
Conclusion générale :

Après avoir établi tout un chapitre pour les résultats obtenus, on va souligner l'intérêt et l'originalité de notre travail par cette conclusion. Pour cela, on va citer les différents points qu'on a traités avec les déductions correspondantes montrant ainsi l'intérêt et la nouveauté.

Durant ce travail, nous avons :

- Rappelé les définitions des effets Piézoélectriques direct et inverse et les équations constitutives du phénomène ;
- Rappelé les notions générales du cycle d'hystérésis, température de Curie et la transition de phase ;
- Présenté le phénomène de la ferroélectricité et les nouveaux matériaux piézoélectrique avec leurs domaines d'application ;
- Dans le cadre de la fonctionnelle de densité (DFT) nous avons mené notre travail en utilisant la méthode des ondes planes avec le pseudopotentiel. Les effets d'échange – corrélation quant à eux étant traités dans le cadre des deux approximations largement utilisées: L'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation généralisée du gradient (GGA).

Cette étude a été réalisée pour calculer la polarisation et le coefficient piézoélectrique en utilisant les avancées récentes en chimie quantique concernant le calcul des propriétés de polarisation. La méthode récemment implémentée dans le logiciel quantum espresso est celle de la théorie dite « moderne » de la polarisation due à King-Smith, Vanderbilt et Resta, qui utilise de façon explicite le concept de la phase de Berry.

Nous avons montré que la théorie basée sur le concept de la phase de Berry utilisée tout au long de ma thèse permettait une bonne prédiction des propriétés dérivées de la polarisation telle que : les constantes piézoélectriques.

On a calculé la polarisation pour chaque structure en utilisant la phase de Berry, et puis on a calculé la polarisation des différentes déformations nécessaires pour obtenir la constante piézoélectrique.

Aussi nous rappelons que d'après la simulation on constate que :

- La présence de la polarisation nécessite deux types d'atomes de charge (+) et (-) et une absence de symétrie par inversion et un système isolant.
- Pour le PZT la phase cubique ne présente pas une polarisation due à la présence de la symétrie par inversion (centrosymétrique).

-
- a_{PZO} est supérieur a_{PTO} rayon empirique de Zr (4d) est supérieur à celui de Ti (3d).
 - Pour toutes les structures le gap énergétique de PZO est plus grand que le PTO.
 - La valeur de la polarisation dépend de la déformation et l'orientation de l'octaèdre d'oxygène.
 - Les constantes piézoélectriques qu'on a calculées sont en bon accord avec les valeurs expérimentales.
 - Dans cette étude on a considéré la phase (PZO et PTO) pour les structures de PZT, le comportement (polarisation + constante piézoélectrique) peuvent être évalué approximativement par la phase pure.