
Introduction générale :

Depuis des années cinquante, l'industrie des microtechniques a connu un essor très important. Les techniques de fabrication ont évolué et ont ainsi permis une réduction du coût de production. Aujourd'hui, de nombreuses applications intégrant des dispositifs de taille réduite. En effet, les actionneurs et les capteurs sont une classe de cette dernière qui utilise les matériaux piézoélectriques comme éléments actifs tel que dans l'imagerie médicale (échographie) et la vélocimétrie.

Les matériaux piézoélectriques sont des composés particulièrement intéressants pour ce type d'application. Les recherches s'orientent de plus en plus vers l'élaboration des solutions solides zirconite-titanate de plomb notée **PZT** qui a présenté des propriétés électriques et électromécaniques très intéressantes du fait de leur nature diélectriques, piézo-électriques et ferroélectriques. La substitution progressive de Ti^{4+} et Zr^{4+} dans le réseau quadratique du titanate de plomb **PbTiO₃** ($c/a > 1$) réduit la distorsion quadratique. L'augmentation de la teneur en zirconium dans le réseau **Pb (Zr_x, Ti_{1-x})O₃** de symétrie quadratique conduit à une région spécifique de concentration en zirconium (**52% à 54%**) à l'apparition d'une autre structure **PZT** de symétrie rhomboédrique. Cette région de concentration présente le domaine de composition où les deux phases coexistent.

Au-dessus de cette dernière, il apparaît une nouvelle phase anti-ferroélectrique de symétrie orthorhombique. Les propriétés de ces matériaux dépendent de leur microstructure, la composition chimique et de leur cycle d'élaboration.

L'objectif de ce travail est de calculer les propriétés piézoélectriques de PZT, plus précisément la constante piézoélectrique e pour cela on a besoin d'étudier la variation de la polarisation en fonction de la déformation. Le calcul de la polarisation ne peut pas être effectué par l'approche classique $p = \vec{q} \cdot \vec{r}$ pour un système macroscopique d'où la nécessité de calculer la phase de Berry en utilisant la DFT (La Théorie de La Fonctionnelle de la densité) afin de déterminer la fonction d'onde électronique φ et l'énergie ε à partir de la résolution de l'équation de Kohn et Sham.

Ce mémoire s'articule autour de trois chapitres principaux :

- Dans le chapitre I nous allons rappeler les définitions et les propriétés associées à la piézoélectrique .Nous présentons également une partie sur les matériaux de type PZT, le diagramme de phase, en particulier, la structure pérovskite .Puis, après avoir rappelé les équations régissant la piézoélectricité, nous présentons les applications les plus répandues pour les matériaux piézoélectriques.
- le deuxième chapitre est composé de deux parties, dans la première partie nous représentons la théorie sur laquelle sont basés nos calculs de structures électroniques à savoir la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). On présente : l'équation de Schrödinger, l'approximation de Born-Oppenheimer, les équations de Kohn et Sham, les approximations de la densité locale et du gradient généralisé et la méthode de la résolution des équations de Kohn et Sham. dans la deuxième partie nous représentons la méthode de déterminer la phase de Berry et polarisation macroscopique.
- Le troisième chapitre est consacré aux résultats et discussions : premièrement, nous présentons la structure cristalline de notre matériau étudié et les détails de calcul Ensuite nous présentons nos résultats et discussions.
- Nous terminons enfin cette présente mémoire par une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus.