fonctions de base et $C_{i\alpha}$ sont les coefficients associées.

Les solutions des équations de *Kohn-Sham* reviennent à déterminer les $C_{i\alpha}$ pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. L'optimisation des coefficients $C_{i\alpha}$ et la détermination de la densité de charge se font séparément. Dans le schéma (I.1), il est nécessaire de déterminer à plusieurs reprises les $C_{i\alpha}$ qui résolvent les équations d'une seule particule (I.18) pour une densité de charge fixe. En utilisant quelques techniques numériques standards, on peut construire l'équation séculaire suivante :

$$(H - \varepsilon_i S)C_i = 0 \quad (I.25)$$

Jusqu'ici la *DFT* est une méthode exacte, mais pour que la *DFT* et les équations de *Kohn-Sham* deviennent utilisables dans la pratique, on a besoin de proposer une formule pour $E_{XC}[(\rho)]$ à cet effet, nous sommes obligés de passer par des approximations.

I.7 L'approximation de la densité locale (LDA)

Plusieurs procédures conventionnelles appliquées dans le calcul de l'énergie des bandes des solides sont basées sur *DFT* et la *LDA*. En 1951, *Slater* [12] a donné une simplification du potentiel d'échange de *Hartrée-Fock* dans la théorie de bande, et selon ce schéma, il apparaît un potentiel d'échange sous la forme :

$$V_{XS}(r) = -3\left(\frac{3}{\pi}\rho(r)\right)^{1/3} \quad (\text{I.26})$$

Ce potentiel $V_{XS}(r)$ est local, puisqu'il dépend seulement de r , et sa forme simple rend les calculs de l'énergie des bandes très facile, et suffisamment exacte.

En 1964, *Hohenberg-Kohn* [4] et *Kohn-Sham* [5] développent la *DFT*. Dans cette théorie, l'énergie E_{XC} est calculée en se basant sur les informations disponibles sur les interactions à plusieurs électrons dans un système à densité constante (un gaz d'électron homogène). L'approximation de la densité locale repose sur la considération suivante : à chaque point dans le solide, il existe une densité d'électron bien définie.

Kohn et *Sham* ont utilisé les propriétés variationnelles pour la détermination de l'énergie d'échange et de corrélation. Pour ceci, ils utilisent les informations disponibles d'un gaz d'électron homogène, et ils traitent les systèmes non-homogènes autant qu'il sont localement homogène avec une énergie d'échange et de corrélation ε_{XC} bien connue.

$$E_{XC}^{LDA} = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{unif}[\rho(r)] dr \quad (\text{I.27})$$

Dans le cas des systèmes polarisés, la densité de charge est décomposée en deux parties. La densité du spin haut $\rho \uparrow (r)$ et du spin bas $\rho \downarrow (r)$. Donc, l'énergie d'échange et de corrélation est donnée comme étant une fonctionnelle de deux densités du spin d'électron, c'est l'approximation de la densité locale du spin (*LSDA*)

$$E_{XC}^{LDA}(\rho \uparrow, \rho \downarrow) = \int \rho(r) \varepsilon_{XC}^{unif}[\rho \uparrow (r) + \rho \downarrow (r)] dr \quad (\text{I.28})$$

L'énergie d'échange et de corrélation d'un gaz uniforme $\varepsilon_{XC}^{unif} \rho(r)$ peut être décomposée en deux contributions.

$$\varepsilon_{XC} = \varepsilon_X(\rho) + \varepsilon_C(\rho) \quad (\text{I.29})$$

I.7.1 L'approximation De Ceperly et Alder

Dans cette approche, l'énergie d'échange $\varepsilon_X(\rho)$ est considérée comme étant l'énergie de Dirac et l'énergie de corrélation $\varepsilon_C(\rho)$ est paramétrisée par *Pedrew et Zunger* [13]:

$$\varepsilon_X(\rho) = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \rho \right)^{1/3} \quad (\text{I.30})$$

Ce qui donne:
$$V_X = \frac{1}{4\pi} (3\pi^2 \rho)^{1/3} \quad (\text{I.31})$$

Pour l'énergie $\varepsilon_C(\rho)$, la condition qui doit être vérifiée est : $\left(\frac{4\pi}{3} \rho \right) r_s = 1$, où r_s est le paramètre de séparation inter-électronique. Il existe deux cas :

1- Pour $r_s < 1$

$$V_C = 0.031 \ln r_s - 0.0583 + 0.0013 r_s \ln r_s - 0.0084 r_s \quad (\text{I.32})$$

2- Pour $r_s \geq 1$

$$V_C = -0.1423 [1 + 1.2284 \sqrt{r_s} + 0.4445 r_s / (1 + 1.0529 \sqrt{r_s} + 0.3334)^2] \quad (\text{I.33})$$

I.7.2 L'approximation de Hedin et Lundqvist

Dans cette approximation, les deux termes sont déterminés comme suit :

$$\varepsilon_X(\rho) = \frac{-3e^2}{4\pi} (3\pi^2 \rho)^{1/3} = \frac{-3}{4\pi \alpha r_s} e^2 \quad (\text{I.34})$$

Avec r_s est le paramètre d'un gaz d'électron qui vérifie la condition suivante :

$$\left(\frac{4\pi}{3} \rho \right) r_s a_B = \frac{1}{\rho} \quad (\text{I.35})$$

Donc, le potentiel d'échange devient :

$$V_X(r_s) = \varepsilon_X(r_s) - \frac{r_s}{3} \frac{d\varepsilon_X(r_s)}{dr_s} = \frac{4}{3} \varepsilon_X(r_s) \quad (\text{I.36})$$

L'énergie de corrélation prend la forme suivante :

$$\varepsilon_C(r_s) = \frac{-C^2}{2} \left[(1 + x^3) \log \left(1 + \frac{1}{x} \right) + \frac{x}{2} - x^2 - \frac{1}{3} \right] \quad (\text{I.37})$$

Où $c=0.045$ et $x = \frac{r_s}{21}$

Le potentiel de corrélation est donné par :

$$V_c(r_s) = \varepsilon_c(r_s) - \frac{r_s}{3} \frac{d\varepsilon_c(r_s)}{dr_s} = \frac{-ce^2}{2} \log\left(1 + \frac{1}{x}\right) \quad (\text{I. 38})$$

I.8 L'approximation du gradient généralisé (GGA)

Malgré que l'approximation de la densité locale reste très efficace, mais dans certains cas on peut remarquer une sorte d'inefficacité de cette approximation. On note par exemple la sous-estimation du paramètre du réseau et la surestimation de module de compressibilité. Donc, pour améliorer ces résultats, une nouvelle correction a été introduite par l'ajout du gradient de la densité, c'est l'approximation du gradient généralisé (*GGA*) [14] :

$$E_{XC}^{GGA} = \int f[\rho(r), \nabla\rho(r)] \rho(r) dr \quad (\text{I. 39})$$

Donc, en gardant la même expression que la *LDA*, et en remplaçant le terme $\varepsilon_{XC}(\rho)$ par une fonction locale de la densité et de son gradient. Plusieurs calculs ont été effectués avec succès sur une variété de matériaux et pour plusieurs paramétrisations (*Singh et Ashkenazi* (1992) [14] ; *Korling et Haglund* (1992) [16] ; *Perdew, Brouke, et Ernzerhof*(1996)) [17], et à partir de ses résultats, on peut noter les conclusions suivantes :

- La *GGA* améliore les propriétés de l'état fondamental des atomes légers, des molécules, des agrégats et des solides composés.

- Plusieurs propriétés des métaux de transition 3d sont perfectionnées.

- L'énergie magnétique des métaux de transition 3d peut être surestimée.

- La *GGA* conduit à une augmentation successive du paramètre du réseau de quelques matériaux qui contiennent les éléments lourds, et ceci détériore la qualité des résultats relatifs à la *LDA*.

I.9 L'auto-cohérence dans les calculs de la DFT

La puissance du théorème de *Hohenberg et Kohn* réside dans le fait que l'énergie est variationnelle. La vraie densité de l'état fondamental est celle qui minimise l'énergie. La densité de charge est obtenue en utilisant l'équation (I-19), et la densité de charge de la $(i + 1)^{ième}$ itération possède la forme suivante :

$$\rho_{ent}^{i+1} = (1 - \alpha)\rho'_{ent} + \alpha\rho'_{sort} \quad (I.40)$$

Où : α est le paramètre de mixage.

Si α est suffisamment petit les itérations se convergent. Cependant, le rayon de convergence devient rapidement petit quand la dimension de la cellule unitaire augmente, particulièrement pour les systèmes métalliques.

Plusieurs techniques de calcul ont été mis en évidence, parmi lesquelles, on trouve la méthode de *Broyden* (1965) [18] qui s'effectue selon le schéma de la figure (I.1). Ce processus commence par une superposition des densités atomiques pour construire la densité cristalline initiale $\rho^{ent}(r)$, cette densité est utilisée par la suite pour calculer le potentiel $V(r)$ utilisé dans la résolution des équations de *Kohn et Sham* [5] d'une seule particule et la détermination de l'énergie de Fermi. Après cette étape une nouvelle densité de sortie doit être créée et testée suivant certaines conditions de convergence. Alors, si cette densité obéit à ces conditions on s'arrête, sinon on mixe les densités de sortie et d'entrée suivant l'équation (I.40) et le processus se répète jusqu'à la convergence.

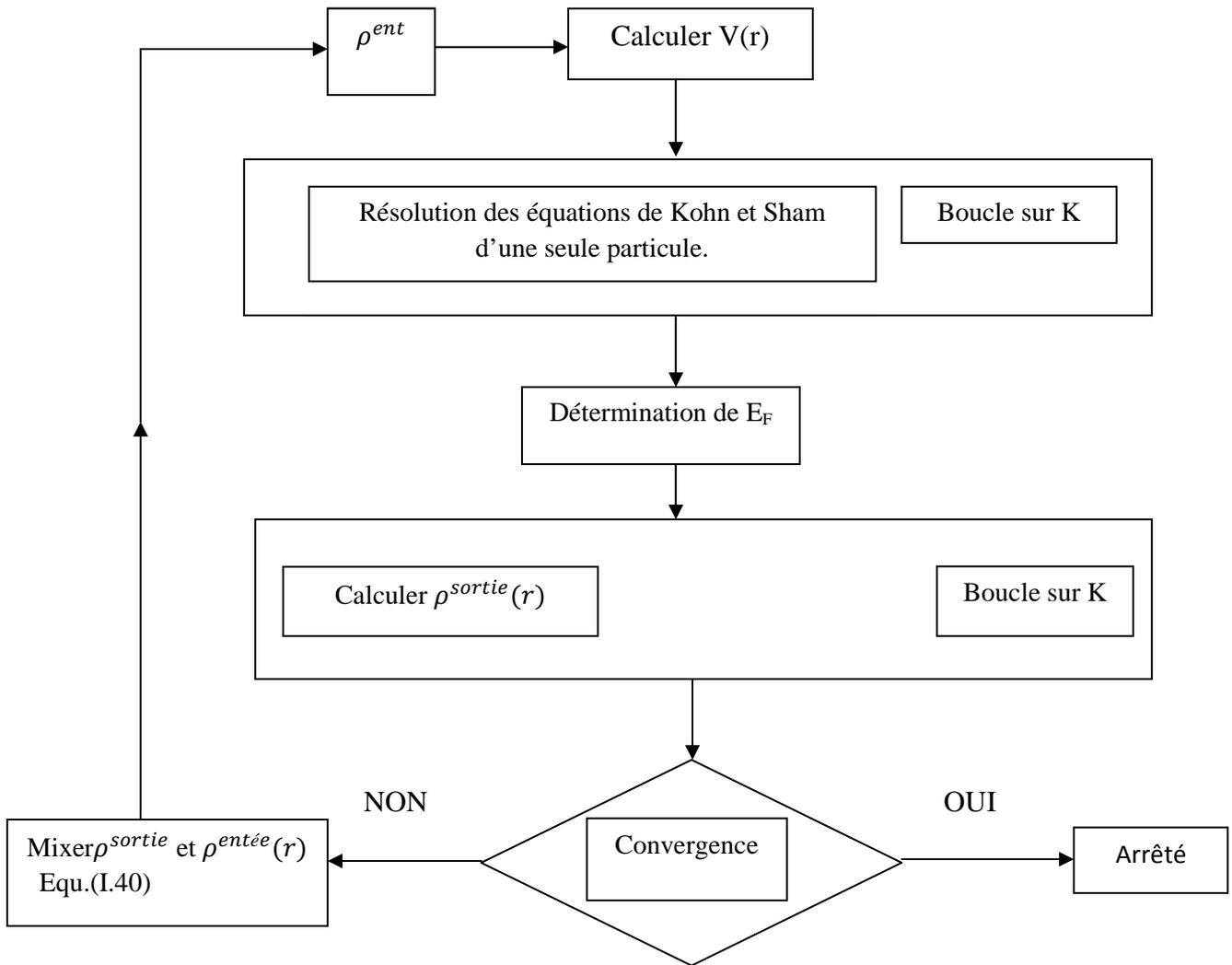


Figure (I.1) : Le diagramme de la fonctionnelle de densité (DFT) [19].

Chapitre II

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

Chapitre II: La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

II.1 Introduction

En 1937, Slater [20] a développé la méthode des ondes planes augmentées (APW). Après plusieurs modifications faites par Anderson [21]. Cette méthode devient la méthode des ondes planes augmentées linéairement (FP-LAPW).

Pour décrire le potentiel cristallin, Slater introduit l'approximation du potentiel Muffin-tin. Ce potentiel est représenté dans Fig.2 et Fig.3. Selon cette approximation, le potentiel est sphériquement symétrique à l'intérieur des sphères atomiques du rayon r_s [$U(\vec{r}) = U(|\vec{r}|)$], et assumé constant à l'extérieur [$U(\vec{r}) = U_0$]. Pour plus de simplification, l'énergie à l'origine calculée peut être choisie de telle façon qu'elle soit nulle [$U_0=0$]. Donc, le potentiel s'écrit sous la forme :

$$U(\vec{r}) = \begin{cases} U(r) & \text{pour } r \leq r_0 \\ 0 & \text{pour } r > r_0 \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

Avant d'entamer cette nouvelle méthode, en commençant d'abord par décrire la méthode (APW) et les motivations derrière le développement de la méthode (FP -LAPW).

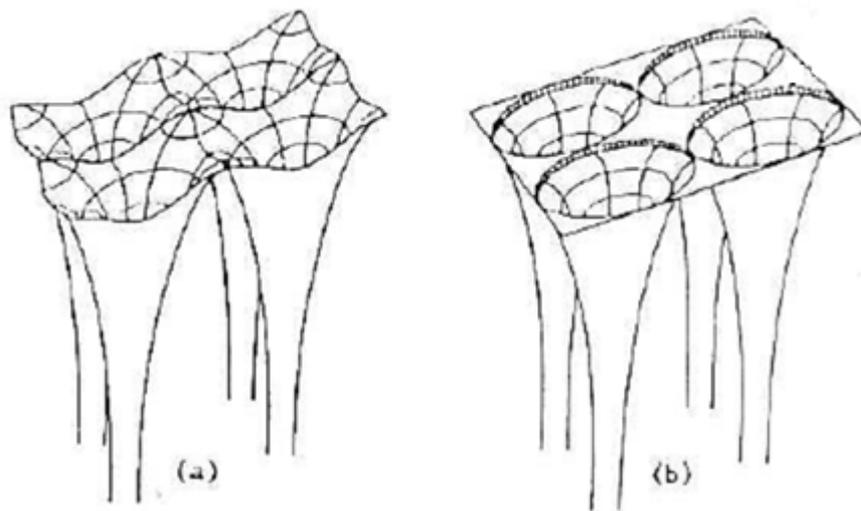


Figure (II.2) : Potentiel cristallin d'un réseau carré à deux dimensions :(a) potentiel total, et (b) potentiel muffin-tin[22] .

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

Slater considère que l'espace est divisé en deux types de régions (voir Fig.3): région de cœur et région interstitielle ; La région près du noyau a un potentiel et une fonction d'onde similaire à ceux d'un atome isolé (alors, le potentiel varie fortement). Cette région est limitée par une sphère atomique (S) de rayon r_0 et le potentiel possède la symétrie sphérique. Dans la région interstitielle les fonctions d'ondes sont planes et le potentiel est constant. Donc la fonction d'onde s'écrit sous la forme :

$$\phi(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(\vec{G}+\vec{K})} & r > r_0 \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(r) & r < r_0 \end{cases} \quad (II.2)$$

Ω : Volume de la maille unitaire.

Y_{lm} : Les harmoniques sphériques.

C_G : Coefficients de développement.

$U_l(r)$: La solution régulière de l'équation suivante:

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

Où E_l : paramètre d'énergie.

$V(r)$: Le composant sphérique du potentiel dans la sphère.

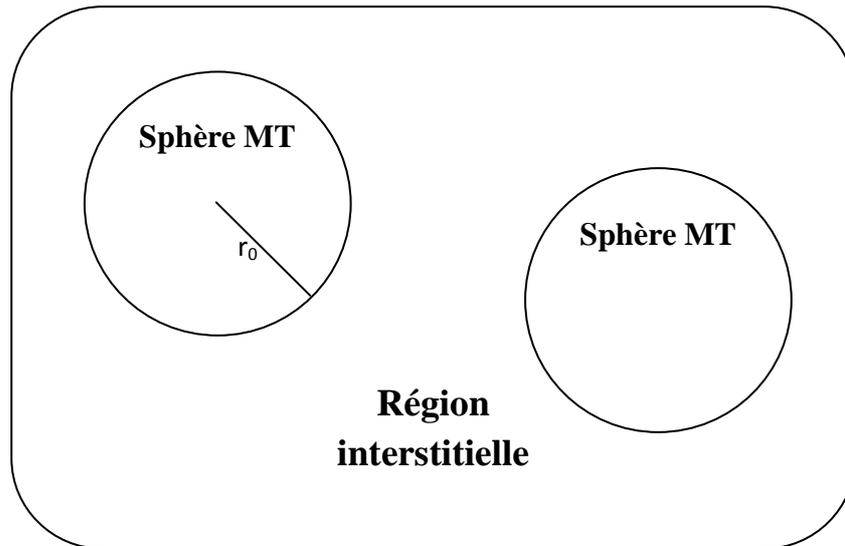


Figure (II.3) : Schéma de la répartition de la maille élémentaire en sphères atomiques et en région interstitielle[22].

Les fonctions radiales sont définies par l'équation précédente, sont orthogonales à tout état propre du cœur, mais cette orthogonalité disparaît sur la limite de la sphère [20]. Comme le montre l'équation suivante:

$$(E_1 - E_2)rU_1U_2 = U_2 \frac{d^2rU_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2rU_2}{dr^2} \quad (II.4)$$

U_1, U_2 : sont les solutions radiales pour ces énergies E_1 et E_2 respectivement.

Slater a fait un choix particulier pour les fonctions d'ondes, il montre que les ondes planes sont les solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel constant. Tandis que, les fonctions radiales sont la solution dans le cas du potentiel sphérique. Donc, il prouve que E_l est égale à la valeur propre E .

Cette approximation est très bonne pour les matériaux à structure cubique à faces centrées, et de moins en moins satisfaisante avec la diminution de symétrie du matériau.

Pour assurer la continuité de la fonction $\varphi(r)$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} doivent être développés en fonction des coefficients C_G des ondes planes existantes dans les régions interstitielles. Ainsi, après quelques calculs algébriques [23], nous trouvons que :

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^2 U_i(r_i)} \sum_G C_G j_l(|K + G|r_0) Y_{lm}^* \quad (II.5)$$

j_l : La fonction de Bessel.

Où l'origine est prise au centre de la sphère et r est son rayon. Ainsi les A_{lm} sont complètement déterminés par les coefficients des ondes planes, et le paramètre d'énergie E_l sont des coefficients variationnelles dans la méthode (APW).

Les fonctions d'ondes se comportent comme des ondes planes dans la région interstitielle, et elles augmentent dans la région de cœur et se comportent comme des fonctions radiales.

Pour l'énergie E_l . Les fonctions APWs sont des solutions de l'équation de Schrödinger, avec E_l est égale à la bande d'énergie indiquée par G . ceci signifiait que les bandes d'énergie ne peuvent pas obtenues par une simple diagonalisation, et ceci implique de traiter le déterminant séculaire comme une fonction de l'énergie.

La fonction $U_l(r)$ qui apparaît dans l'équation (II.4) est dépendante de E_l , et peut devenir nulle à la surface de la sphère MT, cela conduit à la séparation entre les fonctions radiales et les

ondes planes. Pour résoudre ce problème, plusieurs modifications ont été apportés sur la méthode APW. Parmi ces dernières, on cite le travail d'Anderson [21], ainsi que celui de Koelling et Abrman[24]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde $\phi(r)$ à l'intérieur de la sphère par une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(r)$ de leurs dérivées $\dot{U}_l(r)$ par rapport à l'énergie.

II.3 la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

Pour un cristal, l'espace est divisé en deux régions : la première région est la sphère de Muffin-tin, et la deuxième, c'est l'espace restant qui représente la région interstitielle. La fonction de base de la méthode (FP-LAPW) possède des ondes planes dans la région interstitielle et harmoniques sphériques dans les sphères.

II.3.1 Les bases de (FP-LAPW)

Les fonctions de base à l'intérieur de la sphère sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales et leurs dérivés $\dot{U}(r)Y(r)$ par rapport à l'énergie.

Les fonctions U_l sont définies comme dans la méthode (APW) et la fonction $\dot{U}(r)Y_{lm}(r)$ doit satisfaire la condition suivante :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r\dot{U}_l(r) = rU_l(r) \quad (II.6)$$

La fonction d'onde s'écrit comme suite :

$$\phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{G}+\vec{k}r)} & r > r_0 \\ \sum_{lm} (A_{lm}U_l(r) + B_{lm}\dot{U}_{lm}(r)Y_{lm}(r)) & r < r_0 \end{cases} \quad (II.7)$$

Où

A_{lm} : sont des coefficients correspondant à la fonction U_l .

B_{lm} : sont des coefficients correspondant à la fonction \dot{U}_l .

Les fonctions (FP-LAPW) sont des ondes planes uniquement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW. Les fonctions radiales peuvent être développées au voisinage de E_l [23] comme suit :

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l)U_l'(E_l, r) + O(E - E_l)^2 \quad (II.9)$$

Avec $O((E - E_l)^2)$ dénote l'erreur quadratique commise.

La méthode (FP-LAPW) entraîne une erreur sur les fonctions d'ondes de l'ordre de $O(E - E_l)^2$ et une autre sur l'énergie de bande de l'ordre $O(E - E_l)^4$. Nous pouvons obtenir toutes les bandes de valence dans une grande région d'énergie par un seul E_l . Dans le cas de l'impossibilité, on divise la fenêtre énergétique en deux parties.

II.4 Les rôles des énergies de linéarisation E_l

Nous avons cité déjà au-dessus que les erreurs commises dans la fonction d'onde (la densité de charge) sont l'ordre de $O(E - E_l)^2$ et dans les bandes d'énergie de l'ordre de $O(E - E_l)^4$, ce qui indique qu'il faut choisir un paramètre près du central de la bande où on veut obtenir un bon résultat, et on peut optimiser le choix du paramètre en calculant l'énergie totale du système pour plusieurs valeurs de E_l et en sélectionnant l'ensemble qui donne l'énergie la plus inférieure. Malheureusement, quand ces stratégies marchent bien dans plusieurs cas, elles échouent misérablement dans plusieurs d'autres.

La raison de cet échec est décrite dans la présence de haute couche et l'étendue de l'état du cœur (seulement connu comme état de semi-cœur) dans plusieurs éléments en particulier : métal alcalin, les terres rares, récemment les métaux de transitions et les actinides.

Comme mentionné, les fonctions augmentées $U_l(r)Y_{lm}$ et $\dot{U}_{lm}(r)Y_{lm}(r)$ sont orthogonales à chaque état du cœur, cette condition n'est jamais satisfaite exactement excepté pour le cas où les états du cœur ne posséderaient pas le même l .

Les effets de cette orthogonalité inexacte aux états du cœur dans la méthode (FP-LAPW) sont sensibles aux choix de E_l . Le cas le plus critique, là où il y a un chevauchement entre les bases (FP-LAPW) et les états du cœur, ce qui introduit de faux états du cœur dans le spectre d'énergie, ces états sont connus sous le nom de bandes fantômes.

Ces derniers sont facilement identifiées, elles ont une très petite dispersion et sont hautement localisées dans la sphère, et ont un caractère l de l'état de cœur.

Pour éliminer les bandes fantômes du spectre, on peut mettre le paramètre d'énergie E_l égale à l'énergie de l'état du cœur.

II.5 Constructions des fonctions radiales

Dans la méthode (FP-LAPW) Les fonctions de bases sont des fonctions radiales à l'intérieur des sphères, avec la condition que les fonctions radiales et leurs dérivées sont continuées à la limite de la sphère, et dans la région interstitielle sont des ondes planes.

Ainsi, la construction des fonctions de base consiste à déterminer :

1-les fonctions radiales $U_r(r)$ et leurs dérivées $\dot{U}_l(r)$.

2- les coefficients A_{lm} et B_{lm} qui satisfont aux conditions aux limites.

La condition aux limites permet de déterminer les moments angulaires de coupure l_{max} de la représentation des sphères dans les termes du coefficient des ondes planes, G_{max} .

Ceci peut être réalisé en notant que permet une représentation des fonctions avec un nœud maximum de $2l_{max}$ le long du grand cercle autour de la sphère, c'est à dire la distance de $2\pi R_\alpha$ ou $l_{max}/\pi R_\alpha \cdot neoud/a_0$ en unités atomique. D'un autre coté, G_{max} correspond à une onde plane avec $(G_{max}/\pi \cdot neoud)a_0$. En réalisant ceci, on suggère un critère $R_\alpha G_{max} = l_{max}$ qui est très bien suivi en pratique.

II.5.1 Les fonctions radiales non relativistes

Dans le cas non relativiste, les fonctions radiales sont des solutions de l'équation de Schrödinger avec un potentiel sphérique et une énergie fixe E_l .

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} rU_l(r) = 0 \quad (II.9)$$

Où $V(r)$: est la composante sphérique du potentiel dans la sphère MT.

La dérivée par rapport à l'énergie \dot{U}_l d'après [26] est :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r\dot{U}_l(r) = rU_l(r) \quad (II.10)$$

L'orthogonalisation de $U_l(r)$ et de \dot{U}_l d'après [24] est donné :

$$\int_0^{R_\alpha} r^2 U_l^2(r) dr = 1 \quad (II.11)$$

Avec le choix de la norme $\|U_l\|$ permet l'indication de rang pour le quel la linéarisation de l'énergie sera une bonne approximation. En particulier, les erreurs sur l'énergie de linéarisation sont acceptables selon Anderson.

$$\|\dot{U}_l\| \cdot |E_l - E_l| \leq 1 \quad (II.12)$$

Où E_l est le paramètre d'énergie et E l'énergie des bandes.

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

1- on divise les rangs d'énergie dans les fenêtres, et chacune de ces fenêtres est traitée séparément.

2- On utilise un développement sous la forme d'orbitales locales (ceci est effectivement la méthode quadratique).

3- On réduit la taille de la sphère. Donc, on réduit la norme de la dérivée.

Dans la suite, on va exposer les deux premières méthodes, la troisième option a été appliquée par Goedecker [25].

II.5.2 Les fonctions radiales relativistes

Dans le cas des éléments lourds qui ont un nombre atomique élevé, on tient compte de l'effet relativiste.

Les effets relativistes concernent seulement les fonctions radiales dans les sphères MT. Pour introduire cet effet, il faut remplacer les équations (II-9) et (II-10) par les équations de Dirac et leurs dérivées par rapport à l'énergie. Dans le but de résoudre ces équations, Koelling et Harman [26] trouvaient une technique qui néglige l'effet spin-orbite (Roskey [27], Wood et Boring [28] Takeda [29], Macdonald [30]).

Les solutions de l'équation de Dirac sont :

$$\Psi_{k\nu} = \begin{bmatrix} g_k \chi_{k\nu} \\ -i f_k \sigma_r \chi_{k\nu} \end{bmatrix} \quad (II.13)$$

k ; le nombre quantique relativiste.

$\chi_{k\nu}$: est le spin-orbit à deux composants et les coordonnées radiales a été supprimé.

Koelling et Harmon [26] utilisent une nouvelle fonction :

$$\phi_k = \frac{1}{2mC} g'_k \quad (II.14)$$

g'_k : Est la dérivée radiale de g_k .

m : est la masse.

C : est la vitesse de la lumière dans le vide.

La solution en fonction des nombres quantiques habituelle lm [23] s'écrit comme suit :

$$\phi_{lms} = \begin{bmatrix} g_l Y_{lm} \chi_s \\ \frac{i}{2mC} \sigma_r (-g'_l \frac{1}{r} g_l \sigma) Y_{lm} \chi_s \end{bmatrix} \quad (II.16)$$

Où χ_s : est le spinor non relativiste.

Définissant $P_l r g_l$ et $Q_l = r C \phi_l$, l'équation séculaire relativiste devient

$$P'_l = 2MQ + \frac{1}{2} P_l \quad (II.17)$$

$$Q'_l = -\frac{1}{2}Q + \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l) \right] P_l \quad (II.18)$$

Cette dernière équation peut être résolue numériquement comme dans le cas de l'équation de Schrödinger non relativiste en utilisant la méthode prédicateur-correcteur par exemple, en donnant les conditions aux limites.

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{Q}{P} = C \frac{1}{(2Z/C)} ([l(l+1) + 1 - (2Z/C)^{1/2} - 1] \quad (II.19)$$

Le terme spin-orbite peut être inclus en additionnant le terme $-\left(\frac{V'}{4M^2C^2}\right)(k+1)P$ (au membre droit de l'équation (II.15)). La dérivée par rapport à l'énergie est similaire au cas non relativiste.

$$\dot{P}_l = 2(\dot{M}Q_l + M\dot{Q}_l) + \frac{1}{r}\dot{P}_l \quad (II.20)$$

et

$$\dot{Q}_l = -\frac{1}{r}\dot{Q}_l \left[\frac{l(l+1)}{2Mr^2} + (V - E_l) \right] \dot{P}_l - \left[\frac{l(l+1)\dot{M}}{2M^2r^2} + 1 \right] P_l \quad (II.21)$$

Les composantes g_l et f_l peuvent être déterminées en utilisant les définitions de P_lQ_l et ϕ_l . Les deux composantes sont utilisées dans la construction de la densité de charge ou l'évaluation des éléments de matrice (pour les composantes non sphériques de l'Hamiltonien, par exemple). Ainsi la quantité U_l^2 est remplacée dans l'équation (II.11) de normalisation par le terme $g^2 + f^2$.

II.6 Résolution de l'équation de Poisson

Dans l'équation de Kohn et Sham [5]. Le potentiel utilisé contient le potentiel d'échange-corrélation et le potentiel de Coulomb (une somme du potentiel de Hartree et le potentiel nucléaire).

À l'aide de l'équation de Poisson. On peut déterminer le potentiel coulombien.

On a :

$$\nabla^2 V_c(\vec{r}) = 4\pi\rho(\vec{r}) \quad (II.22)$$

On peut résoudre cette équation dans le réseau réciproque. Pour faire cela Hamann [31] et Weinert [32] ont proposé une méthode de résolution dite "pseudo-charge", elle est essentiellement basée sur les deux observations suivantes.

1- La densité de charge est continuée et varié lentement dans les régions interstitielles. Par contre, elle varié rapidement dans la région de cœur.

2- Le potentiel coulombien dans la région interstitielle ne dépend pas seulement des charges dans cette région, mais aussi, des charges dans la région de cœur.

La densité de charge est décrite par une série de Fourier dans la région interstitielle comme suit:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_G \rho(\vec{G}) e^{i\vec{G}\vec{r}} \quad (II.23)$$

Le développement de la fonction de Bessel permet de calculer les ondes planes $e^{i\vec{G}\vec{r}}$.

$$\int_0^R r^{l+2} J_l(\vec{G}\vec{r}) d\vec{r} \begin{cases} R^{l+3} \frac{J_l(\vec{G}\vec{r})}{Gr} & G \neq 0 \\ \frac{R^3}{3} \sigma_{l,0} & G = 0 \end{cases} \quad (II.24)$$

Alors

$$e^{i\vec{G}\vec{r}} = 4\pi e^{i\vec{G}\vec{r}_\alpha} \sum_{lm} I^l J_l(|\vec{G}||\vec{r} - \vec{r}_\alpha|) Y_{lm}^*(\vec{G}) Y_{lm}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) \quad (II.25)$$

Où r : est la coordonnée radiale.

r_α : est la position de la sphère .

Le potentiel coulombien devient :

$$V_c(\vec{G}) = \frac{4\pi\rho(\vec{G})}{G^2} \quad (II.26)$$

En intégrant l'équation (II.26), on trouve :

$$V_{PW} = \sum_{lm} V_{lm}^{PW}(r) Y_{lm}(r) = \sum_V V_V^{PW}(r) K_V(r) \quad (II.27)$$

Où : V_{PW} Le potentiel interstitiel.

Soit :

$$K_V(r) = \sum_m C_{lm} Y_{lm}(r) \quad (II.28)$$

On détermine le potentiel à l'intérieur de la sphère MT par l'utilisation de la fonction de Green.

$$V_V(r) = V_{lm}^{PW}(r) \left[\frac{r}{R} \right] + \frac{4\pi}{2l+1} \left\{ \frac{1}{r^{l+1}} \int_0^x dr' r'^{l+2} \rho_V(r') + r^l \int_x^R dr' r'^{l-1} \rho_V(r') - \frac{r^l}{R^{2l+1}} \int_0^{R_x} dr' r'^{l+2} \rho_V(r') \right\} \quad (II.29)$$

Où, $\rho_V(r)$: sont les parties radiales de la densité de charge.

II.7 Amélioration de la méthode (FP-LAPW) :

L'énergie de linéarisation E_l est d'une grande importance dans la méthode (FP-LAPW). Puisque, au voisinage de E_l , on peut calculer l'énergie de bande à une précision très acceptable. Cependant, dans les états semi-cœur, il est utile d'utiliser l'une des deux moyens : l'usage de fenêtres d'énergie multiples, ou le développement en orbitales locales.

II.7.1 Les fenêtres d'énergies multiples

La technique la plus utilisée pour traiter le problème du semi-cœur est celle qui consiste à diviser le spectre énergétique en fenêtres dont chacune correspond à une énergie E_l [33]. Cette procédure de traitement est illustrée dans la Fig.3.

Dans ce traitement par le moyen de fenêtres, une séparation est faite entre l'état de valence et celui de semi-cœur où un ensemble de E_l est choisi pour chaque fenêtre pour traiter les états correspondants. Ceci revient à effectuer deux calculs par la méthode FP-LAPW, indépendants, mais toujours avec le même potentiel.

La méthode FP-LAPW est basée sur le fait que les fonctions $U_l(\vec{r})$ et $\dot{U}_l(\vec{r})$ sont orthogonales à n'importe quel état propre du cœur et, en particulier, à ceux situés à la surface de la sphère. Cependant, les états de semi-cœur satisfont souvent à cette condition, sauf s'il y a la présence de bandes « fantômes » entre l'état de semi-cœur et celui de valence.

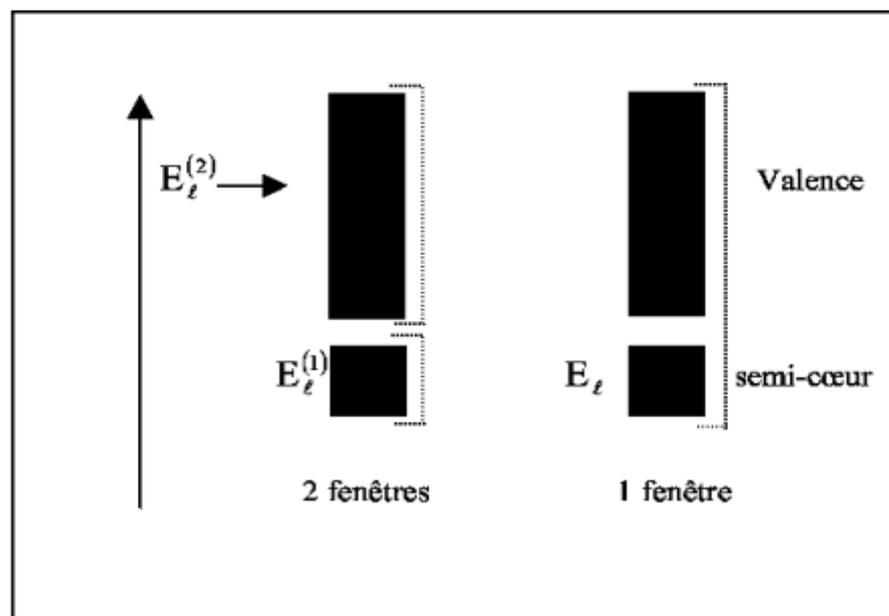


Figure (II .4) :les fenêtres d'énergie multiple[22].

II.7.2 Développement en orbital local

Dans cette technique, on traite tous les états énergétiques avec une seule fenêtre d'énergie. Tekeda[34], Petru [35], Smrcka [36] et Singh [37] proposent une combinaison linéaire de deux fonctions radiales. Les dérivés de ces fonctions par rapport à l'énergie sont égaux, mais les énergies de linéarisation correspondantes sont différentes. La fonction propre a la forme suivante :

$$\phi_{lm} = [A_{lm}U_1(r, E_{1,l}) + B_{lm}\dot{U}_1(r, E_{1,l}) + C_{lm}U_1(r, E_{2,l})]Y_{lm}(r) \quad (\text{II.30})$$

Où : C_{lm} sont ses coefficients possédant la même nature de coefficients A_{lm} et B_{lm} .

II.8 Traitement des effets de spin-orbite

Dans l'étude non relativiste Le terme spin-orbite est important pour le calcul de la structure de bandes et des propriétés électroniques des matériaux qui contiennent des éléments lourds ou des substances magnétiques.

On peut calculer les éléments de la matrice de spin-orbite à l'intérieur d'une sphère, comme suit :

$$\begin{aligned} \langle \phi_G^\sigma | H^{SO} | \phi_{G'}^{\sigma'} \rangle = & \sum_{lm'l'm'} [A_{lm}^*(G)A_{l'm'}(G') \langle U_{lm}^\sigma | H^{SO} | U_{l'm'}^{\sigma'} \rangle] + \\ & B_{lm}^*(G)A_{l'm'}(G') \langle \dot{U}_{lm}^\sigma | H^{SO} | U_{l'm'}^{\sigma'} \rangle + \quad (\text{II.31}) \\ & A_{lm}^*(G)B_{l'm'}(G') \langle U_{lm}^\sigma | H^{SO} | \dot{U}_{l'm'}^{\sigma'} \rangle + \\ & B_{lm}^*(G)B_{l'm'}(G') \langle \dot{U}_{lm}^\sigma | H^{SO} | \dot{U}_{l'm'}^{\sigma'} \rangle \end{aligned}$$

$$\text{Avec} \quad \langle U_{lm}^\sigma | H^{SO} | U_{l'm'}^{\sigma'} \rangle = 4\pi\sigma_{ll'} (X_\sigma^+ Y_{lm}^* \sigma.L Y_{l'm'} X_\sigma) \int dr P_l P_{l'} \left(\frac{1}{2Mc} \right)^2 \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \quad (\text{II.32})$$

Où P_l est la partie la plus importante de la fonction radiale U_l et V la partie sphérique du potentiel.

II.9 Wien2k

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, implémentée dans le code Wien2k [38]. Les principaux programmes nécessaires pour faire le calcul auto-cohérent sont :

NN : C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

LSTART : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états du coeur avec ou sans orbitales locales.

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 le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART. Alors un cycle auto-cohérent est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel à partir de la densité.

LAPW1 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : Calcul les densités de valence.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : Mélange la densité d'entrée et de sortie.

Les différents processus de calcul sont illustrés sur le diagramme de la Fig.5.

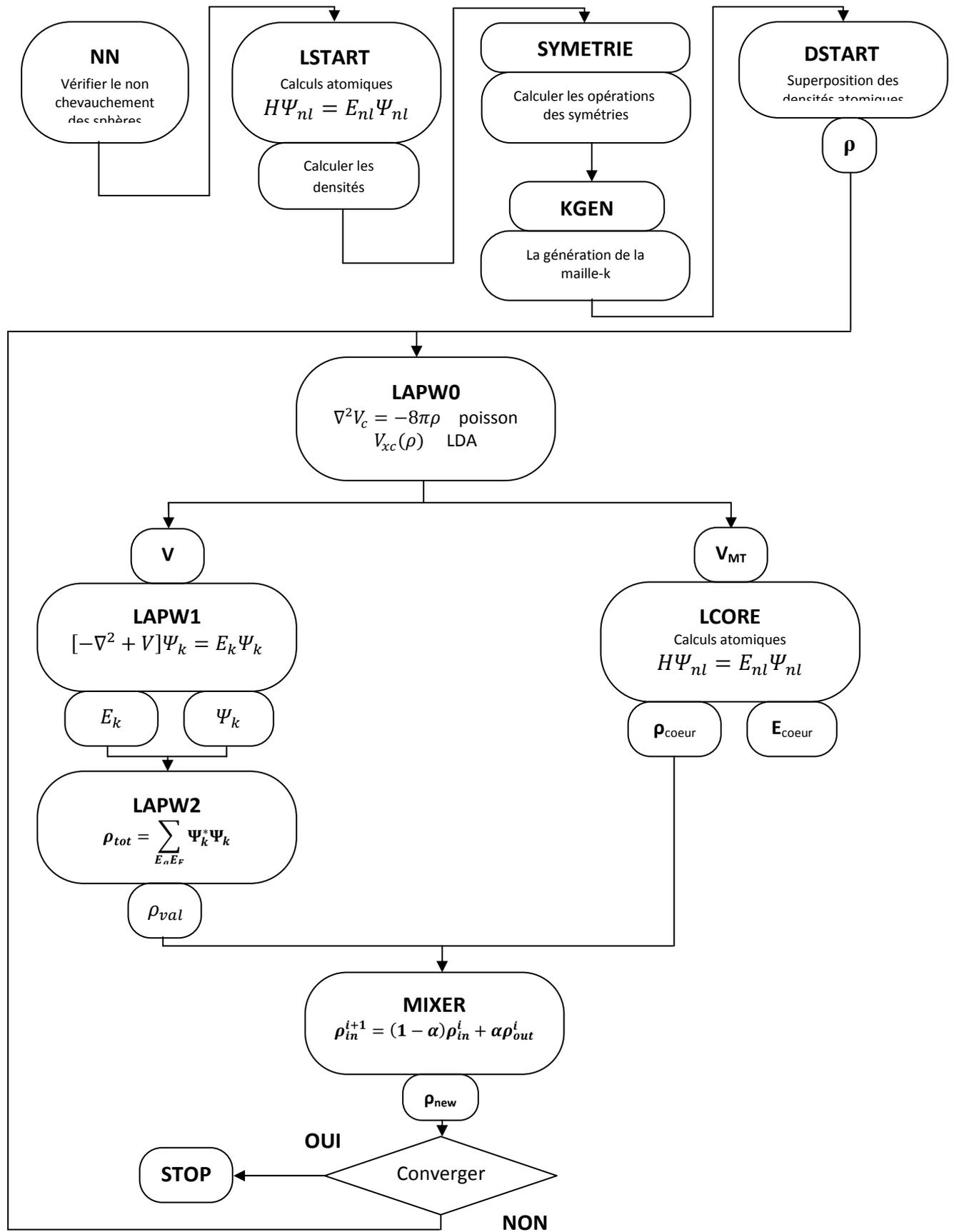


Figure (II.5): la structure du programme Wien2k [22].

Chapitre III
Résultats et discussions

Chapitre III : Résultats et Discussions

III.1 Détail de calcul

Le Tellure de Cadmium (CdTe) est un des matériaux binaires qui cristallise dans la structure zinc-blende (figure III.1) : les atomes de cadmium et les atomes de tellure forment deux sous- réseaux cubiques à faces centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart de la grande diagonale du cube.

Dans la structure zinc-blende, la maille élémentaire comporte quatre molécules du composé (II-VI) : les atomes du groupe II : $(0,0,0)$; $(0,1/2,1/2)$; $(1/2,0,1/2)$; $(1/2,1/2,0)$, et les atomes du groupe VI: $(1/4,1/4,1/4)$; $(1/4,3/4,1/4)$; $(3/4,1/4,1/4)$; $(1/4,3/4,3/4)$.

Chaque atome est entouré de quatre atomes de l'autre type, placés aux sommets d'un tétraèdre. Le groupe d'espace est F43m.

La base de la maille primitive de la structure zinc-blende contient deux atomes : l'un dans la position $(0, 0,0)$ et l'autre dans la position $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$. Les vecteurs fondamentaux sont donnés par leurs composantes : $\vec{a} = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) a$, $\vec{b} = (\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}) a$, $\vec{c} = (0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}) a$.

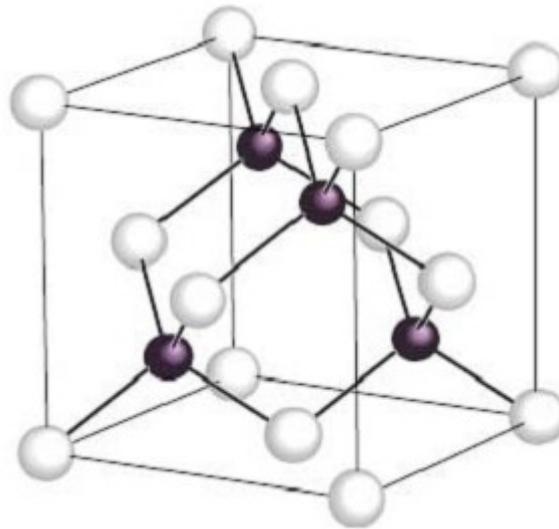
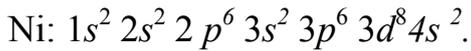
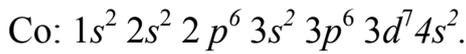
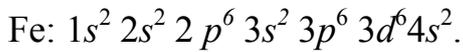
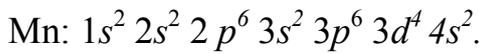
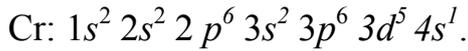
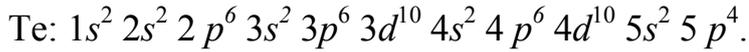
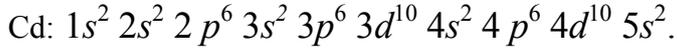


Figure (III.1) : Maille élémentaire de la structure de CdTe (Blende de Zinc)

La structure des matériaux $Cd_{0,5}Cr_{0,5}Te$, $Cd_{0,5}Mn_{0,5}Te$, $Cd_{0,5}Fe_{0,5}Te$, $Cd_{0,5}Co_{0,5}Te$, $Cd_{0,5}Ni_{0,5}Te$, est obtenue par la substitution de deux atomes de (Cr ; Mn ; Fe ; Co ; Ni) par deux atomes de Cd dans les sites de la maille élémentaire de la structure zinc-blende du CdTe,

La configuration électronique de CdTe et les du dopage :



Nous avons utilisé dans ce travail des méthodes d'approximation telles que l'approximation de la densité locale (*LDA*) et l'approximation généralisée du gradient (*GGA*), en utilisant le code *wien2k*. Ce dernier est une implémentation dans le cadre de la DFT de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (*FP-LAPW*). Les fonctions de base, les densités d'électrons et le potentiel sont calculés d'une façon auto-cohérente (self-consistent).

Le calcul de l'énergie totale est obtenu à partir d'un calcul d'optimisation de l'équation de Murnaghan [39] afin d'obtenir le paramètre de maille, le module de compressibilité et sa dérivée par rapport à la pression.

Tableau. (III.1) : les valeurs de $R_{mt}^*K_{max}$, K points, R_{mt} de Cd et R_{mt} de Te dans la structure zinc-blende, et de (Cd,Te,Cr,Mn,Fe,Co,Ni) dans la structure tétragonale.

	$R_{mt}^*K_{max}$	K points	R_{mt} de Cd	R_{mt} de Te
CdTe	GGA	9.5	800	2.4
	LDA	9.5	1000	2.5
	$R_{mt}^*K_{max}$	K points	R_{mt} (Cd,Te,Cr,Mn,Fe,Co,Ni)	
$Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te, Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$	8	400	2.1	
$Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te, Cd_{0.5}Co_{0.5}Te,$	8	400	2.1	
$Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$	8	400	2.1	

III.2 Propriétés structurales

La détermination des propriétés structurales et le premier pas important dans le calcul des propriétés physiques d'un matériau. Nous avons effectué à l'aide du code WIEN2K un calcul auto-cohérent de l'énergie totale pour plusieurs valeurs du réseau a prises au voisinage de la valeur expérimentale. Les valeurs de l'énergie ainsi obtenues ont été ensuite interpolées par l'équation d'état de Murnaghan [39] donnée par :

$$E_T(V) = \frac{B_0 V}{B'_0} \left[\frac{(V_0/V)}{B'_0 - 1} + 1 \right] + E_0 - \frac{V_0 B_0}{B'_0 - 1} \quad (\text{III. 1})$$

Où B_0 et B'_0 sont respectivement le module de compression à l'équilibre et sa dérivée par rapport à la pression, et V_0 étant le volume à l'équilibre de la maille élémentaire. La constante du réseau a correspondant à l'état fondamental est déduite à partir du minimum de la courbe $E_{tot}(a)$ et le module de compression B est déterminé par :

$$B_0 = V \frac{d^2 E_T}{dV^2} \quad (\text{III. 2})$$

Les résultats obtenus pour le CdTe et ces alliages $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$; $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ sont donnés dans les tableaux (III.2) et (III.3) en utilisant les deux approximations LDA et GGA. Ils sont comparés ensuite à ceux obtenus expérimentalement et d'autres prédictions théoriques.

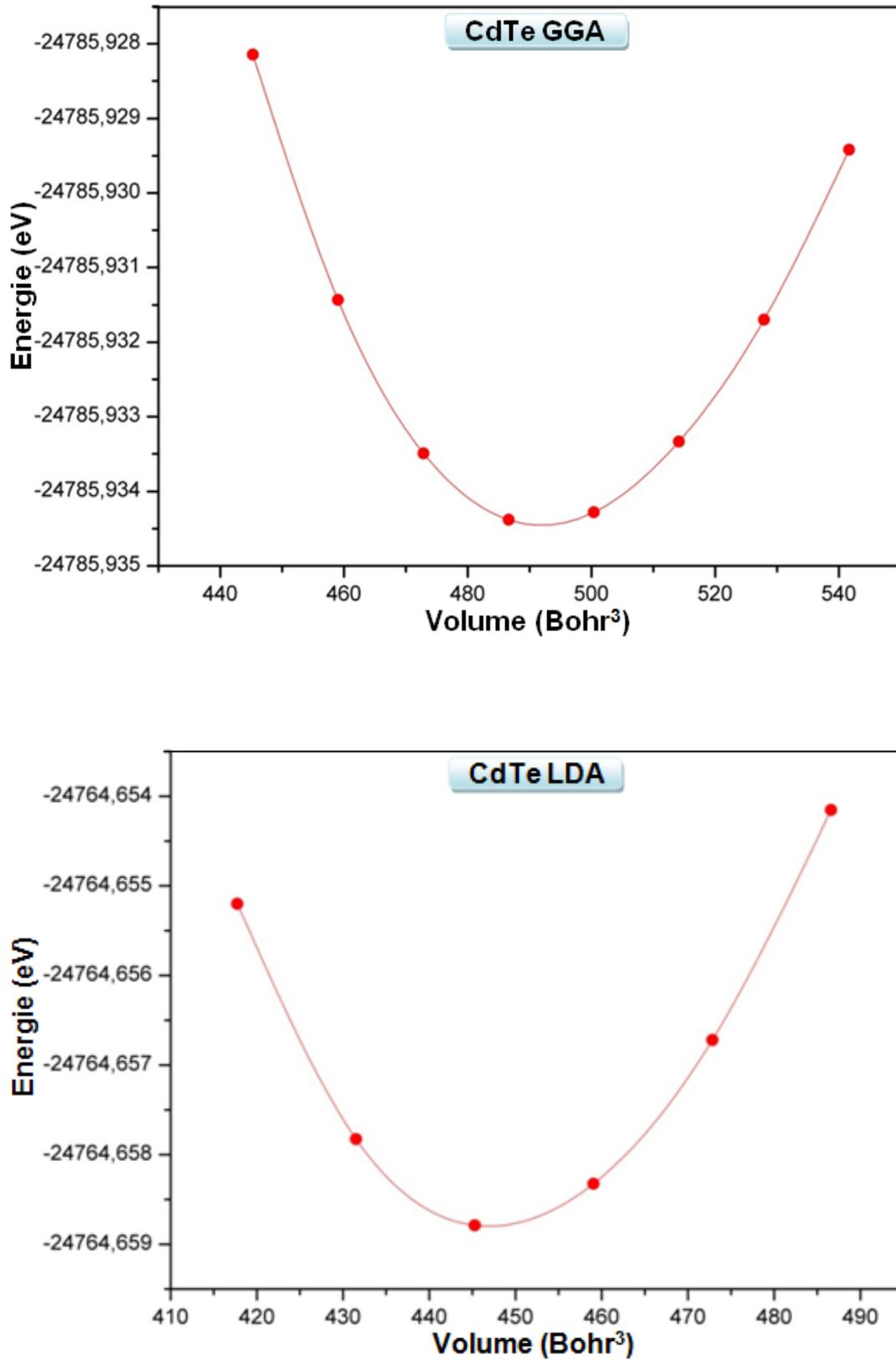
La variation de l'énergie en fonction du volume pour les matériaux étudiés est représentée dans les figures (III.7).

Tableau (III.2) : Les propriétés structurales du CdTe: paramètres du réseau d'équilibre a (Å), le module de compression B_0 (GPa) et la dérivée B_0' dans la phase zinc-blende.

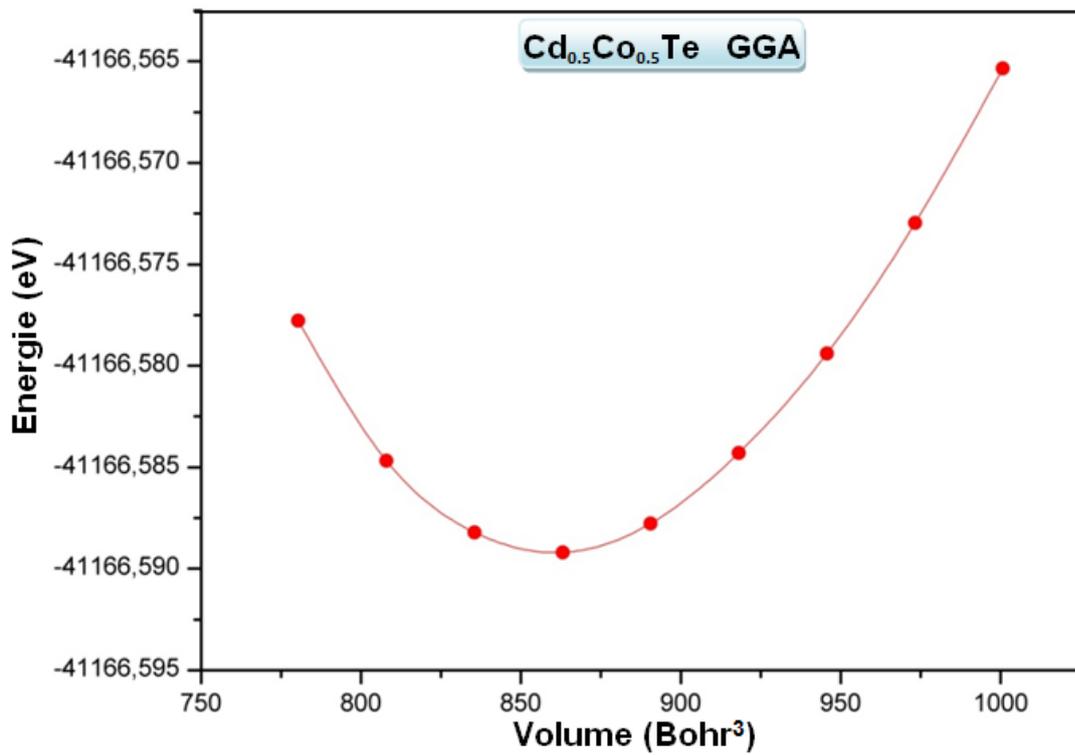
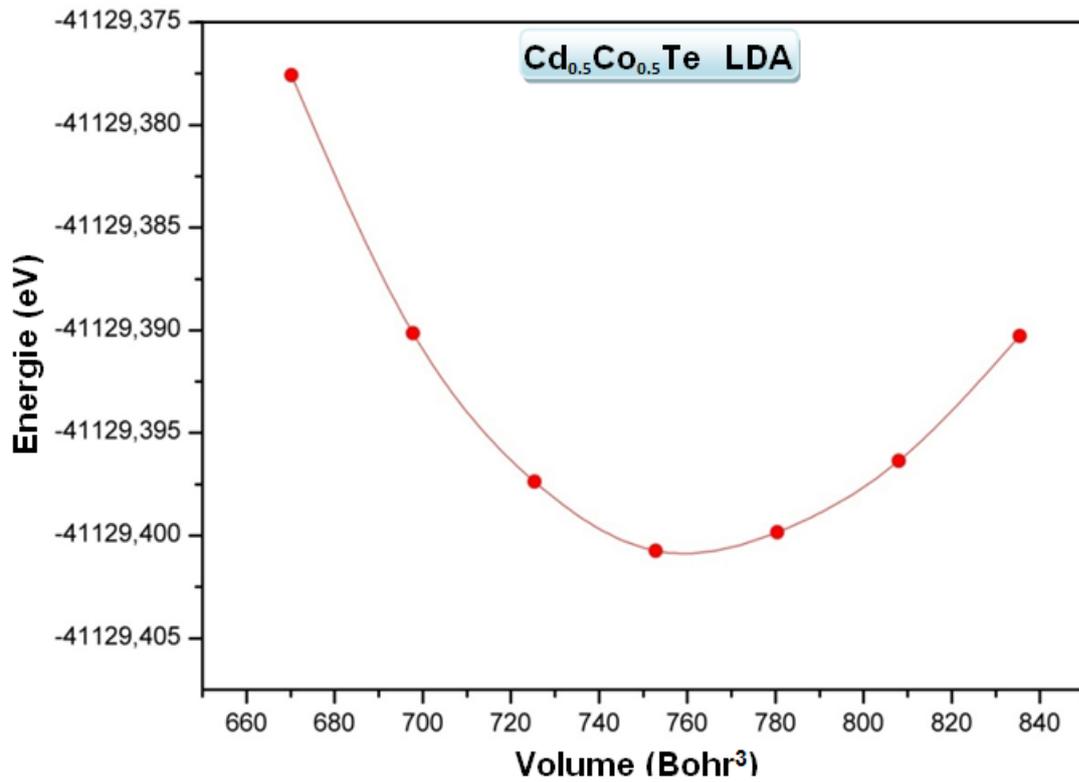
	<i>LDA</i>	<i>GGA</i>	<i>expérience</i>	<i>calculs théorique</i>
$a(\text{Å})$	6.42	6.63	6.481 [42],[43]	6.42, 6.631 [40] 6.602 [41]
$B_0(\text{GPa})$	46.86	34.15	44.50 [41] 39 [42]	46.68, 33.79 [40] 38.10 [41]
B_0'	5.13	4.23	6.40 [41]	5.26 ,5.14 [40] 3.85 [41]

Tableau (III.3) : Le paramètre du réseau d'équilibre a (Å), le module de compression B_0 (GPa) et son dérivée B_0' du $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$

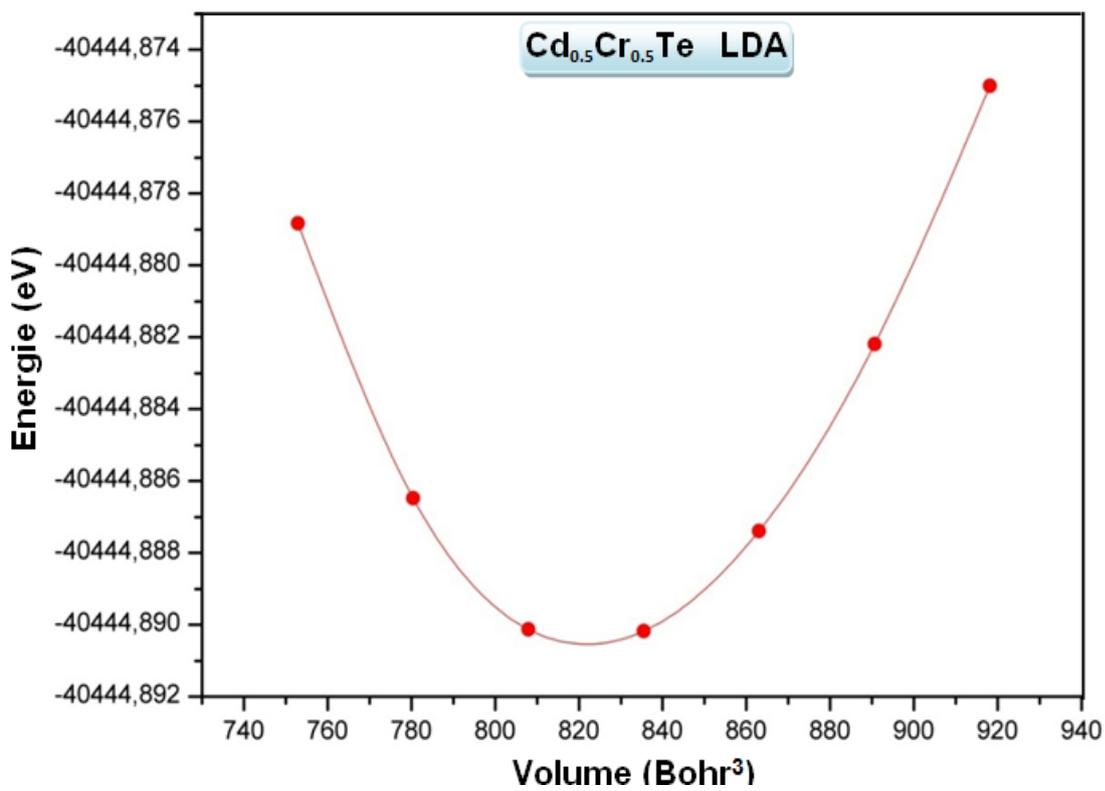
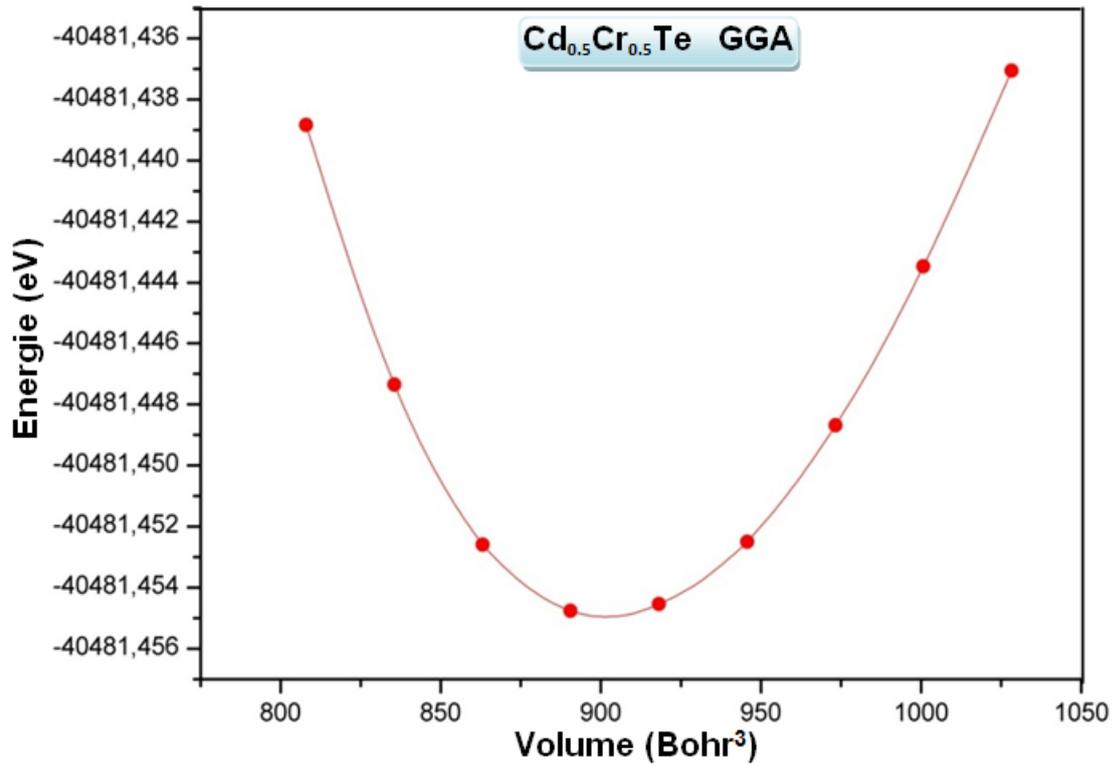
		Paramètre du réseau a (Å)	Module de compressibilité B_0 (GPa)	B_0'
GGA	$\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$	6.44	38.40	4.91
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$	6.49	37.56	4.99
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$	6.39	39.28	4.64
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$	6.34	39.06	4.34
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$	6.25	37.59	2.37
LDA	$\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$	6.42	49.77	4.40
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$	6.29	47.21	4.08
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$	6.17	48.42	4.04
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$	6.09	39.06	4.34
	$\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$	6.03	61.79	3.59
Autres calculs :				
	$\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{Te}$ [44]	6.29	50.4104	4.985
	$\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{Te}$ [41]	6.421	37.12	3.31
	$\text{Cd}_{0.0}\text{Mn}_{1.0}\text{Te}$ [41]	6.370	37.01	3.81
	$\text{Cd}_{0.50}\text{Mn}_{0.50}\text{Te}$ [45]	6.32	49.94	7.46
	$\text{Cd}_{0.25}\text{Cr}_{0.25}\text{Te}$ [46]	6.54	39.76	5.10
Expérience :				
	$\text{Cd}_{0.50}\text{Mn}_{0.50}\text{Te}$ [47]	6.39		



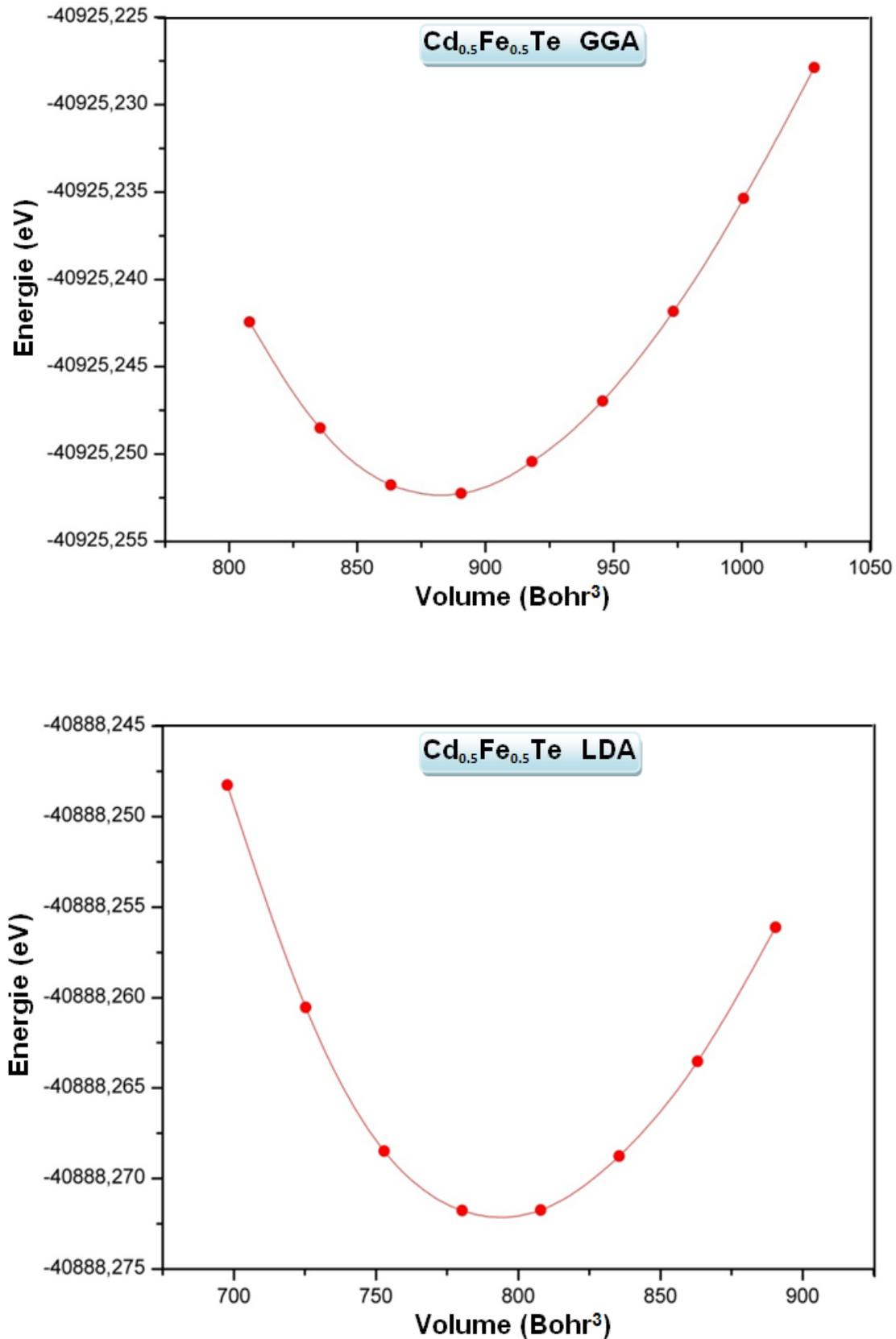
*Figure(III.2) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*



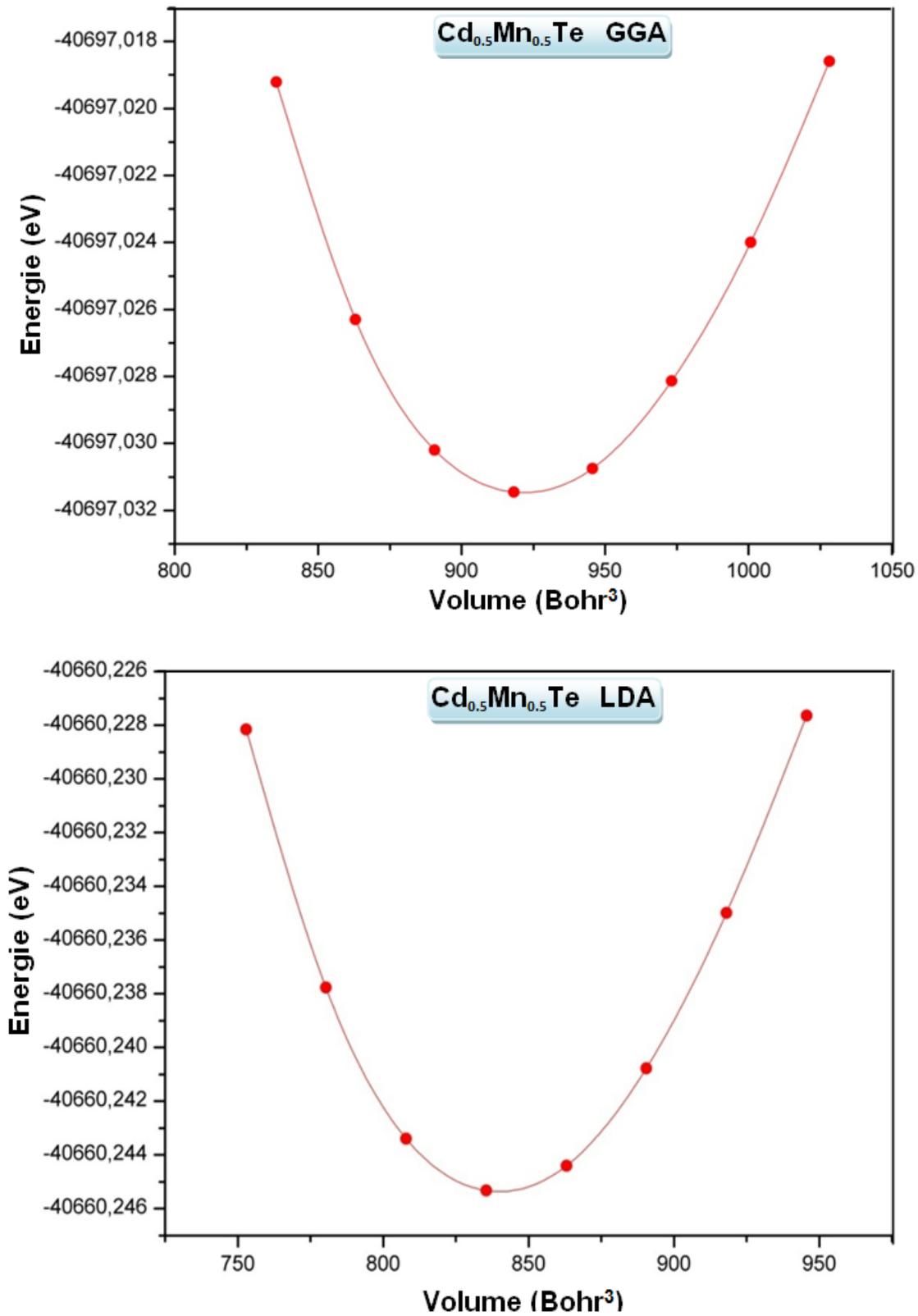
*Figure(III.3) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdCoTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*



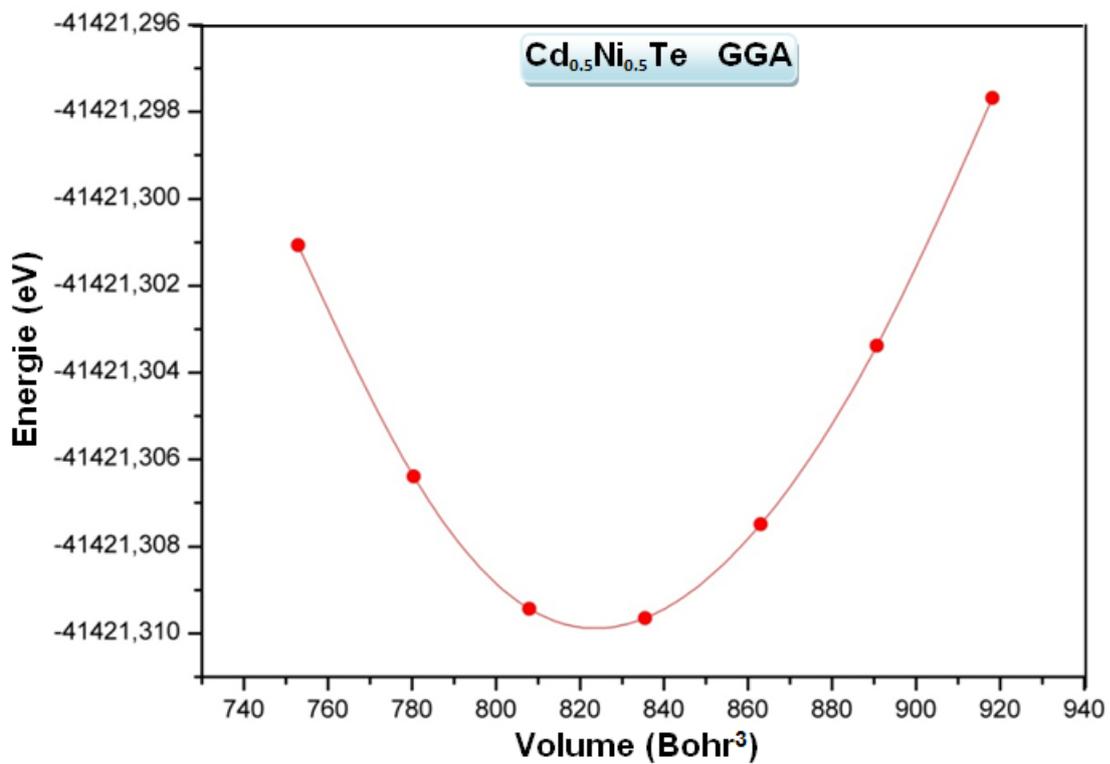
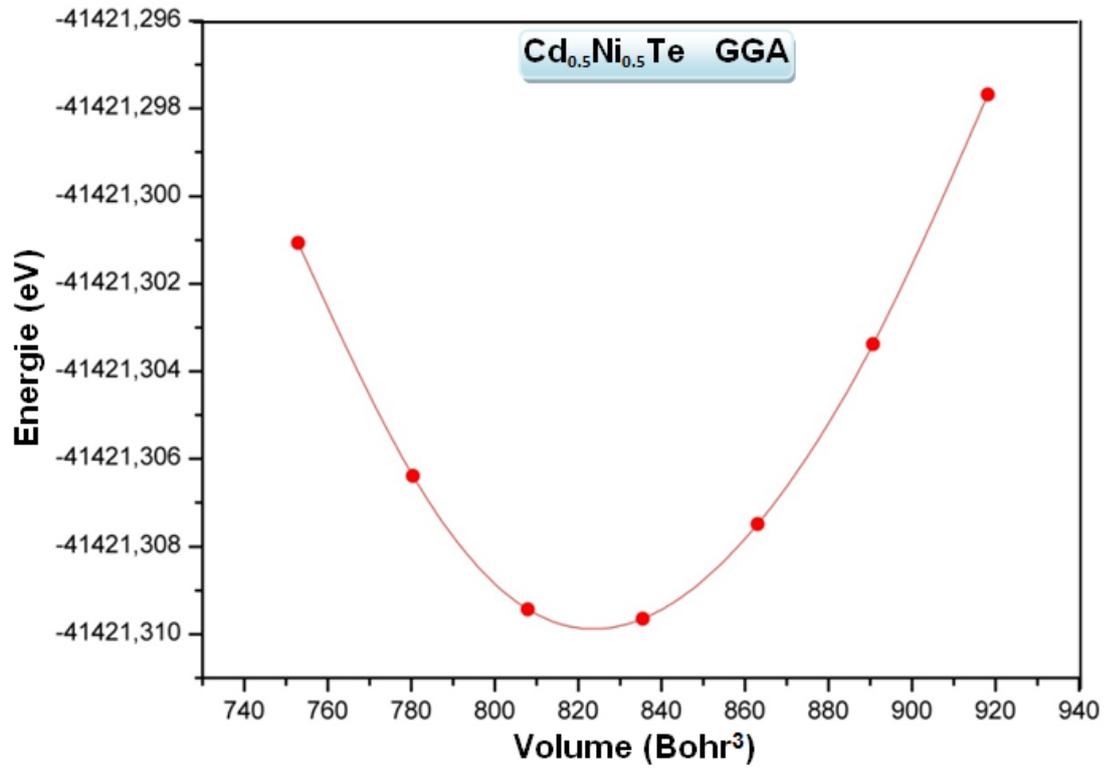
*Figure(III.4) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdCrTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*



*Figure(III.5) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdFeTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*



*Figure(III.6) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdMnTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*



*Figure(III.7) : la variation de l'énergie totale en fonction du volume de CdNiTe
Dans les deux approximations : GGA et LDA*

Nos résultats pour le CdTe et $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ sont en bon accord avec les résultats d'autres Calculs. On constate que le paramètre de maille est sous/(sur)estimé par l'approximation LDA(GGA) par rapport à l'expérience. En effet cette sous /(sur)estimation est de l'ordre de 0.92% (2.3%) et 1.1%(2.04%) pour les composées CdTe et $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ respectivement.

Sachant que le module de compressibilité est sensible à la variation du volume, les valeurs obtenues de ce dernier pour le CdTe sont surestimées par l'approximation LDA et sous-estimées par l'approximation GGA.

Dans notre travail, on n'a pas trouvé des résultats expérimentaux et des calculs théoriques qui ont le même pourcentage (50%) que les matériaux $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$.

III.3 Les propriétés électroniques

III.3.1 Structure de bande

Les électrons d'un atome isolé prennent des niveaux discrets d'énergie, qui sont en fait constitués de sous niveaux (ou sous couches), mais lorsqu'on rapproche deux atomes, ces niveaux (ou sous-niveaux) vont se dédoubler. En étendant ce raisonnement à n atomes, cette dégénérescence fait apparaître des bandes d'énergie permises, qui peuvent « s'interpénétrer » et se séparer à nouveau lorsque la direction inter-atomique diminue, donnant des bandes d'énergie interdite, de largeur E_G (« gap »).

Ces bandes sont donc représentées dans l'espace réciproque, et pour simplifier, seules les directions de plus hautes symétries dans la première zone de Brillouin sont traitées.

Le CdTe est un semi-conducteur à bande interdite directe : le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent au centre de la zone de Brillouin (point Γ sur la figure III.7), nous pouvons dire que pour les deux figures (III.7), les bandes de valence présentent moins de dispersion que les bandes de conduction. Ceci est dû au fait que les électrons dans les bandes de conduction sont plus libres donc moins localisés, et notons que les valeurs trouvées pour le gap d'énergie du CdTe dans les deux approximations sont sous-estimées par rapport à ceux trouvées expérimentalement. On remarque que nos résultats sont en accord avec d'autres calculs.

Pour les matériaux ferromagnétiques $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$ (GGA), $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, les spins majoritaires représentent la nature d'un semi-conducteur, tandis que les spins minoritaires exposent le comportement métallique. Par contre dans le $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, le cas du spin down représente une nature d'un semi-conducteur et le spin up donne le comportement métallique, en suggérant que ces trois matériaux sont des semi-métaux ferromagnétiques.

Les deux composés $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$ (LDA) et $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ sont des métaux ferromagnétiques et le $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ est un semi-conducteur magnétique.

Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction se situent au point Γ , (la figure III-8) des matériaux à base de (Co, Mn, Fe, Cr, Ni) en résultant un gap d'énergie direct dans ces composés.

Les valeurs que nous avons trouvées pour les gaps d'énergie sont données dans le tableau (III-4). Notons qu'on n'a pas des résultats expérimentaux sauf pour le $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ qui est en bon accord avec l'expérience. La comparaison entre la valeur du gap de $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$ et de $\text{Cd}_{0.75}\text{Co}_{0.25}\text{Te}$ [44] montre que le gap d'énergie est proportionnel à la concentration de Co c'est-à-dire que le gap augmente (diminue) avec l'augmentation (diminution) des atomes Co.

Tableau (III.4) : Gaps énergétiques eV de CdTe et Cd_{0,5}Co_{0,5}Te, Cd_{0,5}Mn_{0,5}Te, Cd_{0,5}Fe_{0,5}Te, Cd_{0,5}Co_{0,5}Te, Cd_{0,5}Ni_{0,5}Te

	<i>GGA</i>	<i>LDA</i>	<i>Calcul théorique</i>	<i>expérience</i>
<i>CdTe</i>	0.76	0.50	0.588 [40], 0.88 [49]	1.92 [48]
<i>Cd_{0,5}Co_{0,5}Te</i>	1.03	0.96	0.8 (Cd _{0,75} Co _{0,25} Te) [44]	--
<i>Cd_{0,5}Cr_{0,5}Te</i>	2.08	1.86	--	--
<i>Cd_{0,5}Fe_{0,5}Te</i>	0.861	0.862	--	--
<i>Cd_{0,5}Mn_{0,5}Te</i>	0.63	0.60	0.61 [45]	--
<i>Cd_{0,5}Ni_{0,5}Te</i>	0.96	0.85	--	--

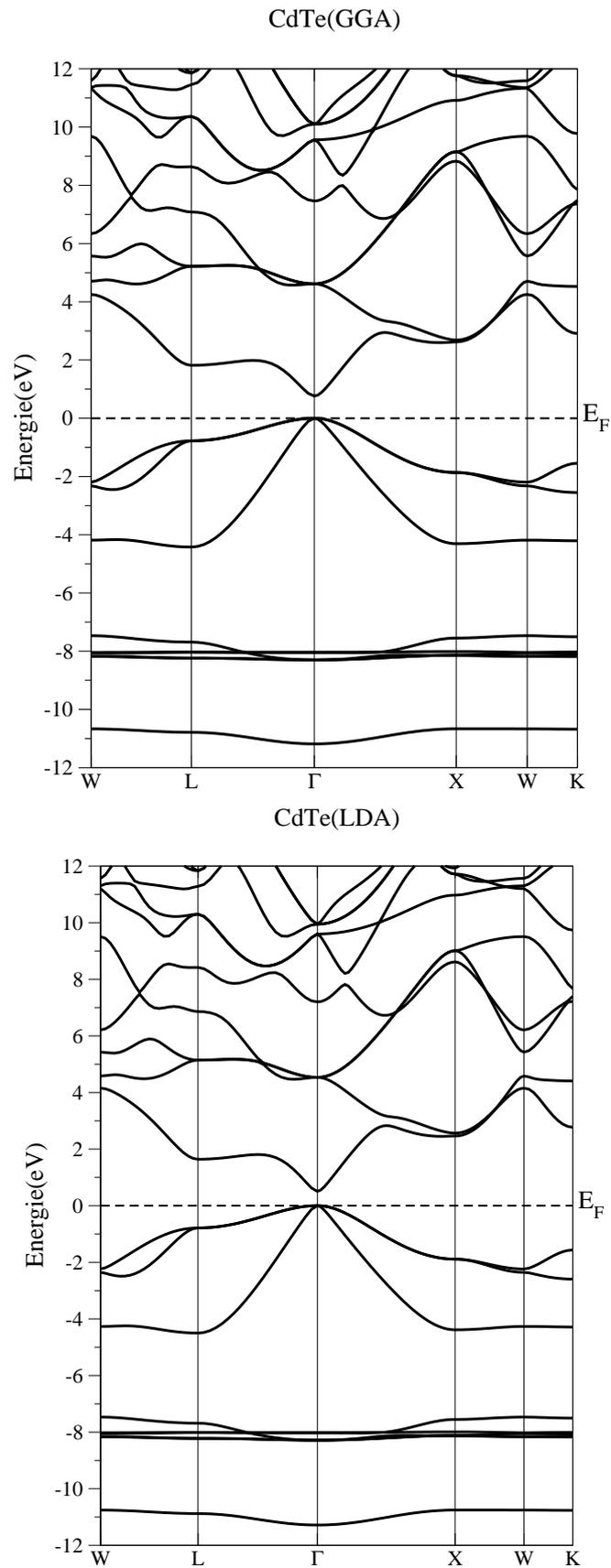


Figure (III.7) : la structure de bandes du composé CdTe en utilisant l'approximation LDA, GGA

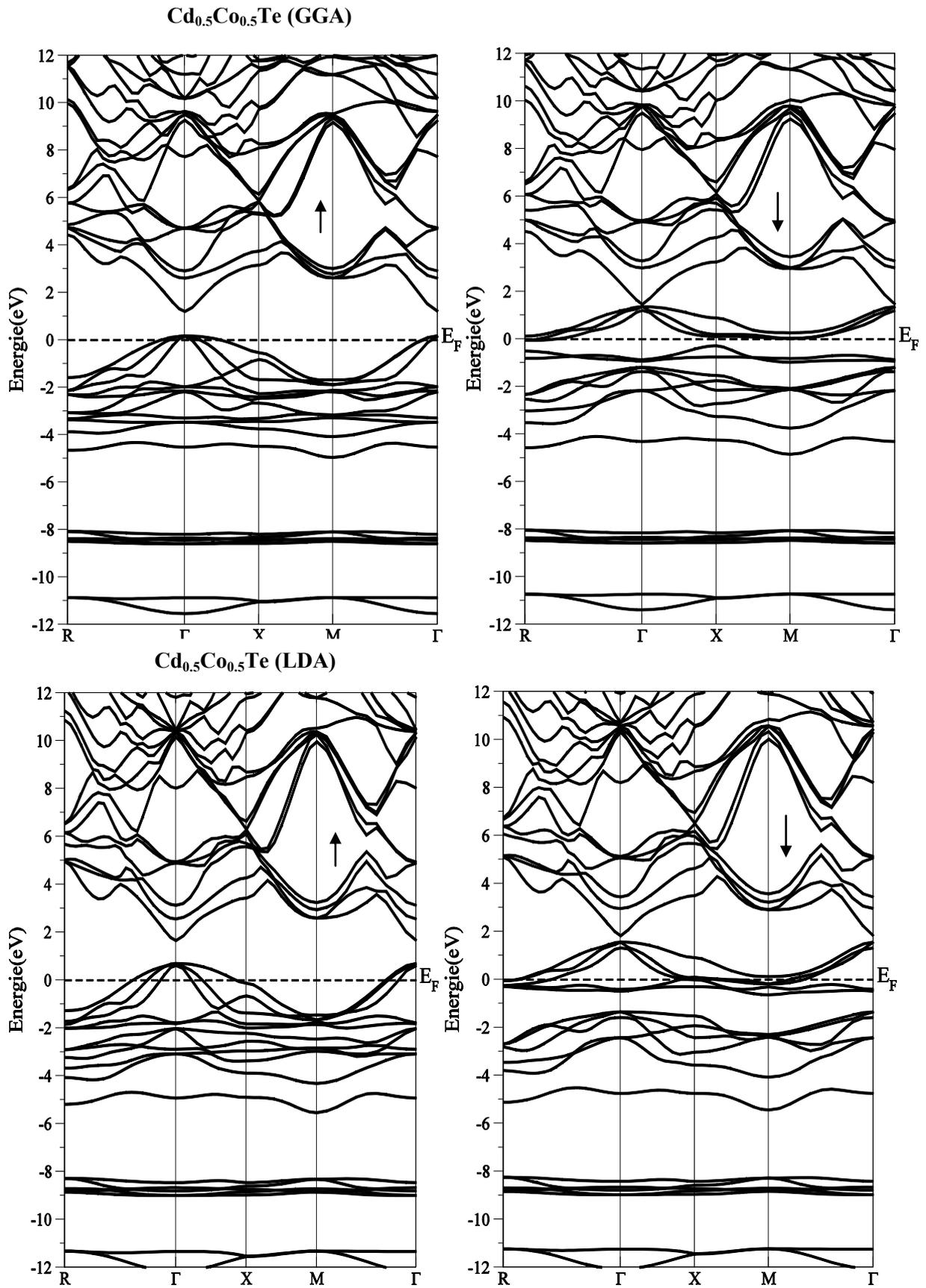


Figure (III.8) : la structure de bandes du composé Cd_{0.5}Co_{0.5}Te en utilisant l'approximation LDA et GGA.

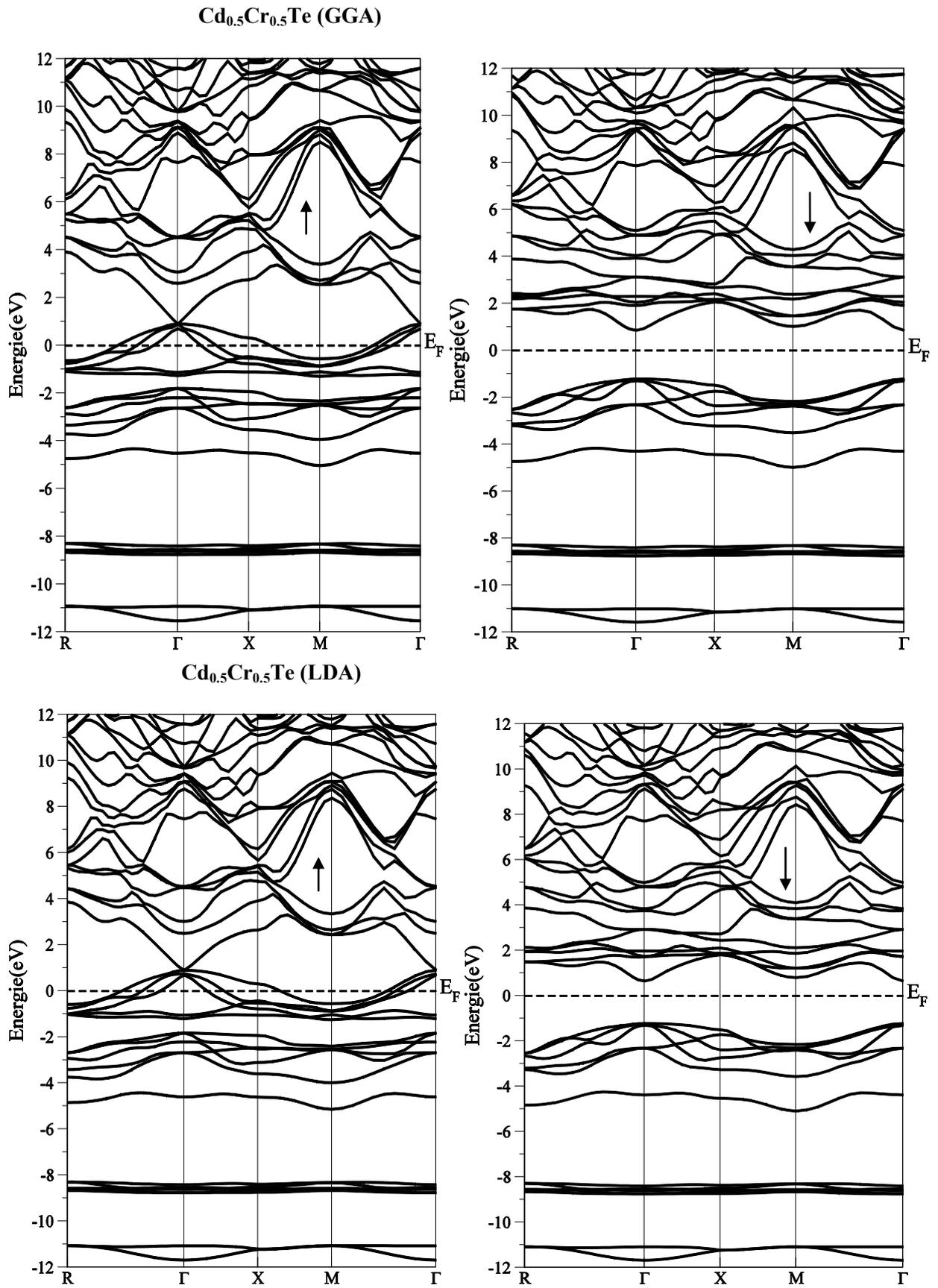


Figure (III.9) : la structure de bandes du composé $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$ en utilisant l'approximation LDA et GGA.

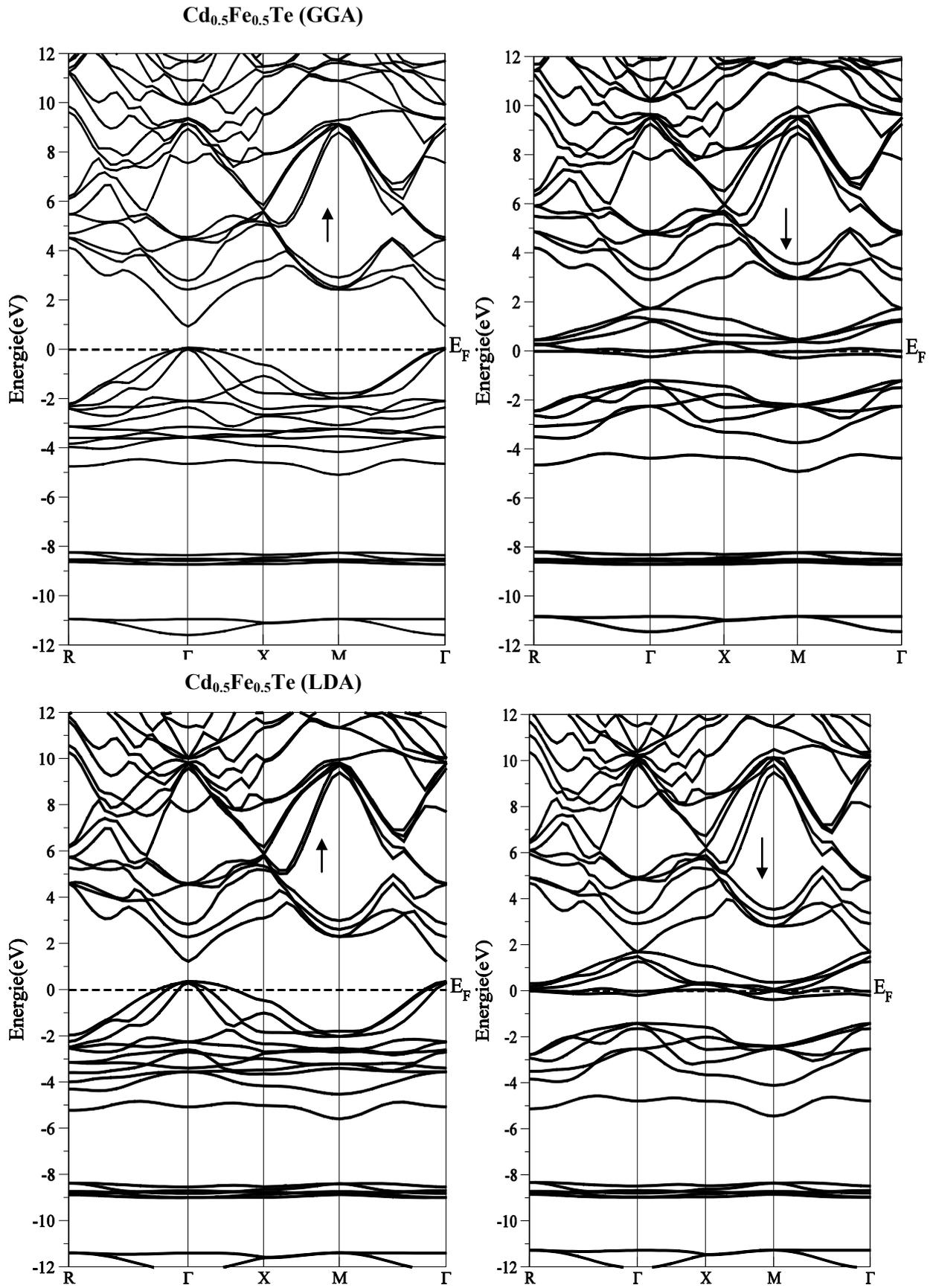


Figure (III.10) : la structure de bandes du composé Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te en utilisant l'approximation LDA et GGA.

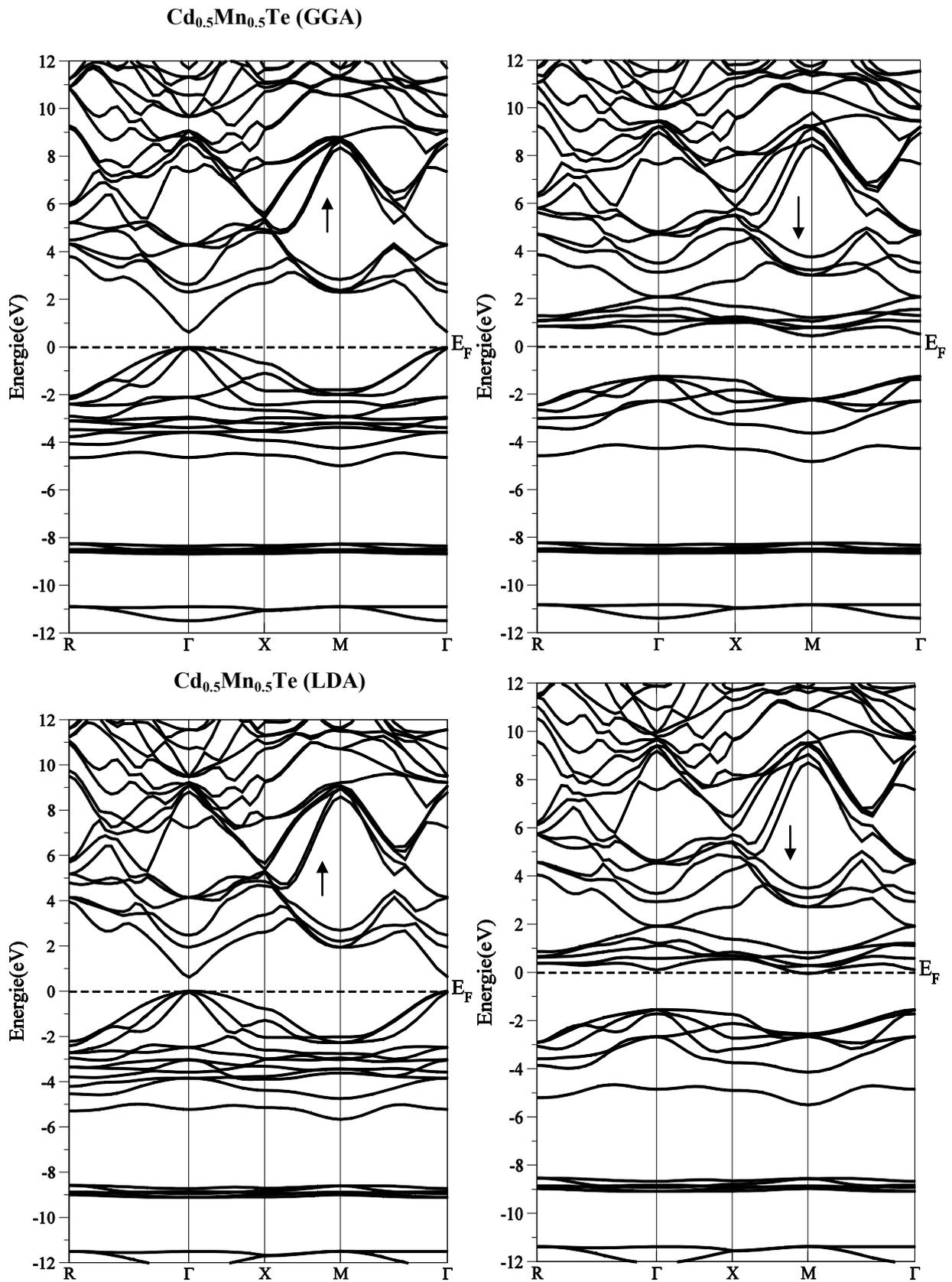


Figure (III.11) : la structure de bandes du composé Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te en utilisant l'approximation LDA et GGA.

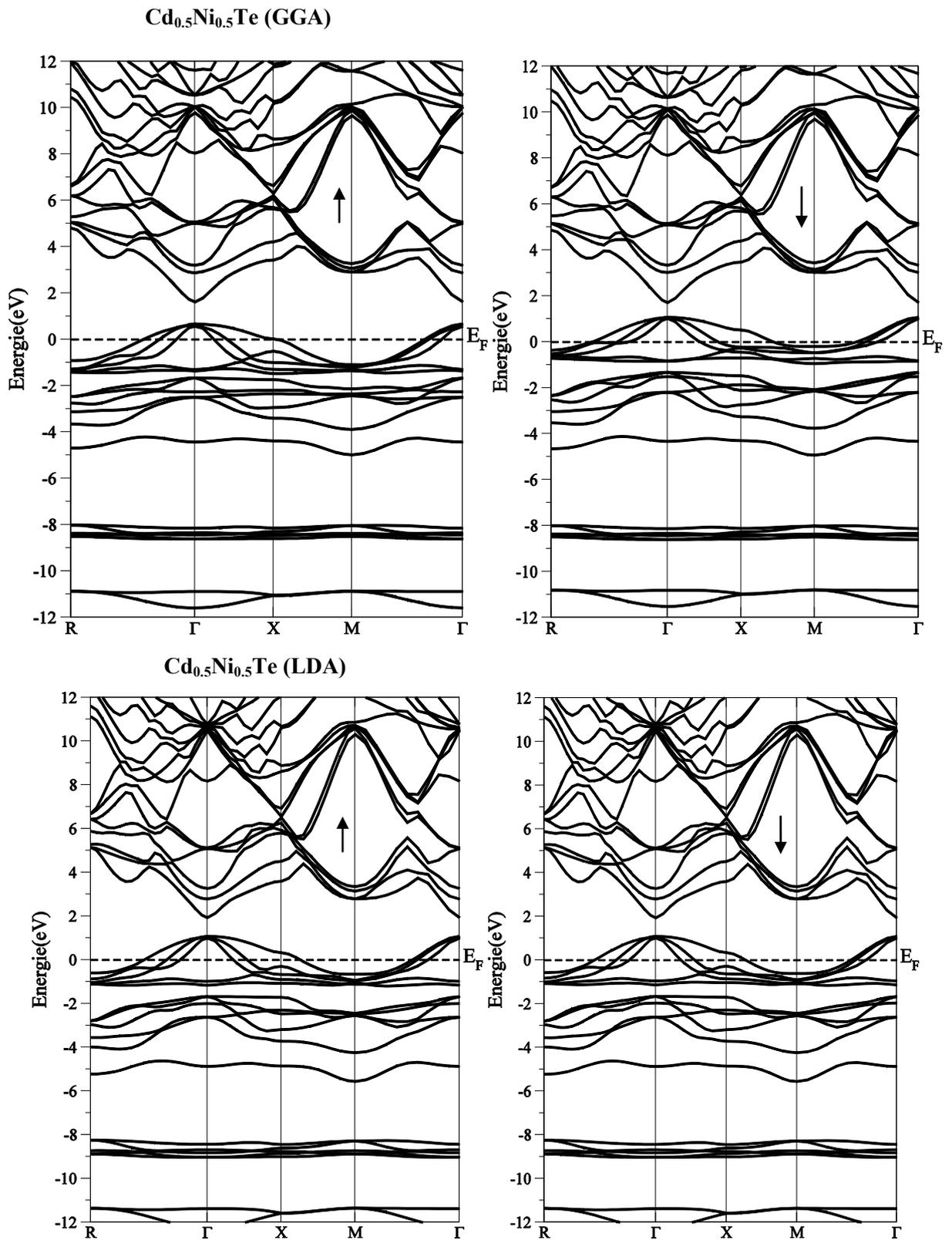


Figure (III.12) : la structure de bandes du composé Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te en utilisant l'approximation LDA et GGA.

III.3.2 la densité d'état

Nous avons calculé les densités d'états (DOS) totales et partielles du CdTe et du $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ dans la phase zinc blende.

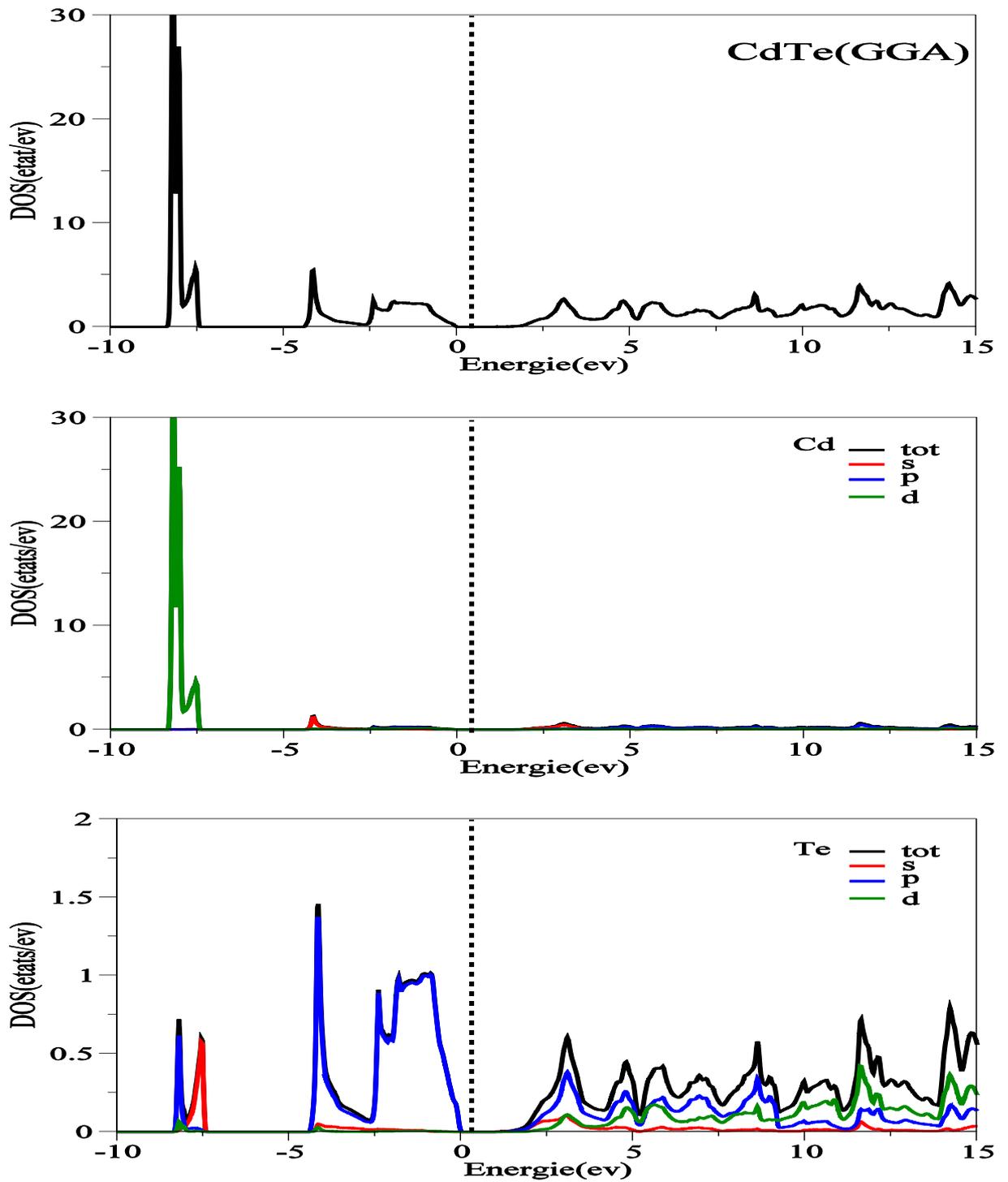
Les figures (III.9-III.17) illustrent les densités d'états totales et partielles obtenues par la GGA et LDA de ces composés.

D'après les figures (III.13) et (III.34) de CdTe nous soulignons l'existence de deux structures au dessous de niveau de Fermi et une au dessus de ce niveau. Pour le semi-conducteur CdTe sa première structure est de largeur de 0.83eV (GGA) et 0.92eV(LDA) et elle est dominée par Cd-d. La deuxième est de largeur de 4.35eV (GGA) et 4.38eV (LDA) et dominée par Te-p et associée avec une faible contribution de Cd-s. La dernière structure est de largeur 13.24 eV (GGA) et 13.24eV (LDA). Cette structure est dominée par Cd-s, Te-p et Te-d.

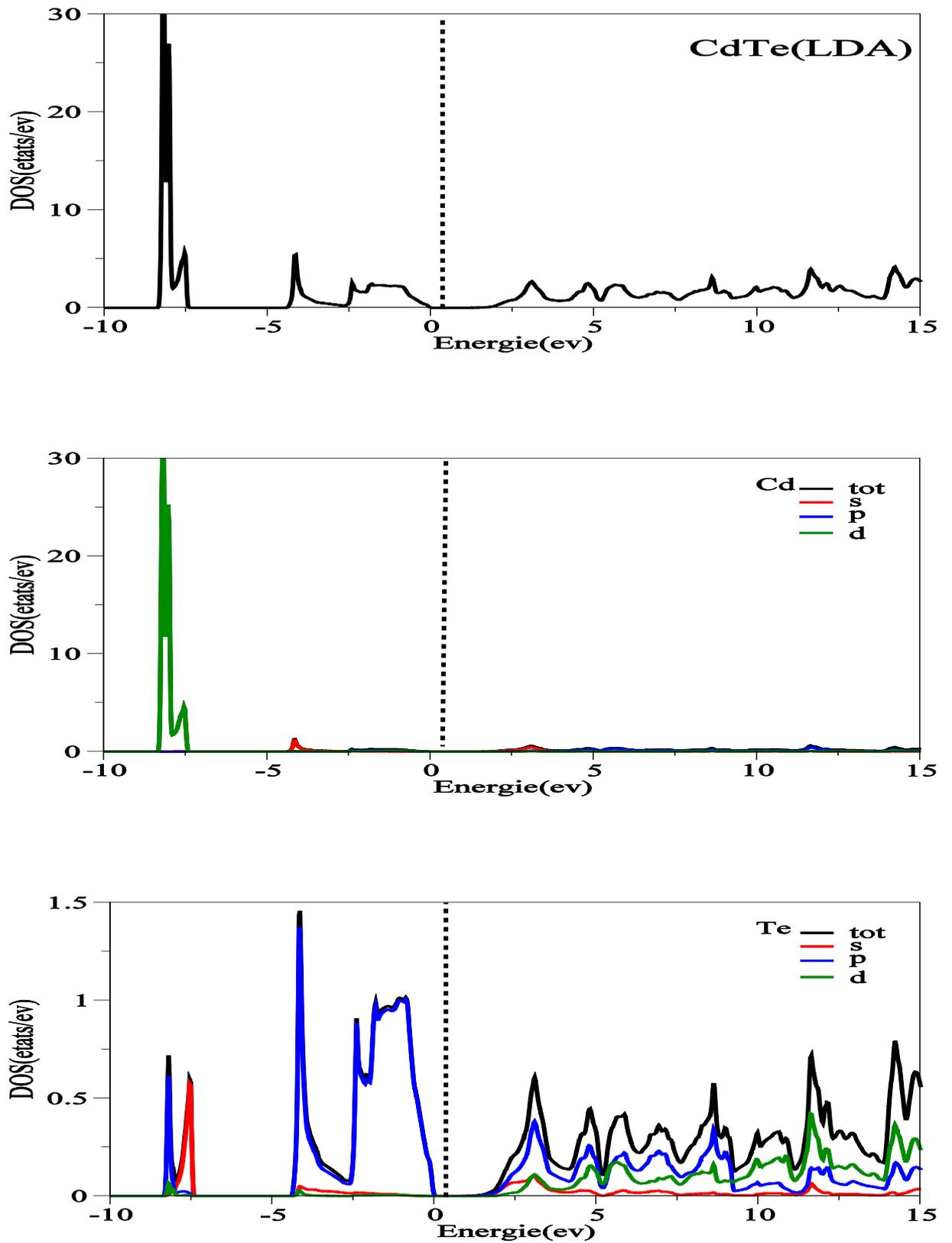
Si on compare les densités d'états totales et partielles dans les figures (III. 11)- (III.28) avec la structure de bandes dans les figures (III.8)-(III.12) dans l'approximation GGA (LDA), on trouve que les bandes de valence des spins majoritaires autour du niveau de Fermi généralement sont obtenues par les états 3d de (Cr ;Mn ;Fe ;Co ;Ni) , bien que les bandes entre -4.7 et -2.4ev (LDA :-5.3 et -2.9ev) sont obtenues par les états p de Te. La bande de conduction des spins majoritaires est totalement dominées par les états p de Te .

Les figures (III.15), (III.19) et (III-30) montrent que les matériaux $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$ (GGA), $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, sont des semi-métaux ferromagnétiques, tel que le cas du spin up représente le semi-conducteur et le cas du spin down donne le comportement métallique, par contre le les spins minoritaires du $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$ exposent un semi-conducteur et les spins majoritaires représentent le comportement métallique.

Le composé $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$ représente un semi-conducteur magnétique et les deux matériaux $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$ (LDA), $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ sont des métaux ferromagnétiques.



Figure(III.13) :La densité d'états totale de CdTe et partielle de cd et Te en utilisant la GGA.



Figure(III.14) :La densité d'états totale de CdTe et partielle de cd et Te en utilisant la LDA.

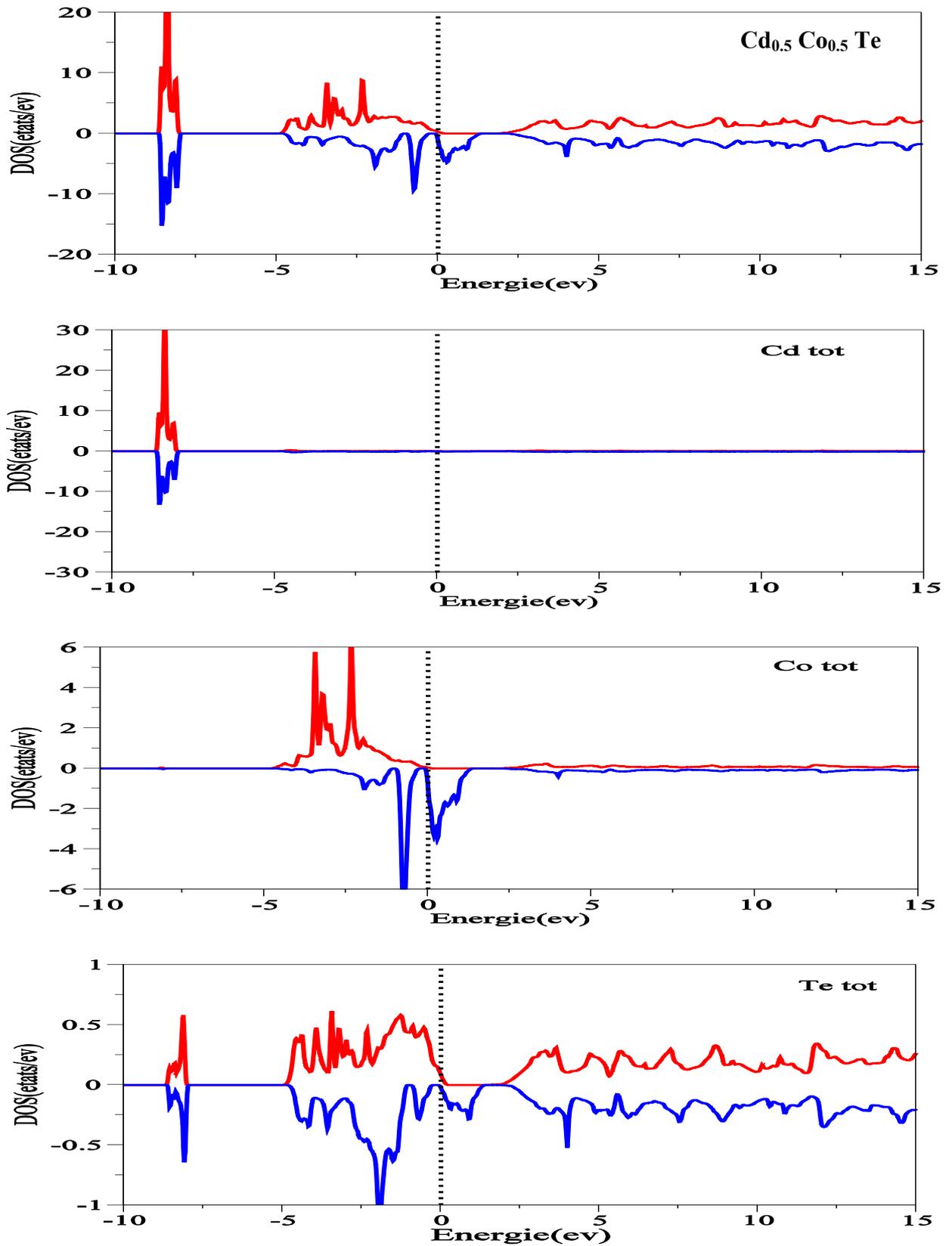
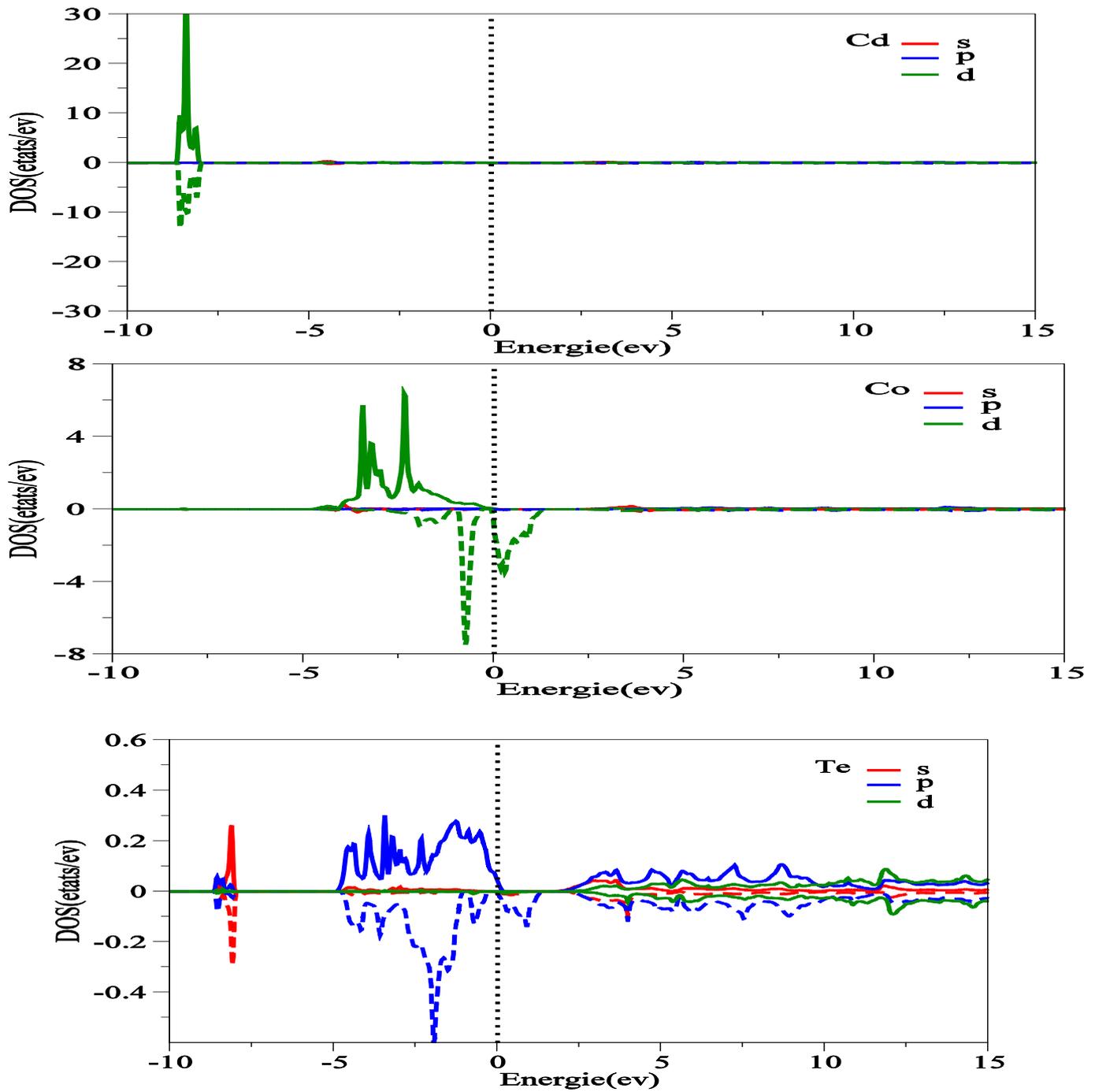


Figure (III.15) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Co, Te en utilisant l'approximation GGA



Figure(III.16) :La densité d'états partielle de Cd,Co,Te en utilisant l'aapproximation GGA.

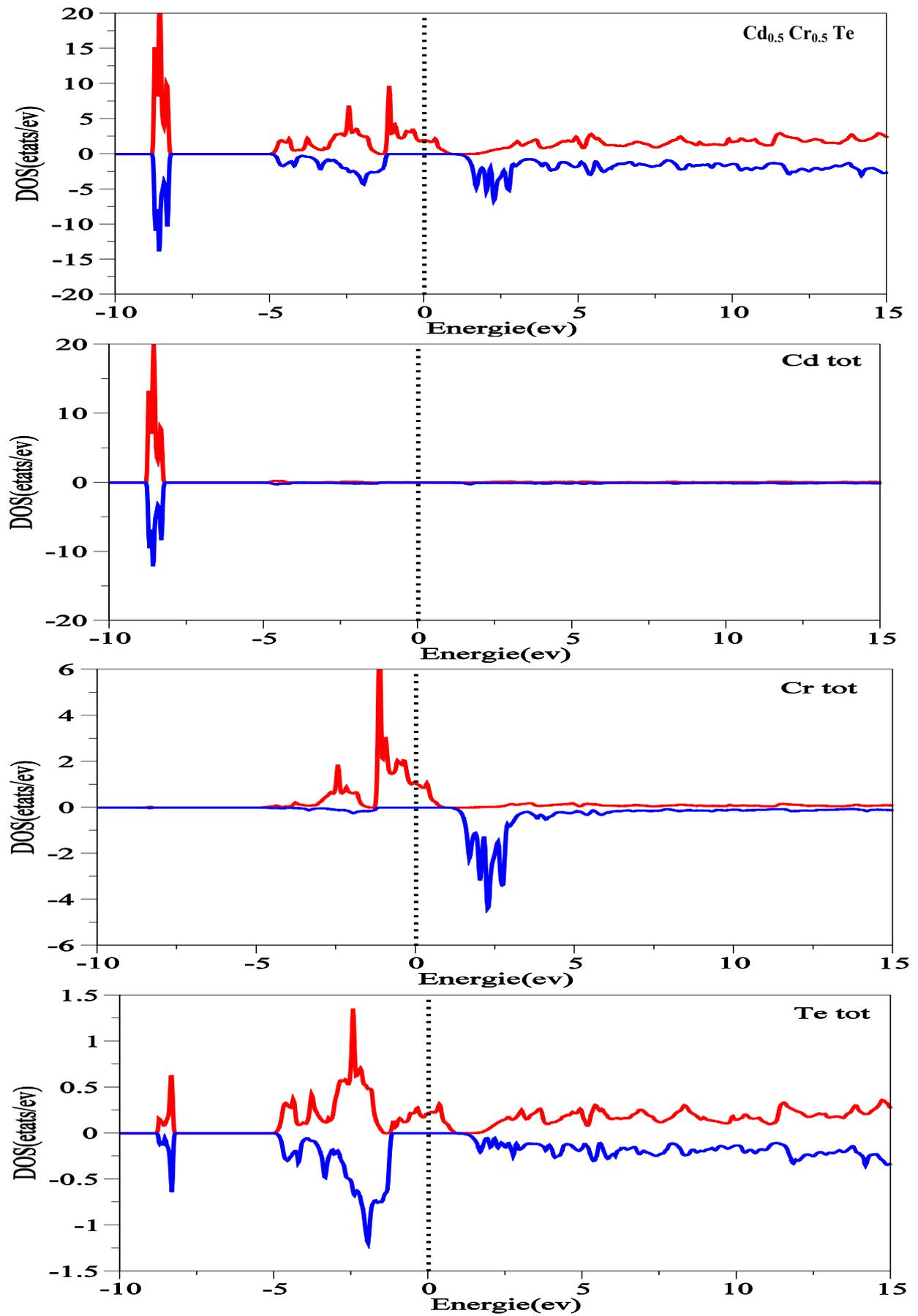
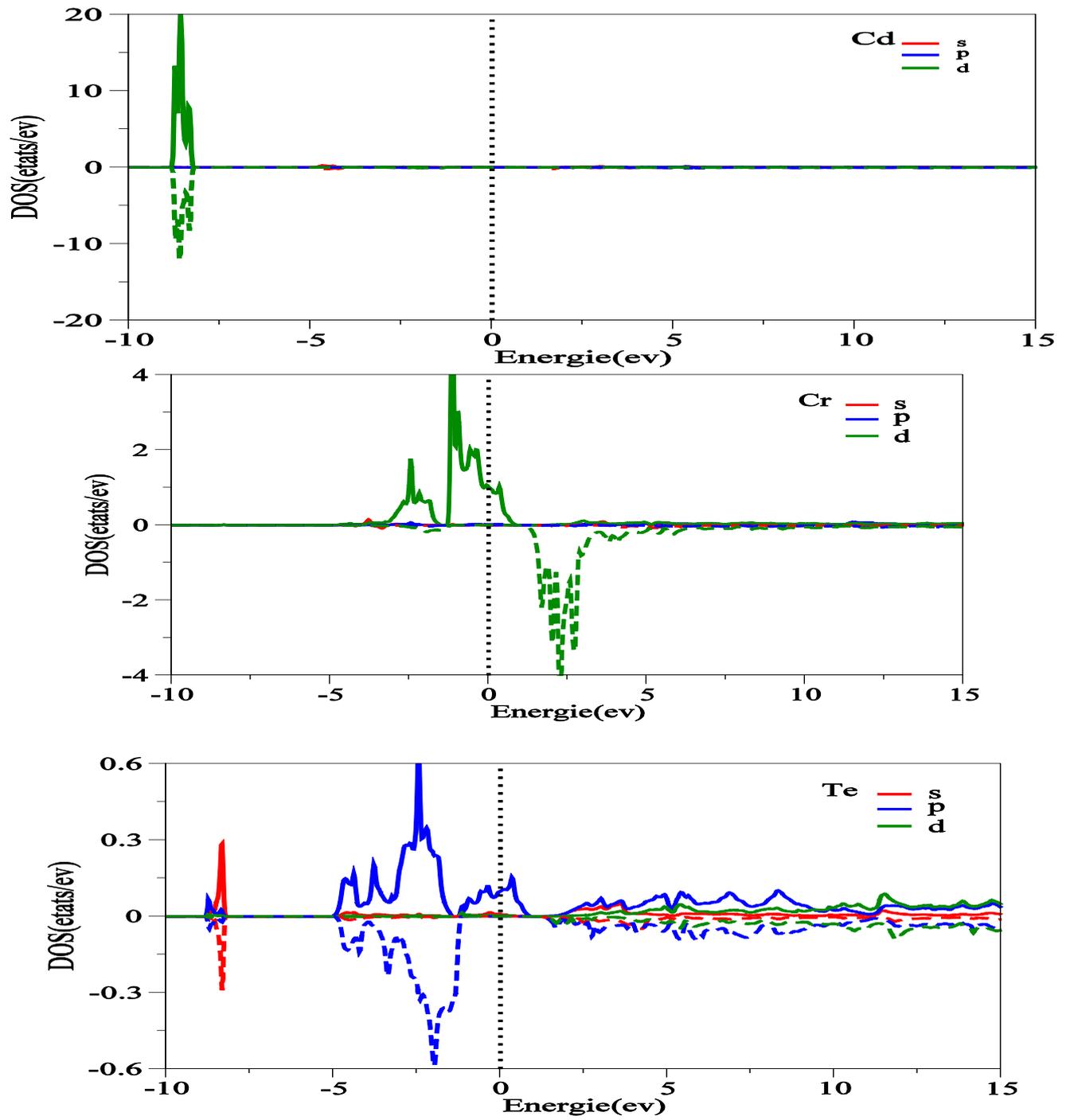
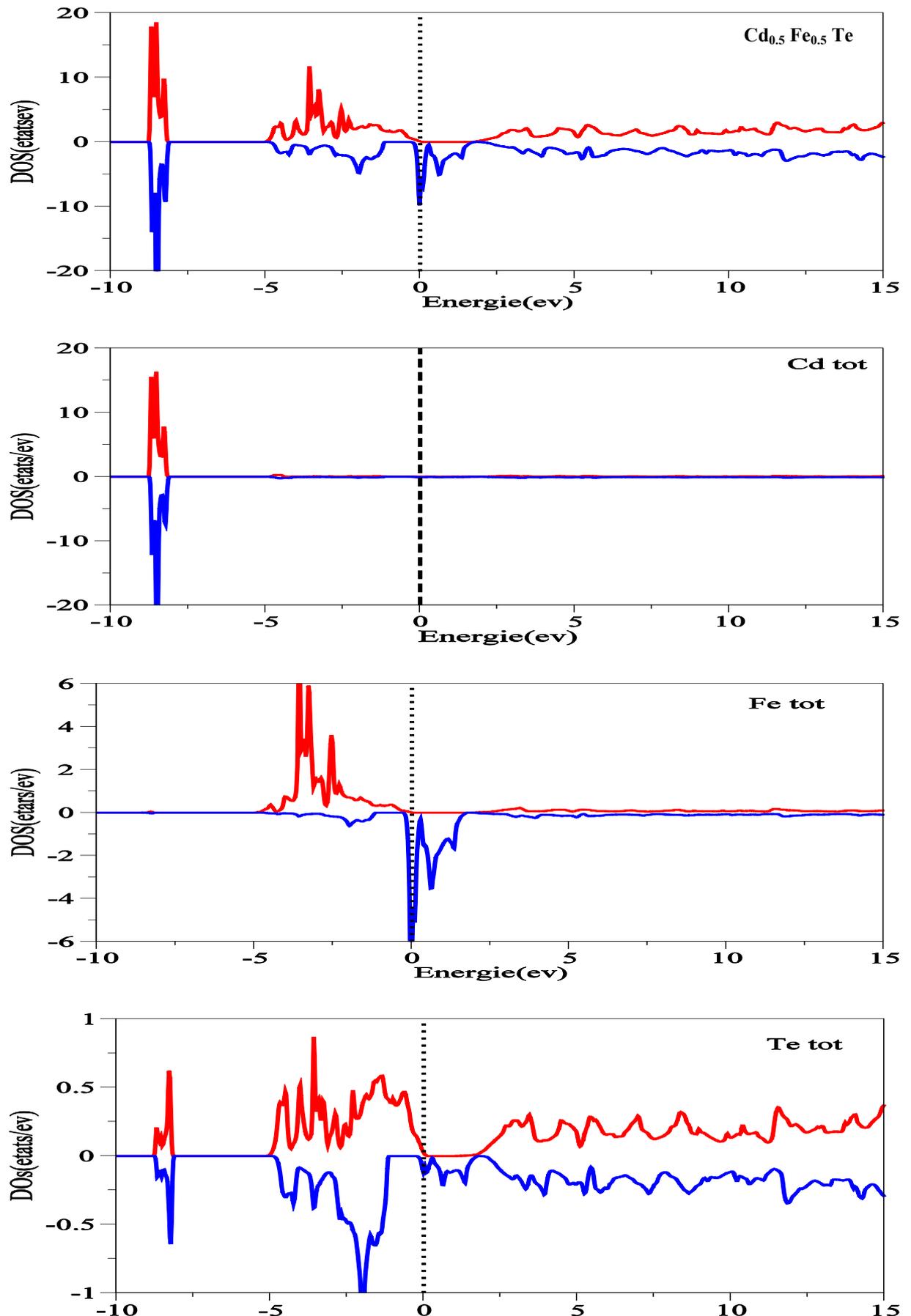


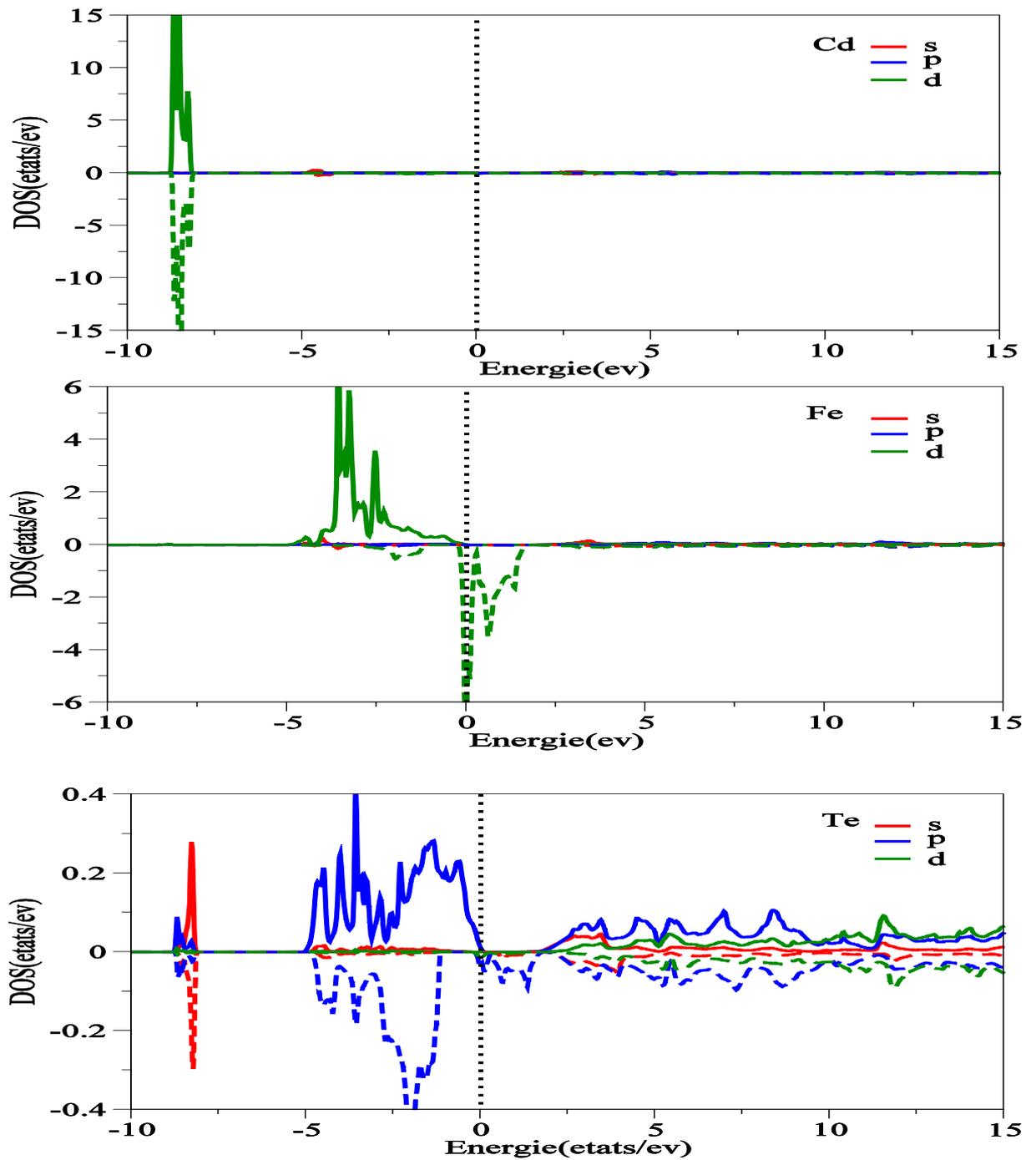
Figure (III.17) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, Cd , Cr , Te en utilisant l'approximation GGA



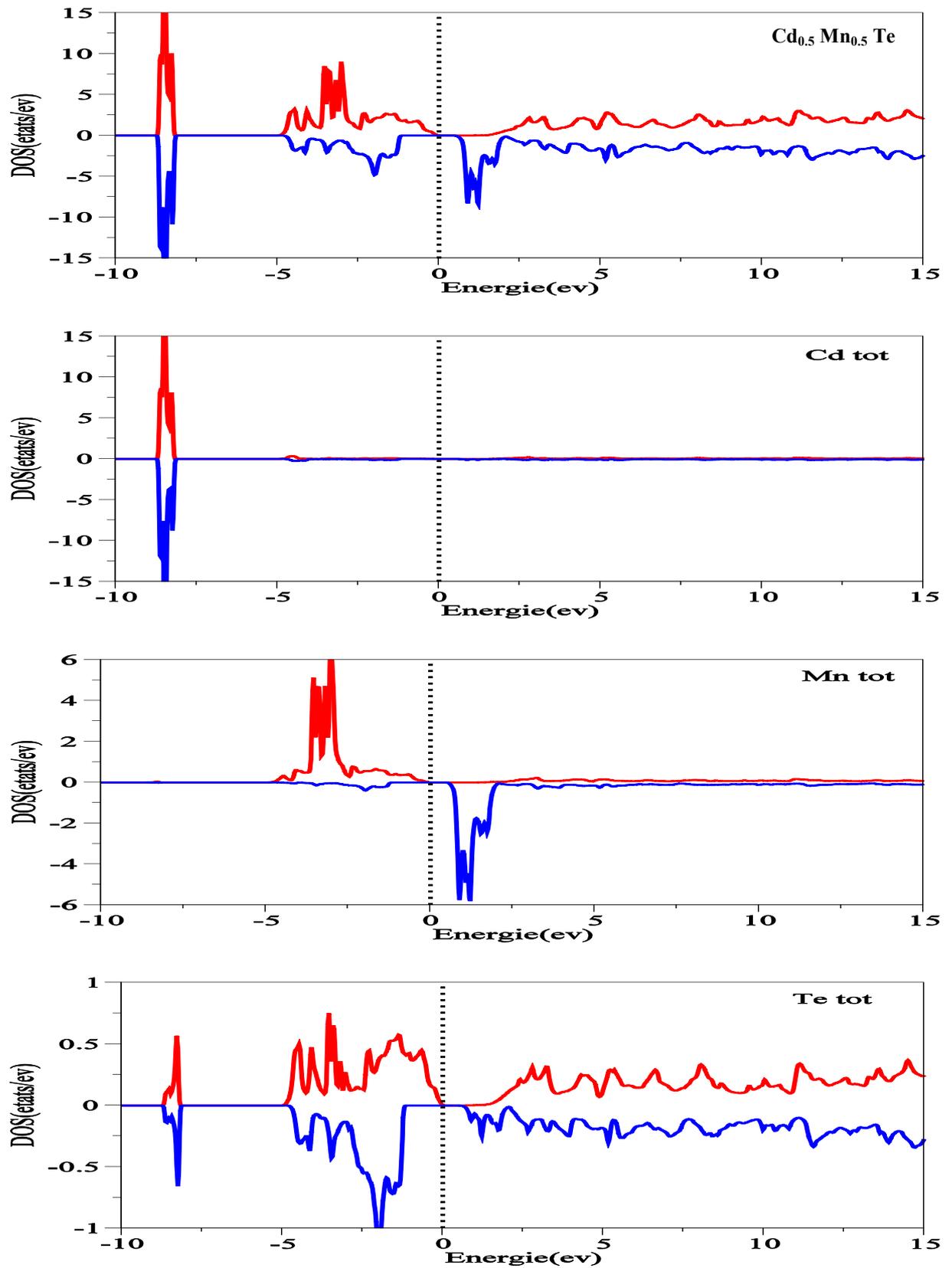
Figure(III.18) :La densité d'états partielle de Cd,Cr,Te en utilisant l'aapproximation GGA.



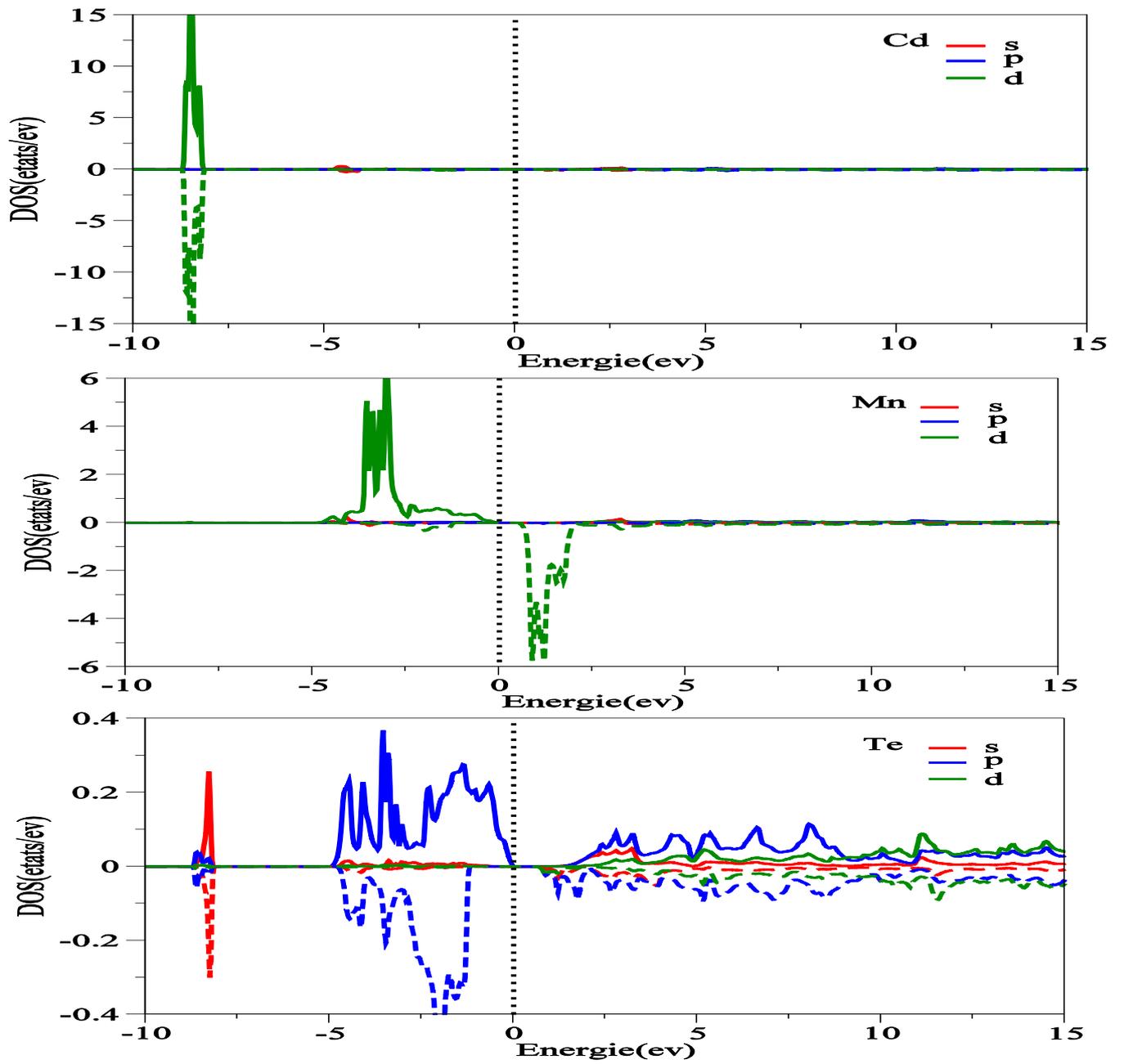
Figure(III.19) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Fe, Te en utilisant l'approximation GGA.



Figure(III.20) :La densité d'états partielle de Cd, Fe, Te en utilisant l'approximation GGA.



Figure(III.21) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Mn, Te en utilisant l'approximation GGA



Figure(III.22) :La densité d'états partielle de Cd, Mn, Te en utilisant l'aapproximation GGA

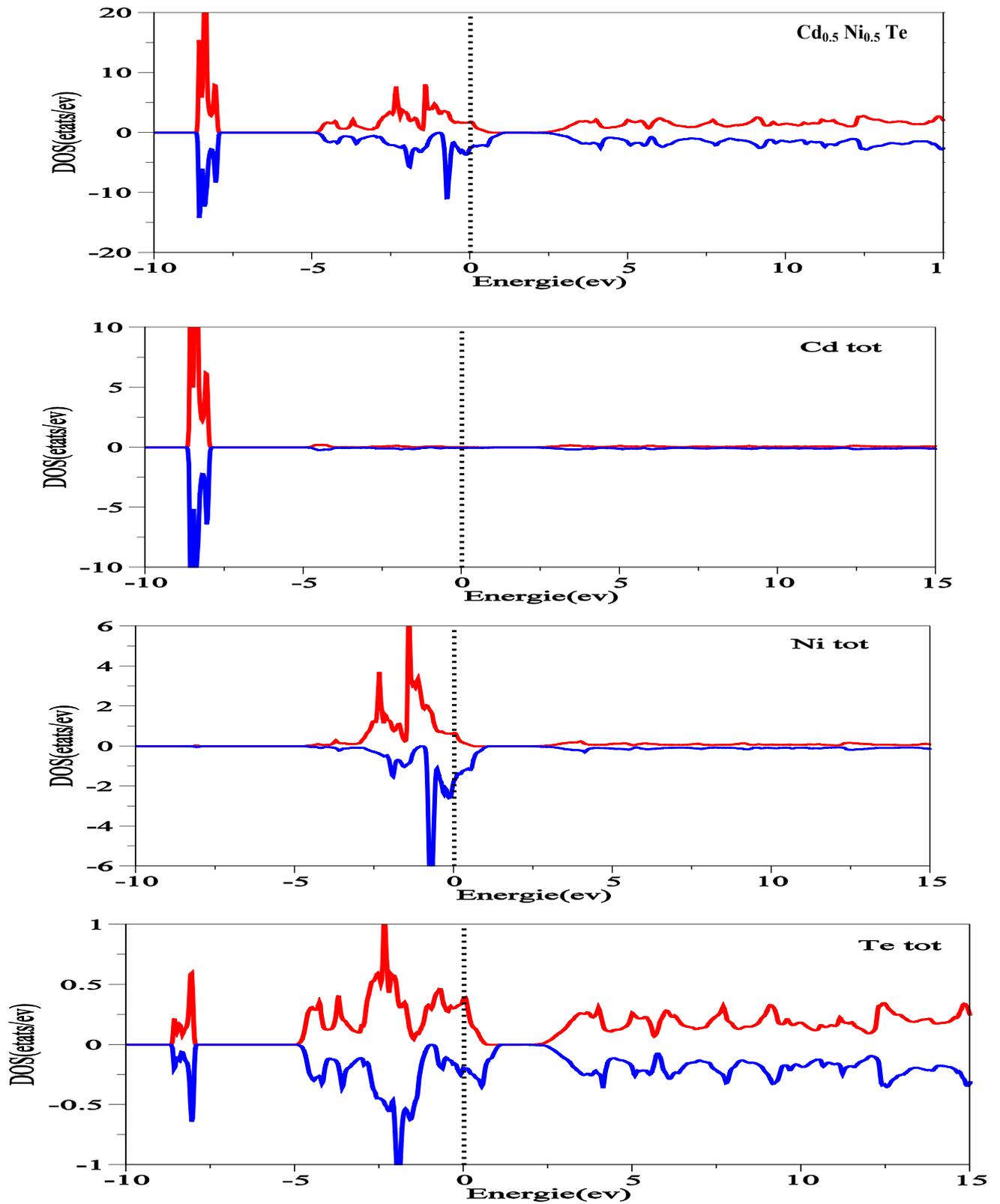
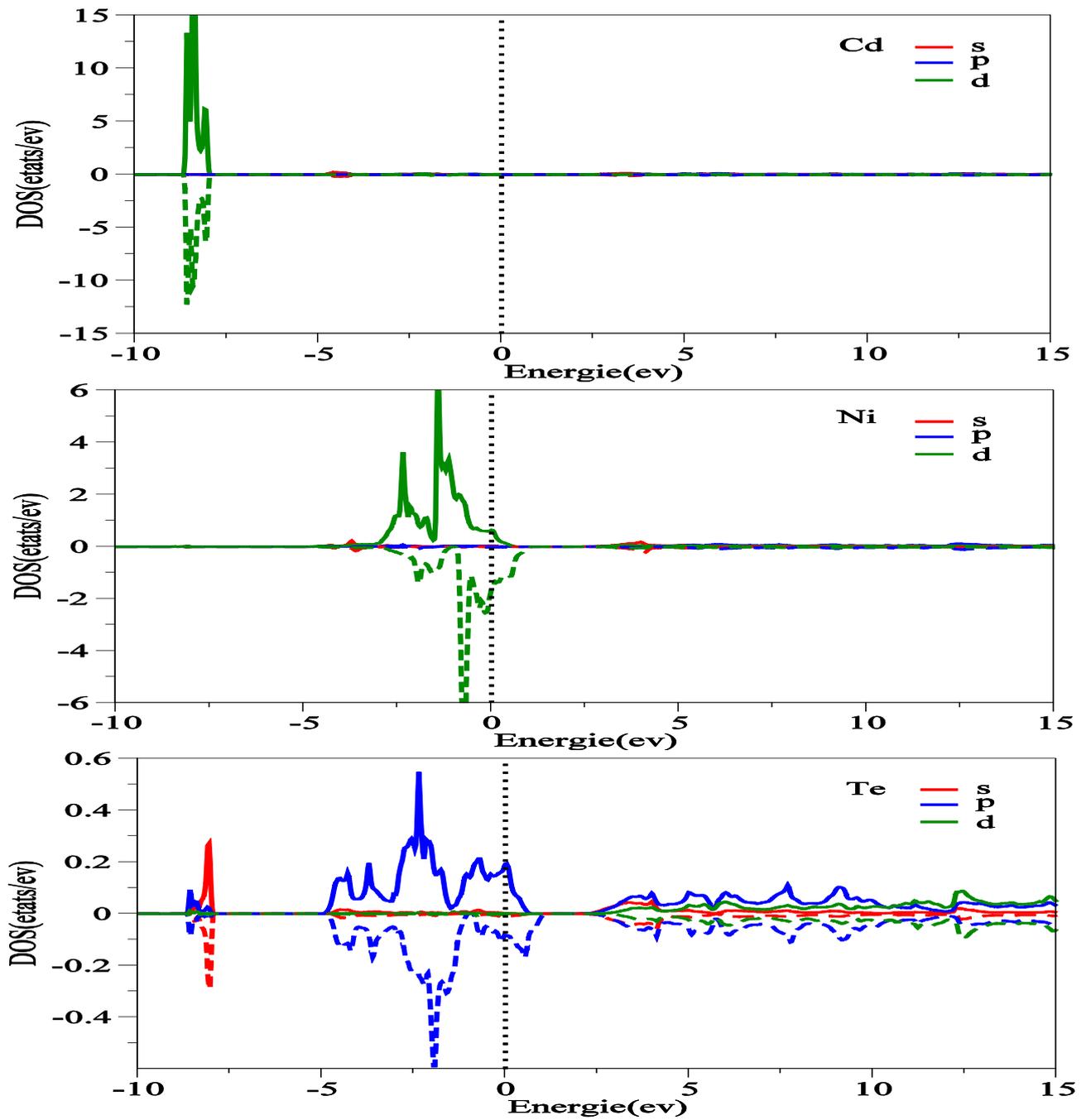
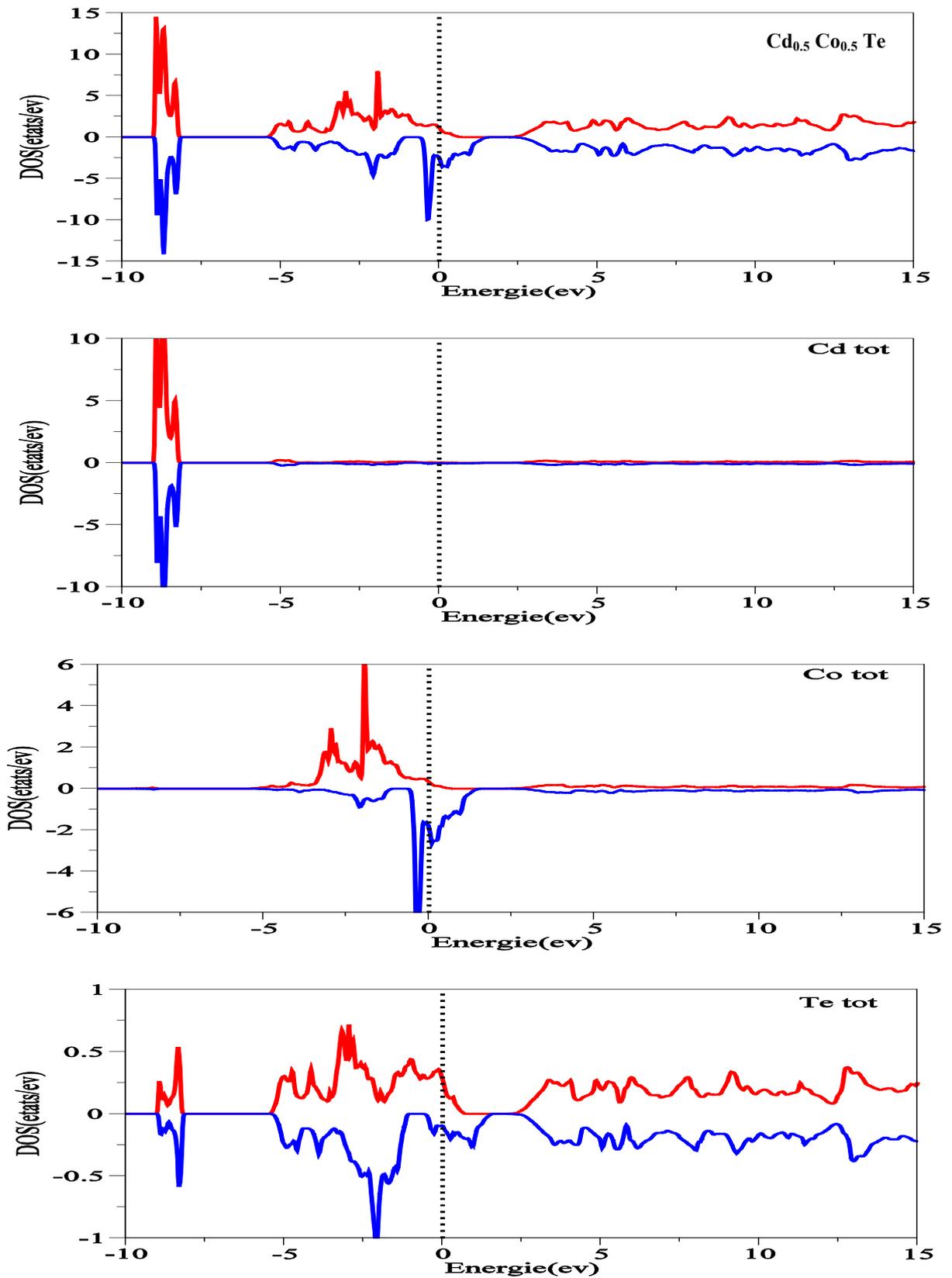


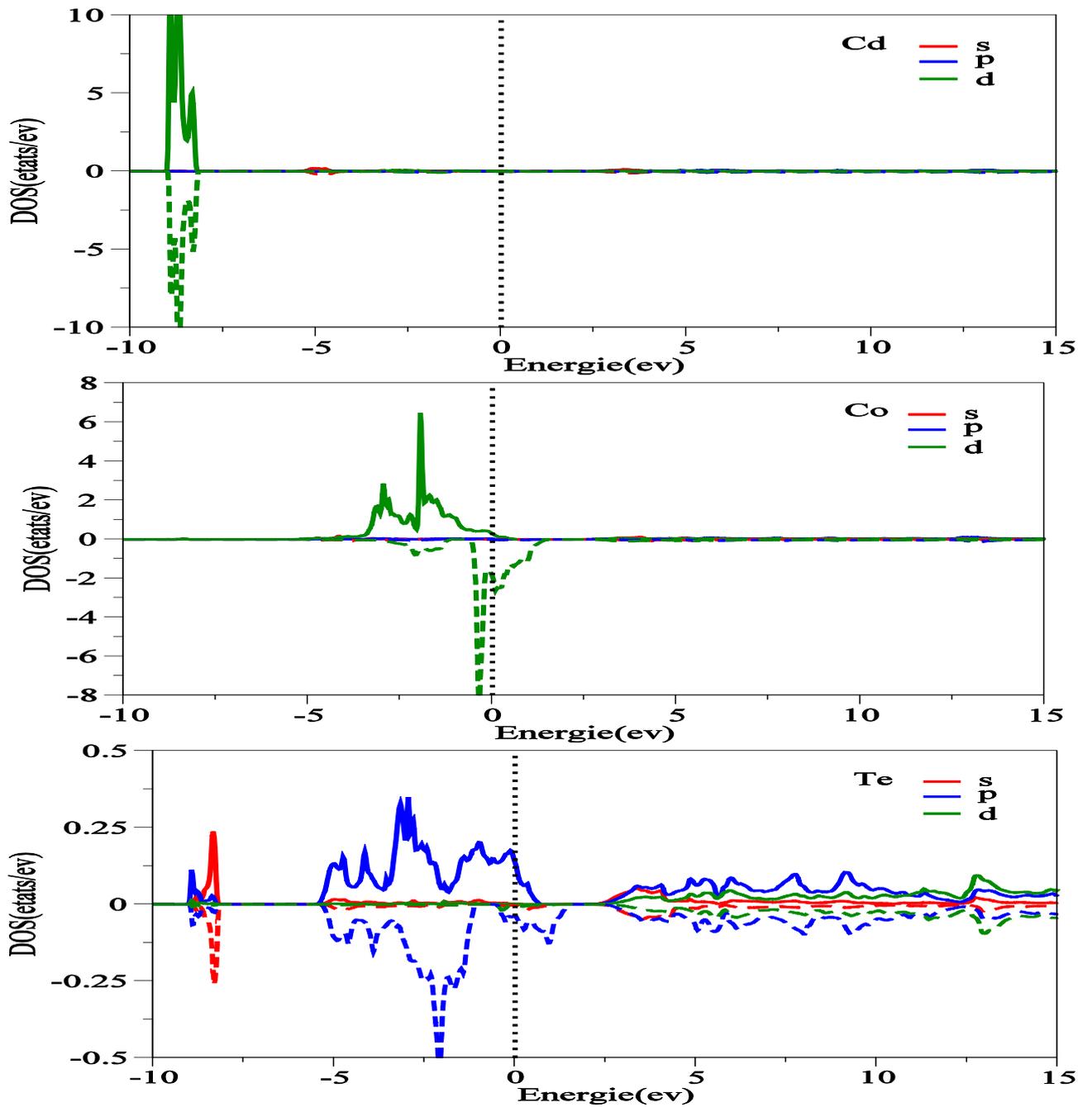
Figure (III.23) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Ni, Te en utilisant l'approximation GGA



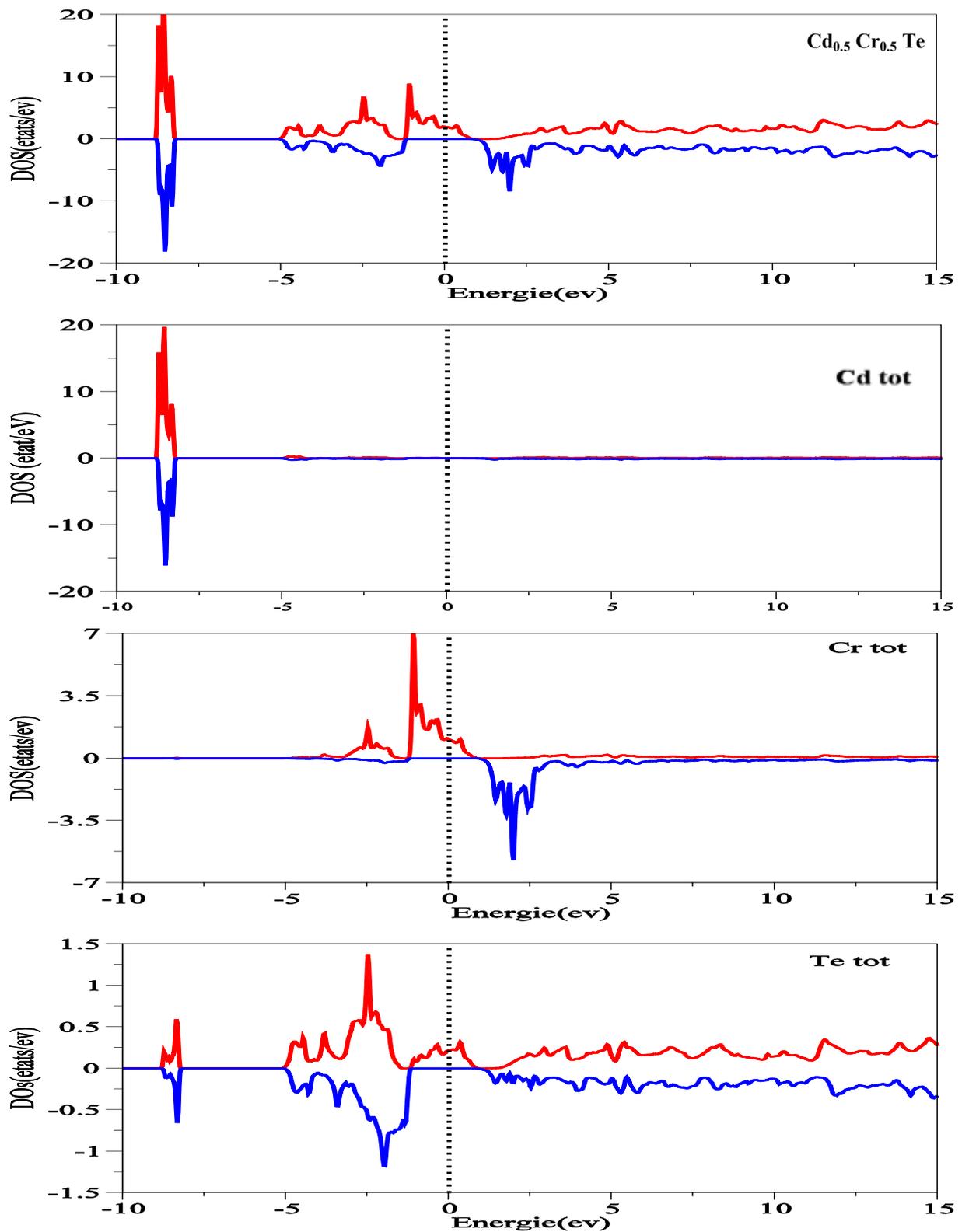
Figure(III.24) :La densité d'états partielle de Cd, Ni, Te en utilisant l'aapproximation GGA



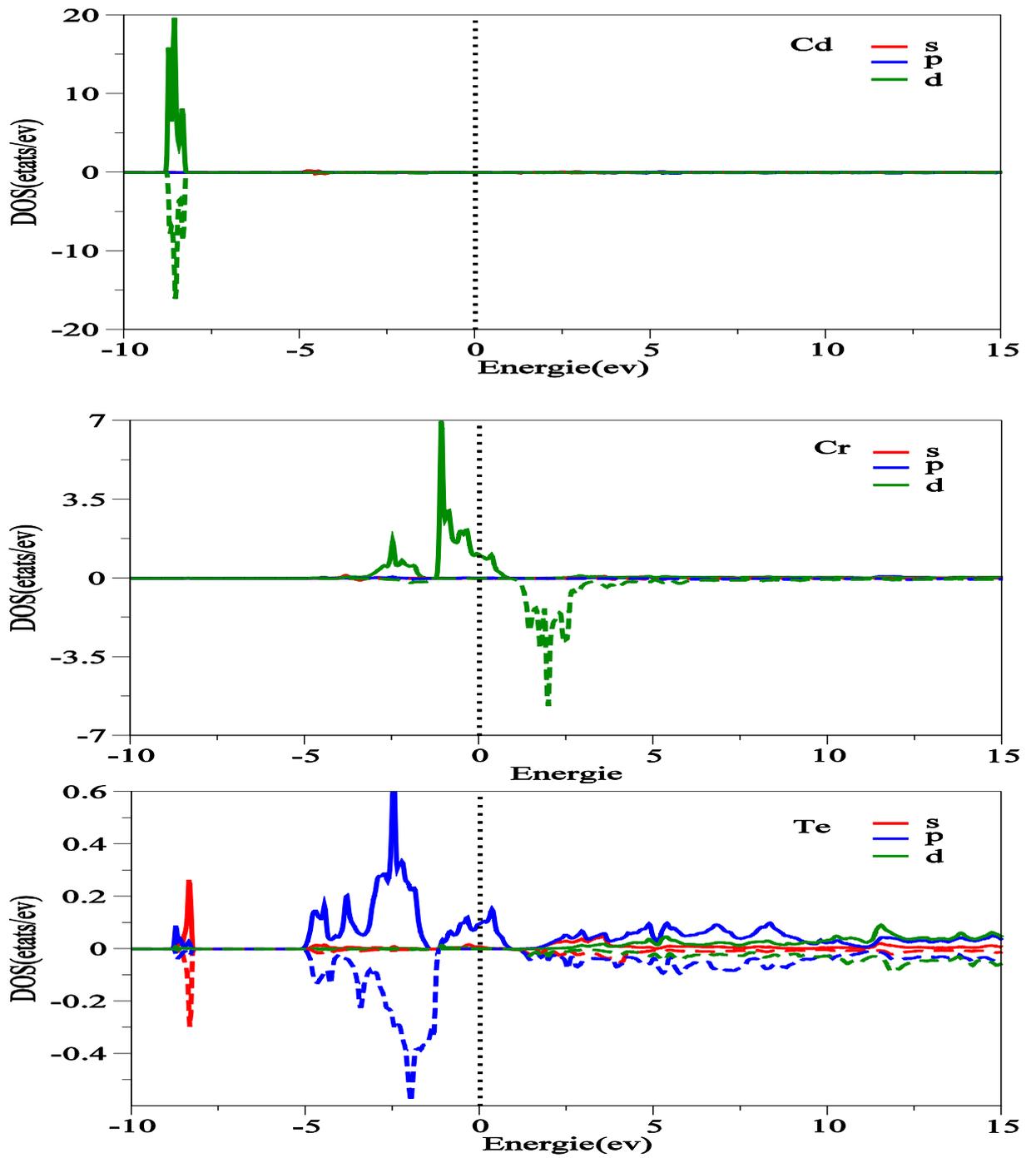
Figure(III.25) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Co, Te en utilisant l'approximation LDA



Figure(III.26) :La densité d'états partielle deCd,Co,Te en utilisant l'aapproximation LDA



Figure(III.27) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Cr, Te en utilisant l'approximation LDA



Figure(III .28) :La densité d'états partielle de Cd, Cr, Te en utilisant l'aapproximation LDA

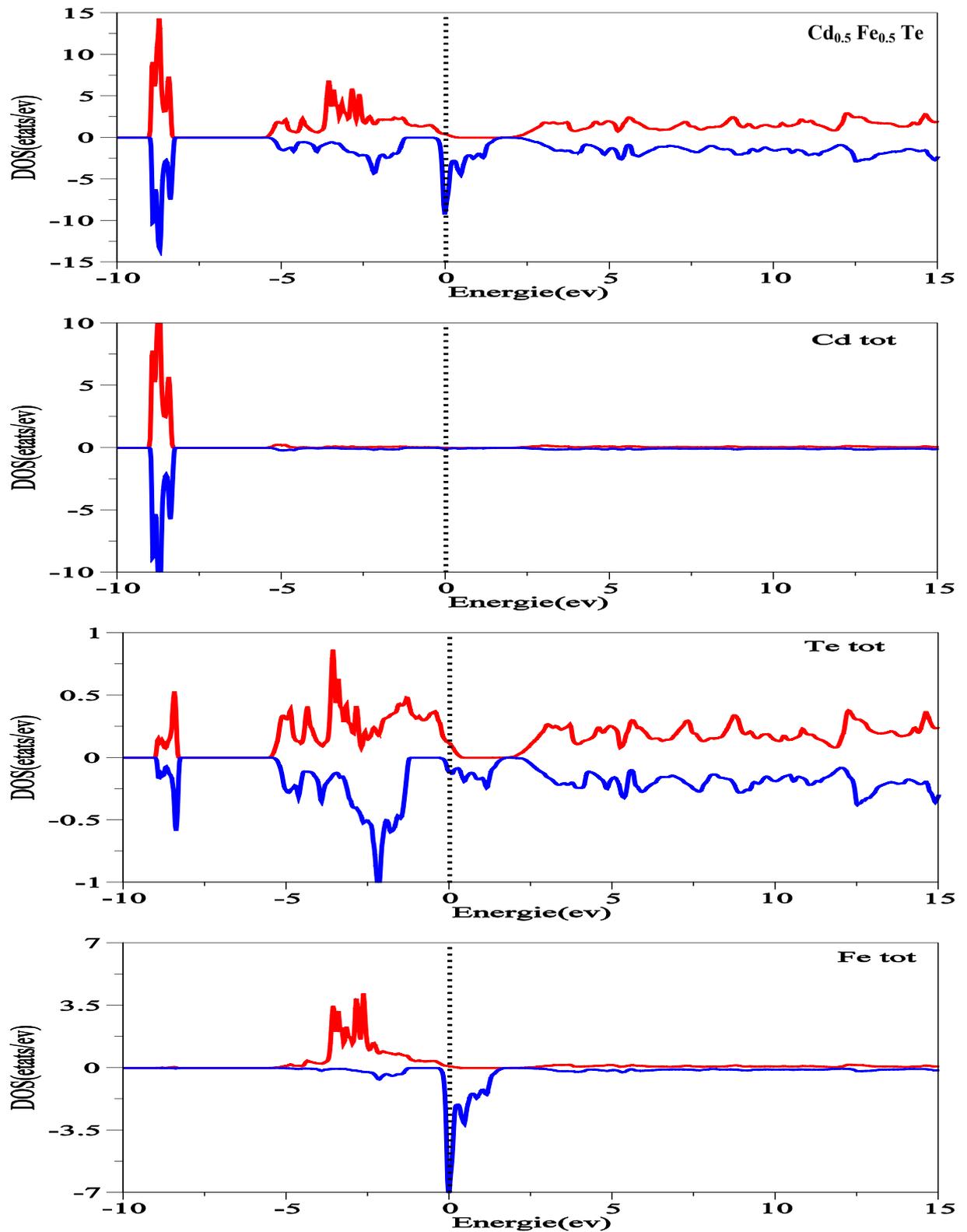
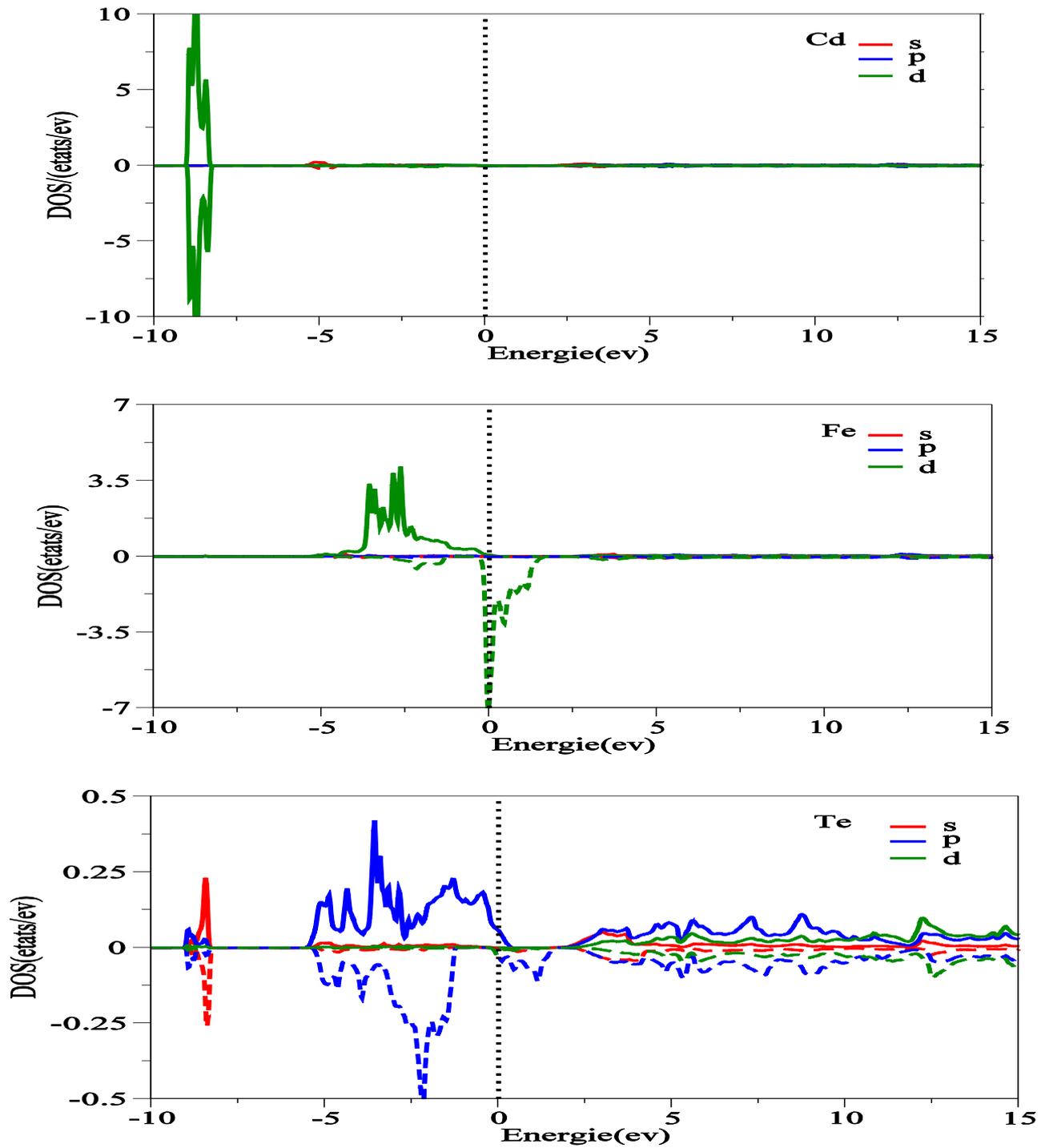
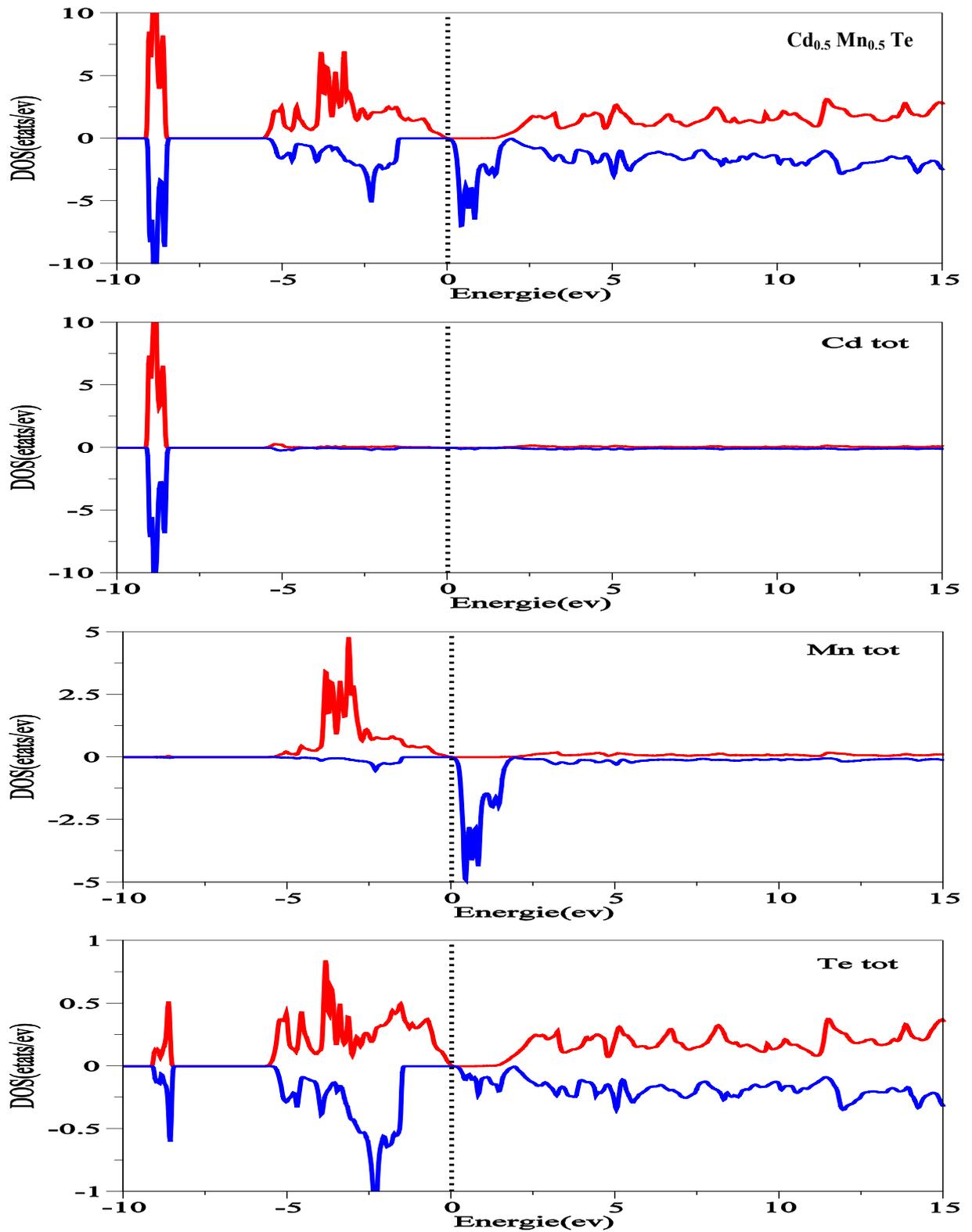


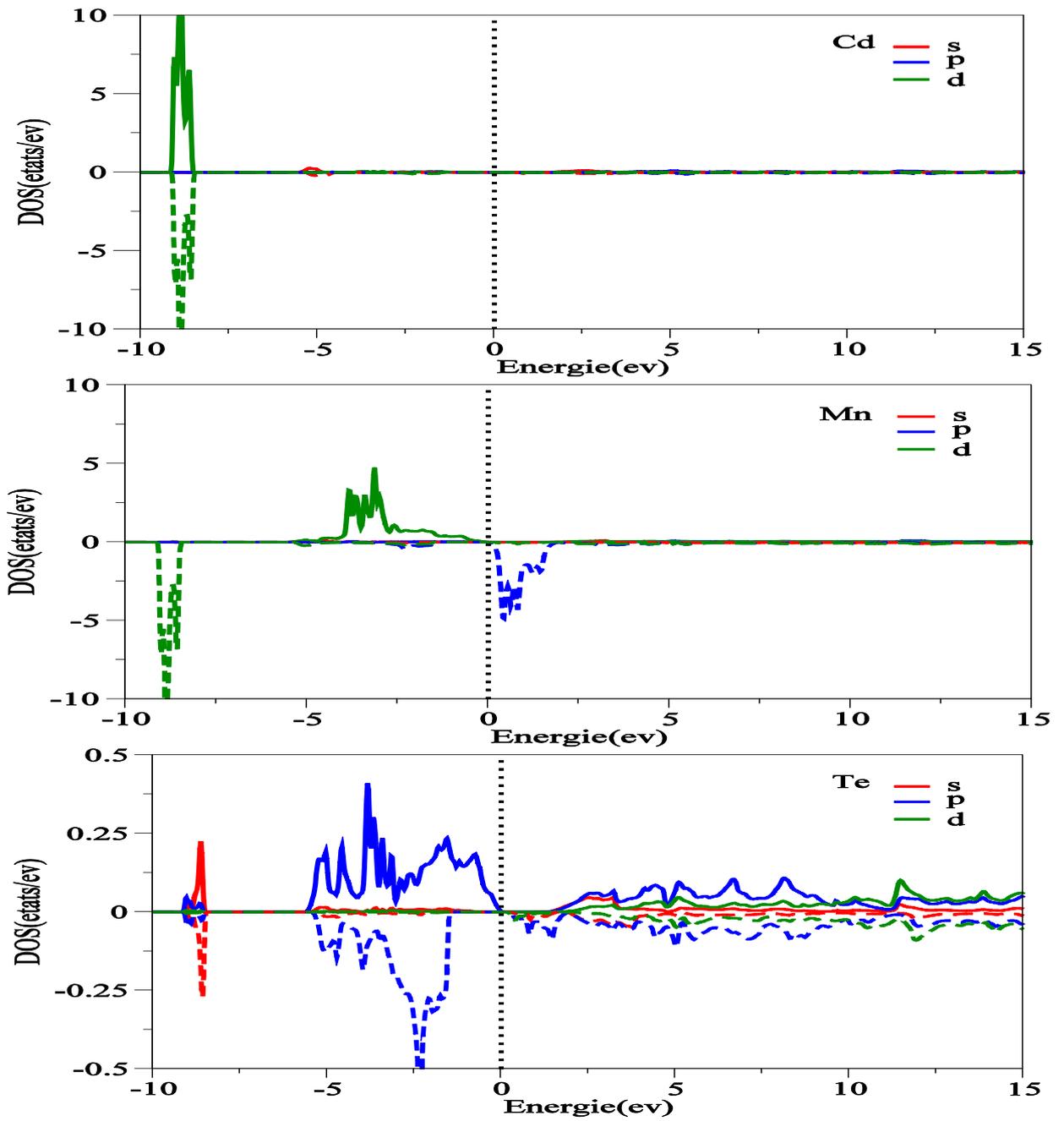
Figure (III.29) : la densité d'état totale du $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, Cd, Fe, Te en utilisant l'approximation LDA



Figure(III.30) :La densité d'états partielle de Cd,Fe, Te en utilisant l'aapproximation LDA



Figure(III.31) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, Cd, Mn, Te en utilisant l'approximation LDA



Figure(III.32) :La densité d'états partielle de Cd,Mn, Te en utilisant l'aapproximation LDA

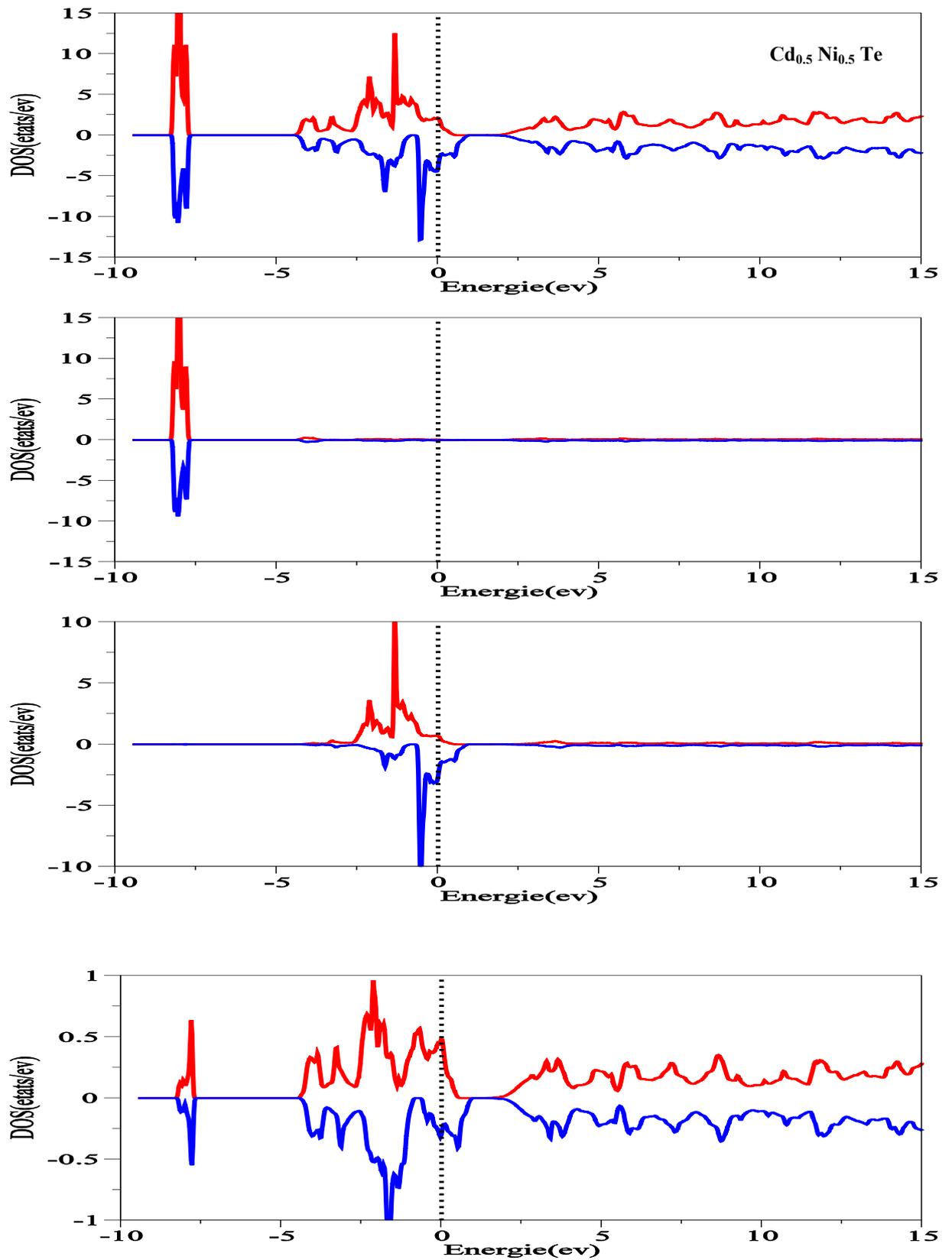
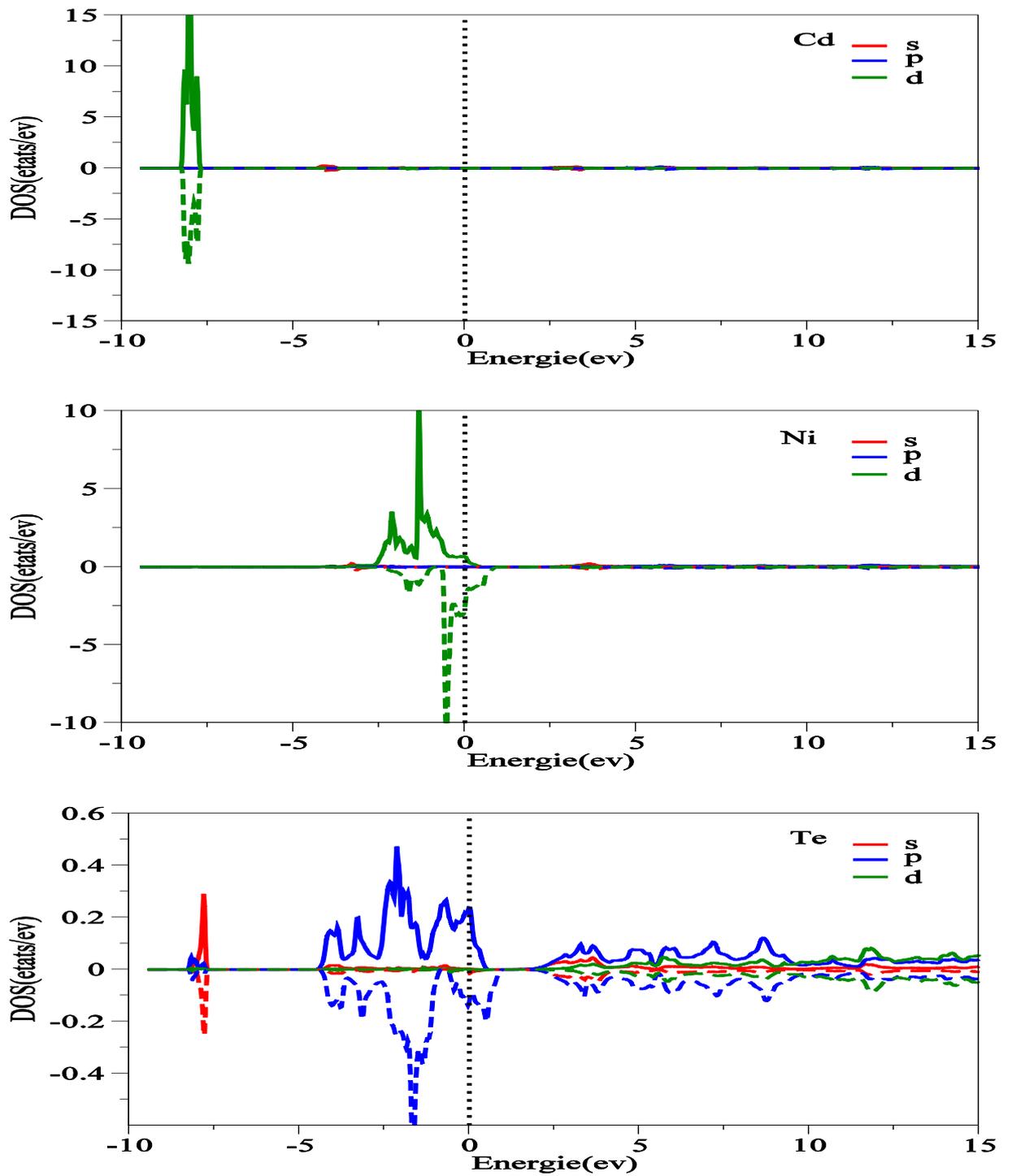


Figure (III.33) : la densité d'état totale du $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te, Cd, Ni, Te$ en utilisant l'approximation LDA



Figure(III.34) :La densité d'états partielle de Cd, Ni, Te en utilisant l'aapproximation LDA

III.4 Le moment magnétique

Le calcul des moments magnétiques des matériaux $\text{Cd}_{0.5}\text{Cr}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Te}$, $\text{Cd}_{0.5}\text{Ni}_{0.5}\text{Te}$ dans les sphères muffin-tin également comme dans les sites interstitiels sont classés dans le tableau (III.5) .

On a trouvé que au dessous de la bande de valance, il existe une très large hybridation entre les états d des matériaux à base des atomes (Cr,Mn,Fe,Co,Ni) et les états Te-p. A cause de cette hybridation p-d, les moments magnétiques locaux des atomes (Cr,Mn,Fe,Co,Ni) calculés par la GGA(LDA) sont réduits par rapport à ces espaces libres, et produit des petits moments magnétiques dans les sites de Cd et Te.

Tableau (III.5) : les moments magnétiques totales en (μ_B) des composés $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$.

Site (GGA/LDA)	$Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$	$Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$	$Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$	$Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$	$Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$
Cd	0.014/0.016	0.020/0.025	0.021/0.027	0.019/0.021	0.009/0.008
Te	-0.067/-0.057	0.029/0.026	0.066/0.027	0.084/0.021	0.046/0.036
Cr	3.470/3.424	/	/	/	/
Mn	/	4.175/4.063	/	/	/
Fe	/	/	3.274/3.123	/	/
Co	/	/	/	2.276/1.935	/
Ni	/	/	/	/	0.796/0.859
Interstitiel	0.655/0.672	0.747/0.815	0.573/0.563	0.439/0.369	0.211/0.186
Par cellule	4.000/3.998	5.000/5.001	3.998/3.854	2.957/2.446	1.107/1.116

Autre calculs

$Cd_{0.75}Co_{0.25}Te$ [44]	0.01 (Cd)	2.2274 (Co)	0.0786 (Te)	0.3773 (interstitiel)	3.000 (par cellule)
$Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$ [45]	0.048 (Cd)	4.326 (Mn)	0.064 (Te).		
$Cd_{0.25}Cr_{0.25}Te$ [46]	0.012 (Cd)	3.683 (Cr)	-0.056 (Te)	0.506 (interstitiel)	4.002 (par cellule)

III.5 Les Propriétés Élastiques :

L'élasticité d'un corps solide est sa réponse sous forme de légère déformation quand il est soumis à des contraintes mécaniques externes. Les contraintes sont décrites par des tenseurs qui déterminent la direction des forces le plan sur lequel elles s'appliquent.

Les modules d'élasticité relient d'une façon linéaire le tenseur des contraintes à celui des déformations dans le régime où la loi de Hooke s'applique. Due à leur grande symétrie, les matériaux à symétrie cubique possèdent seulement trois modules d'élasticité indépendants à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} .

Nous avons évalué ces modules par un calcul de l'énergie totale pour le CdTe.

Pour calculer les coefficients C_{11} et C_{12} , on applique un tenseur de déformation orthorhombique à volume conservé donné par l'expression suivante :

$$\varepsilon^T = \begin{pmatrix} \delta & 0 & 0 \\ 0 & -\delta & 0 \\ 0 & 0 & \delta^2/(1-\delta^2) \end{pmatrix} \quad (\text{III.3})$$

Où δ est la composante e_{11} du tenseur de déformation.

Dans cette déformation, l'énergie totale comprenant également celle due à la déformation élastique est donnée par :

$$E(\delta) = E(-\delta) = E(0) + (C_{11} - C_{12})V\delta^2 + O(\delta^4) \quad (\text{III.4})$$

Avec $E(0)$ l'énergie du cristal sans contraintes et V le volume de la maille élémentaire non déformée.

Par ailleurs, le module de compression pour un cristal cubique isotrope, s'écrit en fonction de C_{11} et C_{12} [50] comme suit :

$$B_0 = \frac{1}{3}(C_{11} + C_{12}) \quad (\text{III.5})$$

Pour le calcul du module d'élasticité C_{44} , on utilise un tenseur de déformation monoclinique à volume conservé donné par l'expression suivante :

$$\varepsilon^T = \begin{pmatrix} 0 & \delta/2 & 0 \\ \delta/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \delta^2/(4-\delta^2) \end{pmatrix} \quad (\text{III.6})$$

L'énergie totale est alors exprimée en fonction de la déformation par l'équation :

$$E(\delta)=E(-\delta)=E(0)+\frac{1}{2}C_{44}V\delta^2+O(\delta^4) \quad (\text{III.7})$$

Les deux tenseurs (III-3) et (III-6) peuvent être utilisés pour tout réseau cubique.

Dans notre calcul, nous considérons seulement des petites distorsions afin de rester dans le domaine élastique du cristal. Les résultats obtenus par la GGA des constantes élastiques sont comparés avec des autres résultats de la même approximation dans le tableau (III.6).

Les résultats obtenus par LDA pour C_{12} , C_{44} sont supérieurs que l'expérience par contre les résultats obtenus par le GGA sont inférieurs des résultats expérimentaux.

Les résultats de C_{11} sont en accord avec les résultats trouvés expérimentalement et des autres calculs dans la GGA et ils sont inférieurs par la LDA. La stabilité mécanique dans les systèmes cubiques implique $C_{11}-C_{12}>0$, $C_{11}+2C_{12}>0$, $C_{44}>0$ (III.8)

D'après le tableau (III.6), nous pouvons voir que le CdTe est mécaniquement stable parce que leurs constantes élastiques satisfont l'équation (III.8)

Tableau (III.6) : Les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44} pour CdTe (les valeurs sont en GPa).

	<i>LDA</i>	<i>GGA</i>	<i>autres calculs</i>	<i>expérience</i>
C_{11}	56.38	49.20	53.201[40]	53.5 [51]
C_{12}	40.11	26.96	23.2[40]	36.5 [51]
C_{44}	40.59	12.1	13.01 [40]	19.9 [51]

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudiés les propriétés structurales telles que la constante du réseau, le module de rigidité ainsi que l'énergie totale d'équilibre, les propriétés électroniques (structure de bandes, densité d'état) et les propriétés élastiques (les constantes élastiques C_{11} , C_{12} et C_{44}) du semi-conducteur CdTe et les mêmes propriétés pour $Cd_{0.5}M_{0.5}Te$ ($M=Cr, Mn, Fe, Co, Ni$) néanmoins on a pas pu calculer les propriétés élastiques .

Dans le cadre de la fonctionnelle de densité avec spin polarisé nous avons mené notre travail en utilisant la méthode des ondes planes augmentées avec un potentiel total (*FP-LAPW*) .les effets d'échange-corrélation sont traités dans le cadre des approximations largement utilisées : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation généralisée du gradient (GGA).

Dans ce travail, nous avons calculé le paramètre du réseau a , le module de compressibilité et sa dérivé par rapport à la pression du semi-conducteur CdTe et de $Cd_{0.5}Cr_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$, $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$ dans la phase zinc blende ces résultats sont sous-estimés par LDA, et suréstimés par la GGA. Pour le CdTe et $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$.

Les résultats de la structure de bandes et le calcul de la densité d'état montrent clairement que les matériaux ferromagnétiques $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$ (GGA), $Cd_{0.5}Fe_{0.5}Te$ sont des semi-métaux, avec les spins majoritaires représentent la nature d'un semi-conducteur les spins minoritaires ont un comportement métalliques. Par contre le cas du spin down représente le la nature d'un semi-conducteur et le cas du spin up expose le comportement métallique. Les deux composés $Cd_{0.5}Co_{0.5}Te$ (LDA) et $Cd_{0.5}Ni_{0.5}Te$ sont des métaux ferromagnétiques et le $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$ est un semi-conducteur magnétique

Le calcul de la structure de bande démontre que le CdTe et les composés à base de (Cr ;Mn ;Fe ;Co ;Ni) possèdent un gap d'énergie direct au point Γ .

Les moments magnétiques généralement sont provoqués par les atomes (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) avec une petite contribution des sites des sites Cd et Te. Tandis que l'hybridation p-d réduit les moments magnétiques de (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) par rapport de ces espaces libres, et produit des moments magnétiques dans les sites non magnétiques de Cd et Te.

Le calcul des constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44}) montre que le CdTe est mécaniquement stable. Pour les matériaux à base de (Cr ; Mn ; Fe, Co ; Ni) on n'a pas pu étudier les propriétés élastique à cause du temps insuffisant.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

- [1] *H. Ohno, Science 281 (1998) 951.*
- [2] *S.A. Touat, F. Litimein, A. Tadjer, B. Bouhafs, Physica B 405 (2010) 625.*
- [3] *A.E. Merad, M.B.Kanoun, S.Goumri-Said, G.Magn.Mater. 302 (2006) 536.*
- [4] *P. Hohenberg , W. Kohn, Phys. Rev. B 136, (1964) 864.*
- [5] *W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A 1133, (1965)140.*
- [6] *D. M. Ceperley and B.J.Alder, Phys.Rev.Lett. 45, (1980) 566 .*
- [7] *J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, (1996) 3865.*
- [8] *Efthimios Kaxira. Atomic and Electronic Structure of Solids. Cambridge University Press (2003).*
- [9] *M. Born, J.R. Oppenheimer, Ann. Phys. 87, (1927) 457.*
- [10] *D.R. Hartree, Proc.Camb. Philos. Soc. 24, (1928) 89.*
- [11] *V. Fock, Z. Phys .61,126 (1930) ; ibid 62, (1930) 795.*
- [12] *J.C .Slater. Phys. Rev 81, (1951) 385.*
- [13] *J. P. Perdew, A. Zunge. Phys. Rev. B 23, 5048 (1981).*
- [14] *Perdew, J. P. CHEvary, J.A. Vosko, S.H., Jackson, K.A., perderson,M.R., sigh, D.J. and F.Olhais, Phys. Rev. B46, (1992) 6671.*
- [15] *D.J. Singh and Ashkenazi.J. (1992) Phys.Rev. B46, 11570.*
- [16] *Korling , M. and Haglund.J. Phys. Rev. B45, (1992) 13293.*
- [17] *J. P. Perdew, S. Burke et M. Ernzerhof, Phys. Lett. 77, 3865 (1996).*
- [18] *C.G. Broyden. Math.comp, 19, (1965) 577.*
- [19] *David J. Singh. Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method, (1994) 13.*

- [20] J.C. Slater, *Phys. Rev.* 51, (1937) 846.
- [21] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* 12, (1975) 3060.
- [22] Kouriche Athmane. *Thèse de magister. Étude des propriétés structurales, électroniques et optiques des semi-conducteurs CdX (X=S, Se et Te) dans la phase Zinc-blende et wurtzite, université de M'sila.*
- [23] M. B. Kanoun. *thèse de doctorat. First-Principles study of Structural, Elastic and Electronic Properties of AlN and GaN Semiconductors under Pressure Effect and Magnetism in AlN:Mn and GaN:Mn systems, univesité de Tlemcen. (2004).*
- [24] D.D. Koelling and G.O. Arbman, *J. Phys. F* 5, (1975) 2041.
- [25] S. Goedecker, *Phys. Rev. B* 47, (1993) 9881.
- [26] D. Koelling and B.N. Harmon, *J. Phys. C* 10, (1977) 3107.
- [27] F. Rosicky, P. Weinberg and F. Mark, *J. Phys. B* 9, (1976) 2971 .
- [28] J.H. Wood and A.M. Boring, *Phys. Rev. B* 18, (1978) 2701 .
- [29] T. Takeda, *J. Phys. F* 9, (1979) 815 .
- [30] A.H. Macdonald, W.E. Pickett and D.D. Koelling, *J. Phys. C* 13, (1980) 2675.
- [31] D.R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* 42, (1979) 662 .
- [32] M. Weinert, *J. Math. Phys.* 22, (1981) 2433 .
- [33] R. Gaspar ,*Acta Phys. Hung.* 3, (1954) 85 .
- [34] T. Takeda and J. Kubler, *J. Phys. F* 5, (1979) 661 .
- [35] J. Petru and L. Smrcka, *Czech. J. Phys. B* 35, (1985) 62 .
- [36] L. Smrcka, *Czech. J. Phys. B* 34, (1984) 694 .
- [37] D.J. Singh, *Phys. Rev. B* 43, (1991) 6388 .
- [38] O. Madelung, M. Schulz, H. Weiss, *LandoltBörstein (Eds.), Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, vol.17, Springe Berlin(1982).*

- [39] F.D. Murnaghan, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* 30, (1944) 244.
- [40] S. Ouendadji, S. Ghemid, H. Meradji, F. El Haj Hassan *Theoretical study of structural, electronic, and thermal properties of CdS, CdSe and CdTe compounds*. *Computational Materials Science* 50 (2011) 1460–1466.
- [41] Sonu Sharma, Nisha Devi, P.S. Bisht, P. Rajaram, *Spin-polarized structural, electronic and magnetic properties of diluted magnetic semiconductors $Cd_{1-x}Mn_xTe$ in zinc blende phase*
- [42] O. Madelung, M. Schlz, H. Weiss (Eds.), *Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology, Landolt-Borstein, vol. 17, Springer, Berlin, 1982.*
- [43] A. Balzarotti, M. Czyzyk, A. Kisiel, N. Motta, M. Podgorny, M. Zimnal- Starnawska, *Phys. Rev. B* 30 (1984) 2295.
- [44] Y. Saeed, S. Nazir, A. Shaukat, A.H. Reshak, *Ab-initio calculations of Co-based diluted magnetic semiconductors $Cd_{1-x}Co_xX$ ($X=1/4S, Se, Te$)*, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 322 (2010) 3214–3222.
- [45] S.A. Touat a, F. Litimein b, A. Tadjer a, B. Bouhafs, *The spin effect in zinc blende $Cd_{0.5}Mn_{0.5}Te$ and $Zn_{0.5}Mn_{0.5}Te$ diluted magnetic semiconductors: FP-LAPW study*, *Physica B* 405 (2010) 625–631.
- [46] S. Amari, S. Méçabih, B. Abbar, B. Bouhafs, *Half-metallic ferromagnetism in $ZnCrTe$ and $CdCrTe$: Ab initio study*, *Computational Materials Science* 50 (2011) 2785–2792.
- [47] A. Balzarotti, M. Czyzyk, A. Kisiel, N. Motta, M. Podgorny, M. Zimnal- Starnawska, *Phys. Rev. B* 30 (1984) 2295.
- [48] J. Heyd, J.E. Peralta, G.E. Scuseria, *Chem. Phys.* 123 (2005) 1.
- [49] E. Deligoz, K. Colakoglu, Y. Ciftei, *Physica B* 373 (2006) 124.
- [50] C. Kittel. *Introduction to Solid State Physics. 7ed* (1996, by Wiley and sons, Inc.)
- [51] B.K. Agrawal, S. Agrawal, *Phys. Rev. B* 45 (1992) 8321.