

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT DE
PHYSIQUE

N° : PH/MAT/11/2022



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Physique des Matériaux

*Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique*

Par : Elbahi Abdeldjabar

Intitulé

**Etude des propriétés structurales et électroniques d'un
Solide cristallin tri-et bidi-dimensionnel.**

Soutenu le / /2022 devant le jury composé de :

Ghellab Torkia

Université de M'sila

Président

Charifi Zoulikha

Université de M'sila

Rapporteur

Baaziz Hakim

Université de M'sila

Examineur

Année universitaire : 2021/2022

Remerciement

*Nous voulons tout d'abord remercier Dieu qui nous a donné force, courage et surtout patience pour continuer ce travail.
Nous voudrions exprimer nos sincères remerciements*

On remercie également notre directrice de thèse professeur Charifi Zoulikha pour tous les efforts et le temps qu'ils nous ont consacrés à accomplir ce travail.

Je remercie les membres de jury : Professeur Baaziz Hakim et MCA Ghellab Torkia, que j'ai le grand honneur de m'accepter l'évaluation de ce travail.

Enfin, mes remerciements à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce projet.

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

À mes parents,

À mes frères,

À mes amis,

À toute ma famille,

Je remercie tous les enseignants et le personnel du département de physique de l'université de M'sila au cours des quatre années passées pour leurs aides et leurs précieux conseils.

Je tiens à remercier l'ensemble de tous les étudiants et les étudiantes de ma promotion.

Sommaire

Introduction générale.....	1
Références	2
Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	
I.1.Introduction.....	8
I.2. Équation de Schrödinger.....	8
I.3. Approximation de Born-Oppenheimer.....	9
I.4. Approximation de Hartree-Fock.....	10
I.5. La théorie de la fonctionnelle de la densité DFT.....	11
I.5.1. Théorèmes de Hohenberg-Kohn.....	11
I.5.2. Les équations de Kohn et Sham.....	12
I.5.3. L'approximation de la densité locale (LDA).....	13
I.5.4. L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	13
I.5.5. Le cycle auto-cohérent.....	13
Références	16
Chapitre II : La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	
II.1.Introduction.....	18
II.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....	18
II.3.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées FP- LAPW.....	20
II.4.Les avantages de la méthode FP-LAPW par rapport à la méthode APW.....	22
II.4.1. Les énergies de linéarisation.....	22
II.4.2. Détermination des fonctions de base.....	23
II.5. Amélioration de la méthode (FP-LAPW).....	23
II.5.1. Les fenêtres d'énergies multiples.....	23
II.5.2. La méthode LAPW+LO.....	24
II.5.3. La méthode APW+lo.....	24
II.6. Le code Wien2k.....	26
Références	28
Chapitre III : Certains aspects des nanomatériaux	
III.1. Introduction.....	30
III.2. Matériaux nanostructuraux.....	30

III.3. Nanomatériaux du carbone.....	31
III.3.1. Fullerène.....	31
III.3.2. Nanotube de carbone.....	32
III.3.3. Le graphène.....	33
III.4. Matériaux bidimensionnels.....	38
III.4.1. Le cas des nanofeuilles de nitrure de bore (h-BN)	38
III.5. Quelques applications des matériaux 2D.....	40
III.5.1. Graphène.....	40
III.5.2.h-BN.....	41
III.6. Concepts de base de la cristallographie.....	41
III.6.1. Structure, direction et plan du cristal.....	42
III.6.2. Structure de surface pour les structures à empilement étroit	43
III.7. Résumé.....	45
Références	47
<i>Chapitre VI ; Résultats et discussion</i>	
IV.1. Introduction.....	51
IV.2. Détails de calcul.....	51
IV.3. La structure cristalline du composé.....	52
IV.4. Propriétés structurales.....	55
IV.5. Propriétés électroniques.....	60
IV.5.1. Les structures de bandes.....	60
IV.5.2. La densité d'états électronique.....	65
Références.....	70
Conclusion générale.....	73

Liste des Tableaux

N°	Titre	Page
Tableau (III.1)	Résumé des plans et des directions en empilement serré, de l'APF et des plus proches voisins pour les structures FCC, HCP	44
Tableau(IV.1)	Notre choix de différents paramètres inclus dans le calcul pour les composés GaN(3D) et GaN(2D) dans les deux approximations GGA et LDA.	52
Tableau(IV.2)	Les configurations utilisées dans le calcul pour les Gallium nitride (GaN).	53
Tableau (IV.4)	Les propriétés structurales des GaN(3D) et GaN(2D) de Murnaghan.	59
Tableau (IV.5)	Valeurs du gap d'énergie des deux composés calculées avec les approximations LDA, GGA et EV-GGA.	65

Liste des Figures

N°	Titre	Page
Figure (I.1)	Représentation du cycle auto-cohérent de résolution des équations de Kohn et Sham.	15
Figure (II .1)	Répartition de l'espace de la méthode APW	18
Figure (II .2)	Les fenêtres d'énergie multiple.	24
Figure (II .3)	L'organigramme des programmes du code Wien2k.	27
Figure (III.1)	Les nanomatériaux ont une dimension caractéristique dans la gamme de taille de 1 à 100 nm. L'échelle de longueur présentée offre un cadre de référence au lecteur	31
Figure (III.2)	Types de fullerènes.	32
Figure (III.3)	Classification des nanotubes de carbone : (à gauche) zigzag, (au milieu) chiral et (à droite) armchair.	33
Figure (III.4)	Le graphène est la base de toutes les formes graphitiques. Enveloppé en forme de boules (0D), enroulé sous forme de nanotubes (1D) ou empilé en couches comme le graphite (3D).	34
Figure (III.5)	(a) La structure du réseau en nid d'abeille du graphène. La cellule unitaire est constituée d'atomes de carbone représentés par A et B, \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs du réseau et (b) la zone de Brillouin correspondante, montrant les points de haute symétrie. correspondante, montrant les points de haute symétrie	35
Figure (III.6)	(à gauche) Structure de bandes électronique du graphène, (à droite) schéma des liaisons σ dans le plan et des orbitales π perpendiculaires au plan des feuilles de graphène	36
Figure (III.7)	(a) Le spectre d'énergie des électrons du graphène dans l'approximation du plus proche voisin et (b) zone de Brillouin	37

	hexagonale du réseau en nid d'abeille, montrant des bandes électroniques coniques qui se croisent.	
Figure (III.8)	Trois catégories de graphène bicouche : (a) empilé en AA, (b) empilé en AB et (c) torsadé. BLG	38
Figure (III.9)	Structure cristalline du nitrure de bore hexagonal et du graphite de carbone.	39
Figure (III.10)	Propriété orbitale et structure électronique du h-BN	40
Figure (III.11)	Illustration des surfaces à faible indice pour (a) les cubes (001), (110) et (111) et (b) les hexagones (0001), (1010) et (1120) hexagonales (0001), (10 $\bar{1}$ 0) et (11 $\bar{2}$ 0)	43
Figure (III.12)	Similitudes et différences entre les structures à empilement étroit : (gauche) FCC et (droite) HCP	45
Figure (IV.1)	La structure cristalline de Gallium-Nitride GaN : (a) à trois dimensions (3D). (b) La configuration tétraédrique.	54
Figure (IV.2)	La structure cristalline de Gallium-Nitride GaN : à deux dimensions (2D).	55
Figure (IV.3)	La variation de l'énergie en fonction du volume du composé GaN(3D) calculée par GGA et LDA.	57
Figure (IV.4)	La variation de l'énergie en fonction du volume du composé GaN (2D) calculée par GGA et LDA.	58
Figures (IV.5)	Représentation graphique de la première zone de <i>Brillouin</i> de Gallium-nitride GaN.	61
Figures (IV.6)	La structure de bandes de GaN(3D) en utilisant les trois approximations GGA LDA et EV-GGA.	62
Figure (IV.7)	La structure de bandes de GaN (2D) en utilisant les deux approximations GGA et LDA.	64
Figure (IV.8)	La densité d'états électroniques de GaN(3D) calculée par LDA, GGA et EV-GGA.	66
Figure (IV.9)	La densité d'états électroniques de GaN(2D) calculée par LDA et GGA.	68

Introduction générale

Introduction générale :

Huit ans se sont écoulés depuis la première caractérisation électrique du graphène, un matériau constitué d'une seule couche d'atomes de carbone à liaison sp^2 disposés dans un réseau en nid d'abeille [1-2]. Considéré comme un objectif impossible pendant de nombreuses décennies, son isolement réussi en 2004 a non seulement conduit à des recherches intensives de la part de physiciens et de chimistes, mais a également inspiré un regain d'intérêt pour l'électronique à base de carbone de la part des ingénieurs d'appareils et des concepteurs de circuits du monde entier [3-4]. Des progrès rapides ont été réalisés ces dernières années pour développer des applications pour le graphène. De nombreuses idées intéressantes ont été démontrées en laboratoire et certains produits attrayants pourraient voir le jour à l'échelle industrielle dans les années à venir. Certaines des applications prometteuses incluent l'électronique [5-8], les capteurs avancés [9], les électrodes semi-transparentes [10], les commutateurs à faible puissance [11], les cellules solaires [12], l'énergie de la batterie stockage [13], et dispositifs plasmoniques accordables pour les applications THz et infrarouge moyen [14-15].

En plus de ses propriétés uniques, il convient de souligner que le graphène n'est que le début d'une famille émergente de matériaux 2D. Matériaux 2D, tels que le bisulfure de molybdène (MoS_2) [16] et d'autres membres de la famille des dichalcogénures de métaux de transition, représentent la mise à l'échelle ultime de la dimension du matériau dans la direction verticale. Dispositifs nano-électroniques construits en matériaux 2D offrent de nombreux avantages pour une miniaturisation plus poussée selon la loi de Moore [17-18] et en tant qu'option de grande mobilité dans le domaine en plein essor de l'électronique à grande surface et à faible coût qui est actuellement dominé par le silicium amorphe à faible mobilité [19] et les semi-conducteurs organiques [20-21]. Le MoS_2 , un matériau semi-conducteur 2D, est également intéressant en tant que complément potentiel du graphène [5,6, 22] pour construire des circuits numériques sur des substrats flexibles et transparents, tandis que sa bande interdite de 1,8 eV mesurée par photoluminescence [23-24], et potentiellement même une bande interdite électronique plus élevée en raison de l'énergie excitonique, est avantageuse par rapport au silicium pour supprimer la source-à-effet tunnel de drain à la limite d'échelle des transistors [25].

Le nitrure de gallium (GaN) est un semi-conducteur à large bande interdite dont la structure cristalline stable est la wurtzite hexagonale. Le tableau 1 rapporte les propriétés physiques et électroniques pertinentes du GaN, comparées à celles du silicium (Si) et du carbure de silicium (4H-SiC). La large bande interdite (3,4 eV) se traduit par une concentration de porteurs intrinsèque ni inférieure de plusieurs ordres de grandeur à celle de Si. Par conséquent, les dispositifs GaN devraient avoir un courant de fuite plus faible et donner la possibilité de fonctionner à des

températures plus élevées. D'autres aspects clés sont le champ électrique critique élevé et la rupture maximale atteignable du matériau, faisant du GaN un semi-conducteur prometteur pour les dispositifs haute tension. En particulier, la possibilité d'obtenir une tension de claquage ciblée (VB) avec des couches de dérive plus fines entraîne une réduction significative de la résistance spécifique à l'état passant (RON) par rapport aux dispositifs Si. De cette manière, des dispositifs plus compacts peuvent être fabriqués, minimisant à la fois les pertes statiques et dynamiques. Enfin, les dispositifs GaN devraient avoir une capacité de commutation à haute fréquence, en raison de la vitesse élevée des électrons de saturation du matériau. Le fonctionnement à haute fréquence est également possible grâce à la présence du gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) dans les hétérostructures AlGaN/GaN [26], dont les valeurs de mobilité dépassent généralement $1000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$.

Property	SiC	4H-SiC	GaN
bande interdite (eV)	1.12	3.2	3.4
Champ critique E_{cr} (MV/cm)	0.25	3	4
Constante diélectrique ϵ	11.8	9.7	9.5
Vitesse de saturation v_s (10^7 cm/s)	1	2	3
Mobilité électronique μ (cm^2/Vs)	1350	800	1300* (* 2DEG)
Concentration de porteurs intrinsèques n_i (cm^{-3}) at 300 K	10^{10}	10^{-7}	10^{-10}
Conductivité thermique k (W/cmK)	1.5	4.9	1.3

Tableau 1 : Propriétés physiques et électroniques pertinentes du nitrure de gallium (GaN) par rapport au silicium (Si) et au carbure de silicium (4H-SiC) [27, 28].

La puissance du calcul ab initio découle du formalisme de la théorie fonctionnelle de la densité DFT et de ses deux approximations pour les énergies d'échange et de corrélation : l'approximation de densité locale LDA et l'approximation du gradient GGA généralisé. La DFT est basée sur le théorème de Hohenberg et Kohn (1964), qui est basé sur la considération que l'énergie totale du système est une fonction de la densité électronique.

La méthode FP-LAPW est l'une des plus précises et est actuellement utilisée pour calculer la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie fonctionnelle de la densité DFT [29]. Nous utilisons le code WIEN2K qui implémente la méthode FP-LAPW. En raison de l'introduction progressive de diverses approximations quantiques dans le code, le nombre d'utilisateurs du code augmente dans le monde entier. Cette méthode est largement utilisée pour modéliser les propriétés structurales et électroniques.

Ce travail que nous présentons est composé de quatre chapitres, l'organisation de ces chapitres est comme suit :

Dans le premier chapitre, tout d'abord, nous présentons un aperçu de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), qui est à la base des méthodes modernes de calcul de structures électroniques. Puis, nous décrivons les équations de Kohn-Sham qui donnent une nouvelle forme de l'équation de Schrödinger. Ainsi, nous présentons les différentes approximations associées à cette théorie seront exposées à savoir : Les approximations de la densité locale LDA et l'approximation du gradient généralisé (GGA) avec l'approximation modifiée de Becke-Johnson mBJ. Dans le deuxième chapitre, nous allons rappeler le principe de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW), et nous terminons par la représentation de code Wien2k.

Le troisième chapitre contient des informations sur notre composé et ses applications les plus connus. Le quatrième chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats obtenus concernant les propriétés structurales, et électroniques du composé GaN à trois dimension GaN (3D) et à deux dimension GaN (2D). Finalement, nous terminons par une conclusion générale qui regroupe tous les principaux résultats de ce travail.

Références :

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* 438 (2005)197.
- [2] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim, *Nature* 438 (2005) 201.
- [3] A. H. Castro Neto, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* 81(2009)109.
- [4] T. Palacios, A. Hsu, and Han Wang, *IEEE Communications Magazine* 48 (2010)122.
- [5] H. Wang, D. Nezich, J. Kong, and T. Palacios, *IEEE Electron Device Letters* 30 (2009)547.
- [6] H. Wang, A. Hsu, J. Wu, J. Kong, and T. Palacios, *IEEE Electron Device Letters* 31 (2010) 906.
- [7] M. Dragoman, D. Neculoiu, D. Dragoman, G. Deligeorgis, G. Konstantinidis, A. Cismaru, F. Coccetti, and R. Plana, *IEEE Microwave Magazine* 11(2010)81.
- [8] H. Wang. A. L. Hsu, and T. Palacios, *IEEE Microwave Magazine* 13(2012)114.
- [9] P. K. Ang. W. Chen, A. T. S. Wee, and K. P. Loh, *Journal of the American Chemical Society*, 130 (2008) 14392.
- [10] G. Eda, G. Fanchini, and M. Chhowalla, *Nat Nano* 3(2008)207.
- [11] K. M. Milaninia, M. A. Baldo, A. Reina, and J. Kong, *Applied Physics Letters* 95(2009)183105
- [12] X. Wang. L. Zhi, and K. Mullen, *Nano Letters* 8(2008)323.
- [13] E. Yoo, J. Kim, E. Hosono, H. Zhou, T. Kudo, and I. Honma, *Nano Letters* 8(2008) 2277.
- [14] L. Ju, B. Geng, J. Horng, C. Girit, M. Martin, Z. Hao, H. A. Bechtel, X. Liang, A. Zettl, Y. R. Shen, and F. Wang, *Nature Nanotechnology* 6(2011) 630.
- [15] H. Yan, X. Li, B. Chandra, G. Tulevski, Y. Wu, M. Freitag, W. Zhu, P. Avouris, and F. Xia, *Nature Nanotechnology* 7(2012) 330.
- [16] S. Helveg, J. V. Lauritsen, E. Lægsgaard, I. Stensgaard, J. K. Nørskov, B. S. Clausen, H. Topsøe, and F. Besenbacher, *Phys. Rev. Lett.*, 84(2000) 951.
- [17] L. Liu. S. B. Kumar, Y. Ouyang, and J. Guo, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 58 (2011) 3042.
- [18] Y. Yoon. K. Ganapathi, and S. Salahuddin, *Nano Lett.* 11(2011) 3768.

- [19] R. A. Street. *Advanced Materials*, 21(2009)2007.
- [20] S. R. Forrest. *Nature*, vol. 428 (2004)911.
- [21] C. D. Dimitrakopoulos and D. J. Masearo, *IBM Journal of Research and Development*, 45(2001)11.
- [22] Y .M . Lin. A. Valdes-Garcia. S. J. Han, D. B. Farmer, I. Meric, Y. Sun. Y. Wu. C. Dimitrakopoulos, A. Grill, P. Avouris, and K. A. Jenkins, *Science*, 332(2011)1294.
- [23] K. F. Mak, C. Lee. J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.*, 105(2010) 136805.
- [24] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li. J. Kim, C.-Y. Chim, G. Galli, and F. Wang, *Nano Lett.*, 10(2010)1271.
- [25] J. Wang and M. Lundstrom, in *Electron Devices Meeting, 2002. IEDM '02. International*, (2002) 707.
- [26] Ambacher O. Smart J. Shealy J.R., Weimann N.G. Chu K. Murphy M. Schaff W.J. Eastman L.F., Dimitrov R. Wittmer L. et al. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures. *J. Appl. Phys.* 85 (1999)3222.
- [27] Roccaforte F., Giannazzo F., Iucolano F., Eriksson J., Weng M.H., Raineri V. Surface and interface issues in wide band gap semiconductor electronics. *Appl. Surf. Sci.* 256(2010)5727.
- [28] Shur M., Rumyanstev S., Levinshtein M. *SiC Materials and Devices*. World Scientific; Singapore: (2006).
- [29] J. R. Stephens. *The B2 aluminides as alternative materials in*, Boston. M. R. S. Materials Research Society Symposium Proceedings, (1984).

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

I.1. Introduction :

DFT c'est l'une des méthodes les plus importantes utilisées en physique, par laquelle les propriétés d'un système multi-particules peuvent être déterminées (énergie totale du système, densité électronique des orbitales, coefficients optiques de la physique et de la matière). C'est l'une des méthodes les plus largement utilisées en informatique quantique en raison de son application potentielle à divers systèmes à coût faible et à grande vitesse.

La manière traditionnelle de le résoudre dépend de l'équation de Schrödinger pour les systèmes constitués de nombreux atomes, en particulier la théorie de Hartree-Fock et la méthode de la fonction d'onde variable $3N$ qui en est dérivée (où N est le nombre total de particules dans le système) L'équation à résoudre Très complexe et demande beaucoup d'efforts. Le principe DFT est une reformulation d'un problème quantique et le transforme d'un problème de système multi-particules en un problème à une seule particule [1].

I.2. Équation de Schrödinger :

En mécanique quantique, l'équation de Schrödinger est une équation aux dérivées partielles qui décrit comment l'état quantique d'un système physique change avec le temps.

Cette équation décrit les états de systèmes quantiques dépendant du temps. Cette équation revêt une importance particulière en mécanique quantique, car elle est considérée comme la deuxième loi du mouvement de Newton, fondamentale en physique classique.[2]

Qui s'écrit sous la forme :

$$\mathbf{H}\Psi = \mathbf{E}\Psi$$

\mathbf{E} : L'énergie totale du système.

Ψ : Fonction d'onde.

\mathbf{H} : Hamiltonien.

L'hamiltonien exact du cristal résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : soit répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons, noyaux,...etc.) [3]

$$H_T = T_n + T_e + V_{n-e} + V_{e-e} + V_{n-n} \quad (\mathbf{I.1})$$

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{m_e} : \text{L'énergie cinétique des électrons} \quad (\mathbf{I.2})$$

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{M_n} : \text{L'énergie cinétique des noyaux} \quad (\mathbf{I.3})$$

$$V_{e-e} = \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right|} : \text{L'énergie d'interaction des électrons entre eux} \quad (\mathbf{I.4})$$

$$V_{n-e} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} : \text{Interaction attractive noyaux électron} \quad (\text{I.5})$$

e : la charge de l'électron.

m : la masse de l'électron.

M : la masse de noyau.

r_i, r_j : Définissant les positions des électrons (i) et (j).

R_i, R_j : Définissant les positions des noyaux (i) et (j).

Donc :

$$H_T = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{R_i}^2}{M_e} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla_{r_i}^2}{M_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|R_i - r_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|r_i - r_j|} \quad (\text{I.6})$$

I.3. Approximation de Born-Oppenheimer :

Born-oppenheimer simplifie l'équation de Schrödinger. Parce que le noyau est très lourd par rapport à l'électron, la masse du noyau est supérieure à celle de l'électron, environ (1836). Par rapport aux électrons, on peut ignorer le mouvement du noyau et ne considérer que le mouvement des électrons [4].

Découpez le mouvement nucléaire et électronique afin que la séparation des variables électroniques et nucléaires puisse être envisagée. Dans ce cas, la fonction d'onde globale du système peut être écrite comme le produit d'une fonction d'onde décrivant le noyau $\phi(R)$ et une autre fonction d'onde décrivant l'électron $\phi(r)$, et ne dépend que paramétriquement de la position de l'ion (c'est-à-dire ne dépend que de la position instantanée des noyaux, pas sur leur dynamique). On a donc une fonction d'onde totale [5] décrivant la molécule qui s'écrit comme :

$$\Psi_{\text{sys}}(r, R) = \chi(R)\Phi(r, R) \quad (\text{I.7})$$

Où $\chi(R)$ est la fonction d'onde des noyaux et $\Phi(r, R)$ est la fonction d'onde des électrons avec des noyaux fixes dans la position R . La position des noyaux devient un paramètre et l'équation de Schrödinger est résolue pour un ensemble de positions fixes des noyaux.

I.4. Approximation de Hartree-Fock :

L'approximation de Hartree-Fock [6] est utilisée pour résoudre l'équation de Schrödinger pour des atomes, molécules, nanostructures et solides. Après suppression d'une interaction entre un noyau et un autre noyau, car elle est lourde, elle n'affecte pas l'équation, est adopté en approximation de Hartree sur Le potentiel électronique et l'interaction attractive entre l'électron et les noyaux.

L'équation de Schrödinger à N électrons se ramène à N équations de Schrödinger à un électron :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = E \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.8})$$

$V_{ext}(\vec{r})$: L'interaction attractive entre l'électron et les noyaux.

$V_H(\vec{r})$: Le potentiel d'Hartree.

La méthode suppose habituellement que la fonction d'onde du système à plusieurs corps peut être approximativement écrit sous la forme d'un déterminant de Slater lorsque les particules sont des fermions, ou bien par un permanent pour le cas de bosons.

Fock, a proposé d'appliquer le principe d'exclusion de Pauli, donc la fonction d'onde électronique s'écrit sous la forme d'un déterminant de Slater [7].

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Psi_1(\vec{r}_1) & \Psi_2(\vec{r}_1) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_1) \\ \Psi_1(\vec{r}_2) & \Psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Psi_1(\vec{r}_N) & \Psi_2(\vec{r}_N) & \dots & \Psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix} \quad (\text{I.9})$$

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$: Facteur de normalisation.

On obtient ainsi les équations de Hartree-Fock :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \vec{\nabla}^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_X(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.10})$$

I.5. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :

La DFT est issue d'un modèle développé par Thomas [8] et Fermi [9] à la fin des années 1920, mais il n'a été possible de l'utiliser qu'au milieu des années 1960. C'est l'une des méthodes les plus importantes en physique théorique, à travers laquelle nous pouvons déterminer les propriétés des systèmes à plusieurs particules, et c'est l'une des méthodes les plus couramment utilisées en informatique quantique car elle peut être appliquée à un coût faible à diverses vitesses du système.

L'objectif principal de la théorie est de remplacer la fonction d'onde par une fonction de densité de seulement trois variables et d'en faire une règle arithmétique. Le principe DFT consiste à reformuler un problème quantique d'un problème de système multi-particules à un problème à une seule particule.

I.5.1. Théorèmes de Hohenberg et Kohn :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) repose sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn. [10] :

- 1- Le premier théorème stipule qu'à une densité électronique donnée correspond une fonction d'onde unique.

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

$$E[\rho(\vec{r})] = F[\rho(\vec{r})] + \int \rho(\vec{r}) V_{ext}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (\text{I.11})$$

Où

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] = T_e[\rho(\vec{r})] + V_{e-e}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.12})$$

$F(\rho)$: Une fonction universelle de la densité électronique ρ .

T_e : L'énergie cinétique

V_{e-e} : L'énergie d'interaction électron-électron

- 2- Le second théorème postule que l'énergie, fonctionnelle de la densité électronique, obéit au principe variationnel.

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{I.13})$$

Les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn, on peut connaître totalement l'état d'un système électronique en déterminant sa densité électronique et on peut obtenir la densité électronique de l'état fondamental en minimisant l'énergie du système.

I.5.2. Les équations de Kohn et Sham :

L'équation de Kohn–Sham [11] décrit le mouvement d'une particule fictive (habituellement un électron, mais ça peut également être plus généralement un fermion) soumis à un potentiel effectif local (également fictif), que l'on désigne habituellement par $V(\mathbf{r})$ ou V_{eff} .

Toutes les interactions à N corps étant contenues dans une fonctionnelle d'échange et de corrélation dépendant de la densité électronique donnée par :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\Psi_i(\vec{r})|^2 \quad (\text{I.14})$$

La fonctionnelle d'énergie s'écrit sous la forme :

$$E_{V_{ext}}[\rho(\vec{r})] = T_0[\rho(\vec{r})] + V_H[\rho(\vec{r})] + V_{XC}[\rho(\vec{r})] + V_{ext}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.15})$$

T_0 : L'énergie cinétique du système sans interaction.

V_H : Désigne le terme de Hartree.

V_{XC} : Le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation.

V_{ext} : inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

L'équation de Kohn–Sham désigne une forme de l'équation de Schrödinger associée à un système mono-électronique fictif ayant la même densité électronique qu'un système réel d'électrons en interactions donné.

Des états des électrons libres sont décrits par Hartree et l'énergie cinétique. La différence entre l'énergie cinétique réelle et l'énergie des électrons non réactifs et la différence entre l'énergie d'interaction réelle et l'énergie Hartree sont prises en compte dans l'énergie d'échange et de corrélation

L'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_H(\rho(\vec{r})) + V_{XC}(\rho(\vec{r})) + V_{ext}(\rho(\vec{r})) \right] \Psi_i(\vec{r}) = E_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.16})$$

$$V_{eff}(\vec{r}) = V_H(\vec{r}) + V_{ext}(\vec{r}) + V_{XC}(\vec{r}) \quad (\text{I.17})$$

Alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] \Psi_i(\vec{r}) = E_i \Psi_i(\vec{r}) \quad (\text{I.18})$$

II.5.3. L'approximation de la densité locale (LDA) :

L'approche de la densité locale [12,13] est fondée sur le modèle du gaz uniforme d'électrons et constitue l'approche la plus simple pour exprimer l'énergie. L'énergie d'échange et de corrélation dépend uniquement de la densité électronique en un point r . on considère que la densité varie très lentement.

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \quad (\text{I.19})$$

$\varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})]$: représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité uniforme ρ .

$$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})] + \varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})] \quad (\text{I.20})$$

$\varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})]$: Fonctionnelle d'échange

$\varepsilon_c^{LDA}[\rho(\vec{r})]$: Fonctionnelle de corrélation

$$\varepsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -\frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \rho(\vec{r}) \right)^{\frac{1}{3}} \quad (\text{I.21})$$

II.5.4. L'approximation du gradient généralisé (GGA) :

L'approximation du gradient généralisé a été introduite pour améliorer la précision de résultats de la LDA. Elle est développée de manière à ce que cette variance de densité soit prise en compte en exprimant les énergies d'échange et de corrélation en fonction de la densité mais aussi de son gradient (i.e. sa dérivée première) [14]. En général, l'énergie de corrélation d'échange Elle s'écrit comme suit :

$$E_{Xc}^{GGA}(p) = \iint [p(\vec{r}), \nabla p(\vec{r})] d\tau^3 \quad (\text{I.22})$$

II.5.5. Le cycle auto-cohérent :

L'équation (I.18) doit être résolue d'une façon itérative dans une procédure de cycle auto-cohérent illustré par l'organigramme de la Figure (I.1). La procédure débute par la définition d'une densité de départ ρ_{in} tel que $\rho_{in} = \rho_{cristal} = \sum \rho_{atomiques}$ Pour diagonaliser l'équation séculaire :

$$(H - E_i S) C_i = 0 \quad (\text{I.23})$$

H : la matrice hamiltonienne.

S : la matrice de recouvrement.

La nouvelle densité de charge ρ_{out} est construite avec les vecteurs propres de l'équation

$$\rho_{out}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i^2(\vec{r})| \quad (\text{I.24})$$

Si l'on n'obtient pas la convergence des calculs, on mélange les densités de charges ρ_{in} et ρ_{out}

$$\rho_{in}^{i+1} = (1 + \alpha) \rho_{in}^i + \alpha \rho_{out}^i \quad (\text{I.25})$$

i : représente la i^{eme} itération

α : paramètre de mélange

La procédure itérative est poursuivie jusqu'à ce que la convergence soit réalisée (teste de convergence sur l'énergie et/ou les charges).

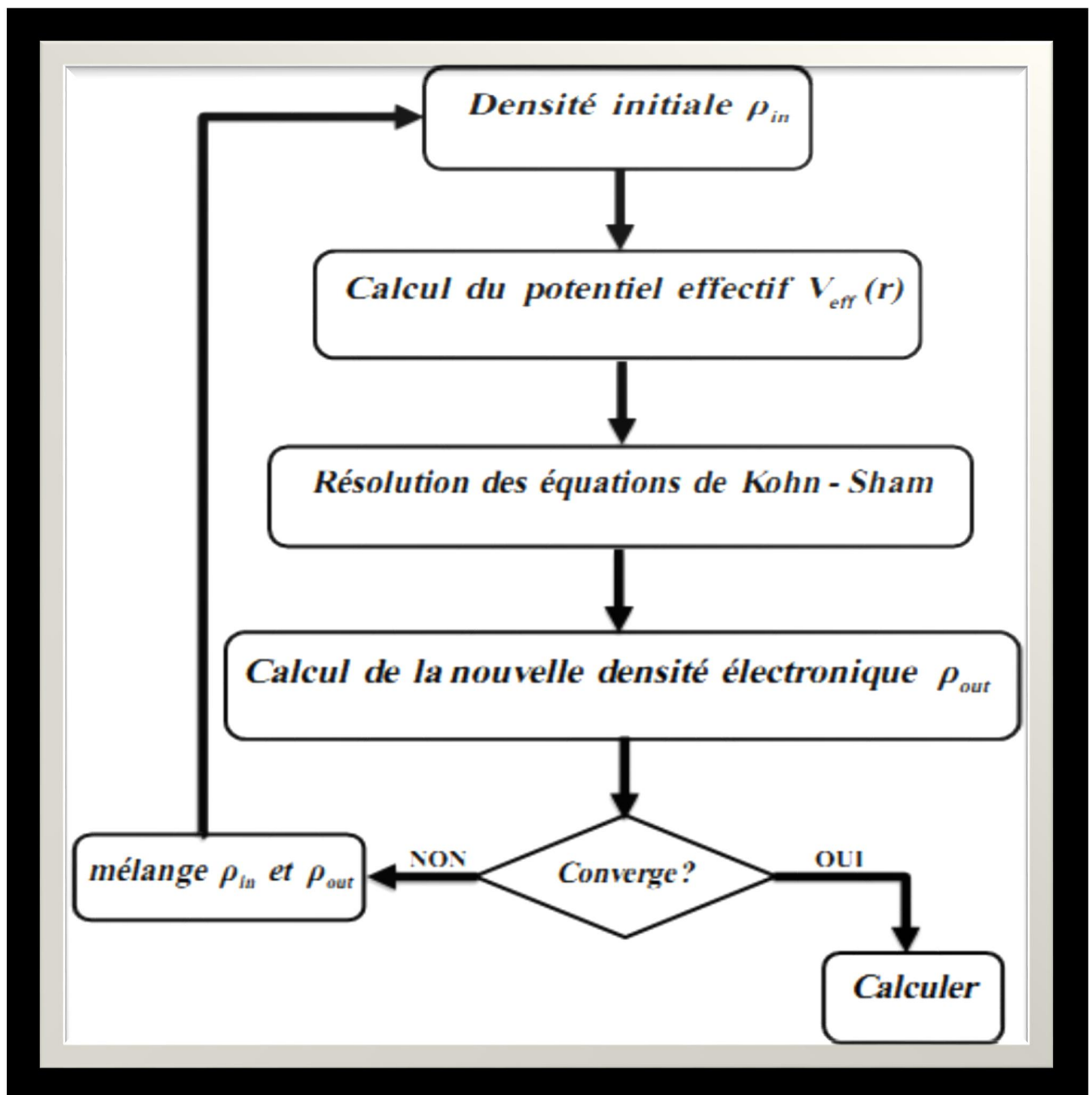


Figure (I-1) : Représentation du cycle auto-cohérent de résolution des équations de Kohn-Sham.

Références :

- [1] P. Hohenberg, W.Kohn, Phys.Rev.B 864 (1964)136
- [2] C. Kittel. 5e édition Dunod. (1996).
- [3] E. Schrödinger. Ann. Phys. 79(1926) 489. ; E. Schrödinger, Ann. Phys. 79 (1926) 361.
- [4] M. Born. J. R. Oppenheimer, Ann. Phys. 87 (1927)457.
- [5] Cohen. Tannoudji, Diu et Laloë, *Mécanique Quantique*, tomes 1 et 2, Hermann
- [6] V. Fock. Z. Phys. 61(1930) 126; 62 (1930) 795.
- [7] J. C. Slater. Phys. Rev. 81(1951)385.
- [8] E. Fermi. Z. Phys., 48(1928)73.
- [9] P. A. M. Dirac, Proc Cambridge Phil. Roy.Soc. 26 (1930) 376.
- [10] P. Hohenberg, W. Kohn: Phys. Rev. B 864(1964)136.
- [11] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. A 1133(1965)140.
- [12] K. Schwarz and P. Blaha : Lecture Notes in Chemistry 67(1996)139.
- [13] R.M. Dreizler and J. da Provincia, Density Functional Methods in Physics (1985).
- [14] J. A .White and D. M. Bird. Pys. Rev. B 50(1994)4957 .

Chapitre II

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

II.1. Introduction :

La théorie de la fonctionnelle de la densité est pour le traitement problème à plusieurs corps. Il est important et utile le choix convenable d'une base de fonctions d'onde pour la résolution des équations de Kohn-Sham. LMTO (Linear Muffin-tin Type Orbital), PW/PP (Plane Waves / Pseudo Potential), et FP-LAPW (Full-Potential Linearized Augmented Plane Waves). Chacun a ses particularités respectives se situent au niveau de la représentation du potentiel et des orbitales mono électroniques de Kohn-Sham.

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

Andersen développé la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) [1], Il s'agit essentiellement d'une modification de la méthode des ondes planes augmentées (APW) développée par Slater, d'abord nous allons revoir la méthode APW.

Slater [2] proposa comme base les fonctions d'ondes planes augmentées (APW) pour résoudre l'équation de Schrödinger à un seul électron, La méthode APW dépend sur l'approximation Muffin-tin, pour décrire le potentiel cristallin, la cellule unitaire est divisée en deux régions Illustré sur la Figure (II.2) :

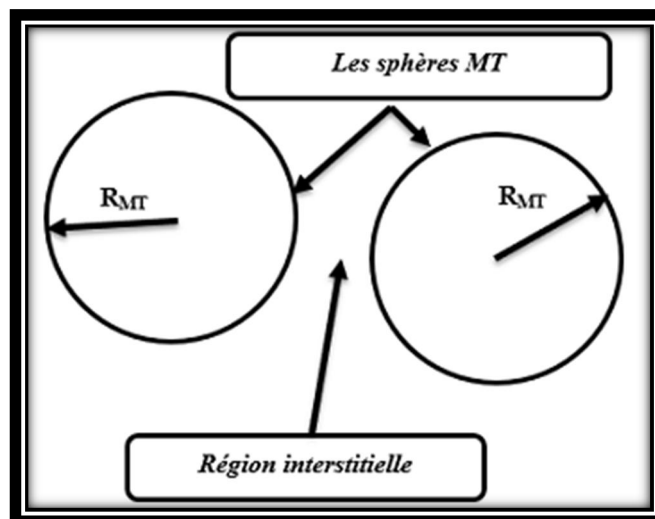


Figure (II.1) : partition de l'espace de la méthode APW.

Alors la fonction d'onde $\Phi(\vec{r})$ est de la forme :

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

R_{MT} : Le rayon de la sphère.

Ω : Le volume de la cellule unitaire.

A_{lm}, C_G : Les coefficients de développement.

Y_{lm} : sont les harmoniques sphériques.

$U_l(r)$: Est la solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale est donnée par :

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

E_l : L'énergie de linéarisation.

$V(r)$: Le potentiel *Muffin-Tin*. Les fonctions radiales définies par l'équation dans la sphère [3].

Cette orthogonalité disparaît en limite de sphère comme le montre l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_2 - E_1) r U_1 U_2 = U_2 \frac{d^2 r U_1}{dr^2} - U_1 \frac{d^2 r U_2}{dr^2} \quad (\text{II.3})$$

Et U_1, U_2 : sont des solutions radiales pour les énergies E_1 et E_2 respectivement

Slater a fait un choix spécial pour la fonction d'onde, et il a montré qu'une onde plane est une solution de l'équation de Schrödinger à un potentiel constant. Les fonctions radiales multipliées par les harmoniques sphériques sont la solution dans le cas du potentiel sphérique. Donc, il prouve qu'est égale à la valeur propre E . Pour garantir la continuité de la fonction $\phi(r)$ à la surface de la sphère (MT), la connexion de l'onde plane dans la région interstitielle se raccorde avec les fonctions d'ondes à l'intérieur des sphères muffin-tin. Les coefficients A_{lm} doivent être basés sur les coefficients C_G des ondes planes existantes dans la région d'interstitielle.

$$A_{lm} = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{\frac{1}{2}} U_l(R_\alpha)} \sum C_G j_l(|K+g|R_\alpha) Y_{lm}^*(K+G) \quad (\text{II.4})$$

Alors :

j_l : La fonction de Bessel.

R_{MT} : est le rayon de la sphère.

A_{lm} Déterminés par les coefficients C_G des ondes planes et les paramètres de l'énergie E_l , ces derniers sont variationnels dans la méthode APW. Les fonctions individuelles qui sont représentées par l'indice l et qui consistent en des ondes planes dans la région interstitielle et en fonctions radiales dans les sphères sont appelées ondes planes augmentées (APW).

La méthode ainsi construite (APW) souffre de quelques difficultés liées à la fonction $U_l(R_\alpha)$ apparaissant au dénominateur de l'équation (II.4). En effet, selon la valeur du paramètre E_l , à la surface de la sphère MT, la valeur de $U_l(R_\alpha)$ peut devenir nulle, entraînant une séparation de la fonction radiale de la fonction d'onde plane. Pour pallier ce problème, certaines modifications ont été apportées à la méthode (APW), en particulier les modifications proposées par Koelling [4] et Andersen [5]. La modification consiste à représenter la fonction d'onde à l'intérieur de la sphère par une combinaison linéaire de la fonction radiale $U_l(r)$ et de sa dérivée par rapport à l'énergie $\dot{U}_l(r)$, aboutissant à la méthode FP-LAPW.

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

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) [6], est pour résoudre les problèmes rencontrés dans la méthode APW et la modification des fonctions de base, Anderson [5] a utilisé des combinaisons linéaires des fonctions radiales et leurs dérivées par rapport à l'énergie à l'intérieur des sphères.

Les fonctions U_l sont définies comme dans la méthode APW, la fonction \dot{U}_l doit satisfaire l'équation suivante :

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

Les fonctions radiales U_l et \dot{U}_l assurent à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes de l'extérieur. Les fonctions d'ondes définies comme des ondes planes augmentées linéairement (LAPW) écrivent :

$$\Phi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r \succ R_\alpha \\ \sum_{lm} \left[A_{lm} U_l(r) + B_{lm} \dot{U}_l(r) \right] Y_{lm}(r) & r \prec R_\alpha \end{cases} \quad (\text{II.6})$$

Les coefficients B_{lm} compatible avec la fonction \dot{U}_l ont de même nature que les coefficients A_{lm} . La fonction (FP-LAPW) sont des ondes planes uniquement dans les zones interstitielles comme dans la méthode APW. Les fonctions radiales peuvent développées voisinage de E_l [7] comme suit :

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l) \dot{U}_l(E_l, r) + 0 \left((E - E_l)^2 \right) \quad (\text{II.7})$$

$0 \left((E - E_l)^2 \right)$: Erreur quadratique en énergie.

La méthode FP-LAPW assure la continuité de la fonction d'onde à la surface de la sphère MT.

Avec une erreur sur les fonctions d'onde de l'ordre $0(E - E_l)^2$ une autre sur les énergies de bandes de l'ordre $0(E - E_l)^4$ [8]. Nous trouvons les bandes de valence dans une grande région d'énergie E_l par un seul calcul. Dans le cas l'impossibilité, on divise la fenêtre énergétique en deux parties.

II.4. Les avantages de la méthode FP-LAPW par rapport à la méthode APW :

- ✓ La méthode LAPW les énergies des bandes de aux points k sont obtenues avec une seule diagonalisation. D'autre part nous trouvons une méthode APW nous calculons l'énergie pour chaque bande.
- ✓ Peu de temps pour faire le calcul car les énergies des bandes à un point donné (k) sont obtenues avec une seule diagonalisation, pas le cas de la méthode APW.
- ✓ La convergence dans la méthode APW est lente alors que La convergence est devenue plus rapide dans LAPW.
- ✓ Le problème de l'asymptote dans LAPW éliminé par l'introduction de la dérivée de la fonction par rapport à l'énergie qui garantit le non découplément des ondes planes avec les fonctions radiales, en comparaison avec la méthode APW.

II.4.1. Les énergies de linéarisation E_i :

Pour de meilleurs résultats, le choix du paramètre d'énergie soit au centre de la bande du spectre d'énergie, les erreurs trouvées dans la fonction d'onde ainsi dans les bandes d'énergie sont de l'ordre $0(E - E)^2$ et $0(E - E_l)^4$ respectivement. Le paramètre E_i est égal à la valeur E nous nous trouvons dans la méthode des ondes planes augmentées (APW).

Le calcul de l'énergie totale d'un système pour plusieurs valeurs du paramètre d'énergie E_i en choisissant la valeur de l'énergie la plus basse, permettent d'optimiser le choix de notre paramètre.

Les fonctions $U_l(r)Y_{lm}(r)$ et $\dot{U}_l(r)Y_{lm}(r)$ sont orthogonales à n'importe quel état de cœur strictement limité à la sphère MT. La condition n'est satisfaite dans le cas où il ne a pas d'états de cœur avec la même valeur l , prend le risque de confondre les états de semi-cœur avec les états de valence, le non orthogonalité de quelques états de cœur dans la méthode FP-LAPW le choix délicat de l'énergie E_l . Dans ce cas, on ne peut pas effectuer le calcul sans modifier E_l .

La solution dans de tels cas est d'utiliser un développement en orbitales locales. L'option n'est pas disponible dans tous les programmes et choisir un rayon de la sphère le plus grand possible. Il convient de noter que divers doivent être définis indépendamment les uns des autres. Les bandes d'énergie ont des orbites différentes. Pour un calcul précis de la structure électronique, les énergies doivent être choisies aussi proches que possible des bandes d'énergie, si les bandes d'énergie ont le même l [9].

II.4.2. Détermination des fonctions de base :

La construction des fonctions de base de cette méthode se fait en deux étapes essentielles :

1-La détermination des fonctions radiales $U_l(r)$ et $\dot{U}_l(r)$.

2- La détermination des coefficients A_{lm} et B_{lm} qui satisfont aux conditions aux limites.

Les conditions aux limites fournissent un moyen simple pour la détermination les moments angulaires l_{\max} et pour la représentation du coefficient G_{\max} des ondes planes dans la sphère MT pour un rayon R_{MT} , tels que : $R_{MT} * G_{\max} = l_{\max}$, ce qui est réalisé en pratique [8].

II.5. Amélioration de la méthode (FP-LAPW) :

L'énergie de linéarisation est très importante dans la méthode (FP-LAPW). Car, autour de E_l , on peut calculer les énergies de bande avec une précision tout à fait acceptable. Cependant, dans l'état semi-cœur, il est utile d'utiliser l'une des deux approches suivantes : utiliser plusieurs fenêtres d'énergie ou étendre les orbitales locales.

II.5. 1. Les fenêtres d'énergies multiples :

La technique la plus utilisée pour traiter le problème du semi-cœur, diviser le spectre énergétique en fenêtres dont chacune correspond à une énergie E_l . La procédure de traitement est illustrée dans la Figure (II.2).

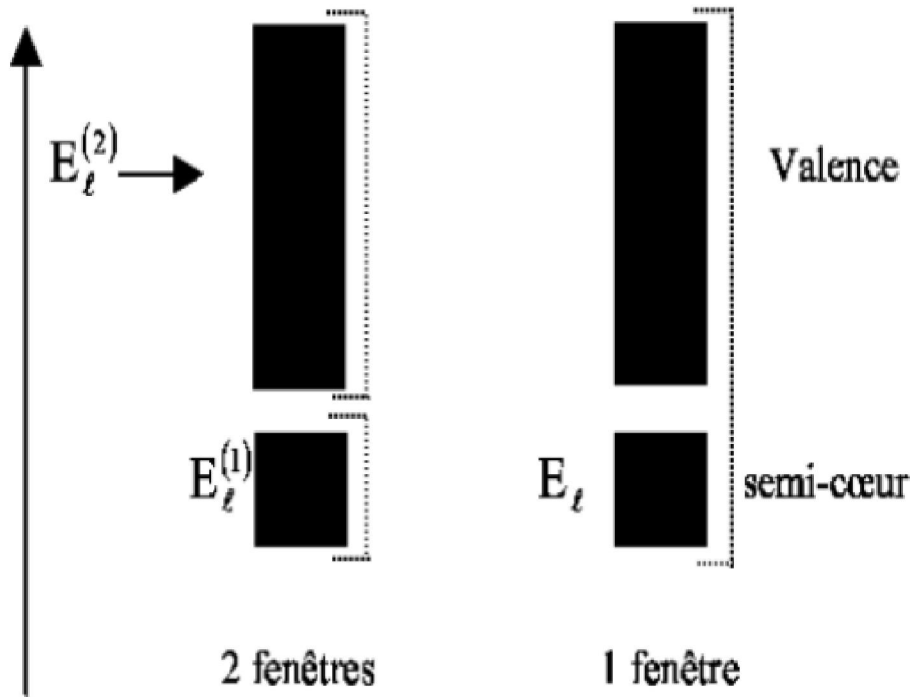


Figure II.2 : Les fenêtres d'énergie multiple.

II.5.2. La méthode LAPW+ LO :

Dans cette technique, tous les états énergétiques sont traités avec une fenêtre énergétique Tekeda [9], Petru [10], smrcka [11], Shaughnessy [12] et Singh [13] ont proposé des combinaisons linéaires de deux fonctions radiales correspondant à deux énergies différentes, et la dérivée par rapport à l'une des énergies donne A fonction de la méthode LAPW+LO.

La fonction propre à la forme suivante :

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{lm} \left[A_{lm} U_{lm}(r, E_{1,l}) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_{1,l}) + C_{lm} U_l(r, E_{2,l}) \right] Y_{lm}(r) \quad r < R \quad (\text{II.8})$$

Où les coefficients C_{lm} sont de la même nature que les coefficients A_{lm} et B_{lm} définis précédemment. Par ailleurs, cette modification diminue l'erreur commise dans le calcul des bandes de conduction et de valence.

II.5.3. La méthode APW+lo :

Le problème avec les méthodes APW est la dépendance énergétique de l'ensemble de fonctions de base. Cette dépendance a pu être éliminée dans la méthode LAPW+Lo, au prix d'un plus grand ensemble de fonctions de base. Plus récemment, Sjösted et al [14] ont proposé une méthode alternative appelée méthode APW+lo. Dans cette méthode, l'ensemble des fonctions de base sera

indépendant de l'énergie et aura toujours la même taille que la méthode APW. En ce sens, APW+lo combine les avantages de la méthode APW et de la méthode LAPW+LO. Le jeu de fonctions de base APW+lo contient deux types de fonctions d'onde.

Les premières sont des ondes planes augmentées APW, avec un ensemble d'énergies E_l .

$$\Phi(\vec{r}) = \begin{cases} \sum_{lm} A_{lm} U_{lm}(r) Y_{lm}(r) & r < R_{mt} \\ \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} C_{\vec{G}} e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}} & r > R_{mt} \end{cases} \quad (\text{II.9})$$

Le deuxième type de fonctions sont des orbitales locales (lo) différentes de celles de la méthode LAPW+LO, définies par :

$$\Phi(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & r > R_{mt} \\ \sum_{lm} \left[A_{lm} U_l(r, E_l) + B_{lm} \dot{U}_l(r, E_l) \right] Y_{lm}(r) & r < R_{mt} \end{cases} \quad (\text{II.10})$$

II.6. Le code Wien2k :

Wien2K n'est pas un logiciel libre, Ce programme permet de faire des calculs sur la structure électronique de la matière en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), le programme a été élaboré par Peter Balha et Karlheinz Schwartz [15].

Est constitué en différents programmes indépendants qui sont liés par le C-SHEL SCRIPT. La séquence et l'utilisation de divers programmes Wien2k sont illustrées dans le diagramme suivant (II. 3).

NN : C'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, ce qui aide à déterminer la valeur du rayon atomique d'une sphère.

LSTART : Un programme qui génère des densités atomiques et spécifie comment gérer différentes orbitales dans un calcul de structure de bande, comme les états de base avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY : Il a généré des opérations de symétrie de groupe d'espace, déterminé des groupes de points pour des positions atomiques individuelles, généré des expansions LM d'harmoniques de réseau et déterminé la matrice de région.

KGEN : Il génère une maille k dans la zone de *Brouillin*.

DSTART : Il génère la densité de départ du cycle SCF en superposant les densités atomiques générées dans LSTART. Une boucle auto-cohérente est alors initialisée et répétée jusqu'à ce que les critères de convergence soient vérifiés. Ce cycle comprend les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel pour 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 les densités d'entrée et de sortie.

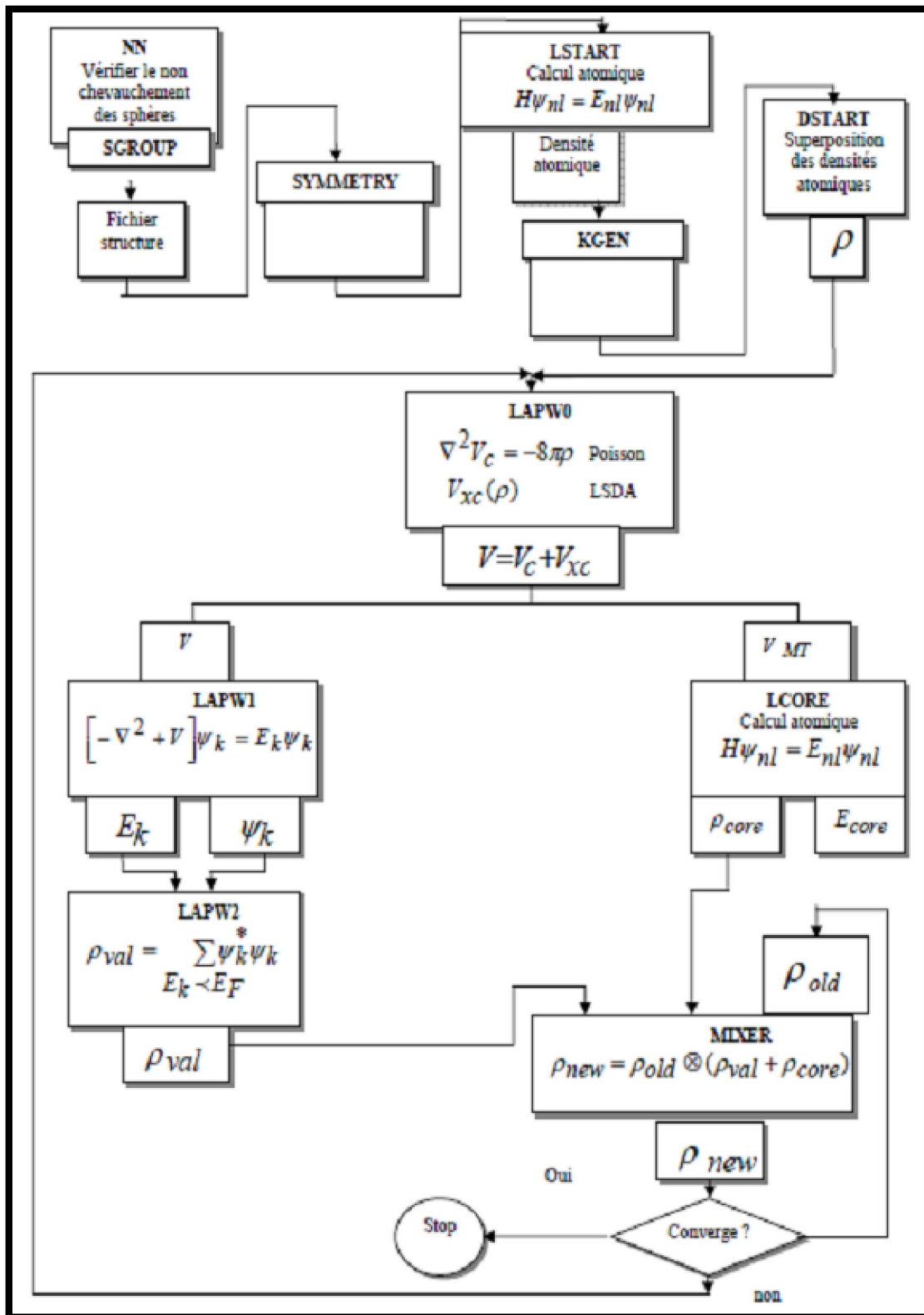


Figure (II -3) : L'organigramme des programmes du code Wien2k.

Références:

- [1] S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L) APW-methods: a step-by- step introduction Belgium August 6, 2004.
- [2] O. K. Andersen, Phys. Rev. B 12, (1975) 3060.
- [3] V. Heine and M. J. G. Lee. Phys. Rev. Lett 27, (1970) 811.
- [4] D.D. Koelling and G.O. Arbman, J. Phys. F 5(1975) 2041.
- [5] O.K. Andersen, Phys. Rev. B 12 (1975) 3060.
- [6] D.Singh, planes waves, pseudo-potentials and the LAPW method, (Klumar Academic Publishers1994).
- [7] S. Cottenier, Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by step introduction (Instituut voor Kern-en Stralingsfysica, K. U. Leuven, Belgium), 2002, ISBN 90-807215-1-4.
- [8] C SIFI, Thèse doctorat, Université d'Annaba (2010).
- [9] T. Takeda and J. Kubler, J. Phys. F 5 (1979) 661.
- [10] J. Petru and L. Smrcka. Czech, J. Phys. B 35 (1985) 62.
- [11] L. Smrcka. Czech, J. Phys. B 34 (1984) 694.
- [12] D. J. Shaughnessy, G. R. Evans and M. I. Drby, J. Phys. F 14 (1987) 1671.
- [13] D. J. Singh, Phys. Rev. B 43 (1991) 6388.
- [14] E. Sjösted, L. Nordström and D. J. Singh, Solid State Commun. 114 (2000) 15.
- [15] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave+local orbitals program for calculating crystal properties (Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Vienna, Austria), (2001).

Chapitre III
CERTAINS ASPECTS DES
NANOMATÉRIAUX

III.1. Introduction :

Dans ce chapitre, nous abordons certains aspects relatifs aux nanomatériaux et certaines de leurs applications. Un accent sera mis sur les matériaux 2D, tels que le graphène et le nitrure de bore hexagonal, qui a été largement étudié dans ce travail de thèse au moyen de calculs de premier principe. Je vais rappelerai quelques concepts de cristallographie utiles pour la suite du manuscrit. Enfin, j'introduirai brièvement l'approche computationnelle utilisée dans ce travail, et qui sera développée dans le chapitre 3.

III.2. Matériaux nanostructuraux :

Les nanomatériaux sont des matériaux à l'échelle nanométrique dont la taille varie de 1 à 100 nm, au moins dans une dimension (figure III.1). Les nanostructures et les nanomatériaux sont devenus l'un des domaines de recherche les plus actifs dans les domaines de la physique, de la chimie et de l'ingénierie de l'état solide. Le nombre de conférences et d'articles de recherche consacrés à ce sujet témoigne de cet intérêt [1]. Les nanomatériaux présentent des propriétés multifonctionnelles qui diffèrent nettement de celles des matériaux en vrac. Ceci est dû au fait qu'ils possèdent une grande fraction d'atomes de surface par unité de volume. Le rapport entre les atomes de surface et les atomes intérieurs change radicalement si l'on divise successivement un objet macroscopique en parties plus petites. Par exemple, les cristaux à l'échelle du nanomètre ont un point de fusion bas, des constantes de réseau réduites, une structure cristalline différente, la disparition ou le déplacement des températures de Curie (des ferroélectriques et des matériaux magnétiques), modification de la conductivité électrique des métaux ou des oxydes, une résistance accrue à l'oxydation et à l'usure, et une plus grande sensibilité des capteurs par rapport à leurs homologues en vrac. Les nanoparticules de semi-conducteurs et de métaux deviennent respectivement des isolants et des semi-conducteurs lorsque la taille caractéristique de quelques nanomètres [2].

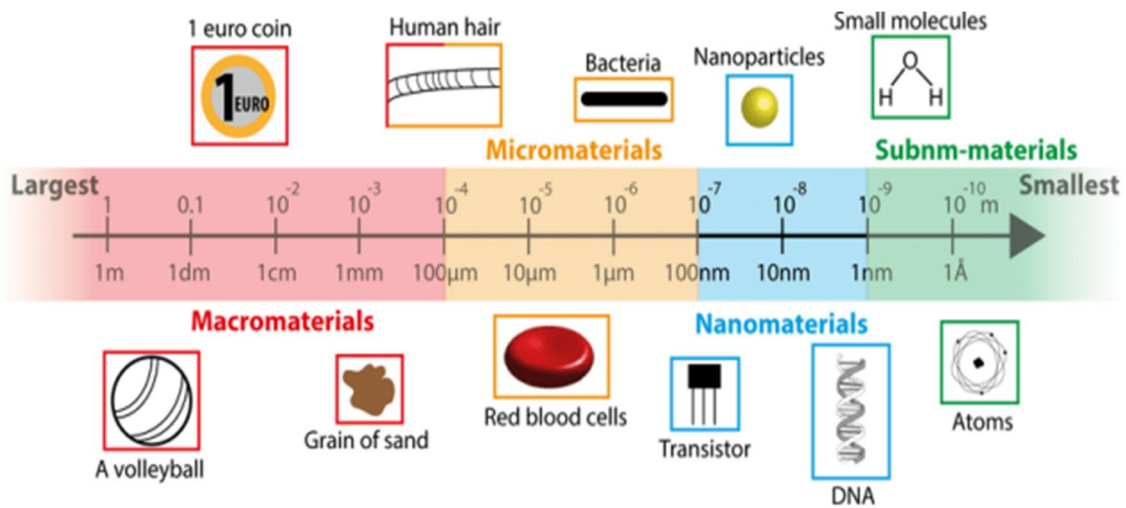


Figure III.1 : Les nanomatériaux ont une dimension caractéristique dans la gamme de taille de 1 à 100 nm. L'échelle de longueur présentée offre un cadre de référence au lecteur. Adapté de [3].

III.3. Nanostructures du carbone :

Dans ce chapitre, je me suis plus particulièrement intéressé aux nanostructures 2D à base de carbone, comme le graphène, et à un système 2D à 2 atomes différents, le nitrure de bore hexagonal. Je présente dans ce qui suit quelques aspects relatifs à ce type de nanomatériaux, en commençant par l'introduction du fullerène de carbone, qui peut être considéré comme le système de base des nanostructures à base de carbone.

III.3.1. Fullerène :

Les fullerènes sont des molécules à cage fermée de dimension zéro pour l'allotropique carbone qui ont la capacité de former diverses formes telles qu'une sphère creuse, un ellipsoïde ou un tube [4]. Le membre le plus connu de la famille des fullerènes est appelé buckyballs (C₆₀), qui est composé de 12 atomes de carbone pentagonaux et 20 hexagonaux.

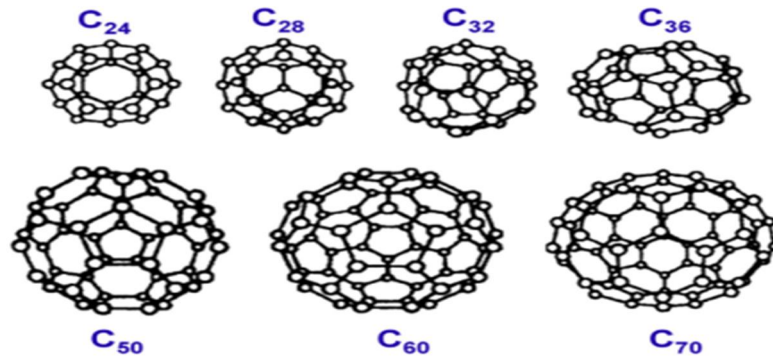


Figure III.2 : Types de fullerènes. Adapté de [4]

III.3.2. Nanotube de carbone :

Les nanotubes de carbone (NTC) de forme cylindrique sont une forme de nanostructure de carbone. Il existe deux types de NTC : les nanotubes de carbone à paroi simple (SWCNT) et les nanotubes de carbone à parois multiples (MWCNT). (MWCNT), dans lesquels il existe plusieurs classes possibles de SWCNT, nommés zigzag, chiral et armchair [5].

Afin de décrire ces nanotubes, le vecteur chiral (C_h) définit la cellule unitaire. Cellule unitaire, le vecteur C_h est défini comme la circonférence de la surface du tube et est donné par [6].

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \equiv (n, m) \quad (\text{III-1})$$

Où n, m sont les entiers qui caractérisent le vecteur chiral, \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les deux vecteurs de base du graphène. L'angle chiral (θ) représenté sur la figure III.3 peut être obtenu à partir de [7].

$$\tan \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n+m} \quad (\text{III-2})$$

L'angle et les indices de chiralité séparent les nanotubes de carbone en trois classes : zigzag ($m = 0, n > 0, \theta = 0^\circ$), chiral ($0 < |m| < n, 0 < \theta < 30^\circ$) et armchair ($n = m, \theta = 30^\circ$) [8].

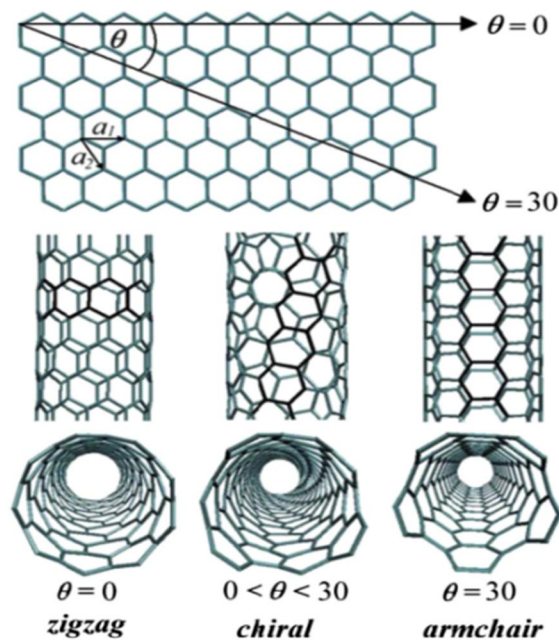


Figure III.3 : Classification des nanotubes de carbone : (à gauche) zigzag, (au milieu) chiral et (à droite) armchair. Adapté de [4].

III.3.3. Le graphène :

Le graphène est le nom donné à une couche unique plate d'atomes de carbone serrés dans un réseau bidimensionnel (2D) en forme de nid d'abeille. En nid d'abeille bidimensionnel (2D) et constitue un élément de base pour les matériaux graphitiques de toutes les autres dimensions (figure III.4). Il peut être enveloppé dans des fullerènes 0D, enroulé dans des nanotubes 1D ou empilés en graphite 3D [9].

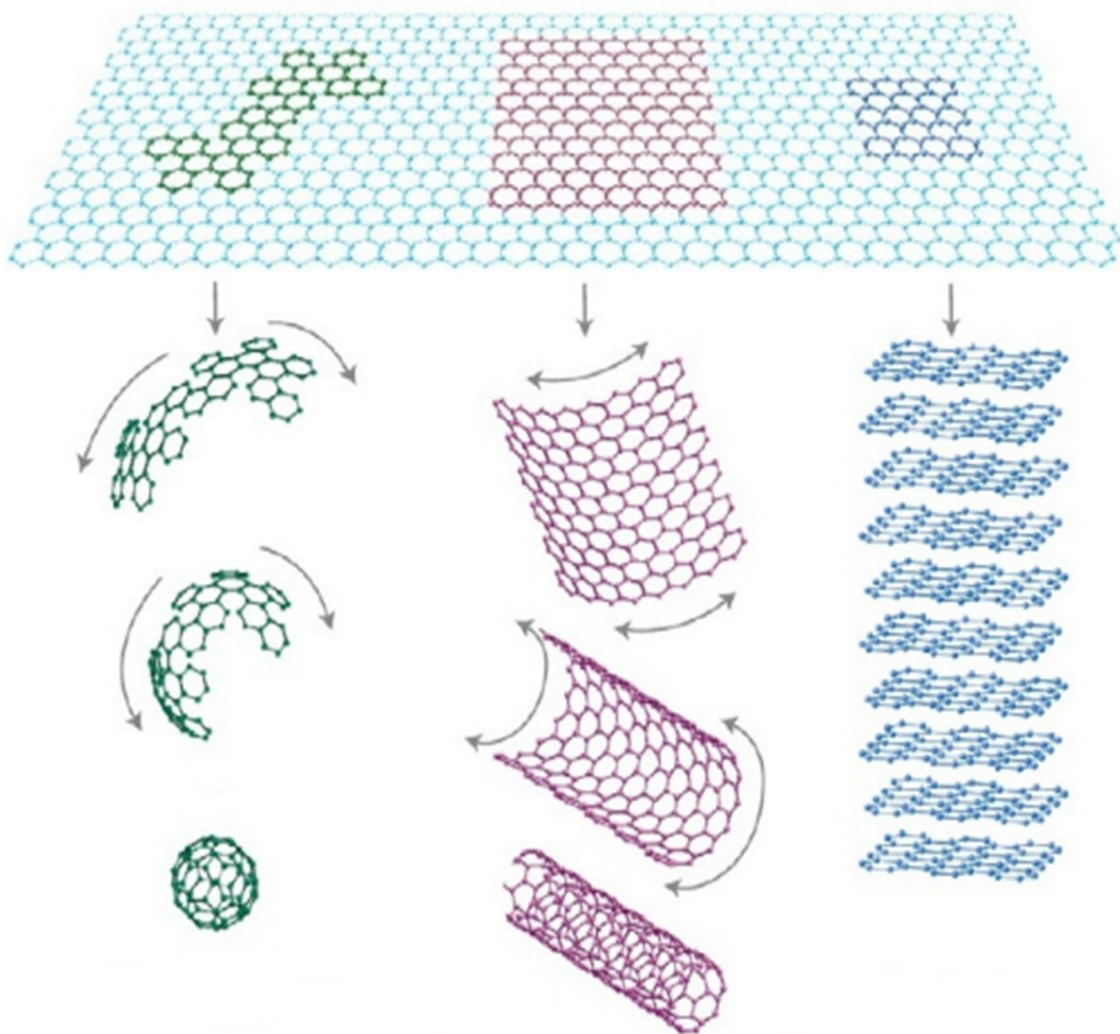


Figure III.4 : Le graphène est la base de toutes les formes graphitiques. Enveloppé en forme de boules (0D), enroulé sous forme de nanotubes (1D) ou empilé en couches comme le graphite (3D). Adapté de [10].

Le graphène possède un réseau cristallin en nid d'abeille, et sa cellule unitaire comprend deux atomes de carbone sur les sites A et B (figure III.5 a). Le réseau de Bravais est triangulaire et les vecteurs du réseau sont définis comme suit [11].

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}) \quad (\text{III-3})$$

Ou $a \approx 1,42 \text{ \AA}$ est la distance entre les plus proches voisins, ce qui est appelé une liaison carbone-carbone. Le treillis réciproque est également triangulaire, les vecteurs du treillis étant donnés par.

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}) \quad (\text{III-4})$$

Des points de symétrie élevés K, K' et M apparaissent pour la zone de Brillouin (ZB), ainsi que des vecteurs d'onde (figure III.5 b).

$$\vec{K}' = \left(\frac{2\Pi}{3a}, \frac{2\Pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \vec{K} = \left(\frac{2\Pi}{3a}, -\frac{2\Pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \vec{M} = \left(\frac{2\Pi}{3a}, 0 \right) \quad (\text{III-5})$$

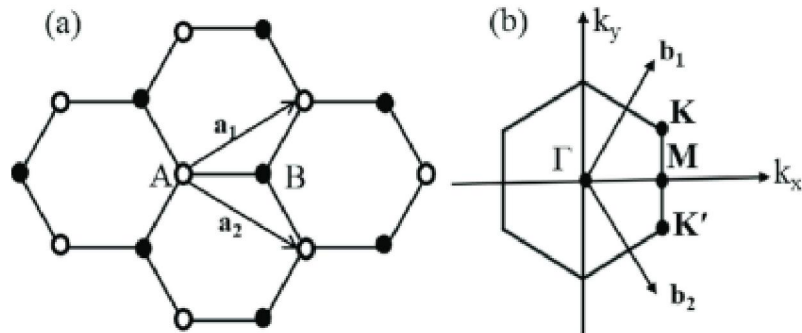


Figure III.5 : (a) La structure du réseau en nid d'abeille du graphène. La cellule unitaire est constituée d'atomes de carbone représentés par A et B, \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs du réseau et (b) la zone de Brillouin correspondante, montrant les points de haute symétrie. Correspondante, montrant les points de haute symétrie. Adapté de [12]

La structure de bande du graphène montre les nombreuses branches d'énergie qui résultent des électrons π et σ , qui sont produits par les électrons les plus externes du carbone [13]. Le point de Dirac au K de la zone de Brillouin est créé par la bande de valence π et la bande de conduction π^* (figure III.6). Tandis que la tâche de la liaison σ est de donner la structure hexagonale distinctive (figure III.6).

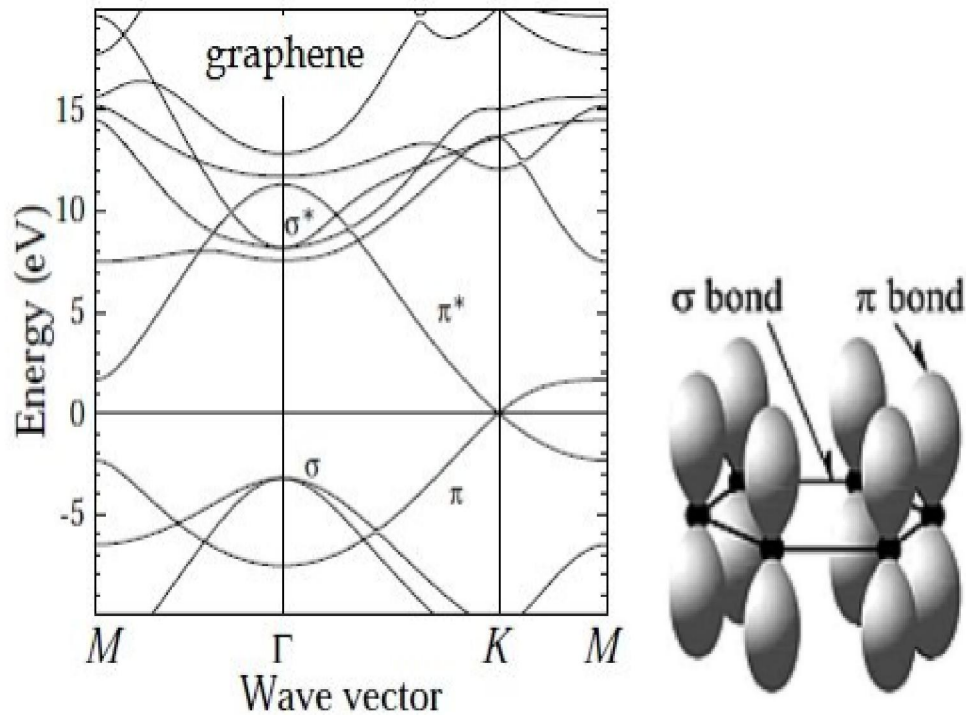


Figure III.6 : (à gauche) Structure de bandes électronique du graphène, (à droite) schéma des liaisons σ dans le plan et des orbitales π perpendiculaires au plan des feuilles de graphène.

Adapté de [14].

La première étude systématique et illustrative a utilisé le modèle de liaison serrée, en approximant le plus proche voisin qui peut résoudre l'équation de Schrödinger et peut obtenir la relation de dispersion d'énergie. D'énergie des bandes π (liaison) et π^* (anti-liaison) pour afficher la structure de bandes du graphène dans une image 3D (Figure III.7 a), où les bandes de valence et de conduction se touchent dans la zone de Brillouin en six points. Brillouin en six points donnant des cônes de Dirac. Parmi ces six points, seuls deux sont non équivalents indiqués par K et K' [15].

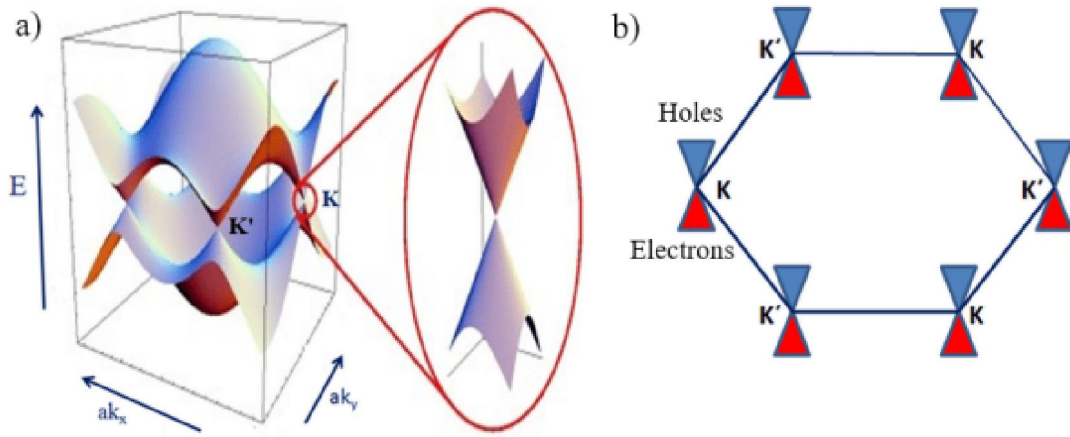


Figure III.7 : (a) Le spectre d'énergie des électrons du graphène dans l'approximation du plus proche voisin et (b) zone de Brillouin hexagonale du réseau en nid d'abeille, montrant des bandes électroniques coniques qui se croisent. Adapté de [16].

Le graphène bicouche (BLG) peut généralement être décrit comme deux couches simples de graphène (SLG) empilées parallèlement l'une à l'autre. Parallèles l'une à l'autre. Trois cas limités sont possibles : si $\theta = 0^\circ$ ($M = N$), les couches en nid d'abeille parfaitement et l'on obtient ce que l'on appelle l'empilement AA (figure III.8 a) (cela signifie que les atomes de même type dans l'unité de graphène ne sont pas liés entre eux). Même type dans la cellule unitaire du graphène, généralement désignés dans la littérature sur le graphène comme des atomes de type A ou B, se superposent.) ; Lorsque des atomes de type A sont superposés à des atomes de type B (ou vice versa), on obtient l'empilement dit AB. Qui peut être obtenu par une rotation complète de ($\theta = 60^\circ$) (Figure 3.8 b). Dans un BLG torsadé, les angles sont confinés sous la forme $0^\circ < \theta < 60^\circ$. (Figure 3.8 c), les grandes supercellules commensurables peuvent être obtenues pour $\theta \sim 0^\circ$ soit en choisissant de grandes valeurs de M et N, pour lesquelles $|M - N|$ est petit, soit pour des angles $\theta \sim 30^\circ$ avec de grands $|M - N|$. Afin d'obtenir un angle $\theta \sim 60^\circ$ proche de l'empilement AB parfait on peut choisir $N=1$ (ou $M=1$) et grand M (ou grand N) [17]. L'indice (M, N) pour le BLG torsadé commensurable est lié à l'angle de torsion θ , à la taille de la cellule L et à l'angle d'ouverture θ , la taille de la cellule L cell, et le nombre d'atomes N atom dans la cellule unitaire comme suit.

$$\cos \theta = \frac{N^2 + 4NM + M^2}{(2N^2 + NM + M^2)}$$

$$L_{\text{cell}} = d\sqrt{3(N^2 + NM + M^2)} \quad (\text{III-6})$$

$$N_{\text{atom}} = 4(N^2 + NM + M^2)$$

Où d est la distance C-C dans la couche de graphène, et (M, N) est une paire d'entiers.

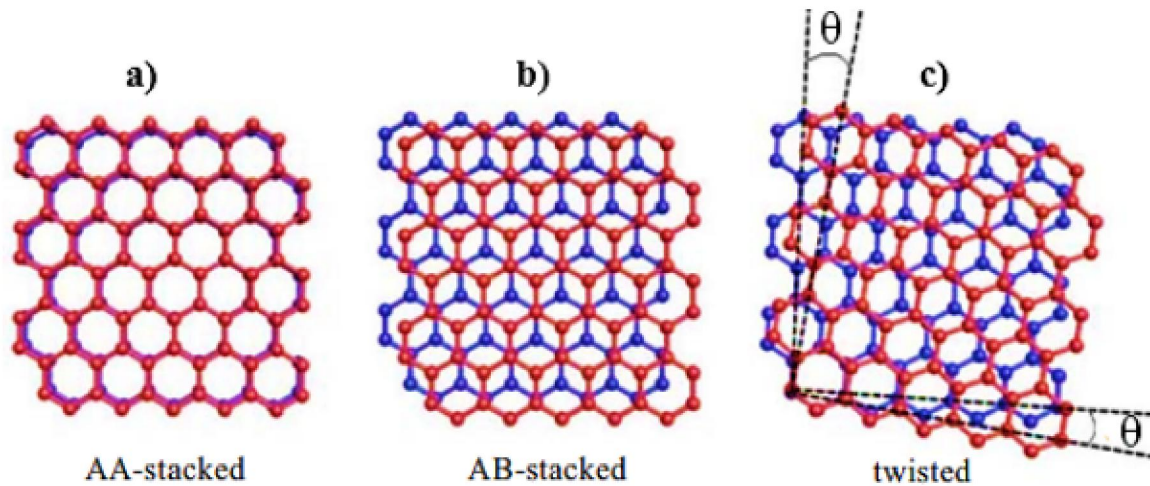


Figure III.8 : Trois catégories de graphène bicouche : (a) empilé en AA, (b) empilé en AB et (c) torsadé. BLG. Adapté de [18].

III.4. Matériaux bidimensionnels :

III.4.1. Le cas des nanofeuilles de nitrure de bore (h-BN) :

Le h-BN appartient à la famille des matériaux 2D, dont l'épaisseur varie d'une couche à quelques couches atomiques. Le h-BN est constitué d'atomes de bore et d'azote conjugués- sp^2 qui forment une structure en nid d'abeille [19]. Sa géométrie est similaire à celle du graphène tout-carbone, comme l'illustre la figure III.9.

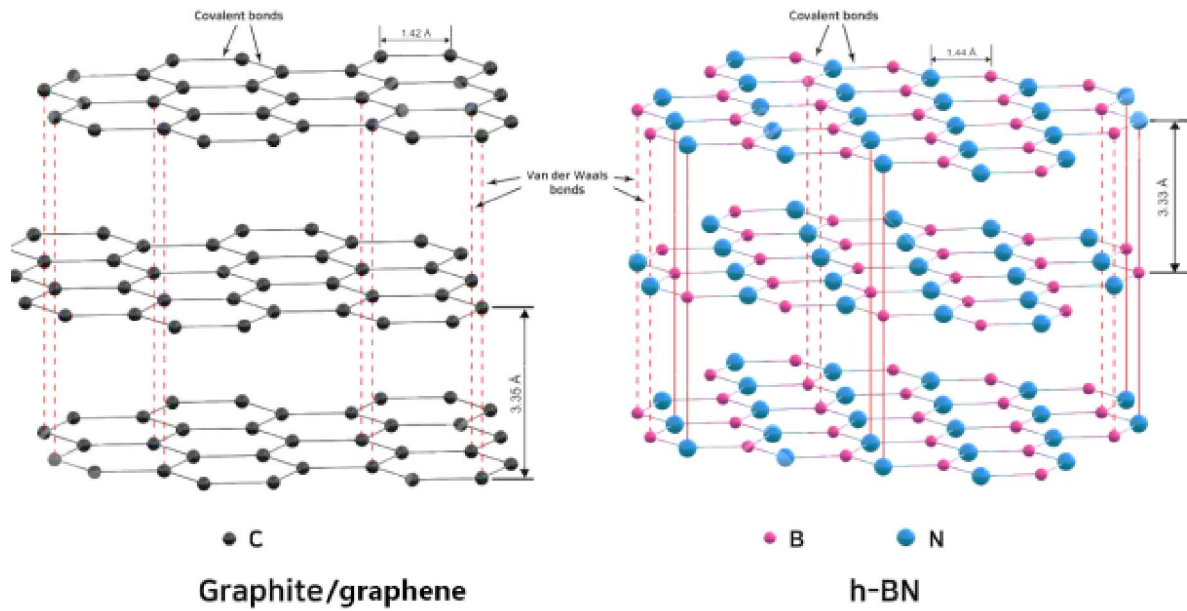


Figure III.9 : Structure cristalline du nitrure de bore hexagonal et du graphite de carbone.

Adapté de [20].

Le h-BN est le seul des matériaux bidimensionnels à posséder une large bande interdite [21], les niveaux HOMO et LUMO du h-BN 2D sont déterminés par π et π^* qui sont situés dans les atomes N et B, comme le montre la Figure III.10.

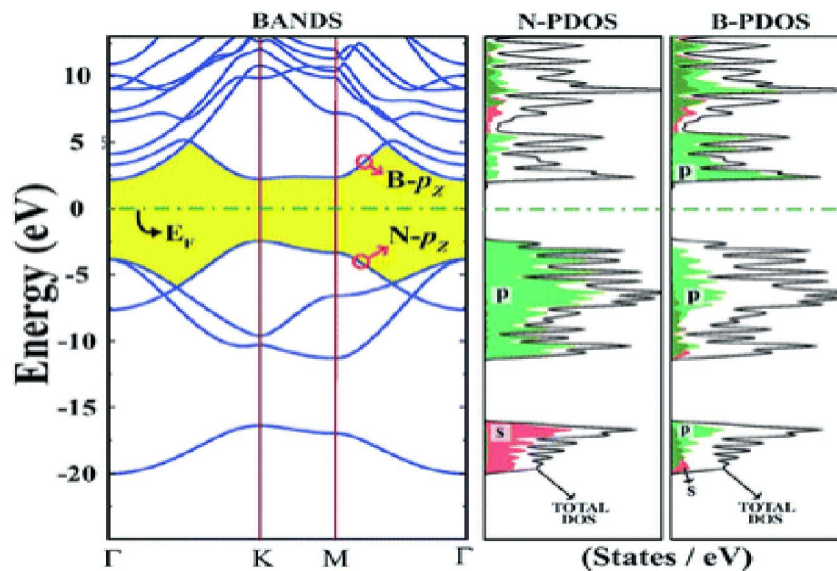


Figure III.10 : Propriété orbitale et structure électronique du h-BN. Adapté de [22].

III.5. Quelques applications des matériaux 2D : Exemple du graphène et du h-BN :

III.5.1 Graphène :

a. Spintronique : Le graphène joue un rôle important dans les dispositifs spintroniques parce que le faible couplage spin-orbite (SO) et l'interaction hyperfine dans les atomes de carbone entraînent des longueurs de diffusion de spin exceptionnellement longues, tout en offrant une mobilité élevée des porteurs de charge et une charge réglable par la porte. La densité de porteurs de charge [23, 24], avec ces propriétés exceptionnelles, est un excellent candidat pour la création d'un spectre complet de dispositifs de sécurité. Pour la création d'un spectre complet de nanodispositifs spintroniques au-delà des technologies actuelles, y compris des dispositifs à très faible demande énergétique et des circuits comprenant des micro puces (ré)inscriptibles transistors, portes logiques [25].

b. Photonique : Le graphène 2D offre des perspectives d'avenir pour les dispositifs et systèmes électroniques. Dans dispositifs optoélectroniques à grande vitesse, la mobilité élevée des porteurs du graphène est un avantage. Les applications dans une variété de régions spectrales bénéficieront de la large absorption spectrale du graphène. Pour les applications nécessitant des structures optiques photoniques et non linéaires robustes, le seuil de dommage optique élevé et la résistance mécanique du graphène seront des facteurs primordiaux. [26]. En outre, la facilité

Le transfert du graphène sur d'autres substrats et sa capacité à recouvrir les surfaces de manière conforme, le rendent idéal pour l'intégration de systèmes photoniques hybrides. Les dispositifs à base de graphène sont fabriqués pour utilisation comme dispositifs optiques et photoniques non

linéaires : tels que la modulation optique, les photodétecteurs, cellules solaires, lasmoniques, LED, laser, écrans tactiles [27].

III.5.2 h-BN :

a. Optoélectronique : Les nanoplaquettes 2D-hBN présentent une transparence élevée dans les longueurs d'onde allant de l'UV à l'IR, tandis que le pic d'absorption net apparaît dans l'ultraviolet profond (DUV). h-BN pourrait être un candidat prometteur pour une application dans l'effet laser ultraviolet, l'émission de photons et les détecteurs DUV [28]. Le détecteur est plus sensible à la lumière DUV qu'à la lumière visible avec une sensibilité stable. h-BN possède de fortes émissions d'athodoluminescence (CL) et de photoluminescence (PL) dans la gamme DUV. h-BN est utilisé comme support d'enregistrement optique et magnéto-optique, et pour les mémoires à disque optique, et magnéto-optique, ainsi que pour les mémoires à disque optique [29].

b. La nanoélectronique : Les excellentes propriétés isolantes et diélectriques du h-BN combinées à une conductivité thermique élevée. Ces propriétés font du h-BN un matériau 2D unique pour la conception et la fabrication de dispositifs de haute qualité, tels que les barrières utilisées dans les transistors à effet tunnel à champ et les isolants atomiquement minces pour séparer les canaux métalliques, et comme couches d'isolant pour les semi-conducteurs MISFET. h-BN est également utilisé comme substrat pour les dispositifs de haute performance, comme les fenêtres dans les micro-ondes. Dispositifs à haute performance comme les fenêtres des appareils à micro-ondes [30].

III.6. Concepts de base de la cristallographie :

L'un des enjeux majeurs de ces dernières années en recherche, en spintronique par exemple, est de contrôler les propriétés des matériaux magnétiques et des spins des électrons. Une possibilité émergente est le couplage d'un ferromagnétique (FM) avec des matériaux 2D. En effet, la combinaison de métaux de transition ferromagnétiques tels que Co, Ni, Fe et leurs alliages, avec des matériaux 2D peut s'avérer être une approche intéressante. Dans ce contexte, il est important d'étudier les effets de l'interface dans les matériaux 2D/FM. Ces effets

Impliquent principalement des hybridations entre les orbitales des atomes de surface du FM et du matériau 2D [31]. Ainsi, dans ce qui suit, je présente quelques aspects fondamentaux de la cristallographie, bien connus mais utiles

III.6.1 Structure, direction et plan du cristal :

Pour comprendre la différence entre masse et surface, nous allons mentionner quelques concepts de base en cristallographie. En considérant un groupe d'atomes comme des points mathématiques, tous les matériaux cristallins peuvent alors être considérés comme un motif répétitif de points dans l'espace appelé treillis. Les groupes de treillis peuvent être classés en sept systèmes cristallins et 14 réseaux de Bravais. La plupart des métaux purs ont l'une des trois structures de réseau : cubique à faces centrées (FCC), cubique à corps centré (BCC), ou hexagonal compact (HCP). Pour mieux décrire la structure du réseau, nous devons définir le système de coordonnées, qui consiste en trois axes planaires le long des bords de la cellule unitaire (a , b , c) avec l'origine à un coin de la cellule unitaire. Une fois que le système de coordonnées a été défini, toute orientation du cristal est facile à indexer. Nous pouvons considérer n'importe quelle direction cristallographique comme un vecteur qui peut être décrit par un ensemble d'entiers $[uvw]$ basés sur le système de coordonnées comme suit : $T = ua + vb + wc$ dans laquelle a , b et c sont les axes de la cellule unitaire ; T est le vecteur représentant cette direction cristallographique spécifique, et u , v et w sont des nombres entiers. Spécifique, et u , v et w sont des entiers. Ainsi, nous pouvons indexer toute direction cristallographique à l'aide d'un ensemble d'entiers $[uvw]$. Ensemble d'entiers $[uvw]$ dans le système de coordonnées de la cellule unitaire (figure III.11).

Nous utilisons $\langle uvw \rangle$ pour définir une famille de directions cristallographiques qui sont identiques en raison de la symétrie des cristaux. Pour tout plan donné, celui-ci sera soit parallèle à l'un des trois axes, soit l'interceptera. Les réciproques des interceptions sur trois axes sont utilisées pour indexer l'orientation des plans cristallographiques. Cet ensemble d'entiers (hkl) est appelé indices de Miller, on utilise aussi $\{hkl\}$ pour indexer une famille de plans cristallins s'ils sont identiques en raison de la symétrie des cristaux, tout comme la famille des directions cristallographiques [32].

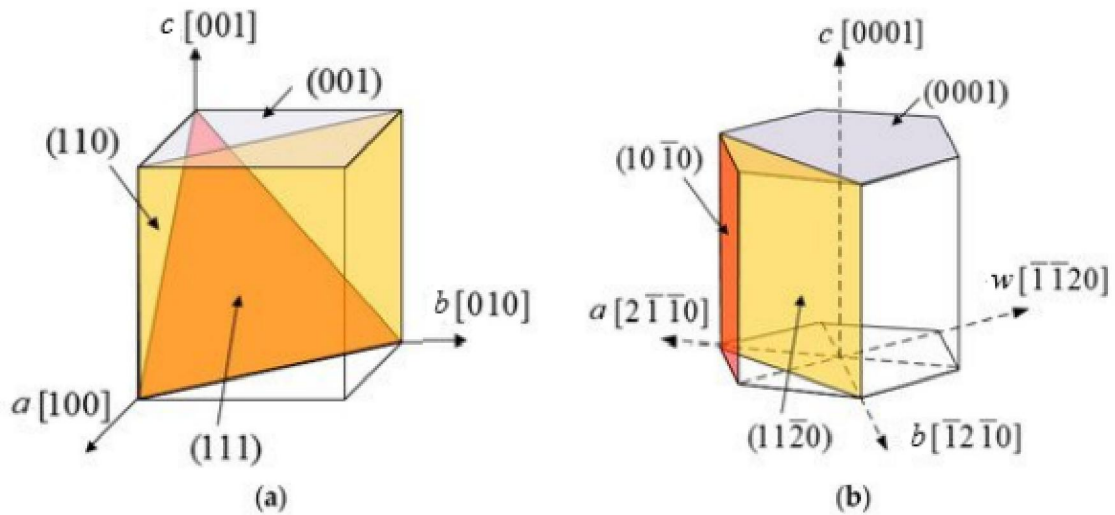


Figure III.11 : Illustration des surfaces à faible indice pour (a) les cubes (001), (110) et (111) et (b) les hexagones (0001), (1010) et (1120). Hexagonales (0001), (10 $\bar{1}$ 0) et (11 $\bar{2}$ 0). Adapté de [33].

III.6.2 Structure de surface pour les structures à empilement étroit :

La densité de tassement volumique des structures HCP est identique à celle des structures FCC, comme le montre le tableau III.1. Dans le tableau III.1. Nous savons que dans la structure HCP, chaque atome a 12 atomes voisins les plus proches - 6 dans le même plan de base et 3 chacun dans le site creux des plans supérieur et inférieur. En ce qui concerne la structure FCC, elle présente la même densité d'empilement qu'une structure HCP, en traçant le (111), nous pouvons clairement voir que tout atome dans ce plan a six atomes voisins les plus proches qui se touchent. Se touchant les uns les autres. Il y a également trois atomes chacun sur le site creux sur les plans cristallins au-dessus et en dessous. La seule différence entre les structures FCC et HCP est que les atomes voisins sur les plans cristallins supérieur et inférieur ne se trouvent pas dans le même ensemble de sites creux dans la structure FCC. En d'autres termes, les atomes supérieurs et inférieurs ne sont pas alignés ensemble comme dans le cas de la structure HCP [34].

Tableau III.1 : Résumé des plans et des directions en empilement serré, de l'APF et des plus proches voisins pour les structures FCC HCP. Adapté de [34].

	FCC	HCP
Close-packed directions	$\langle 110 \rangle$	Hexagonal edge
Close-packed planes	$\{111\}$	Base plane $\{0001\}$
Atomic packing factor (APF)	0.74	0.74
Number of closest neighbors	12	12

Comme mentionné précédemment, les structures FCC et HCP sont toutes deux des structures à empilement rapproché, où la structure HCP est une structure d'empilement de plans empilés (le plan de base) avec une séquence ABABAB, et la structure FCC n'est rien d'autre qu'une structure d'empilement similaire de plan dense (111) avec une séquence de ABCABC. Par conséquent, la structure FCC est également une structure à empilement rapproché avec une séquence d'empilement différente. Si la surface est constituée de leurs plans à empilement serré, c'est-à-dire (111) pour FCC et (0001) pour HCP, comme le montre la figure III.12, chaque structure est une structure à empilement serré. Chaque atome de surface sera identique et aura un numéro de coordination (CN) de neuf, ou neuf voisins les plus proches - six d'entre eux dans le plan et trois atomes dans le plan suivant, sous la surface. En outre, les atomes de la couche suivante, sous la surface, auront un CN de 12. Auront un CN de 12, ce qui signifie qu'ils sont déjà comme les atomes dans la masse. Donc, en théorie, cette couche peut donc déjà être considérée comme une couche de masse [34].

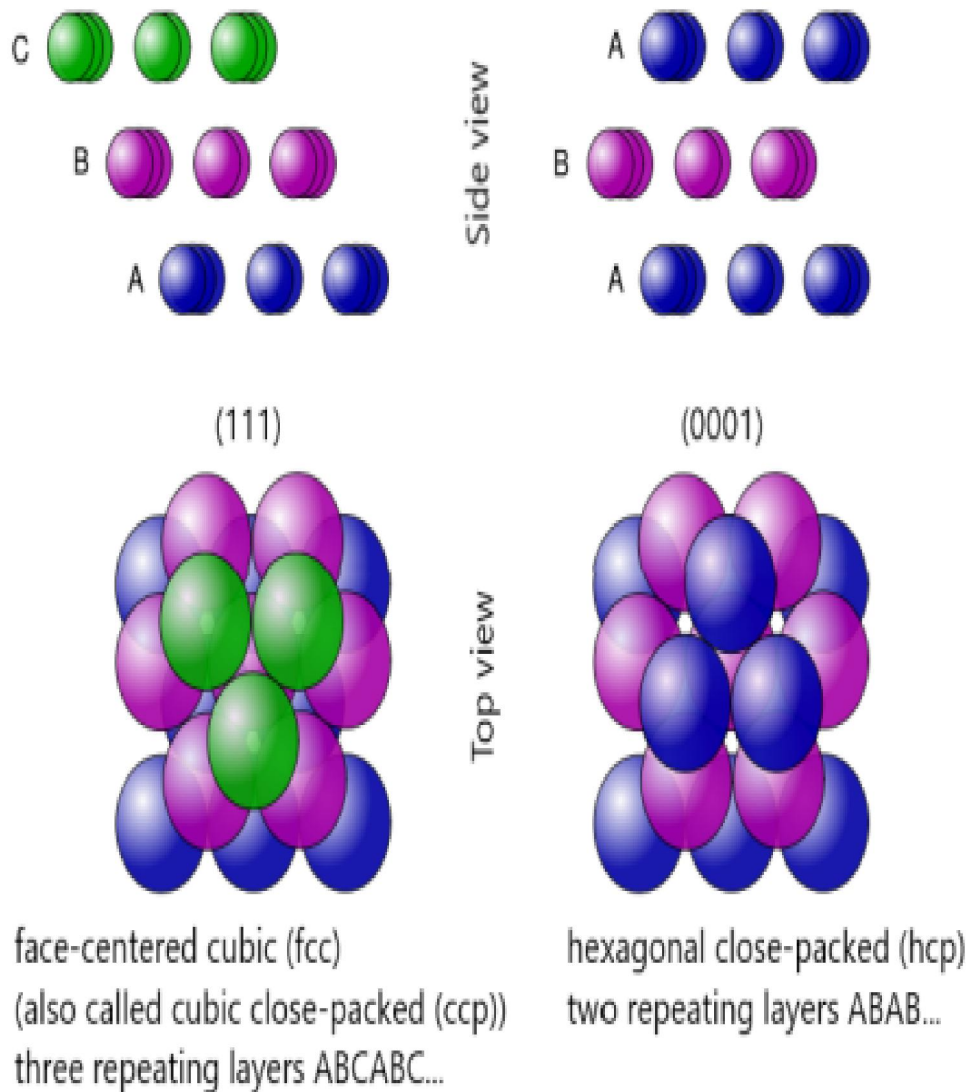


Figure III.12 : Similitudes et différences entre les structures à empilement étroit : (gauche) FCC et (droite) HCP. Adapté de [35].

III.7 Résumé :

Les nanomatériaux peuvent se présenter sous différentes formes, comme les nanotubes, et sous forme de couches, comme les matériaux 2D. Les nanomatériaux bidimensionnels sont dotés de propriétés uniques, comme le graphène et les nanoplaquettes de h-BN, qui présentent un caractère semi-métallique dans le cas du graphène et une grande bande interdite dans le cas du h-BN. Ces deux matériaux occupent une place prépondérante dans de nombreux domaines et applications, tels que l'optoélectronique et la spintronique... etc. Les calculs *ab initio* sont une approche simple et rentable permettant l'étude de différentes combinaisons de matériaux 2D avec d'autres matériaux tels que les matériaux ferromagnétiques. Ceci est particulièrement intéressant pour la conception de matériaux et des dispositifs souhaitables avec des propriétés prédéfinies, ce qui fournit un

moyen efficace d'analyser leur pertinence pour différentes applications, comme par exemple l'utilisation de l'énergie solaire la spintronique.

Références :

- [1] Alan S Edelman and RC Cammarata. Nanomaterials: synthesis, properties and applications. CRC press, (1998).
- [2] Guozhong Cao. Nanostructures & nanomaterials: synthesis, properties & applications. Imperial college press, (2004).
- [3] Brulot Ward. Development, synthesis and characterization of multifunctional nanomaterials. KU Leuven, Belgium, (2014).
- [4] BD Malhotra and MA Ali. Functionalized carbon nanomaterials for biosensors. pages 75–103. (2018).
- [5] Stephanie Reich, Christian Thomsen, and Janina Maultzsch. Carbon nanotubes: basic concepts and physical properties. John Wiley & Sons, (2008).
- [6] T.W. Odom, Jin-Lin Huang, P. Kim, and C. M Lieber, Nature, 391 (6662):62–64, 1998.
- [7] H.Rafii-Tabar. Computational physics of carbon nanotubes. Cambridge University Press, (2008).
- [8] John E Proctor, Daniel Melendrez Armada, and Aravind Vijayaraghavan. An introduction to graphene and carbon nanotubes. CRC Press, (2017).
- [9] Andre K Geim and Konstantin S Novoselov. The rise of graphene. In Nanoscience and technology: a collection of reviews from nature journals, pages 11–19. World Scientific, (2010).
- [10] Nada F Atta, Ahmed Galal, and EH El-Ads. Graphene—a platform for sensor and biosensor applications. volume 9, pages 38–84. IntechOpen, (2015).
- [11] Mikhail Katsnelson and Mikhail Iosifovich Katsnelson. Graphene: carbon in two dimensions. Cambridge university press, (2012).
- [12] Edward L Wolf. Applications of graphene: an overview. Springer, (2014).
- [13] H-S Philip Wong and Deji Akinwande. Carbon nanotube and graphene device physics. Cambridge University Press, (2011).
- [14] Wonbong Choi, Indranil Lahiri, Raghunandan Seelaboyina, and Yong Soo Kang. Synthesis of graphene and its applications: a review. Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 35(1):52–71, (2010).
- [15] Wonbong Choi and Jo-won Lee. Graphene: synthesis and applications. CRC press, (2011).

- [16] NMR Peres. The transport properties of graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(2009)323201.
- [17] G Trambly Laissardi`ere, Didier Mayou, and Laurence Magaud. Localization of dirac electrons in rotated graphene bilayers. *Nano letters*, 10(2010)804.
- [18] Huijuan Cui Yuli Huang, Xiaoyun Li and Zhen Zhou. Bi-layer graphene: Structure, properties, preparation and prospects. *Current Graphene Science (Discontinued)*, 2 (2):97–105, (2018).
- [19] GR Bhimanapati, NR Glavin, and Joshua Alexander Robinson. 2d boron nitride: synthesis and applications. In *Semiconductors and semimetals*, volume 95, pages 101–147. Elsevier, (2016).
- [20] Pramoda Kumar Nayak. *Two-dimensional Materials: Synthesis, Characterization and Potential Applications*. BoD–Books on Demand, (2016).
- [21] Jingang Wang, Fengcai Ma, and Mengtao Sun. Graphene, hexagonal boron nitride, and their heterostructures: properties and applications. *RSC advances*, 7(27): 16801–16822, (2017).
- [22] M. Topsakal, E. Akt`urk, and S. Cirac, *Phys. Rev B*, 79(2009) 115442.
- [23] N. Kheirabadi, A. Shafiekhani, and M. Fathipour. Review on graphene spintronic, new land for discovery. *Superlattices and Microstructures*, 74: 123–145, (2014).
- [24] A. Avsar, H. Ochoa, F. Guinea, B. Ozyilmaz, BJ Van Wees, and I. J Vera- ` Marun. Colloquium: Spintronics in graphene and other two-dimensional materials. *Reviews of Modern Physics*, 92(2020)021003.
- [25] A. C Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal`Ko, K. S Novoselov, S. Roche, P. Bøggild, S. Borini, F.HL Koppens, V. Palermo, N. Pugno, .. Science and technology roadmap for graphene, related twodimensional crystals, and hybrid systems. *Nanoscale*, 7(2015) 4598.
- [26] Marc Currie. Applications of graphene to photonics. Technical report, NAVAL RESEARCH LAB WASHINGTON DC PHOTONICS TECHNOLOGY BRANCH, (2014).
- [27] Qiaoliang Bao, Huiying Hoh, and Yupeng Zhang. *Graphene Photonics, Optoelec-tronics, and Plasmonics*. CRC Press, 2017
- [28] Kailiang Zhang, Yulin Feng, Fang Wang, Zhengchun Yang, and John Wang. Two dimensional hexagonal boron nitride (2d-hbn): synthesis, properties and applications. *Journal of Materials Chemistry C*, 5(46):11992–12022, (2017).

- [29] Roland Haubner, Matthias Wilhelm, Ronald Weissenbacher, and Benno Lux. Boron nitrides—properties, synthesis and applications. *High Performance Non-Oxide Ceramics II*, pages 1–45, (2002).
- [30] Qunhong Weng, Xuebin Wang, Xi Wang, Yoshio Bando, and Dmitri Golberg. Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications. *Chemical Society Reviews*, 45(14):3989–4012, (2016).
- [31] J.Maassen, W. Ji, and H. Guo. Graphene spintronics: . *Nano letters*, 11(1):1
- [32] Charles Kittel, Paul McEuen, and Paul McEuen. *Introduction to solid state physics*, volume 8. Wiley New York, (1996).
- [33] Z. Tang, Y. Chen, and W.Ye, *Crystals*, 10(2020)329.
- [34] Zhen Guo and Li Tan. *Fundamentals and applications of nanomaterials*. Artech House, (2009).
- [35] Wikipedia. Empilement compact — Wikipedia, the free encyclopedia, 2021. [Online; accessed 25-February-2021].

Chapitre IV :
Résultats et discussion

VI.1. Introduction :

L'objet de ce chapitre est d'étudier les propriétés structurales (les paramètres de réseau a et c) et les propriétés électroniques (structure de bande, densité d'états) des semi-conducteurs GaN à trois dimension 3D et à deux dimension 2D.

Pour réaliser cette étude, nous avons utilisé le code WIEN2K basé sur la méthode des ondes planes augmentées linéarisées avec un potentiel total (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), le potentiel d'échange et de corrélation a été déterminé à l'aide de plusieurs approximations à savoir les approximations LDA, GGA et EV-GGA.

VI.2. Détails de calcul :

Dans ce mémoire les calculs sont effectués à l'aide du code de calcul de structure électronique WIEN2K [1]. 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) [2]. On a effectué des calculs semi - relativistes (l'effet de spin-orbite est négligé). Pour déterminer le potentiel d'échange-corrélation, nous avons utilisé les deux approximations suivantes :

1- L'approximation de la densité locale (LDA : Local Density Approximation) paramétrisée par Perdew et Wang [3].

2-L'approximatio du gradient généralisé (GGA : Generalized Gradient Approximation), paramétrisée par Perdew, Berke et Erenzerhof [4].

Pour le composé GaN (3D) et GaN (2D).

Dans la structure à trois dimensions GaN (3D) :

- ✓ Les rayons des sphères Muffin-Tin (**RMT**), donnés en unités atomiques (rayon de Bohr) ou en Angstrom (\AA).
- ✓ Le paramètre de coupure $RK_{\max} = \mathbf{RMT}_{\min} \times K_{\max}=9$, avec ***RMT_{min}*** est le rayon moyen des sphères Muffin-Tin et ***K_{max}*** la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en ondes planes des fonctions propres. Afin d'obtenir la convergence des valeurs propres d'énergie, les fonctions d'onde dans la région interstitielle ont été augmentées dans les ondes planes avec une coupure $RK_{\max} = \mathbf{RMT}_{\min} \times K_{\max}=9$.
- ✓ Le nombre de points k considéré dans la zone de Brillouin : Nous avons choisi **$k=1000$** points.

Dans la structure à deux dimensions GaN (2D) :

- ✓ Le paramètre de coupure $RK_{max} = RMT_{min} \times K_{max} = 8$
- ✓ Le nombre de points k considéré dans la zone de Brillouin : Nous avons choisi $k=200$ points.

Tableau (IV.1) : Notre choix de différents paramètres inclus dans le calcul pour les composés GaN (3D) et GaN (2D) dans les deux approximations GGA et LDA.

<i>Le composé</i>	L'approximation	<i>RMT min *Kmax</i>	<i>K Points</i>	<i>R_{MT} (Ga)</i>	<i>R_{MT} (N)</i>
<i>GaN</i> (3D)	GGA	9	1000	1.9500	1.4000
	LDA	9	1000	1.9500	1.4000
<i>GaN</i> (2D)	GGA	8	200	1.7500	1.5100
	LDA	8	200	2.0000	1.5000

IV.3. La structure cristalline des composés GaN (3D) et GaN (2D) :

Les composés GaN cristallisent en phase du groupe d'espace Gallium nitride $P63mc$ ($n=186$). Les positions atomiques sont :

1) Les positions des atomes : GaN (3D)

Atome 1 : Ga

Position 1 : $x=0.33333334$ $y= 0.66666668$ $z= 0.50000000$

Position 2 : $x=0.66666666$ $y=0.33333334$ $z=0.00000000$

Atome 2 : N

Position 1 : $x=0.33333334$ $y= 0.66666668$ $z= 0.87676000$

Position 2 : $x=0.66666666$ $y=0.33333334$ $z= 0.37676000$

1) Les positions des atomes : GaN (2D)

Atome 1 : Ga

Position 1 : $x=0.16666550$ $y=0.3333050$ $z=0.49989900$

Position 2 : $x=0.66666550$ $y=0.3333050$ $z=0.49989900$

Position 3 : $x=0.16666550$ $y= 0.8333050$ $z=0.49989900$

Position 4 : $x=0.66666550$ $y=0.8333050$ $z=0.49989900$

Atome 2 : N

Position 1 : $x=0.00001550$ $y=0.00003150$ $z=0.50010100$

Position 2 : $x=0.500001550$ $y=0.00003150$ $z=0.50010100$

Position 3 : $x=0.00001550$ $y=0.500003150$ $z=0.50010100$

Position 4 : $x=0.500001550$ $y=0.500003150$ $z=0.50010100$

La configuration électronique des atomes sont présentés dans le Tableau :

Tableau (IV.2) : Les configurations utilisées dans le calcul pour les Gallium-Nitride (GaN).

<i>Elément</i>	Nombre d'électrons <i>Z</i>	Configuration électronique
<i>Ga</i>	31	$[\text{Ar}]^{18} 3d^{10}4s^24p^1$
<i>N</i>	7	$1s^22s^22p^6$

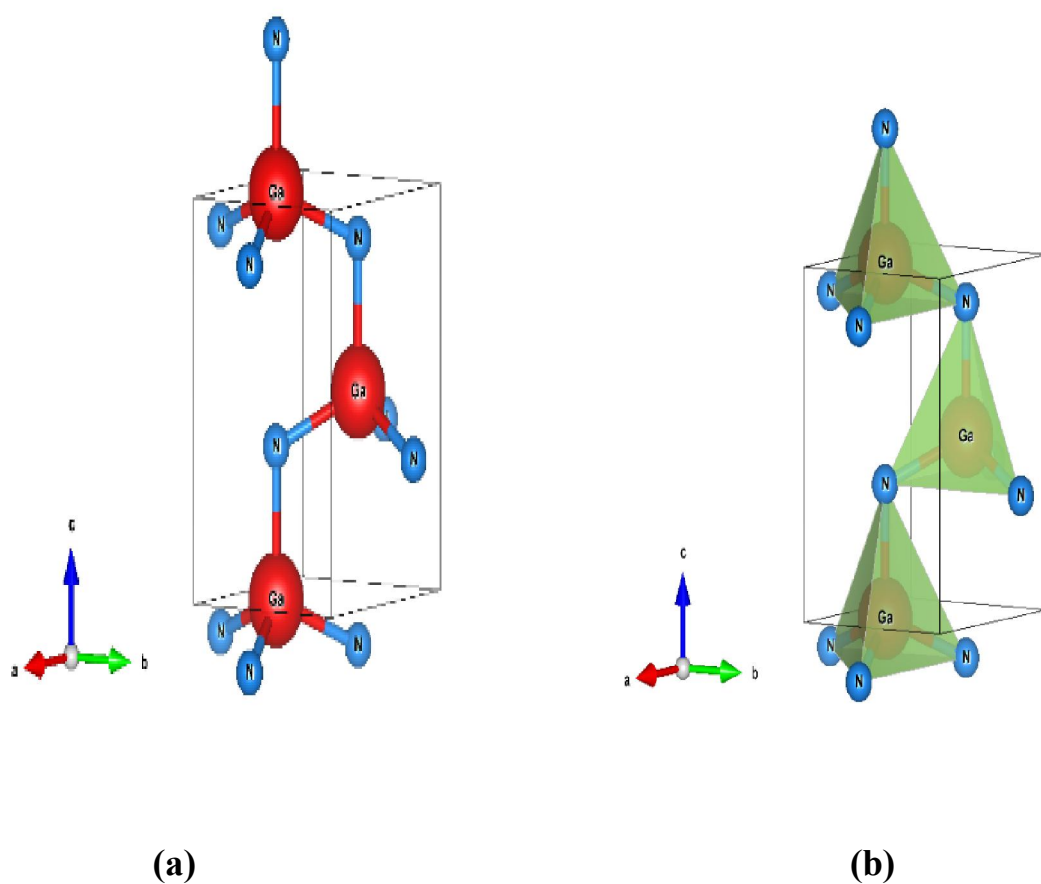


Figure (IV.1) : La structure cristalline de Gallium-Nitride GaN : (a) à trois dimensions (3D). (b) La configuration tétraédrique.

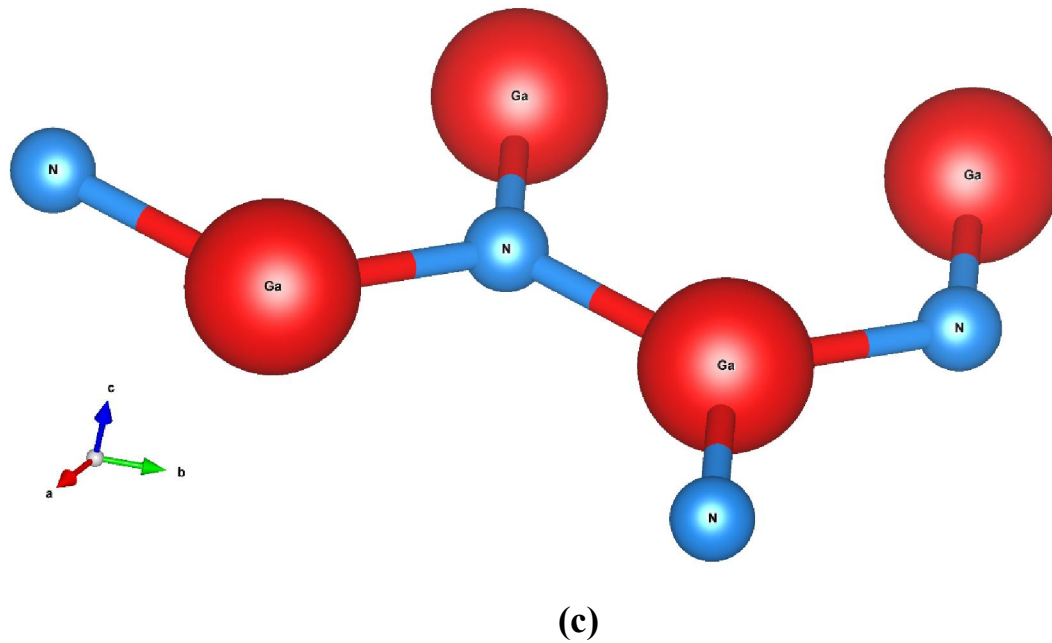


Figure (IV.2) : La structure cristalline de Gallium-Nitride GaN : à deux dimensions (2D).

Le GaN a une structure Wurtzite et cristallise dans le groupe spatial hexagonal P63mc. La structure est tridimensionnelle. Ga (1) est lié à quatre atomes N (1) équivalents pour former des tétraèdres GaN₄ à coins partagés. Toutes les longueurs de liaison Ga (1)-N (1) sont de 1,97 Å. N(1) est lié à quatre atomes équivalents de Ga(1) pour former des tétraèdres NGa₄ à coins partagés.

VI .4. Propriétés Structurales :

Pour déterminer les paramètres structuraux du composé GaN a deux dimensions 2D et trois dimensions (3D). De l'état d'équilibre fondamental, tels que les paramètres du réseau théorique, le module de compressibilité (B) et sa dérivée par rapport à la pression (B') sont évalués par l'extrapolation de l'énergie totale obtenue E_{\min} les valeurs de l'énergie ainsi obtenues ont été ensuite interpolées par l'équation d'état de Murnaghan (1944) [5].

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

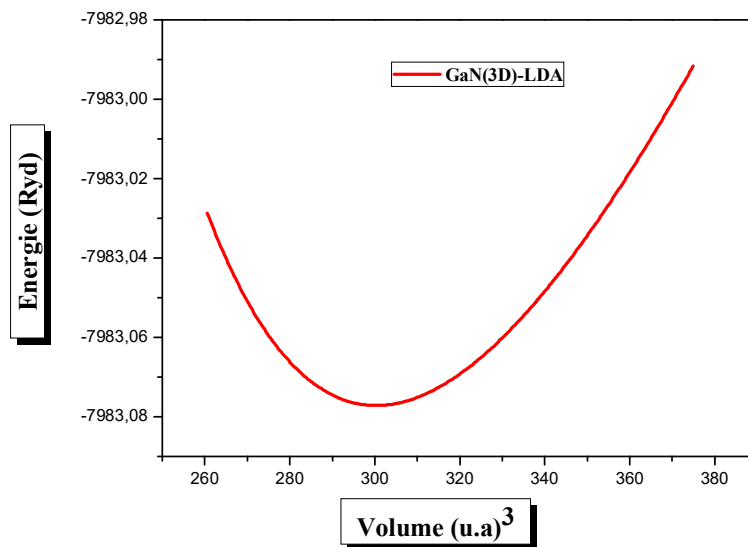
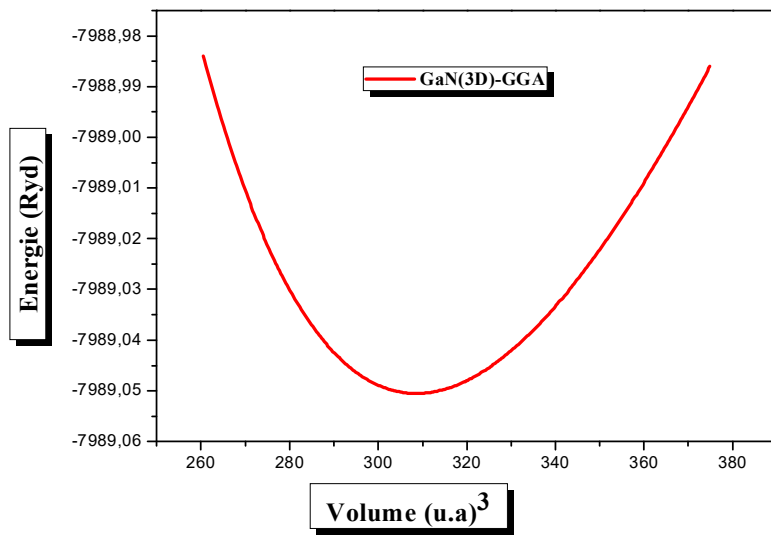
Où E_0 , B_0 et V_0 sont respectivement ; l'énergie totale, le module de compressibilité et le volume à l'équilibre. Le module de compressibilité est déterminé au minimum de la courbe $E(V)$ par la relation :

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

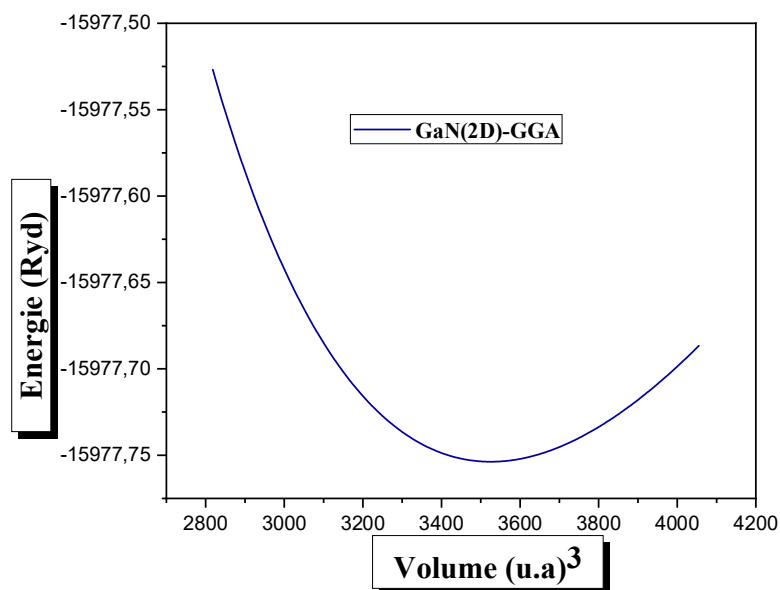
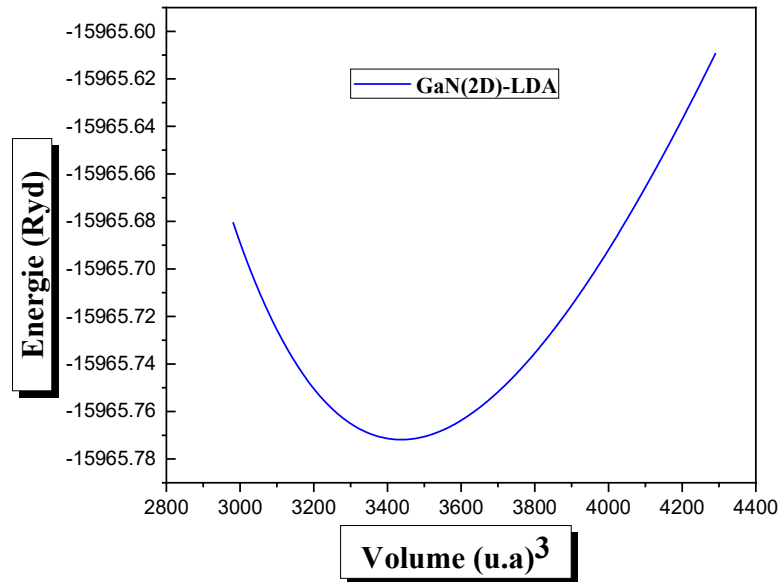
B' : La dérivée du module de compressibilité :

$$B' = \frac{\partial B}{\partial P} \quad (\text{IV.3})$$

Les positions atomiques de chaque composé sont calculées avec les approximations LDA et GGA. Des positions atomiques avec les données expérimentales disponibles. Les données calculées sont en bon accord avec les expériences et les travaux théoriques précédents.



Figures (IV.3) : La variation de l'énergie en fonction du volume du composé GaN (3D) calculée par GGA et LDA.



Figures (IV.4) : La variation de l'énergie en fonction du volume du composé GaN (2D) calculée par GGA et LDA.

Tableau (IV.4) : Les propriétés structurales des GaN (3D) et GaN (2D) de Murnaghan.

Composés	Paramètres	GGA	LDA	Théorique	Erreur relative (%)	
					GGA	LDA
GaN (3D)	a (Å)	3.219136	3.159373198	3.2131136 [6]	0.187	-1.7
	c (Å)	5.243735	5.147655215	5.244599 [6]	-0.016	-1.88
	c/a	1.628926209	1.629328	1.632248234 [6]		
	B (GPa)	188.5501	203.8233			
	B'	4.5864	4.7670			
	E_{\min}	-7989.050507	-7983.077148			
GaN (2D)	a (Å)	6.372659081	6.319855869	6.320771394 [7]	0.82	-0.014
	c (Å)	14.72229244	14.72229244	14.72229244 [7]	0	0
	B(Gpa)	31.3991	33.6404			
	B'	4.1890	4.6662			
	E_{\min}	-15977.753753	-15965.771839			

Pour la structure à trois dimensions 3D : D'après le tableau ci-dessus nous avons remarqué que l'erreur relative calculée par l'approximation GGA est toujours inférieure à l'erreur relative de la LDA car l'erreur relative de la GGA égale 0.187 % et de la LDA égale -1.7%.

Pour la structure à deux dimensions 2D : On remarque que l'erreur relative de la GGA est 0.82% plus élevée que LDA -0.014%. Alors on peut conclure que la LDA est mieux adaptée que la GGA pour le calcul des propriétés structurales pour la structure à deux dimensions 2D. Tandis que la GGA est mieux adaptée que la LDA pour le calcul des propriétés structurales pour la structure à trois dimensions 2D

On trouve que la LDA sous-estime le paramètre du réseau tandis que la GGA surestime ce paramètre.

D'après le tableau ci-dessus nous avons aussi remarqué que le module de compressibilité dans la structure à trois dimensions est supérieur à celui de la structure à deux dimensions car $B=188.55$ GPa, et 203.82 GPa dans la structure à trois dimensions 3D tandis que $B=31.39$ GPa, $B=33.64$ GPa dans la structure à deux dimensions 2D en utilisant la GGA et la LDA respectivement.

IV.5. Propriétés électroniques :

L'importance des propriétés électroniques d'un matériau réside dans le fait qu'elles nous permettent d'analyser et de comprendre la nature des liaisons qui se forment entre les différents éléments du matériau. Ces propriétés comprennent les structures de bandes, les densités de charges et les densités d'états.

IV.5.1. Structure de bandes :

Les bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. Ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles, lesquels sont séparés par des "bandes" d'énergie interdites. Les bandes d'énergie donnent les énergies possibles d'un électron en fonction du vecteur d'onde. Ces bandes sont donc représentées dans l'espace réciproque. Pour les semi-conducteurs le spectre est caractérisé par la présence de bandes de valence et de bandes de conduction dont la plus haute et la plus basse de celles-ci respectivement sont séparées par une bande interdite ou gap.

On définit le gap d'énergie comme la différence entre le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction.

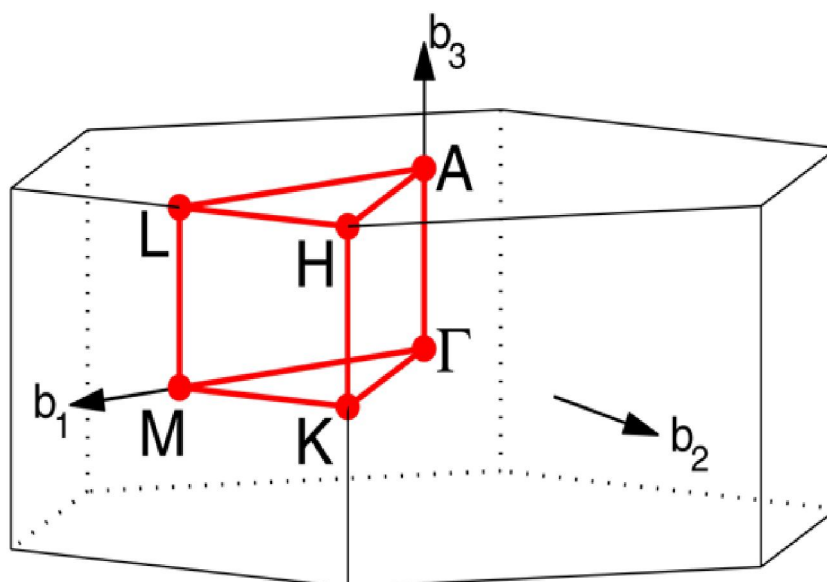
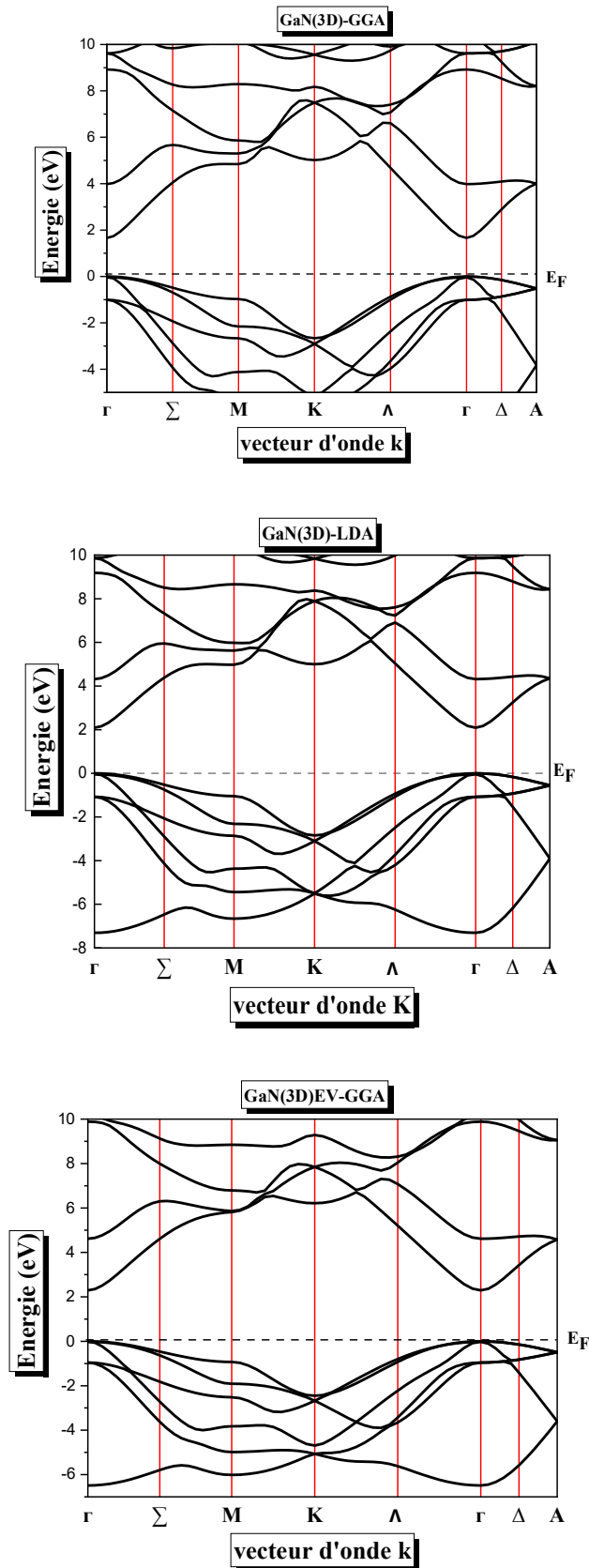
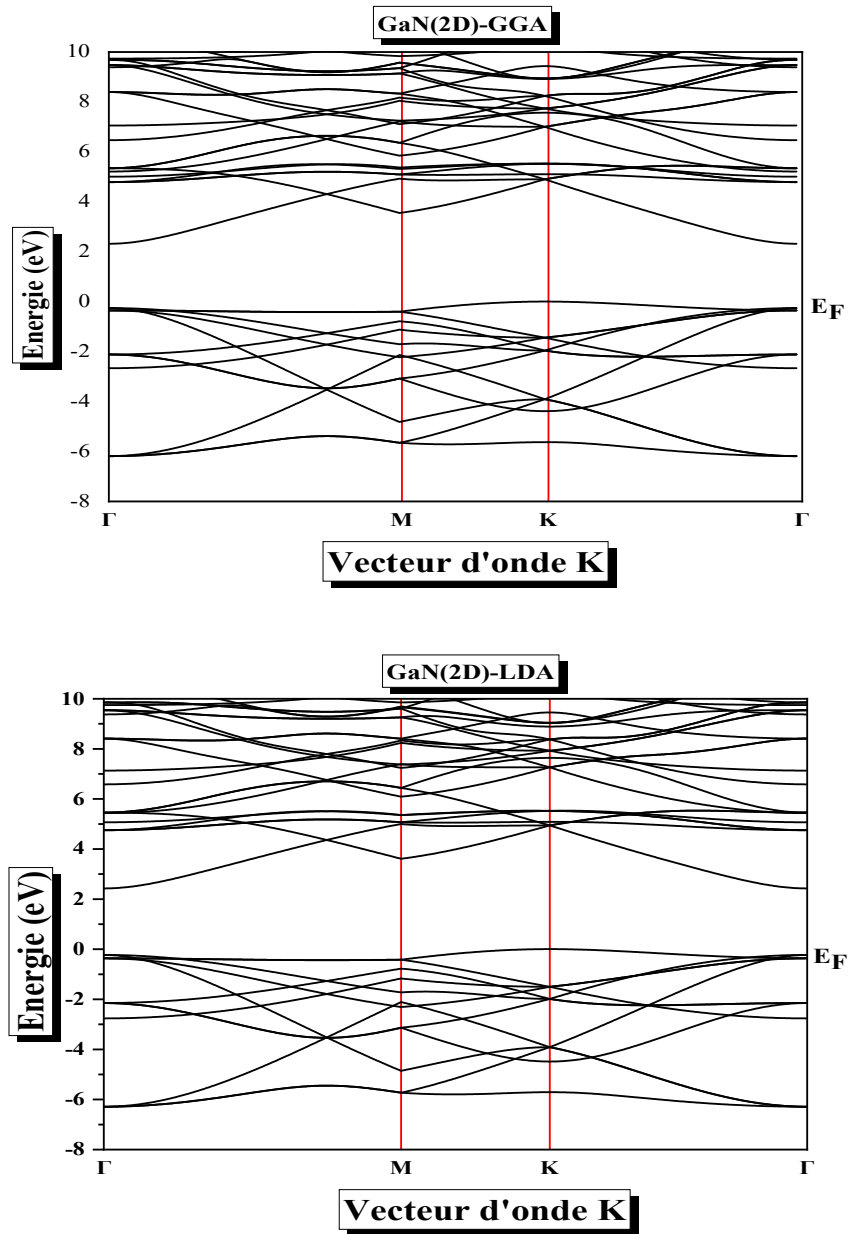


Figure (IV.5) : Représentation graphique de la première zone de *Brillouin* de Gallium-nitride GaN.



Figures (IV.5) : La structure de bandes de GaN (3D) en utilisant les trois approximations GGA LDA et EV-GGA.



Figures (IV.6) : La structure de bandes de GaN (2D) en utilisant les deux approximations GGA et LDA.

Les figures (IV.5, 6) représentent les structures de bandes électroniques selon les directions de haute symétrie de la zone de Brillouin associée à l'état fondamental. Notez que le composé GaN (3D) a une limite maximale de la bande (VBM) et le minimum de bande de conduction (CBM) situés au point $\Gamma \rightarrow \Gamma$ direct.

Nous remarquons que le composé GaN (2D) a une limite maximale de la bande au point K et le minimum de bande de conduction au point Γ , $k \rightarrow \Gamma$ indirect.

Comme nous remarquons dans les deux structures GaN (3D) et GaN (2D) on a une nature semi-conductrice.

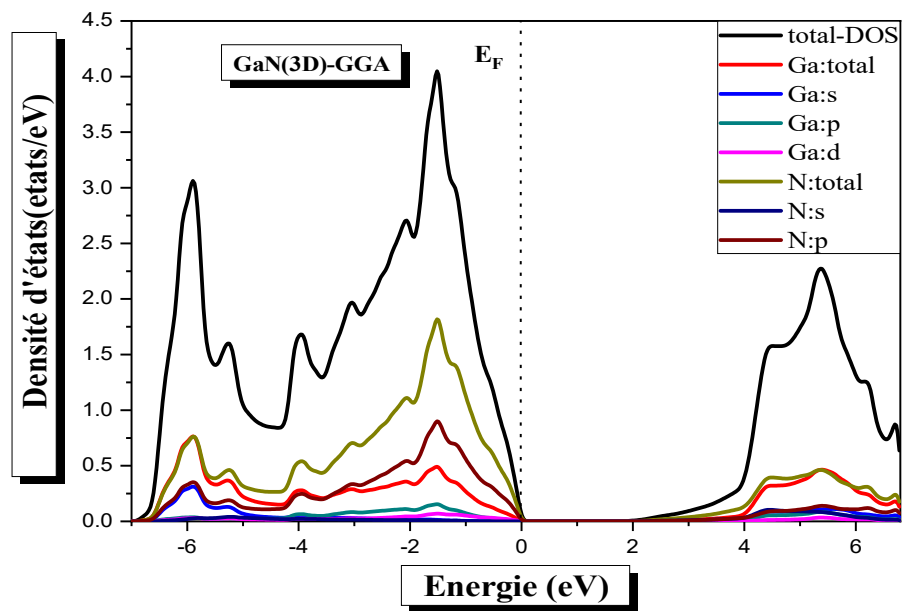
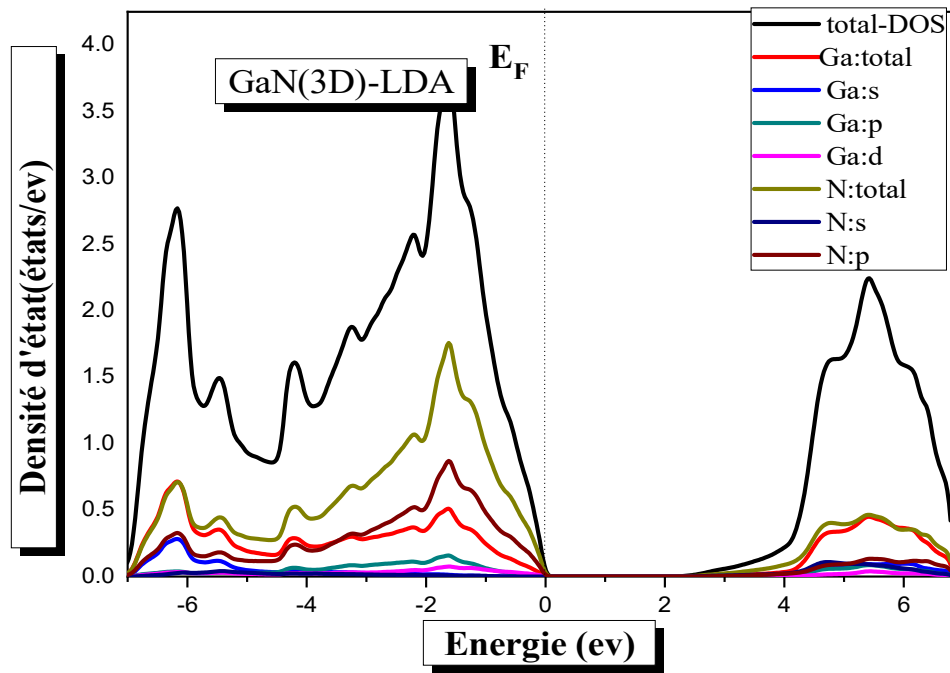
Dans la structure a trois dimensions ; Nous remarquons que nos valeurs du gap pour les approximations GGA, LDA et EV-GGA sont respectivement 1.661 eV, 2.091 eV, et 2.293 eV. Dans la structure a deux dimensions ; Nous remarquons que nos valeurs du gap pour les approximations GGA, et LDA sont respectivement 2.397 eV, et 2.501 eV. Alors on peut conclure que la structure à deux dimensions permet d'augmenter le gap énergétique.

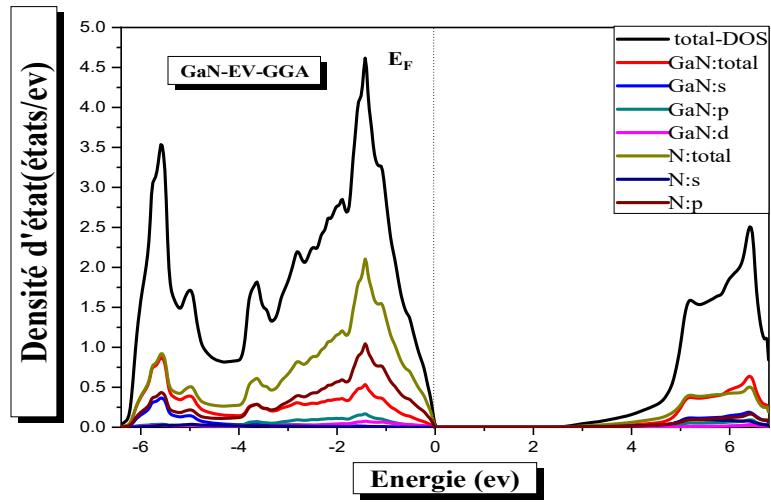
Tableau (IV.5) : Valeurs du gap d'énergie des deux composés calculées avec les approximations LDA, GGA et EV-GGA.

Composés	E _g (eV)		
	GGA	LDA	EV-GGA
GaN(3D)	1.661	2.091	2.293
GaN(2D)	2.397	2.501	-

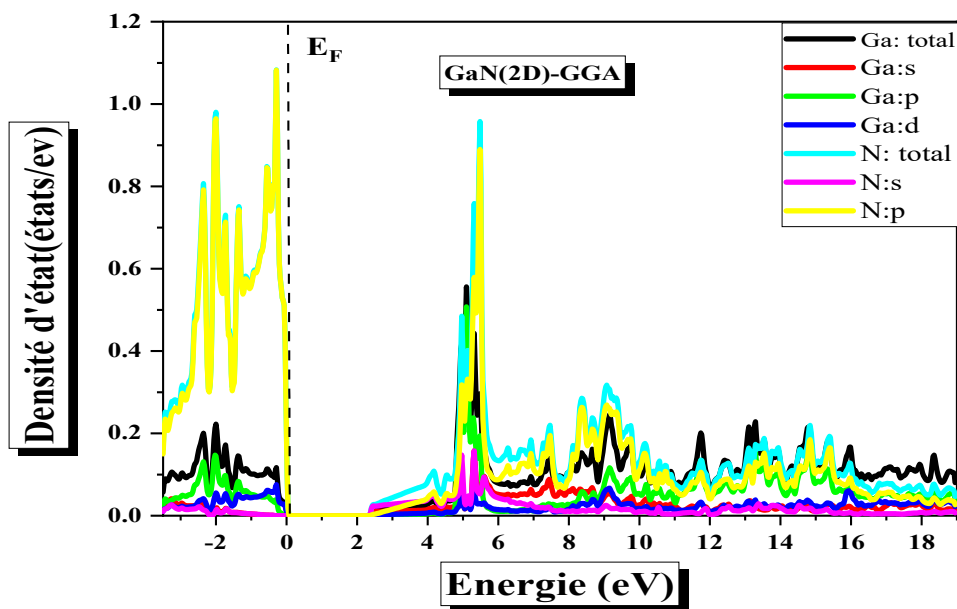
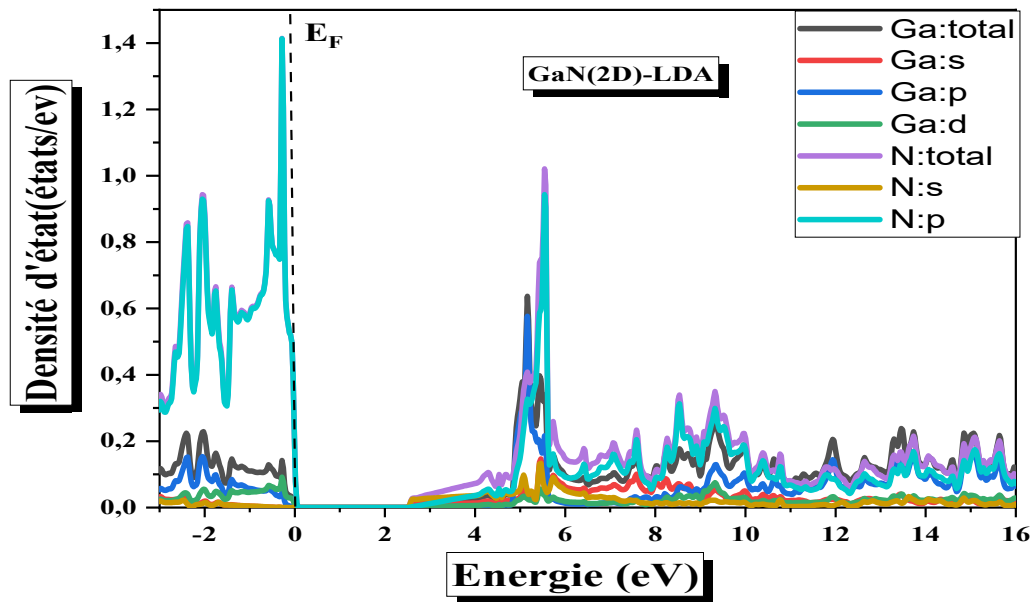
IV.5.2. Densité d'états électroniques du GaN :

La densité d'états (*DOS*) est une grandeur physique importante pour comprendre la nature de la structure de bandes électroniques. La plupart des propriétés de transport sont déterminées sur la base de connaissance de la densité d'états. On obtient ainsi les densités d'états partielles qui permettent de déterminer la structure des liaisons chimiques entre les atomes d'un cristal ou d'une molécule. Les projections de la densité d'état totale dépendent des rayons des sphères sur les quelles sont projetées les densités d'états partielles et ne donnent donc accès qu'à une information qualitative.





Figures (IV.7) : La densité d'états électroniques de GaN(3D) calculée par LDA, GGA et EV-GGA.



Figures (IV.8) : La densité d'états électroniques de GaN(2D) calculée par LDA et GGA.

Les Figures (IV.8) représentent la densité d'états totales et partielles de GaN (3D) calculée par GGA, LDA, EV-GGA.

- ✓ La partie entre (-6,5 eV et -6,1 eV), est principalement dominée par l'orbitale p du N et l'orbitale p du Ga.
- ✓ La partie entre (-4,8 eV et -3.5 eV) est contribué largement par l'orbitales p du N et l'orbitale p du Ga.
- ✓ La partie entre (-2,0 eV et 0 eV) est principalement dominée par l'orbitales p du N et l'orbitale p du Ga.
- ✓ La partie entre (3.5 eV et 6.5 eV) est dominée principalement par l'orbitales p du N et l'orbitale s du Ga avec une faible contribution de p du Ga.

Les Figures (IV.9) représentent la densité d'états totales et partielles de GaN (2D) calculée par GGA, LDA.

- ✓ La partie entre (-3 eV et -2 eV), largement contrôlée par l'orbitale p du N et l'orbitale p du Ga.
- ✓ La partie entre (-1.5 eV et 0 eV), est principalement contrôlée par l'orbitale p du N et l'orbitale p et d du Ga.
- ✓ La partie entre (4.8 eV et 6 eV), largement contrôlée par l'orbitale p du N, l'orbitale p du Ga avec une faible contribution de l'orbitale d du Ga et l'apparence s du N.
- ✓ La partie entre (6.8 eV et 7.9 eV), est principalement dominée par l'orbitale p du N, et l'orbitale s du Ga avec une faible contribution de p du Ga.
- ✓ La partie entre (9 eV et 18 eV), est principalement dominée par l'orbitale p du N et l'orbitale p du Ga avec une faible contribution de l'orbitale s du Ga.

Références :

- [1] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, WIEN2K, an augmented plane-wave + local orbitals program for calculating crystal properties, ISBN 3-9501031-1-2 (2001).
- [2] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. B 136 (1964) 864.
- [3] J. P. Perdew and Y. Wang, phys. Rev. B 45 (1992) 13244.
- [4] J. P. Perdew, S. Burke and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Let. 77 (1996).3865.
- [5] F. D. Murnaghan, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* .30(1944) 244.
- [6] Zoroddu, Agostino and Bernardini, Fabio and Ruggerone, Paolo and Fiorentini, Vincenzo, First-principles prediction of structure, energetics, formation enthalpy, elastic constants, polarization, and piezoelectric constants of AlN, GaN, and InN: Comparison of local and gradient-corrected density-functional theory, Physical Review, Serie 3. B - Condensed Matter (18,1978) .64.2001. 045208.
- [7] Petkov, V. and Gateshki, M. and Choi. J. and Gillan, E.G. and Ren, Y., Structure of nanocrystalline Ga N from X-ray diffraction, Rietveld and atomic pair distribution function analyses, Journal of Materials Chemistry, 15.(2005). 4654.

Conclusion générale

Conclusion générale :

Dans le cadre de cette thèse, nous avons étudié les différentes propriétés structurales, électroniques, des composés gallium nitride (GaN (3D), GaN (2D)) en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées FP-LAPW basée sur la théorie fonctionnelle de la densité DFT. Les effets de corrélation d'échange sont traités dans les cadres approximatifs suivants : GGA, LDA et EV-GGA.

Nos résultats concernant les propriétés structurales telles que le paramètre de réseau, le module de compressibilité, la stabilité des structures qui sont obtenus par les approximations GGA et LDA sont en excellent accord avec les résultats antérieurs.

L'étude des structures de bandes électroniques avec les approximations GGA et LDA nous a permis de conclure que les composés GaN (3D) et GaN (2D) sont semi-conducteurs.

Le composé GaN (3D) possède un gap direct utilisé avec les approximations GGA LDA et EV-GGA.

Le composé GaN (2D) possède un gap indirect utilisé avec les approximations GGA et LDA. Nous avons sélectionné la structure optimale sont évalués par l'extrapolation de l'énergie totale obtenue E_{\min} .

La densité d'états donne une explication détaillée sur la contribution des atomes (Ga, N) pour des différentes orbitales (s, p, d) dans la structure électronique.

À partir de tous ces résultats, il est évident que les composés Gallium nitride (GaN) étudiés sont des très bons mieux pour les futures applications dans les domaines de la nanotechnologie.

Résumé :

Ce travail rapporte des résultats basés sur des calculs de théorie fonctionnelle de la densité (DFT) utilisant la méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (FP-LAPW) employée dans le code informatique Wien2K pour calculer les propriétés physiques des nanomatériaux.

Gallium nitride GaN(3D) et GaN(2D), c'est un avenir dans la nanotechnologie.

Pour le potentiel d'échange-corrélation et calcul des propriétés électroniques des deux composés l'approximation du gradient généralisé (GGA), l'approximation de la densité locale (LDA) et EV-GGA. Les résultats obtenus sont comparés à d'autres travaux théoriques et à des données acquises expérimentalement.

Mots clés : GaN(3D), GaN(2D), Wien2k, FP-LAPW, DFT, GGA, LDA, EV-GGA.

Abstract :

This work reports results based on Density Functional Theory (DFT) calculations using the Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method employed in the Wien2K computer code to calculate the physical properties of Gallium nitride GaN(3D) nanomaterials. and GaN(2D) is a future in nanotechnology.

For the exchange-correlation potential and calculation of the electronic properties of the two compounds the generalized gradient approximation (GGA), the local density approximation (LDA) and EV-GGA. The results obtained are compared with other theoretical work and experimentally acquired data.

Key words : GaN(3D), GaN(2D), Wien2k, FP-LAPW, DFT, GGA, LDA, EV-GGA.

ملخص:

يُبلغ هذا العمل عن النتائج بناءً على حسابات النظرية الوظيفية للكثافة (DFT) باستخدام طريقة الموجة الخطية المعززة (FP-LAPW) المستخدمة في كود كمبيوتر Wien2K لحساب الخصائص الفيزيائية للمواد النانوية لنتريد الغاليوم (3D) GaN. و GaN (2D) هو مستقبل في تكنولوجيا النانو.

بالنسبة لإمكانية الارتباط التبادلي وحساب الخصائص الإلكترونية للمركبين، يتم تقريب التدرج المعمم (GGA) وتقريب الكثافة المحلية (LDA) و (EV-GGA). تمت مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها مع الأعمال النظرية الأخرى والبيانات المكتسبة تجريبياً.

الكلمات المفتاحية : EV-GGA, LDA, GGA, DFT, FP-LAPW, Wien2k, GaN(2D), GaN(3D)