

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
جامعة عمار تليجي بالأغواط
UNIVERSITE AMAR TELIDJI LAGHOUAT
كلية العلوم
FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT Sciences de la Matière



Mémoire de Master

Domaine : Sciences de la matière

Filière : Physique

Option : Physique des matériaux

Par :

SOUDANI SOUMIA

THEME

Calcul ab-initio de la résistance à la traction du mono-
borure de titane **TiB**

Soutenu publiquement le : 26-06-2019 devant le jury composé de :

Mr : LAGOUN Brahim	MCA	Président
Mr : DAHAME Tahar	MCB	Examineur
Mr : BOUROUROU Yahia	MCB	Examineur
Mr : GUEDDDOUH Ahmed	MCA	Encadreur

Année Universitaire 2018 - 2019

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail :

A mon père, qui m'a soutenue durant toutes les années des Études, et qui s'est toujours sacrifié pour me voir réussir.

*A celle qui m'a donné la vie, le symbole de tendresse,
Qui s'est sacrifiée pour mon bonheur et ma réussite, à ma
Mère.*

*A mes frères (Djamel, Hamid) et mes sœurs,
(Wafaa ; Khadidja ; Fatima et Zineb)*

A toute ma famille

SOUDANI

A tous mes amis

*Aux personnes qui m'ont toujours aidé et encouragé, qui
Étaient toujours à mes côtés, et qui m'ont accompagnaient
Durant mon chemin d'études, à tous mes collègues d'étude.
Et à tous ceux qui ont contribué de près ou de loin pour que ce
Projet soit possible, je vous dis merci.*

A tous ceux qui ont sacrifié leur temps pour la science.

Tous ceux qui me sont chers...

SOUIMIA

Remerciements

Nous remercions ALLAH le Tout-puissant de m'avoir donné le Courage, la volonté et la patience de terminer ce travail.

Je tiens tout d'abord exprimé mes remerciements les plus vifs à mon encadreur Dr. Gueddouh Ahmed Maître Conférence-A, Je lui exprime particulièrement toute ma reconnaissance pour sa patience, ses encouragements, son aide, son dévouement pour le travail, et sa disponibilité durant notre préparation de ce mémoire.

J'exprime mes sincères remerciements à monsieur LAGOUN Brahim Maître Conférence -A à l'Université de Laghouat, d'avoir accepté de présider le jury de ce mémoire. Je remercie également tous les membres de jury, en l'occurrence Messieurs DAHAME Tahar Maître Conférence -B à l'Université de Laghouat, et BOUROUROU Yahia Maître-Assistant -B de à l'Université de Laghouat pour acceptant d'examiner ce travail et de l'enrichir par leurs propositions.

J'adresse mes vives reconnaissances à tous les membres du laboratoire de Physique des matériaux de l'université de Laghouat, notamment son directeur Mr. LEFKHEIR Ibn- Khaldoun ; et Je remercie le Mr : DJOUMIKH Boubakar Leurs aide nous a permis de mener au bien nous calculs.

Je remercie tous mes enseignants du Département DES SCIENCES DE LA MATIERE qui ont fortement enrichit ma formation. Sans oublier mes collègues de la section 2ème année Master physique des matériaux.

<i>Table des matières :</i>	<i>i</i>
<i>Liste d'abréviations :</i>	<i>iv</i>
<i>Liste des figures :</i>	<i>v</i>
<i>Liste des tableaux :</i>	<i>vi</i>
<i>Introduction générale :</i>	<i>2</i>

Table des matières

Chapitre I : Etude bibliographique :

<i>I.1. Introduction :</i>	<i>5</i>
<i>I.2. Contrainte-déformation :</i>	<i>5</i>
<i>I.2.1. Définitions :</i>	<i>5</i>
<i>I.2.2. Contrainte</i>	<i>6</i>
<i>I.2.3. Déformation :</i>	<i>7</i>
<i>I. 3. Essais de traction :</i>	<i>7</i>
<i>I.3.1 Description générale d'une machine de traction :</i>	<i>8</i>
<i>I.3.2 Eprouvettes :</i>	<i>9</i>
<i>I. 4. Diagramme contrainte –déformation en Traction D'une éprouvette en métal</i>	<i>9</i>
<i>I. 4.1. Le module d'élasticité :</i>	<i>10</i>
<i>I.4.2. La limite d'élasticité (R_e) :</i>	<i>11</i>
<i>I.4. 3. La résistance à la traction R_m :</i>	<i>11</i>
<i>I.4.4. L'allongement à la rupture ϵ_r :</i>	<i>11</i>
<i>I.4.5. Quelques définitions :</i>	<i>12</i>
<i>I.4.5.1. La rigidité :</i>	<i>12</i>
<i>I.4.5.2. La résistance :</i>	<i>13</i>
<i>I.4.5.3. La ductilité :</i>	<i>12</i>
<i>I.5. Diagramme contrainte –déformation en traction des différents matériaux :</i>	<i>13</i>
<i>I.5.1. Un comportement fragile :</i>	<i>13</i>
<i>I.5.2. Un comportement ductile :</i>	<i>13</i>
<i>I.5.3. Un comportement élastique non linéaire :</i>	<i>13</i>
<i>I.6. Origine microscopique de l'élasticité</i>	<i>14</i>
<i>I.7. Contrainte uniaxiale</i>	<i>15</i>
<i>I.8. Les systèmes cristallins :</i>	<i>15</i>

<i>I.9. Bourure de métaux de transition :</i>	16
<i>I.9.1. Utilisations des métaux de transition :</i>	16
<i>I.9.2. Application industrielle des borures</i>	17
<i>I.9.3. Généralité</i>	17
<i>I.9.4. Les propriétés de borure de titane :</i>	18
<i>I.10. Le daigramme de phase du Ti - B :</i>	19
<i>Référence</i>	20

Chapitre II : DFT

<i>II.1.Introduction</i>	22
<i>II.2.Équation de Schrödinger pour le cristal</i>	22
<i>II.3.Approximations fondamentales</i>	24
<i>II.3.1.L'approximation de Born-Oppenheimer</i>	24
<i>II.3.2. L'approximation de Hartree</i>	24
<i>II.3.3. L'approximation de Hartree_Fock :</i>	25
<i>II.4. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) :</i>	26
<i>II.4.1. Théorèmes de Hohenberg et Kohn (1964)</i>	26
<i>II.4.1.1. Le premier théorème</i>	26
<i>II.4.1.2. Le deuxième théorème (principe variationnel)</i>	27
<i>II.4.2. Approche de Kohn-Sham</i>	27
<i>II.5.Les approximations utilisées en DFT</i>	29
<i>II.5.1.Approximation de la Densité Locale (LDA)</i>	29
<i>II.5.2.Approximation du gradient généralisé (GGA) :</i>	30
<i>II.6. Les pseudo-potentiels :</i>	30
<i>II.7. Code de CASTEP :</i>	31
<i>II.8. Conclusion</i>	31
<i>Référence :</i>	32

Chapitre III : Résultats et discussions

<i>III.1.Introduction :</i>	34
<i>III.2.Remarque :</i>	34
<i>III.3.La première partie : sans l'effet de pression :</i>	34
<i>III.3.1. Propriétés structurales du composé TiB:</i>	34
<i>III.3.2.Paramètres de calcul :</i>	34
<i>III.3.3.Cristallographie de la structure TiB:</i>	35
<i>III.3.4.Convergence de E_{cut} et NK-point :</i>	36
<i>III.3.5. L'optimisation:</i>	36
<i>III.4.Propriétés électroniques :</i>	38
<i>III.4.1.La structure de bande d'énergie :</i>	39
<i>III.4.2.Densité d'état électronique :</i>	40
<i>III.5. Propriétés élastiques :</i>	43
<i>III.5.1.Tenseur des constantes élastiques C_{ij}:</i>	43
<i>III.5.2.Stabilité mécanique de la structure orthorhombique :</i>	43
<i>III.5.3.Module d'élasticité</i>	45
<i>III.6. Propriété d'anisotropie élastique</i>	46
<i>III.7.La température de Debye :</i>	49
<i>III.8.La deuxième partie : sous l'effet de pression</i>	51
<i>III.8.1.L'effet sous pression de traction.</i>	51
<i>III.8.2.Introduction :</i>	51
<i>III.8.3.Méthode de calcul</i>	51
<i>III.8.4. Relation (contrainte – déformation)</i>	53
<i>III.9. Sous l'effet de pression hydrostatique</i>	53
<i>III.10. Conclusion</i>	54
<i>Référence</i>	55
<i>Conclusion générale</i>	57

Liste des abréviations

DFT : Théorie de la fonctionnelle de la densité (Density Functional Theory)

CASTEP : (Cambridge Serial Total Energy Package Software

BFGS: **Algorithme** Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shann

DOS: Densité d'états (Density of states)

GGA : Approximation du gradient généralisé (Generalized Gradient Approximation)

GGA-PBE: Generalized Gradient Approximation Perdew-Burk-Ernzerhof

LDA : Approximation de la densité locale (Local Density Approximation)

PDOS : Densité d'états partielle (Partial density of states)

PP : Pseudo potentiel (Pseudo-potentiel)

PW: Onde plane (Plane Wave)

P.W: position de Wyckoff

ZB : Zone de Brillouin (Brillouin zone)

Cij: ConstantsElastique

S_{ij}: Compliances

Θ_D: Température de Debye

ħ : Constante de Planck réduite (appelée aussi Constante de Dirac)

H: Hamiltonien total du cristal

Ψ : Fonction d'onde du système

σ :Contrainte

G : Module de cisaillement

G_V: Module de cisaillement de Voigt

G_R: Module de cisaillement de Reuss

N_A: Nombre de l'Avogadro

N_{kpt} : Nombre de points k

ν : Coefficient de Poisson

E : Module de Young

Liste des figures :

Chapitre I : Etude bibliographique

Figure .1 : Illustration de contrainte uniaxiale .	6
Figure .2 : Définition des composantes du tenseur des contraintes autour d'un point O	7
Figure .3: Image de gauche : éprouvette de traction plate et cylindrique et image droite : exemple de dispositif de traction du centre des matériaux	8
Figure .4 : Courbe contrainte-déformation. Domaine élastique et domaine plastique	9
Figure .5: Traction simple : force et allongement	10
Figure .6: Déformations dans les trois directions	10
Figure .7: Deux figures : Courbe contrainte-déformation, Limite d'élasticité et résistance à la traction ; et l'éprouvette de traction	11
Figure .8 : Courbe contrainte-déformation. Deux matériaux avec des rigidités et de ductilités différentes	12
Figure .9 : Courbe contrainte-déformation (Comportement fragile)	14
Figure .10 : Courbe contrainte-déformation (Comportement ductile)	14
Figure .11 : Courbe contrainte-déformation. Comportement élastique non linéaire.	14
Figure .12 : Courbe contrainte-déformation. Origine microscopique de l'élasticité.	14
Figure.13. : Contrainte de traction	15
Figure .14: Tableau périodique des éléments, les métaux de transition sont en bleu clair.	17
Figure .15 : Diagramme de phase du Ti - B	19

Chapitre III : Résultats et discussions

Figure .1 : La structure cristalline du composé TiB	36
Figure .2 : Première zone de Brillouin pour le réseau orthorhombique (PNMA) N°62 et les points de haute symétrie. (b_1 , b_2 et b_3 sont les vecteurs du réseau réciproque).	39
Figure .3: La structure des bandes du TiB	40
Figure .4: Le DOS Partielles du TiB	41
Figure .5 : DOS total du TiB	42
Figure .6 : DOS total du TiB et l'orbitale (d) de Ti	42
Figure .7 : Représentation 3D de la dépendance du module de Young (partie gauche) et les intersections de la surface avec les plans (xy), (xz), (yz) (partie droite) pour le composé TiB	48
Figure .8 : Représentation 3D de la dépendance du module de compressibilité (partie gauche) et Les intersections de la surface avec les plans (xy), (xz), (yz) (partie droite) pour le composé TiB	48
Figure .9 : Courbe contrainte-déformation montrant la limite déformation élastique du composée TiB dans les directions (a ; b ; c)	52
Figure .10 : Courbe contrainte-déformation montrant la limite déformation élastique du composée TiB selon les plans (xy, yz, xz)	52
Figure .11 : Courbe contrainte-déformation. Limite du domaine élastique du composée TiB (Traction hydrostatique) à la direction a ; b ; et c	53

Figure .12 : Courbe contrainte-déformation. Limite du domaine élastique du composé TiB (Compression hydrostatique) à la direction a ; b ; et c.....	51
--	-----------

Liste des tableaux

Chapitre I : Etude bibliographique

Tableau I.1 : Les 7 réseaux cristallins :.....	16
---	-----------

Chapitre III : Résultats et discussion

Tableau III- 1 : Les paramètres, le groupe d'espace et les nombres atomiques du composée TiB.....	32
Tableau III- 2 : Valeurs des paramètres optimisé par le code CASTEP de matériaux TiB.....	34
Tableau III- 3 : Energie de cohésion et de formation de TiB.	35
Tableau III- 4: Les constantes C_{ij} calculées pour les TiB.....	41
Tableau III- 5: Le module de cisaillement et de compression de Reuss et Hill PBE en GPa.....	43
Tableau III- 6: Modules d'élasticités	43
Tableau III-7: Température de Debye, densité et vitesse de propagation des ondes	47

Introduction générale

Introduction générale :

La physique de la matière condensée joue un rôle de plus en plus important dans les applications technologiques, et ce rôle ne fera que progresser dans beaucoup de domaines.

Avant d'employer les matériaux (solides) dans l'industrie, il faut s'assurer la qualité de leurs propriétés structurales, électroniques, mécaniques, optiques...etc.

Les propriétés physiques d'un solide sont étroitement liées au comportement des électrons qui le constituent. Le principal but de la théorie de la matière condensée est de résoudre le problème de la structure électronique des solides. La théorie de la structure électronique est utile à la fois pour comprendre et interpréter les résultats expérimentaux, et pour servir comme moyen de prédiction.

Pour une compréhension fondamentale de la structure électronique et par conséquent des propriétés des matériaux, la méthode dites *ab-initio*, basées sur la théorie quantique fondamentale, utilisent seulement les paramètres de calcul pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Cette méthode est devenue aujourd'hui un outil de base pour l'étude des propriétés structurales, électroniques, mécaniques, optiques...etc. Elle est aussi un outil de choix pour l'étude de certains effets difficiles ou impossibles de déterminer par voie expérimentale et pour la prédiction de nouveaux matériaux, et elle est parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire.

La puissance des calculs *ab-initio* a pour origine le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) et ses deux approximations de l'énergie d'échange et de corrélation : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

Le titane et ses alliages sont des métaux présentant de nombreuses propriétés très intéressantes : résistance mécanique spécifique élevée, bonne résistance à la corrosion, et parmi ses alliages on trouve le TiB qui est l'objet de certains aspects fondamentaux de la mécanique des matériaux, utilisant la réponse du matériau aux contraintes unidirectionnelles pour donner un aperçu sur les propriétés mécaniques sans aborder les complexités des états de contraintes multidirectionnelles, et on se limitera au comportement de petites déformations, ou on s'intéresse uniquement sur les courbes de contrainte-déformation (Loi de Hooke) et la réponse du matériau au comportement linéaire (élastique), ou la limite d'élasticité est la contrainte à partir de laquelle un matériau arrête de se déformer d'une manière élastique, réversible et

commence donc à se déformer de manière irréversible, les courbes conventionnelle de traction des matériaux montre d'une manière générale que le la transition élastique-plastique diffère d'un matériau fragile (céramiques,...etc.) à un matériau ductile (métaux, alliages métalliques,...etc.)

Ce mémoire de master a pour but de contribuer à la détermination par la méthode pseudo-potentielle PP, les propriétés structurales, élastiques et anisotropies du composé TiB, dans le but principale est de prédire la pression de traction qui sépare la transition élastique-plastique du matériau et de savoir la direction la plus dure à la traction contre la direction la plus faible, tout on a appliqué des pressions uni axiales selon les trois directions (xx, yy, et zz) et bi axiales (xy, xz, et yz) afin de tracer les courbes contrainte-déformation.

Ce travail est divisé en trois chapitres ainsi qu'une introduction générale et une conclusion générale.

Les chapitres I et II sont de nature plutôt théorique tandis que le chapitre III est consacré aux détails de calcul et les résultats obtenus lors des calculs numériques sur le TiB.

Le premier chapitre et une recherche bibliographique présente la théorie d'essai à la traction des matériaux dans le domaine de déformation élastique sans entrer dans le domaine de déformation plastique.

Le chapitre II présente la théorie fonctionnelle de la densité (DFT), ainsi que la méthode de calcul *ab-initio* utilisée dans ce cadre moyennant le code de calcul Castep qui utilise l'approximation pseudo potentiels (pp).

Le dernier chapitre présente dans une première partie les résultats d'optimisation des calculs des propriétés structurales, électroniques, élastiques et anisotropie du TiB sans l'effet de pression. La deuxième partie présente les résultats de calcul TiB sous l'effet de pression de traction.

Finalement, je termine par une conclusion générale qui regroupe tous les principaux résultats de mon travail

Chapitre I

Etude bibliographique

I.1. Introduction

L'élasticité est un sujet intéressant qui traite la relation entre déformations et contraintes d'un solide sous l'influence des forces externes. Elle est présente dans beaucoup domaines :

- En génie civil ou l'importance à l'analyse de déformation comprenant les barres, les poutres, les plaques,...etc.
- En construction mécanique qui emploie l'élasticité dans de nombreux problèmes dans l'analyse et la conception des éléments de machine. De telles applications incluent l'analyse des contraintes, des déformations de contact, l'analyse de contrainte thermique, la mécanique de rupture.
- En technologie aéronautique et aérospatiale incluent la déformation, la rupture, et l'analyse de fatigue dans les macrostructures.

Robert Hooke en 1678 a proposé pour la première fois le concept de la relation élastique de force-déformation donc la relation entre déformations et contraintes en élasticité, cependant, la formulation principale de la théorie mathématique d'élasticité n'a pas été développée jusqu'au 19ème siècle, ou en 1821 Navier présenté ses investigations sur les équations générales de l'équilibre, et ceci a été rapidement suivi par Cauchy qui a étudié les équations de base d'élasticité et a développé la notation de déformation en un point. Une longue liste de scientifiques et de mathématiciens ont continués le développement de la théorie comprenant Bernoulli, Kelvin, Poisson, Lamé, Saint-Venant, Betti, Kirchhoff, Rayleigh, Kolossoff, et d'autres. Dans ce chapitre on va rappeler les principales relations entre déformation contrainte.

I.2. Contrainte-déformation

I.2.1 Définitions

Lorsqu'on déforme un matériau, on constate qu'aux faibles déformations il se comporte comme un élastique. La force appliquée est proportionnelle à l'allongement, le matériau reprend son état initial une fois la sollicitation cessée. C'est le domaine de déformation élastique. Au-delà d'une certaine force, l'allongement n'est plus proportionnel à la force appliquée. Une fois la force est supprimée, on enregistre une déformation permanente. C'est le domaine de déformation plastique.

La plasticité est un mécanisme qui permet aux métaux de bien résister aux sollicitations mécaniques extérieures, comme les chocs, une des raisons capitales de leur utilisation. Elle est caractérisée par [1]:

- L'irréversibilité (la permanence) de la déformation.
- La non-proportionnalité de la contrainte et de la déformation.
- L'apparition de contraintes internes dont l'origine se situe à l'échelle atomique.

I.2.2. Contrainte

Pour une traction simple, la contrainte est défini comme étant la force F qui agit sur une unité de surface S du matériau. Elle est donnée par la relation [2]:

$$\sigma = F/S \quad (I.1)$$

Unité de mesure : Pascal (Pa). Considérant un corps solide soumis à une force uni axiale F sur la section S défini par le plan perpendiculaire à F (Figure I.1). Si on décompose cette force en forces élémentaire dF agissant sur des éléments de surfaces dS , la contrainte σ est défini par le rapport dF/dS [2].

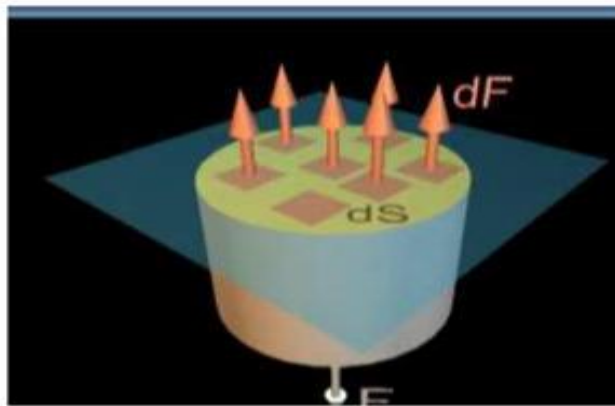


Figure .1 :Illustration de contrainte uniaxiale [2].

Définir un état de contrainte en un point donné d'un matériau soumis à une force extérieure, nécessite de connaître les composantes de la force appliquée sur les trois faces perpendiculaires d'un cube infinitésimal considéré autour de ce point (figureI.2), ce qui correspond aux neuf composantes qui définissent un tenseur dit de contrainte de rang 2 [3].

$$\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix}$$

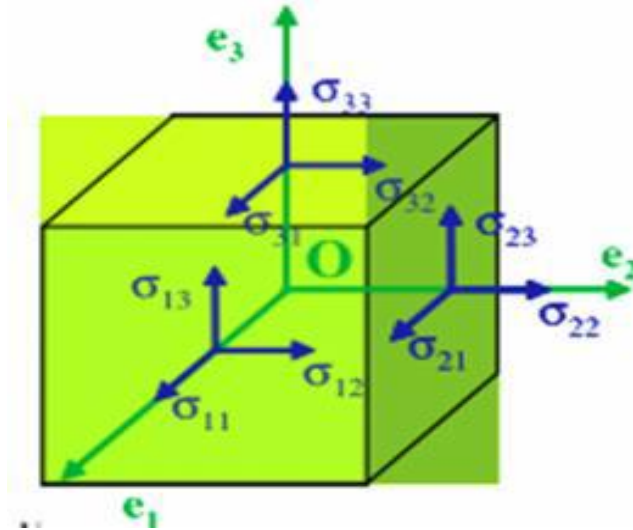


Figure .2: Définition des composantes du tenseur des contraintes autour d'un point O [4].

I.2.3. Déformation

La déformation indique dans quelles proportions les liaisons inter atomiques (à l'échelle microscopique) et la structure elle-même (l'objet, à l'échelle macroscopique) ont été déformées. La déformation, pour une traction simple, est définie comme le rapport de l'allongement ΔL à la longueur initiale L_0 [1]. L est la longueur finale après déformation.

$$\epsilon = \frac{\Delta L}{L_0} = \frac{L - L_0}{L_0} \quad (I.2)$$

I. 3. Essais de traction

L'essai de traction constitue l'un des essais les plus utilisés pour la caractérisation mécanique des matériaux. Etant purement uni axial du moins tant qu'il n'y a pas de striction (diminution catastrophique de la section de l'éprouvette au centre de celle-ci), il permet de

s'affranchir des méthodes de calcul inverse pour aboutir directement à une loi de comportement uniaxiale. il permet de déterminer de nombreuses grandeurs normalisées, comme la contrainte à rupture, la contrainte maximale, la limites d'élasticité, etc , nécessaires dans les calculs de structure. Nous donnons ici tout d'abord la description générale d'une machine de traction, puis des éléments concerna les éprouvettes, les mesures de déformation et de charge appliquée [5].

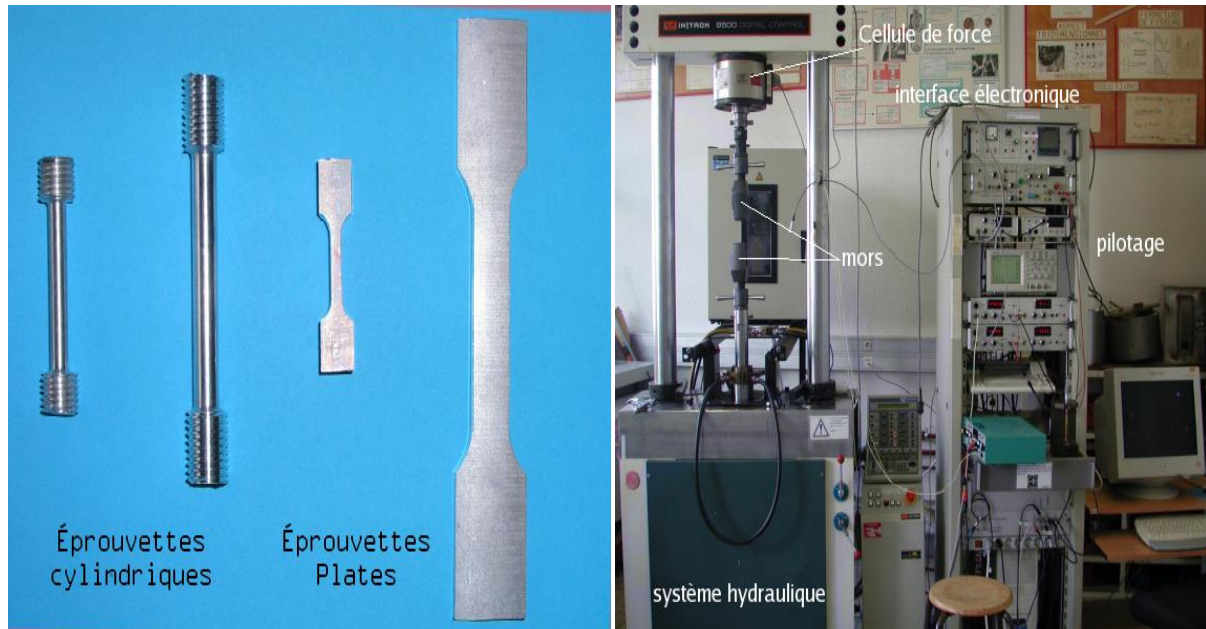


Figure .3: Image de gauche : éprouvette de traction plate et cylindrique et image droite : exemple de dispositif de traction du centre des matériaux [5].

Les extrémités sont plus épaisses pour moins se déformer, elles se raccordent à la section utile (plus étroite et longue pour obtenir un état de contrainte réellement uni axial) par des congés usinés de façon à éviter de trop fortes concentrations de contraintes (donc avec un rayon de courbure aussi grand que possible).

I.3.1 Description générale d'une machine de traction :

Une machine de traction est constituée d'un bâti portant une traverse mobile. L'éprouvette de traction, vissée ou enserrée entre des mors, selon sa géométrie, est amarrée à sa partie inférieure a la base de la machine et à sa partie supérieure à la traverse mobile (dans le cas d'une machine mécanique) ou au vérin de traction (dans le cas d'une machine hydraulique). Le déplacement de la traverse vers le haut réalise la traction. Une machine de traction comporte

une cellule de charge, qui permet de mesurer l'effort appliqué à l'éprouvette et le déplacement de l'éprouvette peut être suivi de diverses façons. Les dispositifs expérimentaux sont généralement asservis et peuvent être pilotés à vitesse de montée en charge, à charge constante, à vitesse de déformation constante, etc... selon ce qui peut être proposé par le système de pilotage.

I.3.2 Eprouvettes :

Les éprouvettes de traction adoptent deux géométries : cylindrique ou plate. La section doit être constante sur une longueur suffisante pour obtenir un état de contrainte homogène sont usinées des têtes d'amarrage avec des rayons de courbures suffisamment grands pour éviter des concentrations de contrainte excessives. Dans le cas des éprouvettes plates, le centrage de l'éprouvette peut devenir problématique si des trous calibrés ne sont pas percés dans les têtes.

I. 4. Diagramme contrainte – déformation en traction d'une éprouvette en métal

L'application d'une force provoque initialement une déformation élastique de l'éprouvette. Cela se traduit sur le diagramme par une droite car la déformation est proportionnelle, pour un métal, à la contrainte (loi de HOOKE) [6].

Cette déformation élastique est réversible. Si la contrainte est annulée, l'éprouvette revient instantanément à sa forme initiale. Cette déformation élastique est suivie d'une déformation irréversible (permanente) appelée déformation plastique, qui se traduit sur le diagramme par une courbe qui se termine au moment de la rupture de l'éprouvette.

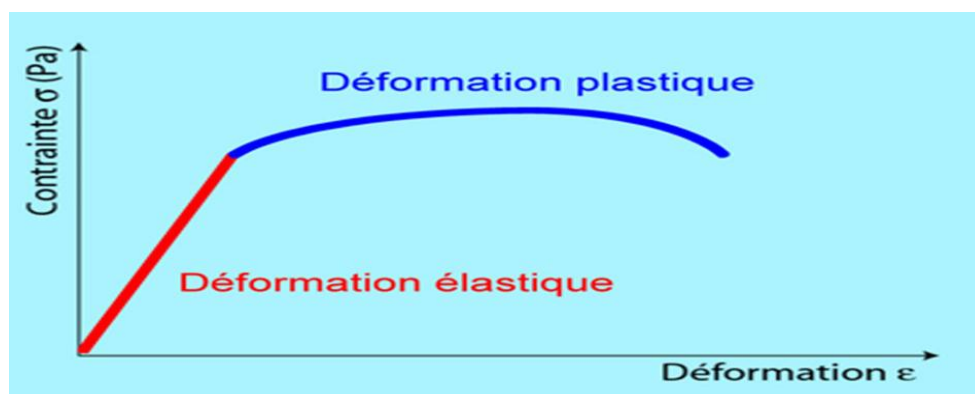


Figure .4 : Courbe contrainte-déformation. Domaine élastique et domaine plastique [7].

Le module d'élasticité E (ou module de YOUNG) représente la pente du domaine élastique du diagramme contrainte-déformation.

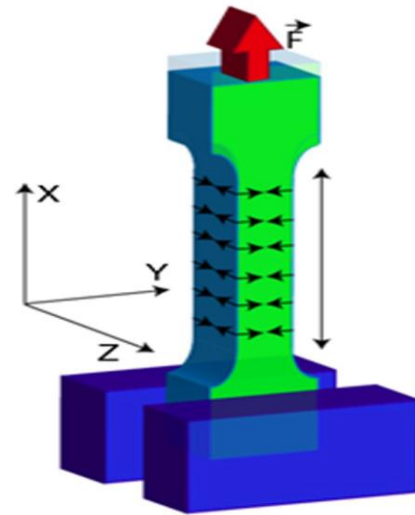
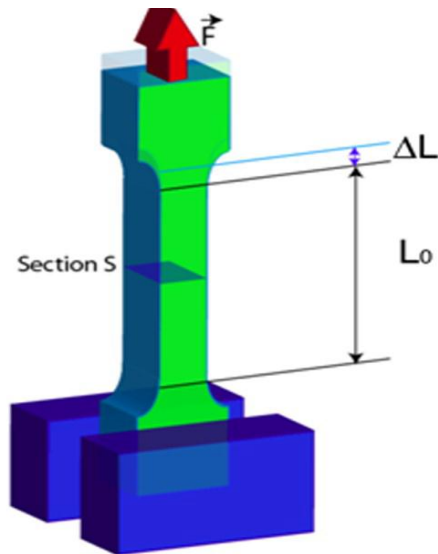


Figure .5 Traction simple : force et allongement **Figure .6** déformations dans les trois directions.

I. 4.1. Le module d'élasticité :

Si l'on raisonne, par simplification, sur un corps parallélépipédique supposé a une seule dimension dans un essai de traction dans un seul axe (uni axiale, selon l'axe des x), l'éprouvette subit un allongement (figure. I. 5). Pour les petites déformations, il existe une relation linéaire entre la contrainte et la déformation :

$$\sigma_x = E \cdot \epsilon_x = \frac{E \cdot \Delta L}{L_0} = \frac{E (L - L_0)}{L_0} \quad (I-3)$$

E est le module d'élasticité ou module de Young

En réalité, l'éprouvette se déforme dans les 3 directions (figure.6).

Dans le sens Ox il y a un allongement, dans les sens Oy et Oz il y a raccourcissement.

Dans ce cas de traction simple, si les contraintes σ_y et σ_z sont nulles, les déformations ϵ_y et ϵ_z ne sont pas. Les 3 déformations sont reliées par le coefficient de POISSON [8].

$$\epsilon_x = -\nu \epsilon_y = -\nu \epsilon_z \quad (I-4)$$

ν est le coefficient de Poisson.

I. 4.2. La limite d'élasticité (R_e) :

Correspond à la contrainte à partir de laquelle le matériau commence à se déformer plastiquement. En pratique, bien que la définition soit simple, cette limite est difficile à apprécier car le passage du domaine élastique au domaine plastique se fait de façon progressive. La difficulté de lecture donnerait des interprétations erronées de cette limite d'un laboratoire à l'autre. Pour s'en affranchir, on a déterminé une limite conventionnelle d'élasticité à 0,2% ($R_{e0,2}$). C'est la contrainte pour laquelle on mesure une déformation plastique de 0,2% [7]

I. 4.3. La résistance à la traction R_m :

Se définit comme la contrainte maximale atteinte durant l'essai de traction.

I. 4.4. L'allongement à la rupture ϵ_r :

Que l'on peut lire sur le diagramme ou sur l'éprouvette rompue.

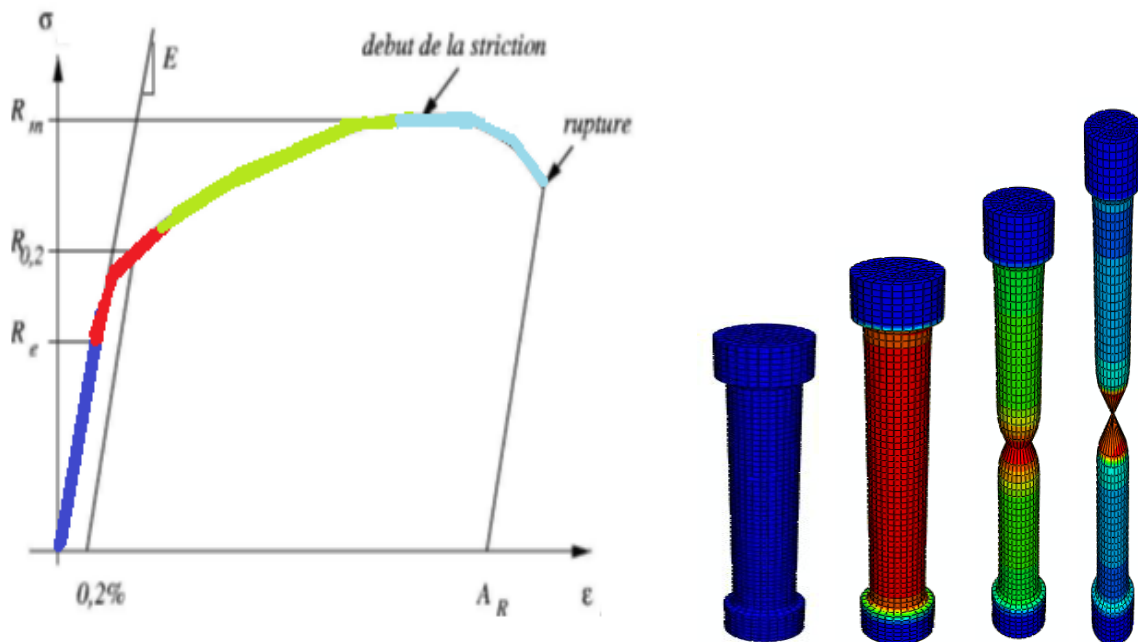


Figure 7. Deux figures : Courbe contrainte-déformation, Limite d'élasticité et résistance à la traction [6] ; et l'éprouvette de traction .

I. 4 .5. Quelques définition :

On peut également définir certaines caractéristiques déterminées par l'essai de traction :

I. 4 .5.1. La rigidité :

Est fonction de l'énergie des liaisons entre les atomes ou les molécules constituant le matériau. On mesure la rigidité principalement par le module d'YOUNG. Plus ce module est élevé, plus le matériau est rigide.

I. 4 .5.2. La résistance :

Caractérise la contrainte maximale qu'un matériau supporte avant de se rompre. Cette résistance est fonction de l'intensité des liaisons mais également de la forme des pièces ou de ses défauts.

I. 4 .5.3. La ductilité :

Correspond à la capacité d'un matériau à se déformer de façon permanente avant de se rompre. Plus l'allongement à la rupture est élevé, plus le matériau est considéré comme ductile. A l'opposé, lorsque la déformation permanente est très réduite ou nulle, on parle d'un matériau fragile. Un matériau fragile peut présenter une résistance très élevée.

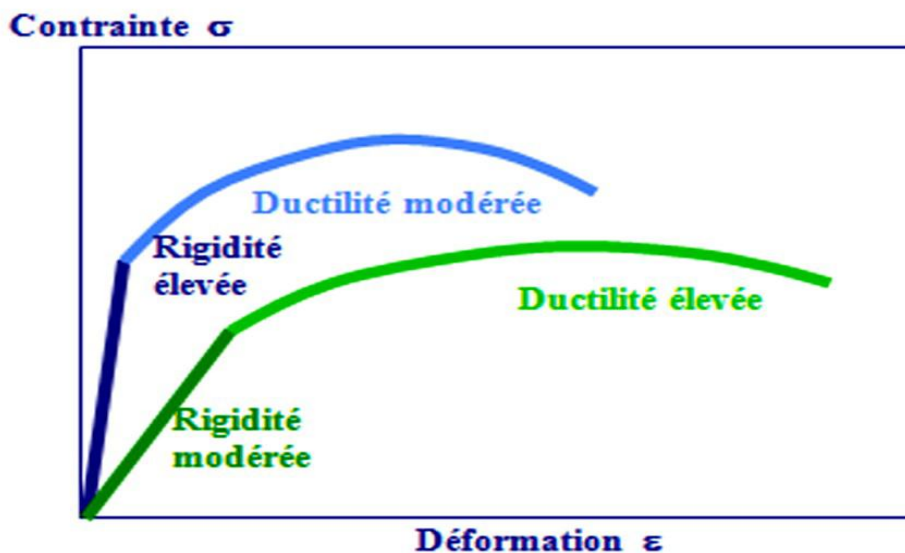


Figure .8 : Courbe contrainte-déformation. Deux matériaux avec des rigidités et des ductilités différentes.

I.5. Diagramme contrainte - déformation en traction des différents matériaux :

Nous avons raisonné jusqu'à maintenant sur un seul matériau de type métallique. Si l'on analyse les courbes de traction de l'ensemble des matériaux on retrouve trois comportements possibles.

I.5.1. Un comportement fragile :

Le matériau ne présente pas de domaine de déformation plastique, la rupture se produit alors que les déformations sont purement élastiques. Les verres, les céramiques et les polymères thermodurcissables sont des matériaux à rupture fragile [9].

I.5.2. Un comportement ductile :

Une déformation plastique irréversible suit la déformation élastique réversible. La taille de police thermoplastique présentant ce type de comportement. Dans les métaux, les liaisons interatomiques ne constituent pas un obstacle majeur à la propagation des dislocations. Les métaux sont donc des matériaux ductiles avec de faibles limites d'élasticité [10].

I.5.3. Un comportement élastique non linéaire :

La déformation élastique n'est pas proportionnelle à la charge qui la provoque. Un tel comportement est caractéristique de certains polymères thermoplastiques et des élastomères. La force de rétraction élastique est engendrée par des mouvements browniens (agitation thermique des molécules) qui agitent les segments de chaînes macromoléculaires et cette force est très faible [5].

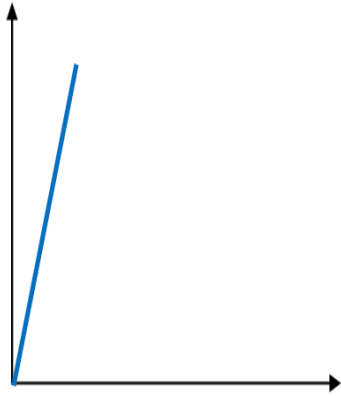


Figure .9 : Comportement fragile



Figure .10 : Comportement ductile [10].

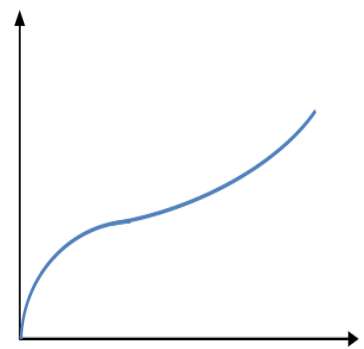


Figure .11 : Comportement élastique non linéaire [10].

I.6. Origine microscopique de l'élasticité

L'origine microscopique de l'élasticité est la petite variation de la distance inter-atomique qui engendre une forte variation de l'énergie interne du système (figure -12) tel que :

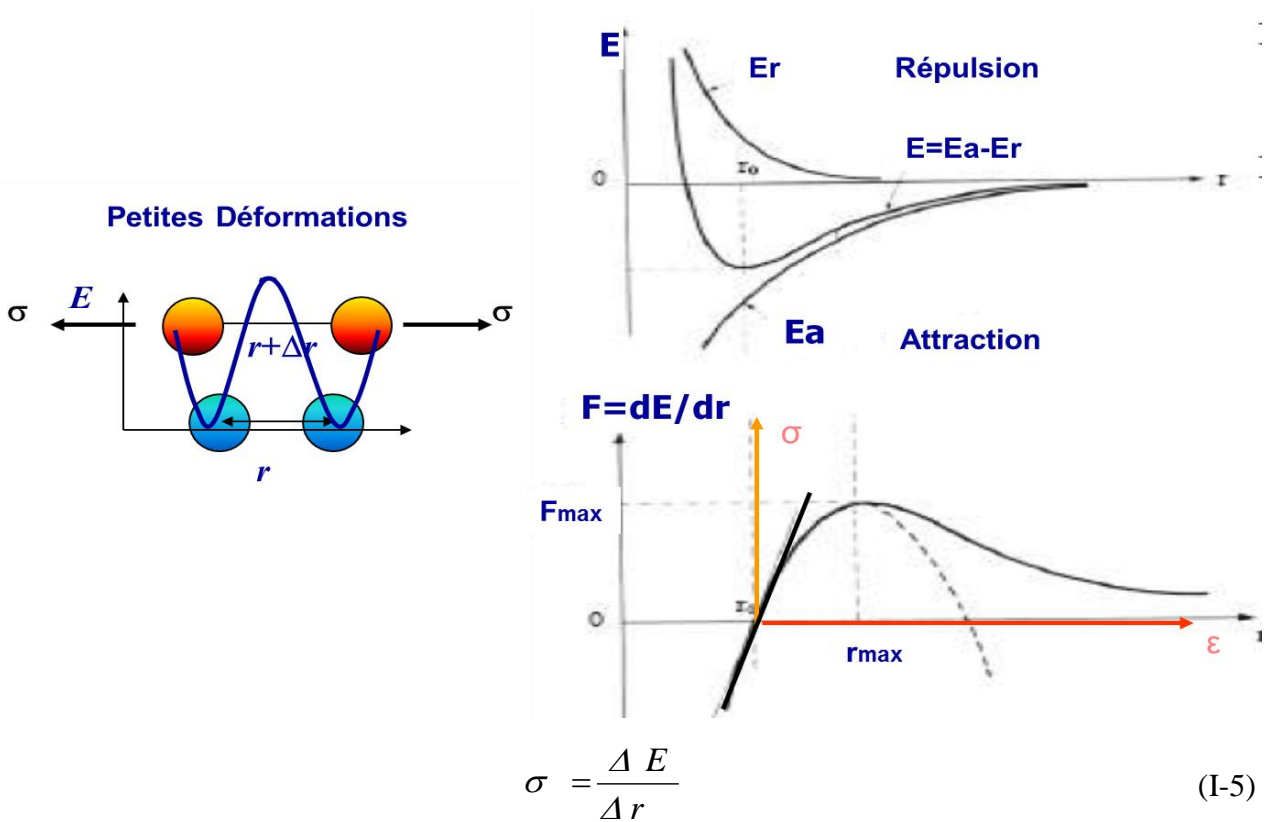


Figure .12. Courbe contrainte-déformation. Origine microscopique de l'élasticité.

I.7. Contrainte uniaxiale

Si on applique une contrainte de traction uniaxiale (Figure.13), on remarque que dans les deux autres directions perpendiculaires, le matériau se rétracte proportionnellement à l'allongement subi dans la direction de traction.

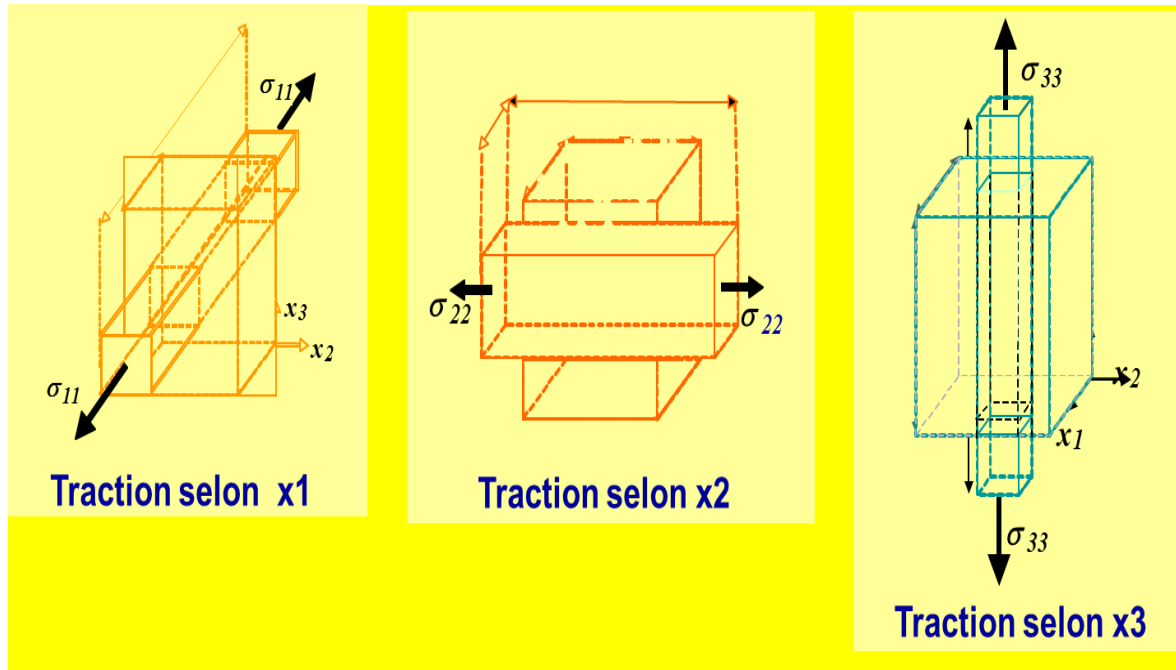


Figure. 13. Contraintes de traction.

I.8. Les systèmes cristallins :

La description d'un cristal se fait en utilisant un système de trois axes de coordonnées caractérisé par les longueurs a, b, c des vecteurs directeurs des axes et par les angles α, β, γ que font ces axes entre eux. Ces axes décrivent les arêtes de la maille. L'origine des axes est prise sur un nœud du réseau. Selon la symétrie de la maille cristalline, il existe sept systèmes cristallins de base définis dans le Tableau. I.1 [11] :

Tableau I.1 : Les 7 réseaux cristallins [11] :

Paramètres	Système cristallin
$\alpha ; \beta \text{ et } \gamma \text{ Quelconque ; } a \neq b \neq c$	Triclinique
$\alpha = \beta = 90^\circ \text{ et } \gamma \text{ Quelconque ; } a \neq b \neq c$	Monoclinique
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ ; a \neq b \neq c$	Orthorhombique
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ ; a = b \neq c$	Tétraogonale (quadratique)
$\alpha = \beta = \gamma = \text{Quelconque ; } a = b = c$	Trigonal (rhomboédrique)
$\alpha = \beta = 90^\circ ; \gamma = 120^\circ ; a = b \neq c$	Hexagonal
$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ ; a = b = c$	Cubique

Dans notre travail, nous nous sommes appuyés sur une étude des propriétés du TiB appartenant au système (Orthorhombique).

I.9. Borures des métaux de transition

I.9.1. Utilisations des métaux de transition :

Plusieurs éléments de transition et leurs dérivés sont des catalyseurs importants pour de nombreux procédés industriels, notamment pour la préparation des dérivés du pétrole et des matières plastiques, où les composés organiques sont hydrogénés, oxydés ou polymérisés. - On emploie les dérivés du titane, de l'aluminium et du chrome dans la polymérisation de l'éthylène en polyéthylène.

- Des catalyseurs contenant du fer sont utilisés dans le procédé de préparation de l'ammoniac à partir de l'hydrogène et de l'azote.
- Des molécules contenant des éléments de transitions interviennent dans les processus biochimiques de nombreux systèmes vivants, la plus connue étant la molécule complexe

d'hémoglobine, contenant du fer, et qui transporte l'oxygène dans le sang de tous les vertébrés et de certains invertébrés.

I.9.2. Application industrielle des borures :

Les pièces borées ont été utilisées dans une grande variété d'applications industrielles. La dureté élevée des matériaux borures en fait un thème adapté à la résistance à l'usure, en particulier à celle provoquée par les particules abrasives. Les applications industrielles incluent: vis d'extrusion, cylindres, buses textiles, matrices de poinçonnage, matrices d'estampage, moules de plastique et de céramique, moules de coulée sous pression à rouleaux, mandrins, matrices de formage à chaud.... Des pièces d'acier boratées ont été utilisées pour les métaux non ferreux fondus (Al, Zn, Sn). Les aciers austénitiques enduits sont résistants à l'acide HCl. Une boruration à grande échelle a été appliquée sur de petits engrenages pour pompe à huile dans un moteur diesel Volkswagen, afin d'accroître la résistance à l'usure de l'adhésif [20]

I.9.3. Généralité

Les propriétés des borures sont semblables à celles des métaux. Par exemple, les diborures de titane TiB_2 et de zirconium ZrB_2 ont une conductibilité électrique 5 à 6 fois plus grande que celle des métaux purs. La conductibilité thermique de TiB_2 serait 13 fois plus importante que celle du titane pur[12].

Les intermétalliques M_2B ($M=Fe, Cr, Ni, Mn, Co, Ti, Mo, W, \dots$) possèdent une structure orthorhombique ou tétragonale. La faible concentration du bore conduit à une grande distance entre les atomes de bore et ne permet pas la formation des liaisons B-B tandis que des liaisons B-M et M-M peuvent facilement se former. Par ailleurs, les composés MB ($M=Fe, Cr, Mn, Co, Ti, Mo, W, Hf, Nb, V, \dots$) où la concentration du bore est plus importante les liaisons B-B se forme facilement et contribuent fortement dans la dureté de ce type de matériaux.

Signalons enfin qu'il existe d'autres types de composés de formules : MB_2, MB_4, MB_6 .

Dans notre travail on s'intéresse aux borures de fer de type M_2B qui est le Fe_2B et MB qui est FeB .

H																	He																														
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne																														
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar																														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr																														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe																														
Cs	Ba		Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn																														
Fr	Ra		Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Cn	Uut	Fl	Uup	Lv	Uus	Uuo																														
<table border="1"> <tr> <td>La</td><td>Ce</td><td>Pr</td><td>Nd</td><td>Pm</td><td>Sm</td><td>Eu</td><td>Gd</td><td>Tb</td><td>Dy</td><td>Ho</td><td>Er</td><td>Tm</td><td>Yb</td><td>Lu</td> </tr> <tr> <td>Ac</td><td>Th</td><td>Pa</td><td>U</td><td>Np</td><td>Pu</td><td>Am</td><td>Cm</td><td>Bk</td><td>Cf</td><td>Es</td><td>Fm</td><td>Md</td><td>No</td><td>Lr</td> </tr> </table>																		La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu	Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu																																	
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr																																	

Figure I.14: Tableau périodique des éléments, les métaux de transition sont en bleu clair [13].

I.9.4. Les propriétés de borure de titane :

Les borures de titane (TiB , Ti_3B_4 et TiB_2) forment un groupe de composés avec des propriétés particulières, compris le point de fusion élevé, haute dureté et bonne conductivité électrique / thermique. Parmi ces borures de titane, TiB_2 est le plus stable thermodynamiquement [14- 16]. TiB_2 a élevé module de Young ($E= 565$ GPa), dureté élevée ($H_v= 24$ GPa), excellente résistance à l'usure, ainsi qu'une bonne conductivité électrique [16]. Grâce à ces propriétés spectaculaires combinées, TiB_2 a été largement étudié et utilisé comme nouveau matériau structurels, renforts en composites à matrice en alliage d'aluminium, aluminium raffineur de grain, outils de coupe et revêtements résistants à l'usure [17-19]. Cependant, le composé TiB est principalement formé dans des alliages de Ti avec l'absence d'autres borures de titane. Expérimentalement, il n'a été identifié que le TiB au haut module ($E = 371$ GPa [11]) et haute dureté ($H_v = 16$ GPa [10]) dans des travaux récents. Bien que, Panda et Chandran [2] ont montré que le module de Young était de 427 GPa, calculé en fonction du potentiel linéaire total. Méthode des ondes planes augmentées.

I.10. Le diagramme de phase du Ti - B :

TiB est principalement formé en augmentant la concentration du Bore dans la matrice de Ti
(Voir figure .15).

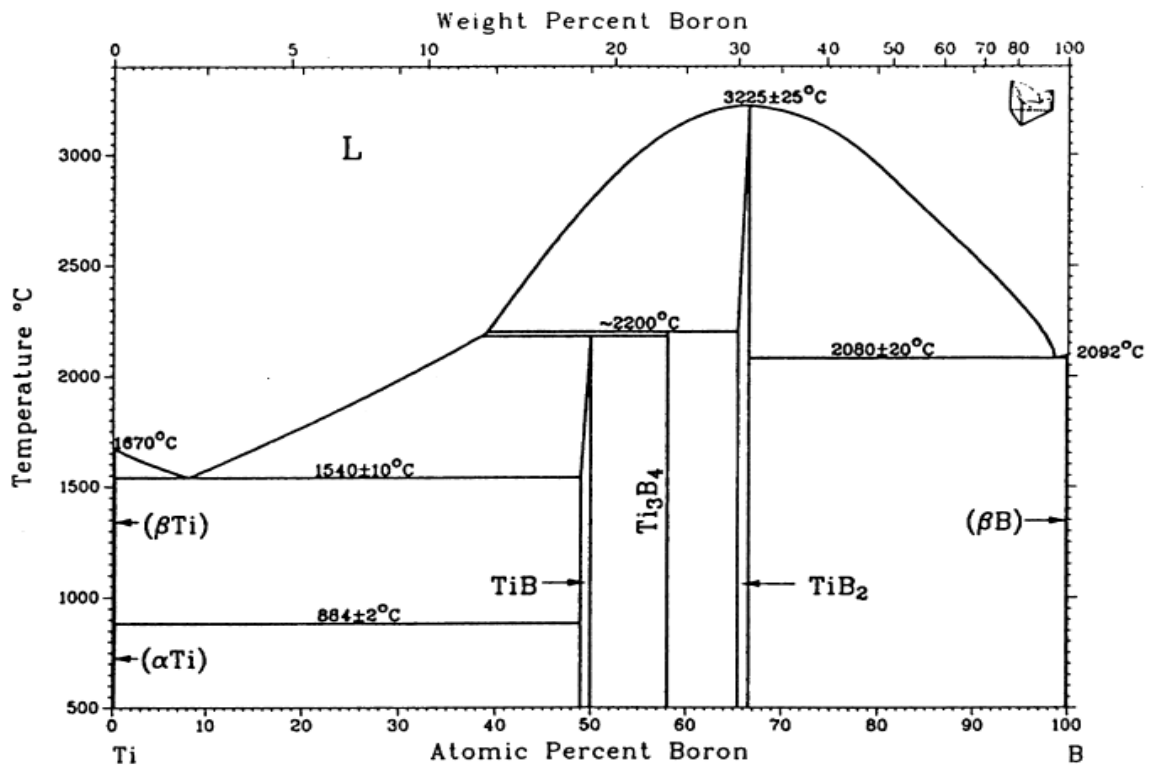


Figure. 15 : Diagramme de phase du TiB [21].

Reference:

- [1] B.Jaoul, Etude de la plasticité et application aux métaux, ParisTech, (2008).
- [2] J.P.Baillon, J.M.Darlot, Des matériaux, version2.1.1.
- [3] S.BOUDRAHEM, Microstructure et propriétés mécaniques des matériaux,cours master1 matériaux et nano-composites, 2014. .
- [4] Y.Estrain, L.P.Kubin, Evolutionof dislocation densities and thecrystalconditions for the portvin-le chatelier effect, Acta metal. Vol.38, No 5, pp, 697-708, 1990.
- [5] R.Moulart, Thèse de Doctorat, ENSAM.Paris, (2007).
- [6] Encycl. Med. Chir. (Paris-France, Odontologie, 23063 B10, 7-1990, 17p.
- [7] BAILON JP, DORLOT JM. : Des matériaux. Presses Internationales Polytechniques, 2000, 736p.
- [8] GORDON JE. : Structure et Matériaux. L'explication mecanique des formes. Pour La Science diffusion Belin, 1994, 213p..
- [9] D. François, Lois de comportement des métaux : Élastoplasticité ; Viscoplasticité, École Centrale de Paris.2012.
- [10] F. yahamdi, modélisation des courbes de tractions et évaluation du coefficient d'écrouissage des aciers traitée par brunissage, Université Badji Mokhtar Annaba; 2008..
- [11] P. N. E. JOUHARI, "Cours : « Cristallochimie »,SMC(P) S2, M8 (E2)," FACULTE DES SCIENCES, DEPARTEMENT DE CHIMIE., UNIVERSITE MOHAMMED V-AGDAL
- [12] G. VERMESAN, P. JACQUOT, and E. VERMESAN, "La boruration," Traitement thermique, pp. 39-44, 1995.
- [13] MSc. Mehmet Kayhan aus Bursa, Turkei Transition Metal Borides:Synthesis, Characterization and Superconducting Properties, Vom Fachbereich Chemie Der Technischen Universität Darmstadt , 2013.
- [14] Panda KB, Chandran KSR. Comput Mater Sci 2006;35:134e50.
- [15] Panda KB, Chandran KSR. Acta Mater 2006;54:1641e57.
- [16] Munro RG. J Res Natl Inst Stand Technol 2000;105:709e20.
- [17] Yi H, Ma N, Li X, Zhang Y, Wang H. Mater Sci Eng A 2006;419:12e7.
- [18] Yi H, Ma N, Zhang Y, Li X, Wang H. Scr Mater 2006;54:1093e7.

- [19] Zhang M-X, Kelly PM, Easton MA, Taylor JA. *Acta Mater* 2005;53:1427e38.
- [20] G. Ahmed, "Ab-initio calculation of the physical properties of some transition metal borides.," *Magnetism and Magnetic Materials* 406(2016)192–199, vol. 121, 2017.
- [21] S. Gorsse*, J. P. Chaminade and Y. Le Petitcorps, In situ preparation of titanium base composites reinforced by TiB single crystals using a powder metallurgy technique.

CHAPITRE. II

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

II.1. Introduction

Les propriétés physiques des matériaux sont rarement décrites avec exactitude en raison de la complexité que présentent ces systèmes à plusieurs particules. En effet, la résolution de ces problèmes dits "à N corps", doit inévitablement avoir recours à des approximations, non seulement pour simplifier les calculs mais aussi pour une bonne représentation de ce système très compliqué [1].

La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques permettant une étude fiable de la structure électronique et des systèmes physiques et chimiques, particulièrement pour les systèmes contenant un grand nombre d'électrons. Le but de cette théorie est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique des méthodes traditionnelles comme Hartree- Fock par la densité électronique [2]. Si la densité électronique est connue, le système est complètement défini, donc la DFT montre qu'il est possible de décrire toute la complexité du problème à N corps par un système « effectif » dont l'hamiltonien peut s'écrire comme une fonctionnelle de la densité totale à un corps. Seulement, la théorie ne donne pas la forme de cette fonctionnelle et, en pratique, nous devons avoir recours à des approximations [3].

II.2. Équation de Schrödinger pour un cristal

Les solides sont constitués par une association de particules élémentaires : les ions lourds de charge positive et les électrons légers de charge négative. Le problème général est d'essayer de calculer toutes les propriétés des particules (ions + électrons) à partir des lois de la mécanique quantique, à l'aide de l'équation de Schrödinger :

$$H\psi = E\psi \tag{II.1}$$

Tel que E est l'énergie de l'état fondamental du cristal décrit par la fonction d'onde Ψ du cristal.

H : est l'Hamiltonien exact d'un cristal qui résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons).

Ψ : La fonction d'onde du système.

$$H_{\text{tot}} = T_e + T_N + V_{e-e} + V_{e-N} + V_{N-N} \quad (\text{II.2})$$

Dans laquelle les termes T_e , T_N , V_{e-e} , V_{N-N} et V_{e-N} correspondent respectivement à

$$\text{L'énergie cinétique des électrons : } T_e = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} = \sum - \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2)_i \quad (\text{II.3})$$

$$\text{L'énergie cinétique des noyaux : } T_N = \sum_\alpha \frac{p_\alpha^2}{2M_\alpha} = \sum - \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla^2)_\alpha \quad (\text{II.4})$$

$$\text{Interaction répulsive (électron-électron) : } V_{e-e} = \sum_{i,j \neq i} \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{1}{2} \left(\frac{e^2}{|\vec{r}_\alpha - \vec{r}_i|} \right) \quad (\text{II.5})$$

$$\text{Interaction répulsive (noyau - noyau) : } V_{N-N} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \frac{1}{2} \sum_{\alpha; \beta} - \left(\frac{e^2 Z_\alpha Z_\beta}{|\vec{R}_\alpha - \vec{R}_\beta|} \right) \quad (\text{II.6})$$

$$\text{Interaction attractive (noyaux -électron) : } V_{e-N} = \frac{1}{4\pi\epsilon} \sum_{i;\alpha} - \left(\frac{e^2 Z_e}{|\vec{r}_i - \vec{R}_\alpha|} \right) \quad (\text{II.7})$$

e : est la charge de l'électron et Z : la charge de noyau

m ; M les masse d'électrons et des noyaux, respectivement.

r_i , r_j définissant les positions des électrons (i) et (j) respectivement.

R_α , R_β Définissant les positions des noyaux (α) et (β) respectivement

$$\text{Opérateur Laplace : } \nabla^2_i = \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \quad (\text{II.8})$$

L'équation de Schrödinger (II.1) contient $3(Z+1)N$ variables ; N étant le nombre d'atomes du cristal. Puisque on trouve dans 1cm^3 d'un solide cristallin près de $5 \cdot 10^{22}$ Atomes, en posant $Z=14$, le nombre des variables sera égal à $2 \cdot 10^{24}$ Il est évident qu'on ne va pas obtenir une solution générale à cette équation. Cela vient non seulement à des difficultés de calcul d'ordre technique, mais également à une impossibilité à réaliser, car la mécanique quantique moderne ne dispose d'aucune méthode pour résoudre des problèmes concernant un grand nombre de particules. Pour trouver une solution de l'équation de Schrödinger d'un système de particules se trouvant en interaction, il est indispensable de réduire ce système à un système de particules indépendantes. Dans ce cas l'équation de Schrödinger peut être décomposée en un système d'équations, chaque équation ne décrivant que le mouvement d'une seule particule. Pour cela il faut faire des approximations [4].

II.3. Approximations fondamentales

II.3.1. L'approximation de Born-Oppenheimer

En exploitant le fait que le rapport entre la masse de l'électron et celle du proton est très faible, l'équation de Schrödinger peut se simplifier en découplant le mouvement des électrons de celui des noyaux. Cette approximation[5], dite adiabatique ou de Born-Oppenheimer, tient compte du fait que le mouvement des noyaux est beaucoup plus lent que celui des électrons. Donc à l'échelle de temps du mouvement des électrons, les noyaux paraissent fixes. Dans ce cas, l'Hamiltonien d'écrit dans l'équation peut donc se réduire à un Hamiltonien électronique.

$$\Psi [\{\vec{R}_i\}], \{\vec{r}_i\} = \psi_e [\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}] \psi_n [\{\vec{R}_i\}] \quad (\text{II.9})$$

On s'intéresse à la fonction d'onde électronique $\psi_e [\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}]$ qui doit satisfaire l'équation :

$$H_e \psi_e = E_e \psi_e \quad (\text{II.10})$$

Où H_e est l'Hamiltonien électronique donné par :

$$H_e = T_e + U_{ee} + U_{Ne} \quad (\text{II.11})$$

Cette approximation adiabatique réduit le problème à plusieurs corps, mais le problème électronique demeure impossible à résoudre exactement, même par voie numérique. Face à cette difficulté, de plus amples développements sont requis : la théorie de Hartree_Fock et la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (Density Functional Theory : DFT) [3].

II.3.2. L'approximation de Hartree

En l'absence du terme d'interaction électron-électron, le Hamiltonien se réécrit comme une somme de terme mono électronique. L'approche développée par Hartree (En 1928) consiste à modéliser l'interaction de Colomb par un potentiel effective V_{Hartree} agissant sur chaque électron et traduisant l'effet moyen de l'ensemble des autres électrons[6], défini

Par :

$$V_{\text{Hartree}} = \sum \int d\vec{r}' \psi_j(\vec{r}') \psi_j^* \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{II.12})$$

Et à écrire la fonction d'onde comme le produit des fonctions d'ondes à une particule, Orthogonales entre elles :

$$\psi(\vec{r}) = \prod_{i=1}^{N_{ee}} \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.13})$$

II.3.3. L'approximation de Hartree_Fock

En 1930, Fock a montré que la fonction d'onde de Hartree ne respecte pas le principe d'exclusion de Pauli parce qu'elle n'est pas antisymétrique par rapport à l'échange de deux particules quelconques. Le défaut est corrigé en ajoutant un terme supplémentaire non local d'échange. La fonction d'onde est alors remplacée par un déterminant de Slater formé par les fonctions d'onde mono électroniques qui est antisymétrique par rapport à l'échange[6, 7]

$$\Psi[\{\vec{r}_i\}] = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \psi_1(\vec{r}_2) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \psi_2(\vec{r}_1) & \psi_2(\vec{r}_2) & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{pmatrix} \quad (\text{II.14})$$

Où $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ est le facteur de normalisation.

On obtient ainsi les équations de Hartree_Fock :

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{m} + V_{e-N} + V_{\text{Hartree}} + V_{\text{Fock}} \right] \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{II.15})$$

Avec :

$$V_{\text{Hartree}} = \sum \int d\vec{r} |\psi_j(\vec{r}')|^2 \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (\text{II.16})$$

$$V_{\text{Fock}} = -\left[\sum \int d\vec{r} \psi_i(\vec{r}) \psi_j(\vec{r})^* \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right] \quad (\text{II.17})$$

Le système se résout de manière auto cohérente dans la mesure où le potentiel dépend des fonctions d'onde. Cette approximation de Hartree_Fock conduit à de bons résultats, notamment en physique moléculaire. Mais le traitement des systèmes étendus comme le solide reste difficile. Dans le cas d'un métal, la méthode de Hartree_Fock conduit à des résultats en contradiction avec l'expérience ; on trouve que la densité d'états d'un métal

est nulle à la surface de Fermi, ce qui est en totale contradiction avec l'expérience. Ce constat met en évidence un phénomène physique important négligé dans la théorie de Hartree_Fock : les corrélations électroniques.

II.4. La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

La théorie de la fonctionnelle de densité est une reformulation du problème quantique à N corps en un problème portant uniquement sur la densité électronique. L'approche de la DFT exprime les propriétés de l'état fondamental en termes de densité électronique. La méthode évite ainsi d'avoir à calculer la fonction d'onde de l'état fondamental. La simplicité de la DFT provient du fait que, contrairement aux méthodes Hartree_Fock, qui utilise une fonction d'onde multiélectronique dépendant de 3N variables, la densité quant à elle, n'est fonction que de trois variables seulement. Cette approche est basée sur deux théorèmes fondamentaux dus à Hohenberg et Kohn ; dont l'origine physique remonte aux travaux de Thomas et Fermi.

II.4.1. Théorèmes de Hohenberg et Kohn (1964)

Le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est basé sur deux théorèmes de Hohenberg et Kohn

II.4.1.1 Le premier théorème

Les auteurs ont montré que L'énergie totale de l'état fondamental E est une fonctionnelle unique de la densité des particules $\rho(r)$ pour un potentiel externe $V_{ext}(r)$ donné. Ce théorème met en évidence une correspondance unique entre le potentiel extérieur et la densité électronique. Puisque celle-ci fixe le nombre d'électrons, elle détermine alors aussi de manière unique la fonction d'onde et par là les propriétés électroniques du système.

Pour un système donné, l'énergie s'écrira donc comme suit:

$$E[\rho] = T[\rho(\vec{r})] + U_{ee}[\rho(\vec{r})] + U_{ext}[\rho(r)] \quad (\text{II.18})$$

Ou encore :

$$E[\rho] = F_{HF}[\rho(r)] + \int \rho(r) V_{ext}(r) dr \quad (\text{II.19})$$

Avec : $F[(\rho)] = T_e[\rho(\vec{r})] + U_{ee}[\rho(\vec{r})]$ qui est la fonctionnelle de Hohenberg-Kohn contenant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle due à l'interaction répulsive électron-électron.

II.4.1.2 Le deuxième théorème (principe variationnel)

Hohenberg et Kohn montrent que l'énergie atteint son minimum pour la densité réelle. Par conséquent, la densité de l'état fondamental peut être obtenue à partir du principe variationnel.

Ce deuxième théorème découle du fait que la fonctionnelle de l'énergie totale de tout système à plusieurs particules possède un minimum qui correspond à l'état fondamental.

La densité de particules de l'état fondamental vérifie donc :

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{II.20})$$

ρ_0 Étant la densité de l'état fondamental[8].

II.4.2. Approche de Kohn-Sham

L'équation de Schrödinger est donc reformulée en termes de ce que l'on convient d'appeler l'équation de Kohn-Sham (K.S) qui est en fait une équation de Schrödinger avec un potentiel effectif dans lequel des quasi-particules se déplacent[8]. Le potentiel effectif dans la représentation de Kohn-Sham s'écrit :

$$V(\vec{r}) = V_{ext}(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) + V_H(r) \quad (\text{II.21})$$

V_{ext} Décrit l'interaction électrons-noyaux et noyaux-noyaux,

V_{xc} Est le potentiel d'échange –corrélation

V_H Est le potentiel de Hartree.

Les équations de Kohn-Sham sont couplées par la densité électronique :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_i \psi_i(\vec{r}) \psi_i^*(r) \quad (\text{II.22})$$

Ce couplage est alors inclus dans la solution obtenue de manière itérative. Pour l'expansion d'orbitales en termes de base de fonctions d'ondes, différentes bases peuvent être utilisées. En fait le choix de la base n'est pas aussi crucial que celui de la fonctionnelle pour l'énergie d'échange corrélation. Une fois ce choix fixé, les orbitales sont utilisées pour trouver une meilleure densité ρ au travers du cycle auto-cohérent. Un premier exemple de base est un ensemble d'ondes planes. Son efficacité n'est certes pas la meilleure car il y a un besoin d'un grand nombre de fonctions planes pour l'expansion. Une base plus efficace serait bien entendu les orbitales de Kohn-Sham elles-mêmes mais elles présentent le grand inconvénient de ne pas être connues au début du calcul. Une alternative est l'utilisation d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques

Les méthodes basées sur la DFT sont classées suivant les représentations qui sont utilisées pour la densité, le potentiel et particulièrement les orbitales de Kohn et Sham. Le choix de la représentation est fait pour minimiser le coût de calcul en maintenant une précision suffisante[9].

Les orbitales de Kohn et Sham sont données par:

$$\Phi(\vec{r}) = \sum C_{i\alpha} \phi_{\alpha}(r) \quad (\text{II.23})$$

$\phi_{\alpha}(\vec{r})$ Sont les fonctions de base.

$C_{i\alpha}$ Sont les coefficients de l'expansion.

La résolution des équations de Kohn et Sham revient à déterminer les coefficients $C_{i\alpha}$ pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. Ceci est réalisé en injectant la densité de charge initiale ρ_{in} pour diagonaliser l'équation séculaire :

$$(H - \varepsilon_i S) C_i = 0 \quad (\text{II.24})$$

H : représente la matrice hamiltonien

S : la matrice de recouvrement.

II.5. Les approximations utilisées en DFT

Il existe trois types d'approximations dans les calculs de la DFT. Le premier type d'approximation est conceptuel et concerne l'interprétation de deux grandeurs que sont les énergies et les orbitales obtenues par résolution de l'équation de Kohn-Sham. Le deuxième type est numérique et concerne les méthodes de résolution de l'équation Kohn-Sham. Cette approche nécessite un choix de la base des fonctions d'ondes. Le troisième type concerne la construction de l'expression de la fonctionnelle d'échange-corrélation $E_{XC}(\rho)$, inconnue qui contient tous les aspects d'un problème à N corps[10].

II.5.1. Approximation de la Densité Locale (LDA)

En 1965, Kohn-Sham [11] proposaient l'approximation de la densité locale (LDA), elle est basée sur le fait que, la densité électronique peut être traitée localement sous la forme d'un gaz d'électrons uniforme, ce qui revient à négliger les effets des variations de la densité. En d'autre terme, elle repose sur l'hypothèse que les termes d'échange-corrélation ne dépendent que de la valeur locale de la densité $\rho(\mathbf{r})$. L'énergie d'échange et de corrélation s'exprime comme suit :

$$E_{XC}^{LDA}[\rho] = \int \epsilon_{XC}(\rho(\vec{r})) \cdot \rho(\vec{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{II.25})$$

Avec ϵ_{XC} est la densité d'énergie d'échange et de corrélation par électron, pour un gaz d'électrons homogène. Ceci est connu par l'approximation de la densité locale (LDA). La densité d'énergie ϵ_{XC} est généralement calculée par la méthode de Monte Carlo quantique[6]. Les approximations de ce potentiel d'échange-corrélation sont cependant nettement meilleures si on fait usage des densités de spin, ce qui est la manière la plus aisée de tenir compte des règles de Hund. On obtient alors l'Approximation de la Densité Locale de Spin (LSDA, *Local Spin Density Approximation*) et la fonctionnelle d'échange-corrélation s'écrit :

$$E_{XC}^{LSDA}[\rho \uparrow, \rho \downarrow] = \int \epsilon_{XC}(\rho \uparrow(\vec{r}), \rho \downarrow(\vec{r})) \cdot \rho(\vec{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{II.26})$$

Où $\rho\uparrow$ et $\rho\downarrow$ désignent respectivement les densités d'électrons associées aux états de spin haut (\uparrow) et bas (\downarrow). La plupart des paramétrisations de ces fonctionnelles LSDA ont été obtenues en calculant exactement l'énergie d'un gaz d'électrons infini pour différentes densités électroniques données. Les formes analytiques de $E_{XC}^{LSDA}[\rho\uparrow, \rho\downarrow]$ ne font pas appel à des paramètres externes empiriques dans la procédure de paramétrisation.

II.5.2. Approximation du gradient généralisé (GGA) :

L'approximation du gradient généralisé a été introduite pour améliorer la précision des résultats de la LDA.

Elle consiste à écrire l'énergie d'échange et de corrélation non seulement en fonction de la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ mais aussi de son gradient $\nabla\rho(\mathbf{r})$ pour prendre en compte le caractère non uniforme du gaz d'électrons.

Elle s'écrit comme suit :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho] = \int \epsilon_{XC}(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})) \cdot d\mathbf{r} \quad (\text{II.27})$$

La GGA est donnée par différentes paramétrisations de la fonctionnelle d'échange et de corrélation, parmi elles celle de Perdew et ses collaborateurs[12]

II.6. Les pseudo-potentiels :

Le problème de la résolution du système d'équations de Kohn-Sham, devient de plus en plus onéreux en termes de temps de calcul, au fur et à mesure que le système à traiter contient un grand nombre d'électrons, comme par exemple, pour les métaux de transition qui se caractérisent par une localisation des orbitales d

On sait que seuls les électrons de valence participent à la formation des liaisons. Les électrons de cœur, dans les couches les plus proches du noyau, sont peu affectés par les potentiels créés par les noyaux environnants. C'est en utilisant cette observation que l'approximation des cœurs gelés a été proposée. Cette approximation consiste à regrouper les électrons de cœur avec leur noyau en un cœur dont les états électroniques resteront inchangés, quel que soit l'environnement dans lequel l'atome sera placé. Ainsi, l'énergie totale du système peut être calculée en résolvant les équations de Kohn-Sham pour les seuls électrons de valence. Cette approximation de cœur gelé est à la base des pseudo-potentiels[13].

II.7. Code de CASTEP :

Le code CASTEP (Cambridge Serial Total Ennery Package Software) [14], est un logiciel utilisant la théorie de la fonctionnelle de densité. Ce code permet de donner des informations sur les énergies totales, les forces et les contraintes exercées sur un système atomique. Il peut calculer la géométrie optimale, les structures des bandes, les spectres optiques et les constantes élastiques.

Ce logiciel a été développé par le professeur K.C .Payne [15]et commercialisé par Accélères. CASTEP est un programme basé sur la mécanique quantique et les calculs sont effectués par l'utilisation de la technique pseudo-potentielle et les ondes planes (PP-PW) pour la résolution de l'équation de Kohn et Sham dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ce code sert à simuler l'énergie totale par l'utilisation de l'intégration sur un nombre spéciale des K points dans la première zone de Brillouin avec une base d'ondes planes.

II.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les principes généraux de la théorie de la fonctionnelle de la densité. D'autre part, nous avons mis en évidence les simplifications requises pour pouvoir appliqué cette théorie. Nous avons commencé par l'approximation de Born Oppenheimer, Hartree et Hartree_Fock pour résoudre l'équation de Schrödinger. Et par la suite nous avons présenté les points fondamentaux de la théorie de la fonctionnelle de la densité et les équations de Kohn-Sham. Cette théorie est précise mais pour la rendre utilisable, une approximation doit être introduire pour le terme d'échange corrélation : l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) qui améliore la description du système étudié dans certains cas.

Reference:

- [1]. AMMI, D., Modélisation des propriétés structurales, électroniques et optiques des polymères conjugués PPP et PPV, in PHYSIQUE DES MATÉRIAUX2013, UNIVERSITÉ MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU.
- [2]. Parr, R. and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford Univ. Press, New York, 1989.
- [3]. Farida, K., Etude DFT Relativiste de la Structure Electronique et de la Réactivité des Complexes Organométalliques d'Actinides, in Physique, UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI DE TIZI-OUZOU.
- [4]. Bouri ,Saadi, propriétés physique de X_2GdIn ($X= Au, Ag, Cu$); in PHYSIQUE DES SOLIDE 2013/07/ 01. UNIVERSITE Setif 1.
- [5]. Born, M. and R. Oppenheimer, Zur quantentheorie der molekeln. Annalen der Physik, 1927. 389(20): p. 457-484.
- [6]. Mourad,S.,Semi-conducteurs polaires: etude des propriétés structurales,vibrationnelles et thermodynamiques, in Physique2013, Université 8 Mai 1945, Guelma.
- [7]. Fock,V.,Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen mehrkörperproblems. zeitschrift für Physik, 1930. 61(1-2): p. 126-148.
- [8] Hakim, M.Y.e.A., *Etude des propriétés physico-chimiques des nano*
- [9] Vanderbilt, D., *Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism*. Physical Review B, 1990. **41**(11): p. 7892.
- [10]. SARI, A., Etude ab-initio des propriétés Structurales, Electroniques et Elastiques d'Alliages intermétalliques : Matériaux Prometteurs pour le Stockage de l'Hydrogène., in Physique2015, UNIVERSITE ABOU BAKR BELKAÏD DE TLEMCEN.
- [11]. Fermi, E., E. Fermi, Rend. Accad. Naz. Lincei 6, 602 (1927). Rend. Accad. Naz. Lincei, 1927. **6**: p. 602.
- [12]. Hakim, M.Y.e.A., Etude des propriétés physico-chimiques des nano systèmes Lin et NaLin : Etude à travers la DFT, in Chimie2016, A. MIRA - Béjaïa.
- [13]. Farida, S., Etude ab initio de la coadsorption de Li et H sur des surfaces et des agrégats de platine, in PHYSIQUE, MODULO MAMMERI DE TIZI-OUZOU.
- [14]. M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, C. J. Pickard; P.J. Hasnip S. J. Clark, M. C.Payne, "First Principles simulation: ideas, illusratioas and the CASTEP code ", J. Pbys: Coadens. Matter , 14, 2717 -2743 (2002).
- [15]. M. C- Payne, M. P. Teter, D. C- Allan, T. A.Arias,J. D.Joannopoulos, "Iterative Minimisation. Techniques f r Ab Initio Total Ennery Calculassent : Molecular Dynamics.

Chapitre. III

Résultats et discussion

III.1. Introduction :

Dans la première partie de ce chapitre je discuté les résultats de mes calculs concernant les propriétés structurales, électroniques, élastiques et d'anisotropie du composé TiB sans l'effet de pression. Dans sa deuxième partie qui est réservé aux résultats de calculs de la structure TiB sous l'effet de pression de traction uni axial et bi axial particulièrement puis sous l'effet de pression de compression hydrostatique.

Les calculs ont été réalisés par le code CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) en utilisant la méthode pseudo potentielle (PP-PW). Le potentiel d'échange et de corrélation a été traité par l'approximation GGA-PBE[1].

III.2. Remarque :

Avant de lancer des calculs ab-initio, nous devons faire une étude de convergence de certains paramètres tels que: l'énergie de coupure E_{cut} et le nombre de points dans la première zone de Brillouin (nkpt). Ces tests de convergence sont importants dans la mesure où ils nous permettent de gagner un temps considérable de calcul, après cette démarche on fait le choix des grandeurs de convergence telles que l'énergie, la force,...etc.

III.3. Première Partie : TiB sous l'effet de pression nulle:

III.3.1. Propriétés structurales du composé TiB:

L'étude des propriétés structurales est un point de départ à cause de leurs importances dans la compréhension d'autres propriétés électroniques, élastiques.

III.3.2. Paramètres de calcul :

Il faut signaler que le code Castep recommande des valeurs pour certains paramètres d'entrée : paramètres de maille, positions atomiques et groupe d'espace, ainsi Il exige également le choix pour certains paramètres comme l'énergie de coupure et le nombre de K - points dans l'espace réciproque. Les critères de convergence prisent dans nos calculs sont : Energie, forces, déplacement, stress, et nous avons opté pour l'échange et corrélation l'approximation GGA-PBE 96 (Perdew, Burke and Ernzerhof) [1]. Le nombre de K- point

dans la 1ere zone de Brillouin est pris pour 45 points (6x10x6) et l'énergie de coupure est de 420 eV. Le tableau III-1 regroupe quelques paramètres et grandeurs d'entrés pour le matériau/TiB.

Tableau III-1 : Les paramètres de maille, groupe d'espace et les nombres atomiques du composée TiB.

Composé	paramètre (Å) et position d'atome	Groupe d'espace ;	Angle	Etats de valence	Z
TiB	a = 5.306616 b = 2.955656 c = 3.964782	Orthorhombic	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Ti : $3S^23p^63d^24s^2$ B : $2S^22p^1$	22
	(Ti) x =0.178333 y =0.25 z =0.122512 (B) x =0.034917 y =0.25 z =0.620536	Pnma N°62			

III.3.3. Cristallographie de la structure TiB

TiB a une structure orthorhombique et se cristallise dans le groupe d'espace Pnma (N°62), la structure cristalline du composé TiB est représentée dans La figure. 1. Le groupe d'espace Pnma génère 8 positions équivalentes. La maille conventionnelle contient 4 atomes dechaque élément.

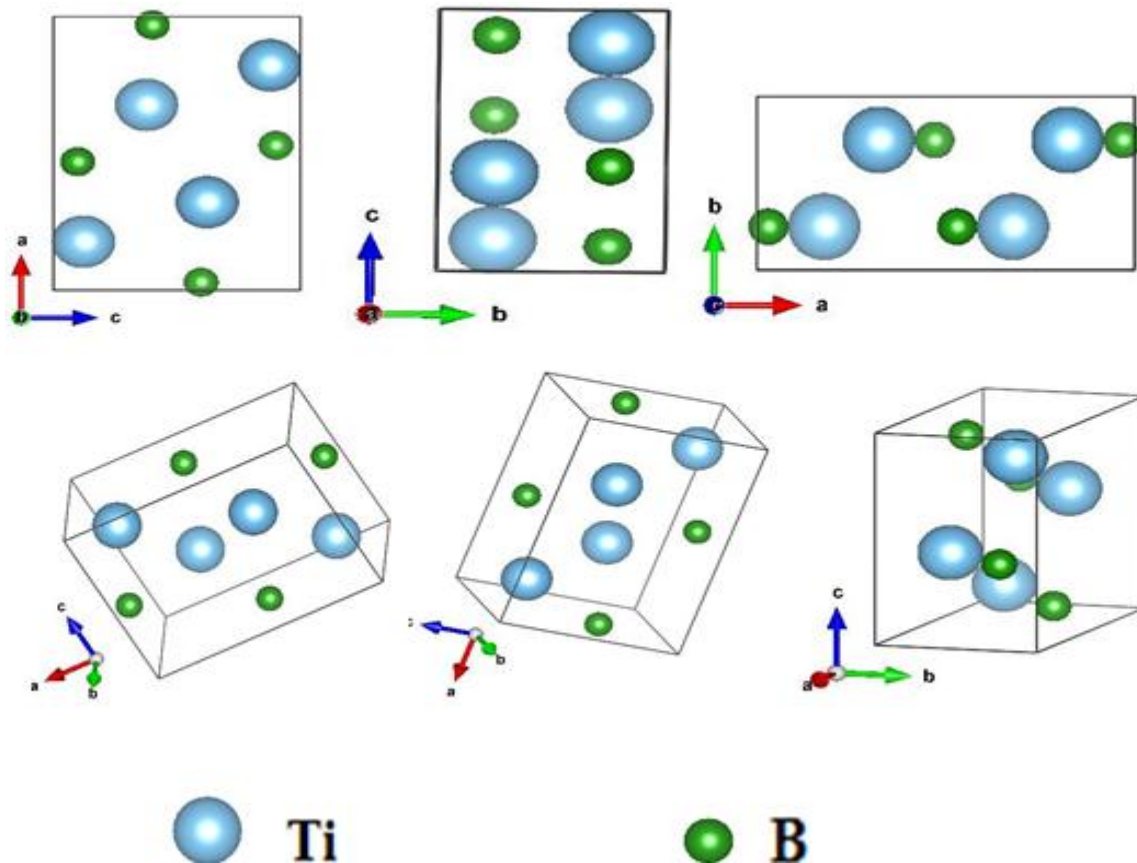


Figure. 1 : La structure cristalline du composé TiB.

III.3.4. Convergence de Ecut et NK-point :

Dans la pratique, il faut toujours tester la convergence des résultats par rapport à l'énergie de coupure et par rapport à la grille des K-points, mais du fait que le code de calcul (Castep) utilise un algorithme BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) qui est une méthode permettant de résoudre un problème d'optimisation non linéaire sans contraintes [1].
 NK-point = (6 * 10 * 6). Ecut = 420 eV.

III.3.5. L'optimisation:

Après avoir obtenu les paramètres de convergence (Ecut et k point), nous procédons à l'optimisation par la relaxation des atomes (c'est à dire minimiser les composantes des forces exercés sur chaque atome). On doit varier les paramètres cristallins de la maille en fonction de l'énergie totale. La valeur minimale de cette énergie correspond aux paramètres de maille et

les positions optimales. Le code du calcul CASTEP utilise l'algorithme de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno « BFGS » [2].

Dans le cadre de l'optimisation, le code CASTEP utilise les critères suivants :

- Force maximal = 0,0001 eV/Å°
- Energie = 5.10^{-6} eV/atm
- Déplacement maximal = 5.10^{-4} Å°
- Stress maximal = 0.001 GPa

Le tableau III-2 regroupe les résultats des opérations d'optimisations du composé TiB utilisant l'approximation GGA-PBE.

Tableau III-2 : Valeurs des paramètres optimisé par le code CASTEP de matériaux TiB.

Matériaux	avant l'optimisation	Après l'optimisation
TiB	$a = 5.306616 \text{ Å}^\circ$ $b = 2.955656 \text{ Å}^\circ$ $c = 3.964782 \text{ Å}^\circ$	<p>Nos calculs: $a = 6.113870 \text{ Å}^\circ$ $b = 3.049168 \text{ Å}^\circ$ $c = 4.565795 \text{ Å}^\circ$</p> <p>Autre calcul: ($a = 6.111 \text{ Å}^\circ$)^a $(b = 3.05 \text{ Å}^\circ)$^a $(c = 4.567 \text{ Å}^\circ)$^a</p> <p>Autre calcul: ($a = 6.12 \text{ Å}^\circ$)^b $(b = 3.06 \text{ Å}^\circ)$^b $(c = 4.56 \text{ Å}^\circ)$^b</p> <p>Expérimental [4] $a = 6.12 \text{ Å}^\circ$ $b = 3.06 \text{ Å}^\circ$ $c = 4.56 \text{ Å}^\circ$</p>

^aRef[3], ^bRef. [4],

D'après l'analyse de valeurs optimisées par mes calculs, il est bien clair que mes résultats sont en bon accord avec celles calculées par d'autres auteurs.

Avant d'engager dans les calculs des propriétés physiques, on doit s'assurer de la stabilité thermodynamique de notre composé est cela se fait tout en calculant les deux 'énergies : Energie de cohésion (E_{coh}) et Energie de formation (E_f) définie comme suit[5] :

$$E_{coh}(TiB) = \frac{E_{total}(TiB ; cell) - n E_{iso}(Ti) - n E_{iso}(B)}{n} \quad (III- 1)$$

$$E_f (TiB) = E_{coh} (TiB) - E_{coh}(Ti) - E_{coh}(B) \quad (III- 2)$$

Les résultats de calcul sont présentés dans le Tableau -III- 3

Tableau III- 3 : Energie de cohésion et de formation de TiB.

Energie / Composé	TiB	Ti	B
E_{iso}	/	-3160,703	-70.501
E_{total}	-6728,10693	-3187,3357	-76.953
E_{coh}	-31,1742	-13,31635	-6.452
E_{Form}	-11,40585	/	/

Les valeurs calculées de l'énergie de cohésion et de formation de TiB sont, respectivement de -31,1742 eVet -11,40585, indiquant que notre composé est stable thermodynamiquement du fait que leurs énergies sont négatives.

III.4. 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 et préciser son caractère (isolant, conducteur ou semi-

conducteur), ainsi que l'état des orbitales du matériau. Ces propriétés comprennent les structures de bandes, les densités de charges et les densités d'états. Ainsi que permet de savoir des propriétés à l'échelle macroscopique.

III.4.1. La structure de bande d'énergie :

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, et pour simplifier, seules les directions entre les points de haute symétrie dans la première zone de Brillouin sont traitées.

La (figure.2) illustre la zone de Brillouin de la maille élémentaire du TiB avec les principaux points de haute symétrie correspondants: Γ (0, 0,0), Z (0, 0, 0.69), T (0, 1.03 ,0.69), Y (0, 1.03, 0), S (0.51, 1.03 ,0) et X (0.51, 0,0) ; U (0.51, 0,0.69) ; R (0.51, 1.03 ,0.69).

Les vecteurs du réseau réciproque (b_1 ; b_2 ; b_3).

$$b_1 = (1.028 ; 0 ; 0) , b_2 = (0 ; 2.061 ; 0) , b_3 = (0 ; 0 ; 1.38)$$

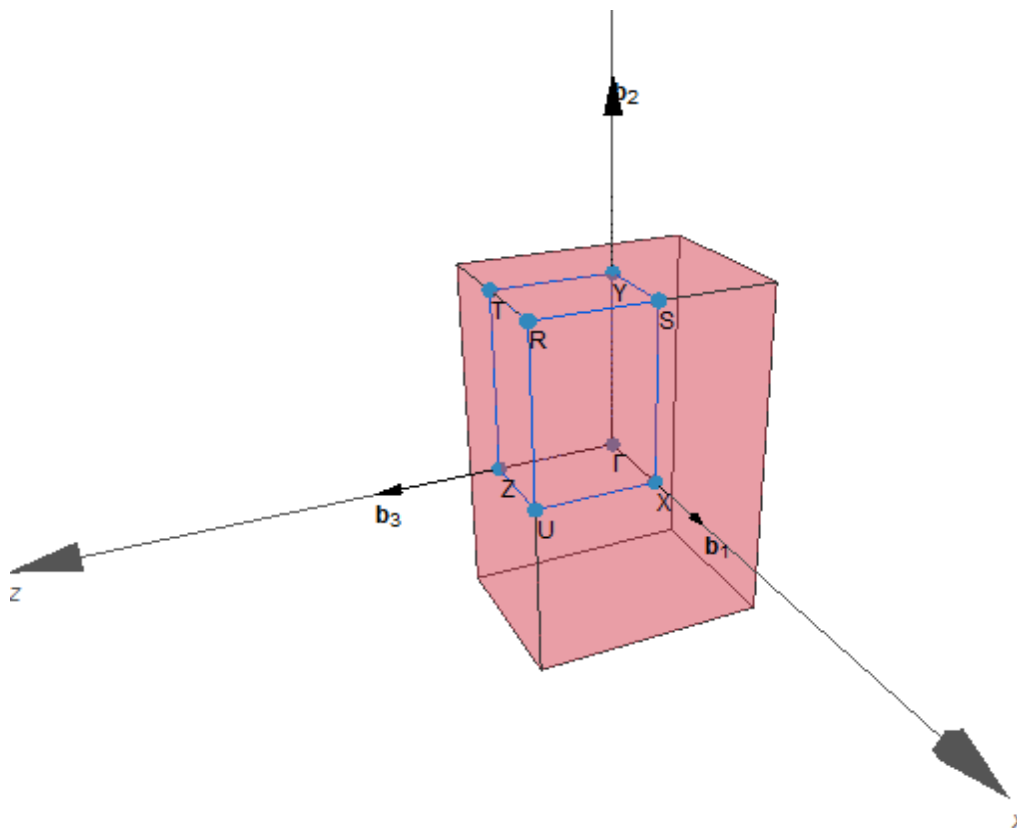


Figure. 2 : Première zone de Brillouin pour le réseau orthorhombique ($Pnma$) et les points de haute symétrie. (b_1 , b_2 et b_3 sont les vecteurs du réseau réciproque).

Nous présentons ci-dessous la structure de bandes tracée par la méthode (PP-PW) – GGA du code CASTEP pour notre matériau. Figure .3

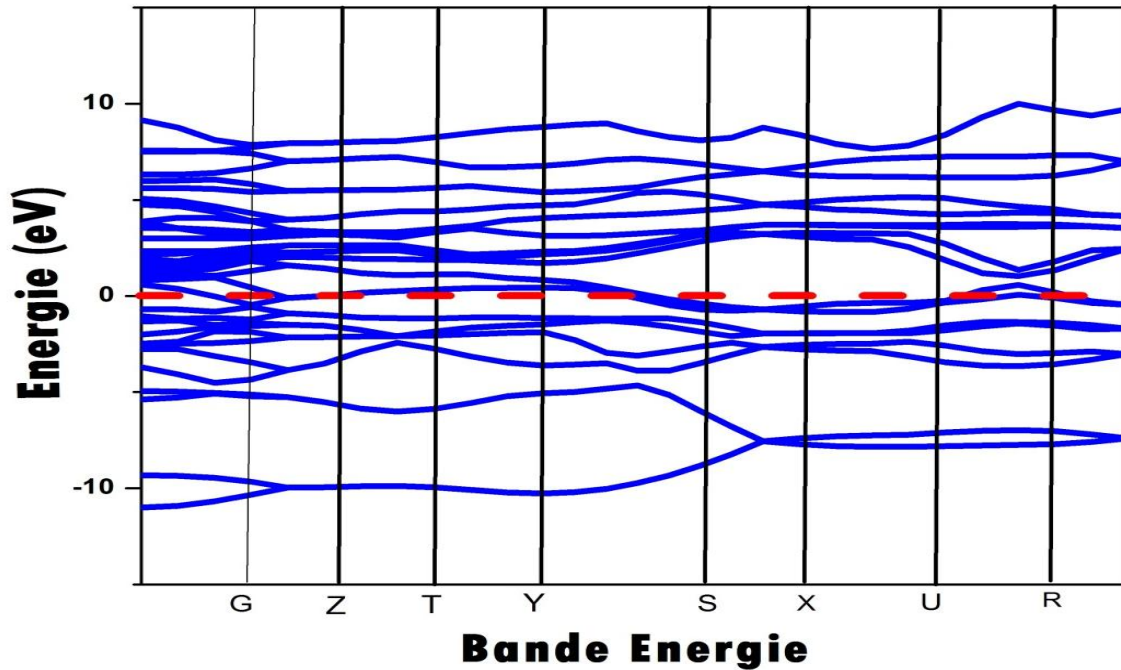


Figure .3: La structure de bandes du TiB

La (Figure. 3) ci-dessus montrent que les bandes de valences et les bandes de conduction se chevauchent au niveau de Fermi, ou on conclue que le caractère de notre matériau est métallique. On remarque bien qu'il y a une dégénérescence dans plusieurs segments entre les points de haute symétrie, qui fait que des états quantiques se retrouvent au même niveau d'énergie.

Dans les figures des structures de bandes ci-dessus j'ai présenté l'intervalle énergétique d'interaction -12 eV jusqu'au 10 eV pour bien voir l'interaction des électrons proche de l'énergie de Fermi.

III.4.2. Densité d'état électronique :

La densité d'état électronique (DOS) donne une information sur l'occupation des bandes électronique d'un matériau [6].

Les densités d'états partielles (PDOS) et totale (TDOS) sont présentés par les figures.4 et Figure .5.

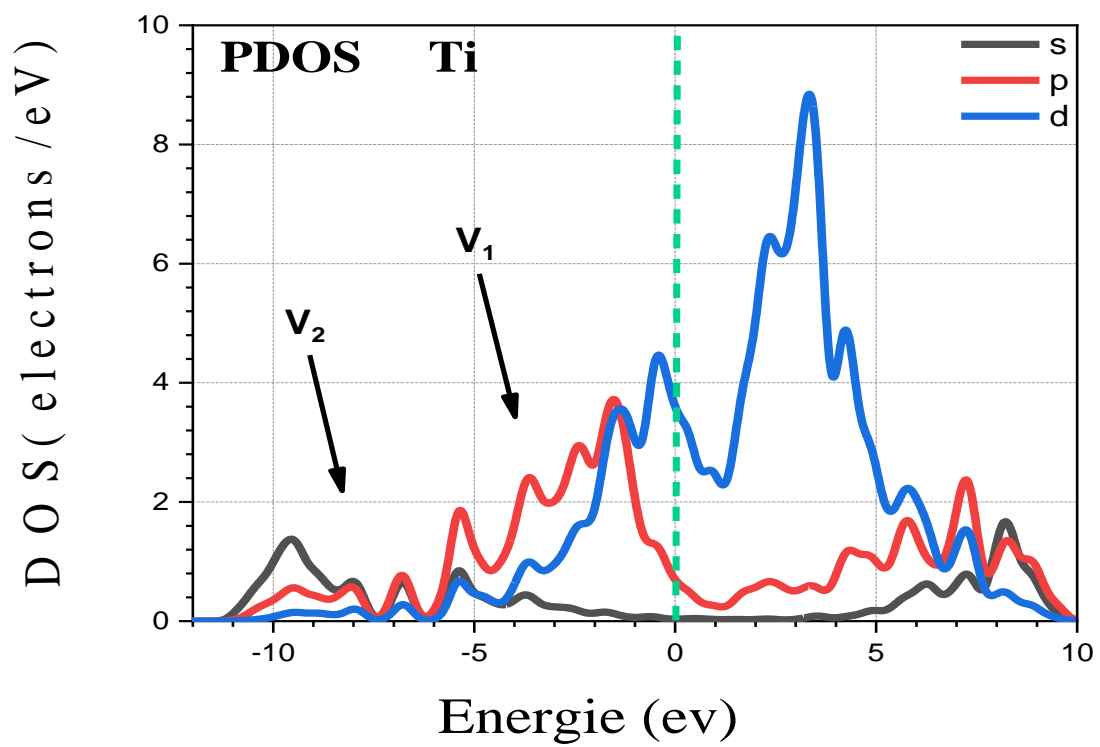
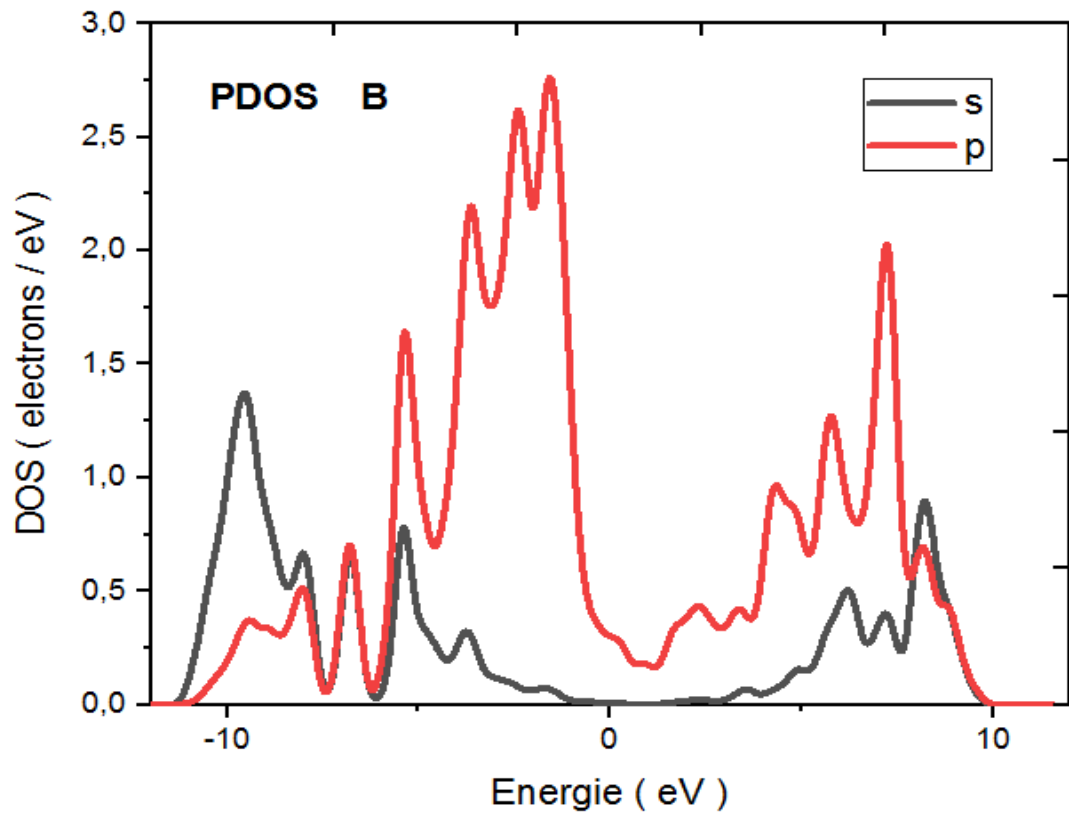


Figure .4 : DOS Partielles du TiB.

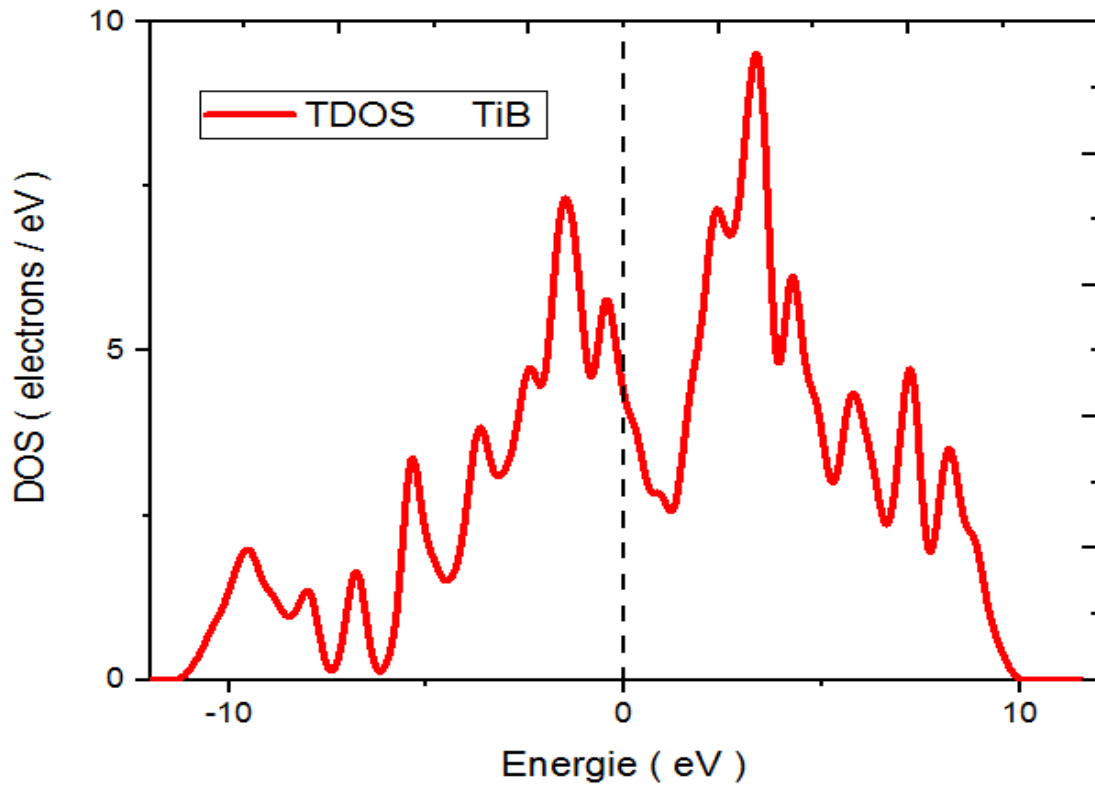


Figure .5 : DOS total du TiB.

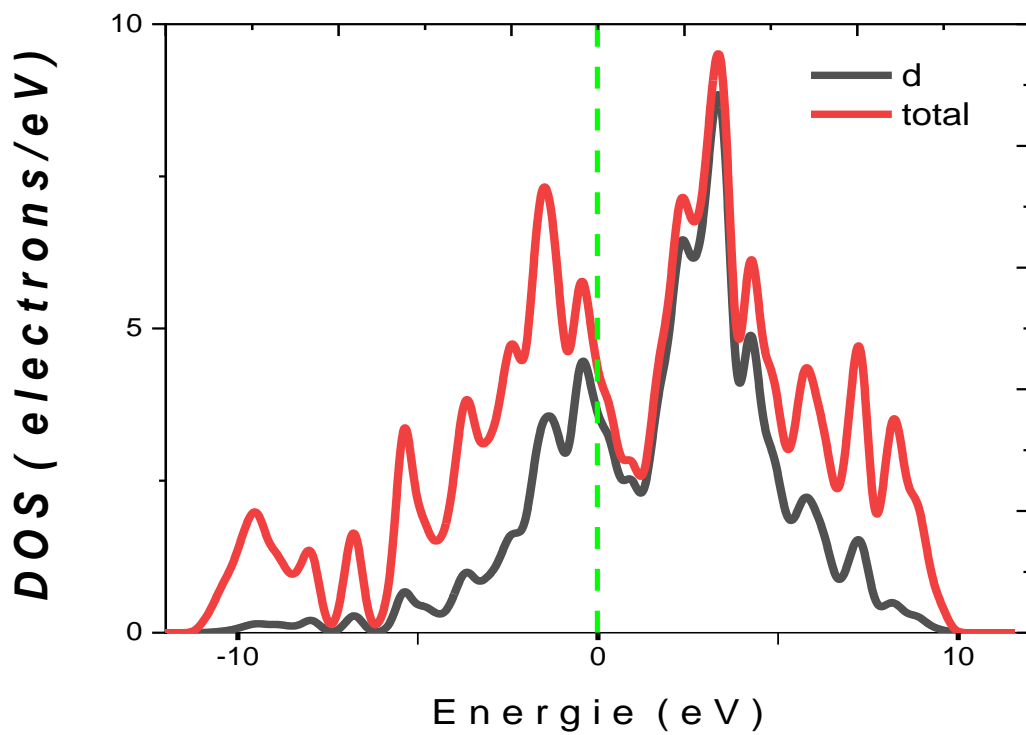


Figure .6 : DOS total du TiB et l'orbitale (d) de Ti.

Les bandes de valence du matériau étudié sont réparties à des régions comme suite :

- ❖ La région [-12 eV; 1] est divisé en deux sous-groupes distincts V1 et V2. Ce groupe est formé d'une mixture d'orbitales p et s de (Ti) et (B) et l'orbitales d de (Ti).

La bande de conduction est située entre [1, 12 eV].

Dans les figures des densités d'états ci-dessus j'ai présenté les intervalles énergétique d'interaction -12 eV jusqu'au l'énergie de Fermi, et de plus l'intervalle énergétique de la bande de conduction de 1 eV jusqu'au 10 eV.

- L'examen de la densité d'états totale confirme le caractère métallique du composé TiB.
- L'examen de la densité d'état totale montrent bien que l'état 3d de l'élément Ti contribue fortement dans la densité d'état totale du composé TiB (figure. 6).

III.5. Propriétés élastiques :

Les propriétés élastiques sont fortement corrélées au type de liaisons entre les atomes car leurs mesures apportent des informations concernant les forces liant les atomes ou les ions constituant un solide. L'analyse du comportement élastique d'un matériau se ramène à la détermination des constantes élastiques correspondantes. Les propriétés mécaniques sont définies par la connaissance des constantes élastiques C_{ij} , ces paramètres peuvent être déterminés de façon efficace à partir des calculs ab- initio.

III.5.1. Tenseur des Constantes élastiques C_{ij} :

Un système de symétrie orthorhombique requies neuf constants élastiques indépendants (C_{11} , C_{22} , C_{33} , C_{44} , C_{55} , C_{66} , C_{12} , C_{13} et C_{23}).

Les trois premières constantes C_{11} , C_{22} et C_{33} représentent la résistance à la compression/traction unidirectionnelle respectivement suivant les directions principales [100], [010] et [001] (i.e. suivant les axes principales a, b et c). D'autre part les six constantes qui restent C_{44} , C_{55} , C_{66} , C_{12} , C_{13} et C_{23} définissent la résistance aux contraintes de cisaillement[7].

III.5.2. Stabilité mécanique de la structure orthorhombique :

Les résultats obtenus confirment la stabilité mécanique de TiB dans la Structure orthorhombique , Car les critères de stabilité équation III-6 ; sont vérifiés [9].

$$C_{ii} + C_{jj} - 2C_{ij} > 0; i, j = 1, 2, 3 \text{ et } i \neq j$$

III-3

$$\sum C_{ij} > 0 \quad i, j = 1, 2, 3$$

Les valeurs calculées de ces constantes pour le composé TiB sont illustrées dans le Tableau III -4.

Tableau III-4: Les constantes C_{ij} calculées pour les TiB.

C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{22}	C_{33}	C_{44}	C_{55}	C_{66}	C_{23}	Reference
415.9	85.5	110.0	522.9	416.4	196.7	181.8	221.8	61.0	Nos calculs
411	91	107	524	410	189	186	193	61	[4]
418	84	107	523	402	198	178	219	64	[8]
416	86	110	520	413	198	179	222	59	[3]

D'après ces résultats, on remarque que cette structure est stable mécaniquement vue les conditions de stabilité mécanique pour un système orthorhombique.

- C_{11} est très proche de C_{33} (415 et 416 GPa, respectivement) dans le système orthorhombique
- On remarque les valeurs de (C_{11} , C_{22} , C_{33} , C_{44} , C_{55} , C_{66} , C_{12} , C_{13} et C_{23}). est très proche de les résultats théorique de la référence.
- La valeur calculée du C_{22} , est plus grande par rapport aux autres constantes (C_{11} , C_{22} , C_{33} , C_{44} , C_{55} , C_{66} , C_{12} , C_{13} et C_{23}).
- Les valeurs calculées pour C_{11} , C_{22} et C_{33} sont plus grandes que les valeurs calculées pour C_{44} , C_{55} et C_{66} , signifiant ainsi, que les matériaux étudiés sont plus résistant à la compression unidirectionnelle qu'aux déformations de cisaillement.

III.5.3. Modules d'élasticité :

Les propriétés élastiques macroscopiques sont décrites par le module de compression B, le module de cisaillement G, le module de Young E et le coefficient de poisson ν .

Les méthodes les plus souvent utilisées pour calculer les modules d'élasticité isotropes à partir des approximations de Voigt [10] ,approximations de Reuss [11] qui sont les limites supérieure et inférieure, des modules élastiques (B, G) des matériaux poly-cristallins statistiquement isotropes.

Pour la symétrie orthorhombique on a les formules qui nous permettent de calculer le module de cisaillement ainsi que le module de compression données par les relations[7].

$$B_v = (C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23})/9 \quad \text{III-4}$$

$$1/B_R = (S_{11} + S_{22} + S_{33}) + 2(S_{12} + S_{23} + S_{13}) \quad \text{III-5}$$

$$15G_v = (C_{11} + C_{22} + C_{33}) - (C_{12} + C_{23} + C_{13}) + 3(C_{44} + C_{55} + C_{66}) \quad \text{III-6}$$

$$15G_R = 4(S_{11} + S_{22} + S_{33}) - 4(S_{12} + S_{23} + S_{13}) + 3(S_{44} + S_{55} + S_{66}) \quad \text{III-7}$$

A partir de ces modules on peut définir d'autres grandeurs élastiques tel que le module de Young E, le rapport de Poisson ν :

$$B = \frac{B_R + B_v}{2} \quad \text{III-8}$$

$$G = \frac{G_R + G_v}{2} \quad \text{III-9}$$

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad \text{III-10}$$

$$\nu = \frac{3B + 2G}{2(3B + G)} \quad \text{III-11}$$

Le tableau III-5 donne un aperçu sur les modules d'élasticités :

Tableau III-5: Le module de cisaillement et de compression de Reuss, Voigt et Hill.

G_v	G_R	G_H	B_v	B_R	B_H	Ref
193.3	189.7	191.5	207.6	206.7	207.1	Nos calculs
186	183	184.5	207	206	206.5	[4]

Tableau III-6: modules d'élasticités

G	B	E	ν	B/G	Ref
191.5	207.2	439.2	0.1466	1.08	Nos calculs
184.5	206.5	427	0.15	1.11	[4]
191	206	438	0.146	1.08	[3]
193.5	207	443	0.14	1.07	[8]

Dans le but de classer les composés comme des matériaux fragiles ou ductiles, on a calculé le rapport B/G, avec la valeur critique qui sépare les comportements ductile/fragile égale à 1.75 (Fragile < 1.75 < ductile), donc on remarque que les valeurs de rapport B/G du composé TiB égale 1.0816, alors on conclue que le TiB est fragile.

III.6. Propriété d'anisotropie élastique :

En physique, l'anisotropie implique qu'une propriété physique dépend des directions cristallographiques de la structure. Donc, il est nécessaire d'évaluer l'anisotropie élastique d'un solide pour comprendre la variation de ces propriétés mécanique dans les différentes directions. Pour évaluer l'anisotropie élastique d'un matériau, il existe une manière utile qui donne une visualisation de l'anisotropie élastique par une représentation du module de Young et module de compressibilité dans un espace tridimensionnel (3D) et (2D). Les trois dimensions de la surface fermé qui représentent la dépendance du module de Young E et

module de compressibilité B dans une direction dans le cristal ayant une structure orthorhombique sont décrites par les relations suivantes [12]:

$$\frac{1}{E} = (S_{11})l_1^4 + (S_{22})l_2^4 + (S_{33})l_3^4 + (2S_{12} + S_{66})l_1^2l_2^2 + \quad \text{III-12}$$

$$(2S_{23} + S_{44})l_2^2l_3^2 + (2S_{13} + S_{55})l_1^2l_3^2$$

$$\frac{1}{B} = (S_{11} + S_{12} + S_{13})l_1^2 + (S_{12} + S_{22} + S_{23})l_2^2 + (S_{13} + S_{23} + S_{33})l_3^2 \quad \text{III-13}$$

$$l_1 = \sin\theta\cos\varphi, \quad l_2 = \sin\theta\sin\varphi; \quad l_3 = \cos\theta \quad \text{III-14}$$

Dans les équations (III-12), et (III-13); les S_{ij} sont les constantes élastiques de compliances et l_1 , l_2 et l_3 , sont les cosinus directeur par rapport à l'axe des x, y et z, respectivement. Dans une représentation 3D, et 2D la distance entre l'origine du système de coordonnées à cette surface est égale à la valeur du module représenté dans une direction donnée. Dans une représentation 3D, un matériau isotrope présenterait une forme sphérique, et l'écart par rapport à la forme sphérique indique le degré d'anisotropie [13].

Les résultats de calcul de la surface 3D, 2D du module de Young et module compression appliquée par l'équation III-12; III-13 dans le cas de la structure orthorhombique du TiB sont illustrés dans la figure .7 et figure .8

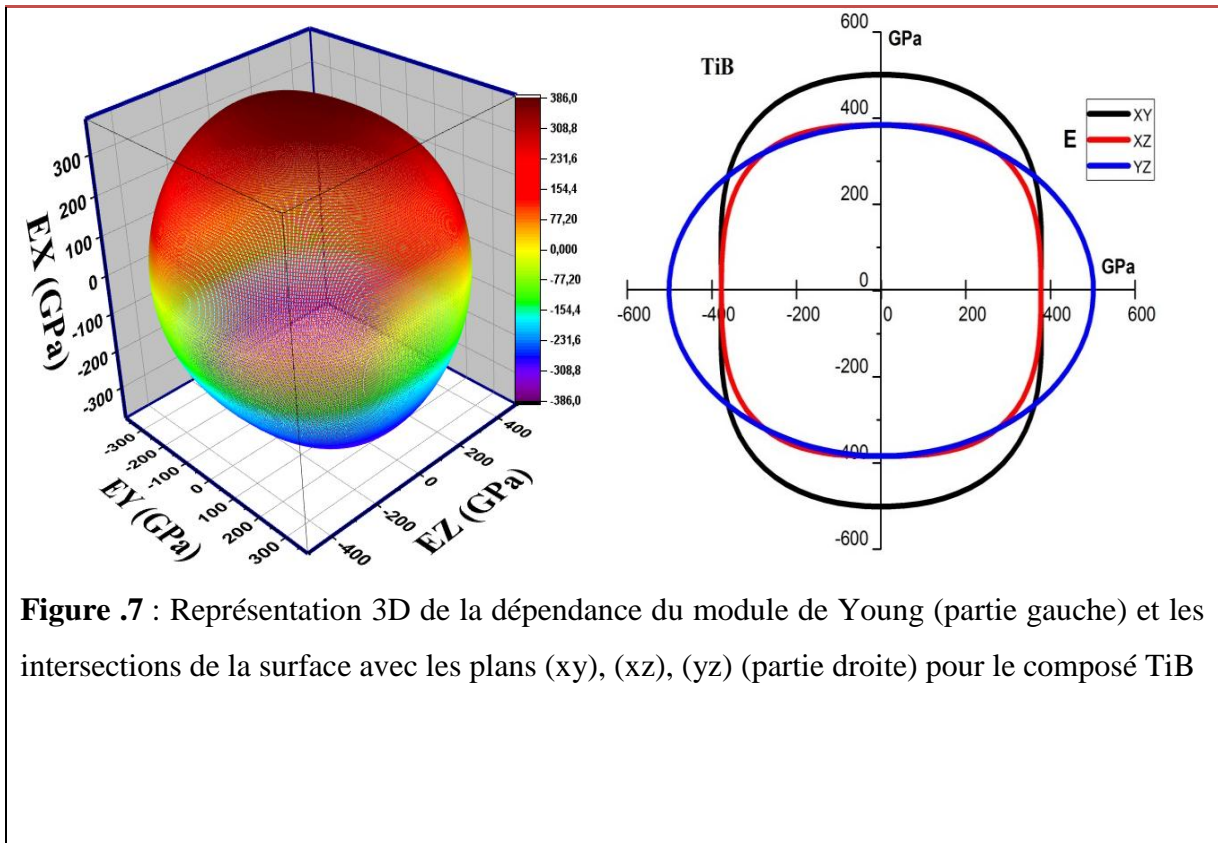


Figure .7 : Représentation 3D de la dépendance du module de Young (partie gauche) et les intersections de la surface avec les plans (xy), (xz), (yz) (partie droite) pour le composé TiB

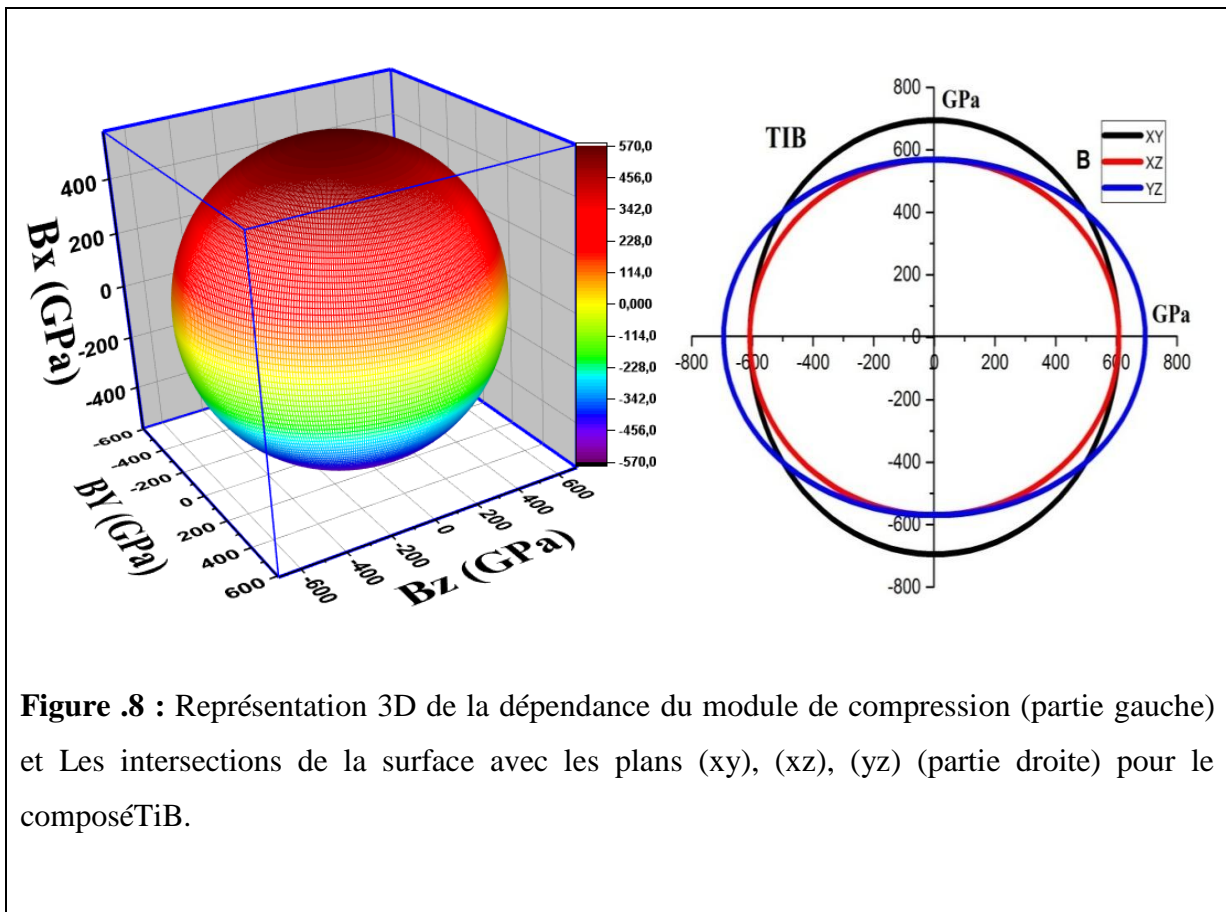


Figure .8 : Représentation 3D de la dépendance du module de compression (partie gauche) et Les intersections de la surface avec les plans (xy), (xz), (yz) (partie droite) pour le composé TiB.

Les caractéristiques de l'anisotropie du module de Young, l'intersection de la surface 3D avec les différents plans sont tracées à droite de la Figure .7.

Il est intéressant de noter que la valeur maximale du module de Young pour le matériau TiB, aura lieu dans le plan (yz), et le plan (xy) ; quand la contrainte est appliquée dans l'une des directions $[011]$, $[01\bar{1}]$, $[0\bar{1}1]$ et $[0\bar{1}\bar{1}]$. Tandis que la valeur minimale est réalisée dans le plan (xz), lorsque la contrainte est appliquée dans l'une des directions principales $[010]$, $[001]$, $[0\bar{1}0]$ et $[00\bar{1}]$.

A partir de la Figure.8, on peut facilement voir que le module de compression est presque anisotrope pour le TiB.

Les projections de module de compression dans différents plans tracées dans le côté droit de la Figure.8, montrent clairement que le module de compression le long de l'axe b- est le plus grand, ce qui implique que la compression le long de l'axe b- est difficile que la compression le long des axes a et c.

En particulier dans les plans (xy) et (yz). Le matériau possède un comportement isotrope presque parfait du module de compression dans le plan (xz).

Les résultats montrent aussi clairement que la réponse élastique à une traction/compression uni axiale est presque identique dans les deux plans (xz) et (yz) pour TiB.

III.7. La température de Debye :

La vitesse de propagation des ondes élastiques transversales v_t et longitudinale v_l dans un solide ainsi que la vitesse moyenne du son v_m s'expriment de manière simple en fonction des grandeurs élastique B et G, elles dépendent aussi de sa densité ρ tel que :

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{1}{v_t^3} + \frac{1}{v_l^3} \right) \right]^{-\frac{1}{3}} \quad \text{III. 15}$$

$$v_t = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad \text{III. 16}$$

$$v_l = \sqrt{\frac{(B + \frac{4G}{3})}{\rho}} \quad \text{III. 17}$$

La température Deby Θ_D est un paramètre important qui détermine les propriétés thermodynamiques des matériaux (la chaleur spécifique et la température de fusion...etc.). Elle est définie comme :

$$\Theta_D = \frac{h}{k} \left(\frac{3nN_A}{4\pi M} \right)^{\frac{1}{3}} v_m \quad \text{III. 18}$$

Tel que est la constant de Planck (k) ; (B) est la constante de Boltzmann, (n) est le nombre d'atomes par molécule, (N_A) est le nombre d'Avogadro, (M) la masse moléculaire et (v_m) vitesse moyenne du son.

Les propriétés thermodynamiques, la température de fusion et la conductivité thermique sont toutes liées à la température de Deby. A partir des équations (III-15), (III-16), (III-17) et (III-18) il, nous pouvons calculer les vitesses de propagation longitudinal v_l transversal v_t et moyenne v_m des ondes acoustiques élastiques isotropes et la température de Deby D_0 . Les résultats sont présentés dans le tableau III-7.

Tableau III-7: *Température de Debye, densité et vitesse de propagation des ondes Longitudinales, transversales et moyennes pour TiB.*

P (g/cm ³)	v_l (m/s)	v_t (m/s)	v_m (m/s)	Θ_D (K)	Ref
4.58	10049.3	6466.7	7100.2	959.1	Nos calcul
4.58	10031	6457	7083	959	[3]
4.58	10191.2	6499.1	7143.3	967.7	[14]

Mes résultats sont en bonne accord avec d'autres calculs [3] et [14] .

La température de Deby Θ_D et les vitesses de propagation des ondes acoustiques élastiques isotropes sont plus élevées pour TiB.

On s'attend donc à ce que la température de fusion et la conductivité thermique du TiB soit plus élevée.

III.8. La deuxième partie : sous l'effet de pression

III.8.1. l'effet sous pression de traction.

III.8.2. Introduction :

Les propriétés mécaniques des métaux sont d'un grand intérêt puisqu'elles conditionnent non seulement les problèmes de mise en forme des matériaux mais également leur comportement en service dans des applications industrielles extrêmement diversifiées. Le choix du matériau d'une pièce industrielle dépendra de propriétés mécaniques, résistance, dureté, ductilité ... Il est donc nécessaire de mesurer ces grandeurs physiques par des essais mécaniques. L'essai de traction est le procédé expérimental le plus largement utilisé dans l'étude du comportement mécanique, il permet l'étude des propriétés mécaniques de base.

III.8.3. Méthode de calcul

Dans cette deuxième partie nous présentons nos résultats de calcul concernant le comportement des propriétés mécanique du matériau TiB, sous l'effet de pression de traction, il est évident que la pression change l'interaction intra-atomique ce qui influe directement sur la géométrie de la maille élémentaire sous les pressions appliquées, dans notre cas on a appliqué des pressions allant jusqu'aux 50 GPa, ou, à chaque pression, une optimisation complète des paramètres du réseau est effectuée. Les résultats de calcul de l'effet de la pression sur la variation des paramètres de maille (a), (b) et (c) sont illustrés dans la Figure. 9 ; pour étudier les mécanismes de déformation mécanique de ce matériau, nous avons tracé la courbe contrainte-déformation en traction uni axial dans les directions (a ; b ; et c), Figure. 9; et bi axial dans les plan (xy, xz, et zy), Figure. 10, est cela pour estimer la pression de traction qui sépare la région élastique à la région plastique.

- On peut voir que l'influence de la composante de contrainte dans la direction de chargement (a, b, ou c) affecte une déformation plus grande et importante, que celle dans les autres directions
- Chaque courbe montre une variation linéaire. Quand la déformation élastique atteint sa limite, un tournant apparaît dans la courbe de traction (tension).

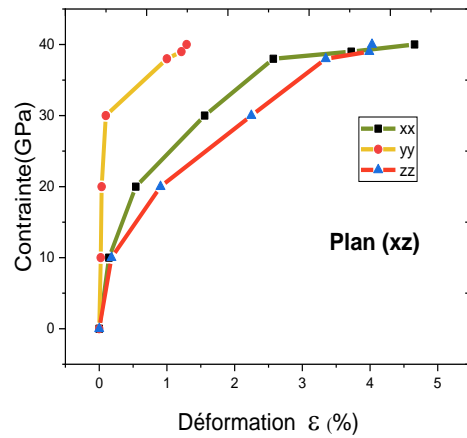
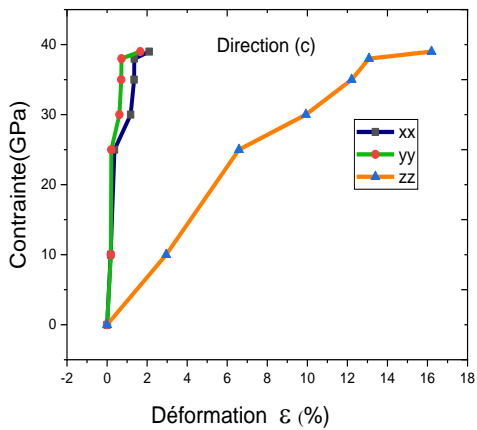
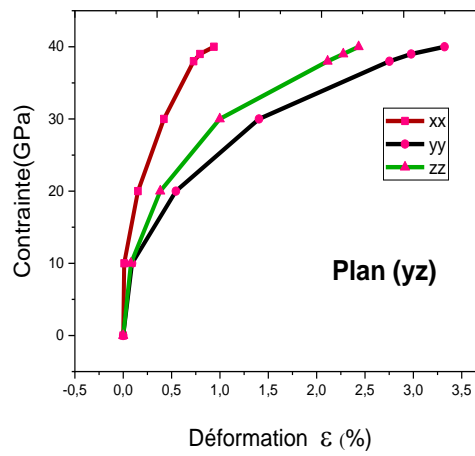
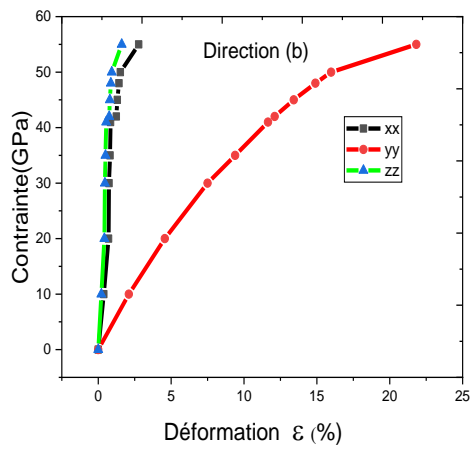
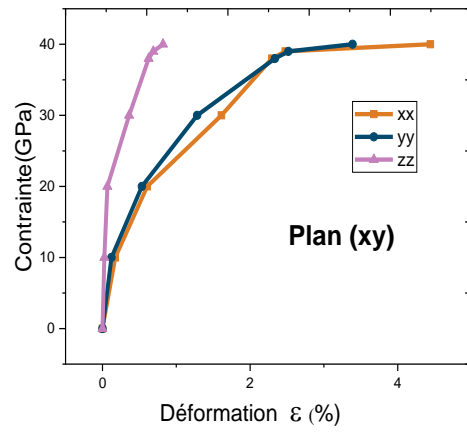
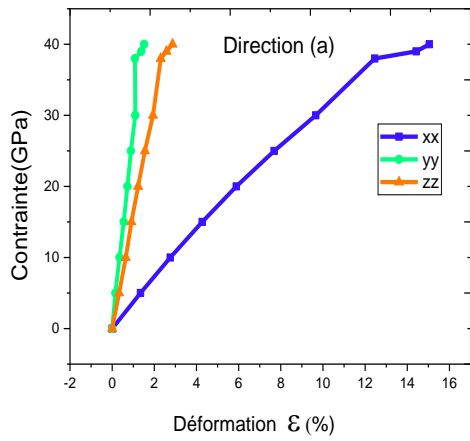


Figure. 9. Courbe contrainte-déformation montrant la limite déformation élastique du composée TiB dans les directions (a ; b ; c)

Figure.10. Courbe contrainte-déformation montrant la limite déformation élastique du composée TiB, selon les plans (xy, yz, xz)

III.8.4. Relation (contrainte – déformation)

La contrainte – déformation résulte de l'expérience de traction uniaxiale sont présentées à la Figure. 9 et celles relatives à l'extension biaxiale sont illustrés à la Figure.10. Dans chaque courbe, il y a trois déformations calculés pour chaque traction appliquée sur les directions x, y, z, qui représentent ici les paramètres de maille (a, b, et c). On peut toujours voir que la déformation dans le sens de la traction est toujours la plus grande qu'aux autres directions. La limite élastique des directions X et Z sous la pression de traction est estimée à 40 GPa tandis que la limite élastique de la direction Y sous la pression de traction est estimée à 55 GPa ce qui est confirmé par les constantes élastiques ($C_{22} > C_{33} > C_{11}$). Les données pour l'extension biaxiale sont illustrées par la Figure. 10. Toutes les extensions biaxiales présentent des structures fragiles. Le plan xy est assez différent de celles des plans yz et zx. La contrainte maximale est plus grande (2.5%) et les trois plans (xy ; yz ; zx) sont presque les mêmes à faible déformation. Les données pour les plans yz et zx sont sensiblement différentes et avoir la contrainte maximum d'environ 3.5%. Un tel comportement indique une forte anisotropie de la réponse mécanique.

II.9. Sous l'effet de pression hydrostatique :

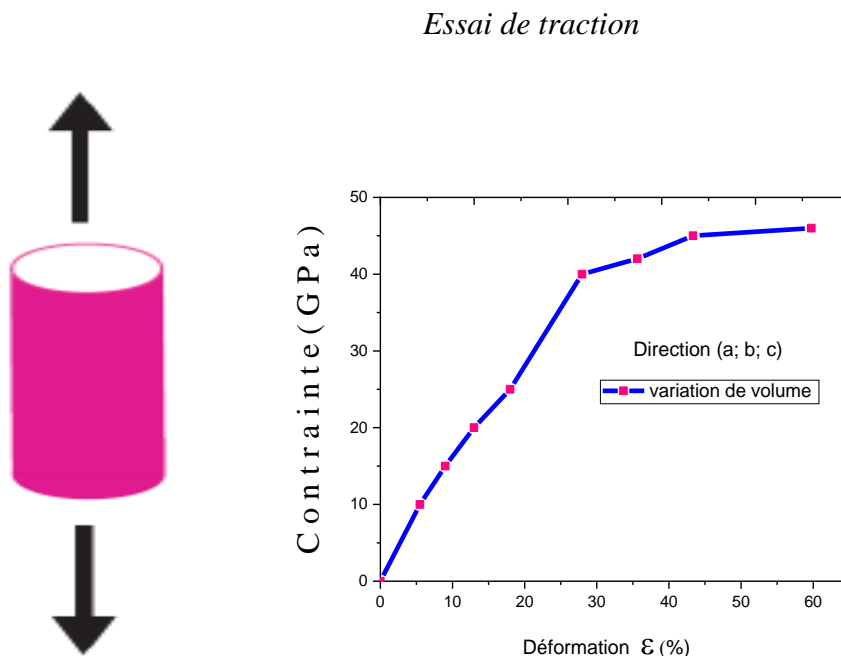


Figure.11. Courbe contrainte-déformation. Limite du domaine élastique du composé *TiB* (Traction hydrostatique) à la direction *a* ; *b* ; et *c*.

Essai de compression

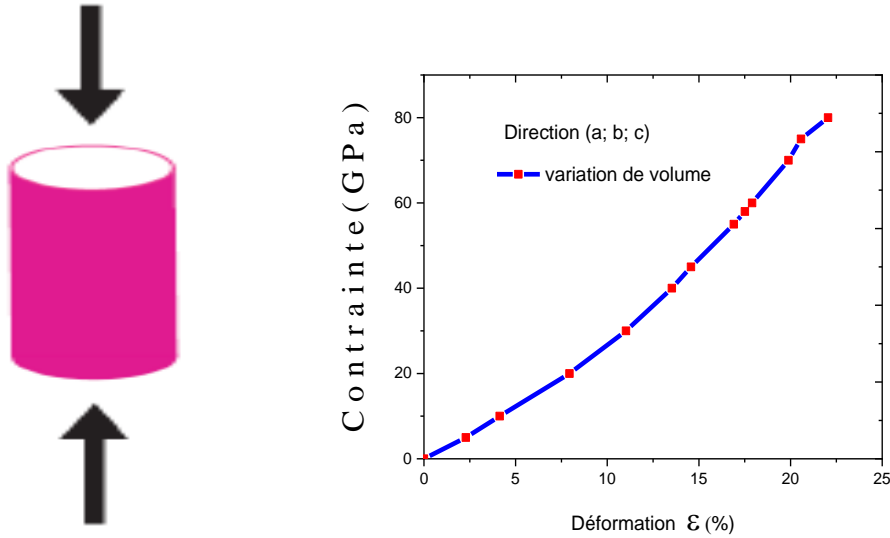


Figure. 12. Courbe contrainte-déformation. Limite du domaine élastique du composé TiB (Compression hydrostatique) à la direction a ; b ; et c .

Après les résultats ; et le traçage des deux courbes (traction –compression), on remarque que le composé TiB est plus dur à la compression que la traction.

Dans la (figure.11) on remarque bien que la pression de transition (élastique plastique) est estimée à 40 GPa, tandis que dans la (figure.12) de compression le matériau est déformé plus pour être comprimé, ce qui explique les grandes valeurs calculées pour C_{11} , C_{22} et C_{33} .

III.10. Conclusion

Dans ce chapitre on a étudié le composé TiB en deux catégories : la première est sans l'effet de pression, la deuxième est sous l'effet de pression, les deux études sont lancées par les calculs de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)[15], dans l'approximation GGA-PBE. Nous avons réalisé une étude théorique des propriétés structurales, électroniques et élastiques du TiB à pression nulle. Les paramètres calculés de maille à l'équilibre et les coordonnées atomiques internes et l'ensemble complet des constantes élastiques monocristallin du TiB calculées nous paraissent consistantes et en bon accord avec d'autres travaux.

Le composé TiB présente un degré d'anisotropie au niveau du module de Young et du module de compression.

Reference:

- [1] Y.-x. Yuan, "A modified BFGS algorithm for unconstrained optimization," *IMA Journal of Numerical Analysis*, vol. 11, pp. 325-332, 1991.
- [2] T. H. Fischer, J. Almlof, "General methods for geometry and wave function optimization", *J. Phys. Chem.*, 96, 9768-9774 (1992).
- [3] Dong Chen, Zhe Chen, Yi Wu, Mingliang Wang*, Naiheng Ma, Haowei Wang, "First-principles study of mechanical and electronic properties of TiB Compound under pressure" D. Chen et al. / *Intermetallics* 52 (2014) 64e71.
- [4] Panda KB, Chandran KSR. *Acta Mater* 2006;54:1641e57.
- [5] G. Ahmed, "Ab-initio calculation of the physical properties of some transition metal borides.," *Magnetism and Magnetic Materials* 406(2016)192–199, vol. 121, 2017.
- [6] CHIHI. Tayeb: these de doctorat, UNIVERSITE FERHAT ABBAS-SETIF.
- [7] HADDADI Khelifa, thèse de doctorat, Etude des propriétés structurales, élastiques et électroniques des composés anti pérovskites de type XN₃, Université Ferhat Abbas de Sétif,
- [8] Li Y-F, Xu H, Xia Q-L, Liu X-L . *J Cent South Univ Technol* 2011;18:1773e9.
- [9] F. Mouhat, and Francois-Xavier Coudert, Necessary and Sufficient Elastic Stability Conditions in Various Crystal Systems, *Phys. Rev. B* 90, 224104 (2014).
- [10] A. Reuss, *ZAMM - J. Appl. Math. Mech. / Zeitschrift Für Angew. Math. Und Mech.* 9 (1929) 49–58.
- [11] R. Hill, *Proc. Phys. Soc. Sect. A* 65 (1952) 349–354
- [12] J. F. Nye, "Physical properties of crystals ," 1957.
- [13] A. Benmakhlouf, A. Bentabet, A. Bouhemadou, S. Maabed, R. Khenata, and S. Bin-Omran, "Structural, elastic, electronic and optical properties of KAlQ₂ (Q= Se, Te): A DFT study," *Solid State Sciences*, vol. 48, pp. 72-81, 2015.
- [14] Yan H-Y, Wei Q, Chang S-M, Guo P. *Trans Nonferrous Met Soc China* 2011;21: 1627e33.
- [15] M. D. Segall, P. J. D. Lindan, M. J. Probert, C. J. Pickard; P. J. Hasnip, S. J. Clark, M. C. Payne, "First-principles simulation: ideas, illustrations and the CASTEP code", *J. Phys. Condens. Matter*, 14,2717-2743 (2002).

Conclusion générale

Conclusion générale

Ce mémoire est le résultat d'un travail de recherche effectué au Laboratoire Physique des Matériaux (LPM), Université Amar T'élidai Laghouat. Ce travail qui a été consacré à l'étude de la traction uni axial et bi axial sur le matériau TiB m'a offert l'opportunité de savoir pas mal de choses sur les matériaux. Cette étude menée par la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation de densité de gradient généralisée, moyennant les codes de calcul Castep est divisé en deux volets :

- Sans l'effet de la pression, les valeurs calculées pour les paramètres de maille et les constantes élastiques s'accordent parfaitement avec les données expérimentales et d'autres calculs théoriques, en calculant le rapport B/G et basant sur la suggestion de Pugh, on a montré que le composé TiB a la tendance d'être classés comme matériaux fragiles, de plus, entraînant les matériaux poly cristallins comme agrégats des monocristaux avec des orientations aléatoires, les modules d'élasticité tels que le module de compression, Young cisaillement, et le coefficient de Poisson sont calculés à partir des constantes élastiques et leurs anisotropies mécaniques sont discutées. La représentation des surfaces tridimensionnelles (3D) et 2D des modules de compression et Young démontrent le degré d'anisotropie.
- Sous l'effet de la pression, j'ai appliqué des pressions uni axiales selon les trois directions (xx, yy, et zz) et bi axiales (xy, xz, et yz) ou j'ai tracé les courbes contrainte-déformation, et prédire les pressions de traction (40 GPa) de transitions élastiques-plastiques.

ملخص:

هدف المُذكرة هذه هو الحساب الأساسي للخصائص الهيكلية، الإلكترونية، ومرونة التباين لمركب أحادي البورون TiB، أُجري الحساب في إطار نظرية الكثافة الذّالية بإستعمال طريقة أشباه الكمونات (PP) مع تقريب التدرج المعمم (GGA)، المثبت في البرنامج CASTEP. الدراسة تحت الضغط (الشد) لهذا المركب بيّنت عند قيم ضغط معيّنة نهاية حد المرونة و بداية حد المطّاطية. النتائج المتحصّل عليها تمت مقارنتها مع نتائج أخرى، وهي على إتفاق جيّد معها في الحالة الأساسية للحصول على وصف جيد للسلوك الميكانيكي للمركب دون تأثير الضغط، فقد قمنا بحساب الثوابت المرنة C_{ij} و من خلالها دراسة خواص تباين المرونة للمركب المدروس، وتحقق استقرارها الميكانيكي، وتم تحديد سرعات الموجة الصوتية في الاتجاهات الرئيسية واستنادا إلى تقريب فويه - روس وهيل، اكتشفنا الخصائص المرّونية للمركب المدروس لمتعدد البلورات وحدات الوسائط الفيزيائية المرّونية (، معامل القص G، معامل يونغ E و بواسون ν) حيث تم رسم مخططات السطوح (3D) ومخطط المستوى (2D) لمعامل الضغط ومعامل يونغ متعددة المستويات، للكشف عن تباين الخصائص المرّونية.

الكلمات المفتاحية: الكثافة الذّالية، طريقة أشباه الكمونات، أحادي البورون، برنامج الحساب، حد المرونة و بداية حد المطّاطية.

Résumé:

Le but de ce mémoire est le calcul ab initio des propriétés : structurales, électroniques, et anisotropie élastique du mono borure : TiB. Le calcul a été mené dans le cadre général de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) moyennant la méthode pseudo potentiels (PP) avec l'approximation du gradient généralisé de Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA-PBE), qui est implanter dans le code de calcul CASTEP. L'étude, sous l'effet de la pression de traction de ce composé qui contient un métal de transition montre à une certaine pression la limite élastique du matériau et le commencement de la phase plastique. Les résultats obtenus ont été commentés et comparés avec les données disponibles. Un très bon accord a été trouvé entre les résultats calculés à l'état fondamentale et ceux issus de la littérature. Pour une bonne description du comportement mécanique du matériau considérésans l'effet de la pression, nous avons calculé d'abord ses constantes élastiques en état monocristallin. Les valeurs numériques obtenues pour les C_{ij} du système étudié, vérifier la stabilité mécanique et elles sont utilisées pour quantifier les vitesses d'ondes acoustiques et la température de Deby suivant les directions principales. En utilisant toujours les valeurs des C_{ij} et en se basant sur l'approximation de Voigt-Reuss-Hill, nous avons exploré les propriétés élastiques des composés étudiés en état poly cristallin : les modules d'élasticité isotropes (module de compression B, module de cisaillement G, module de Young E et rapport de poisson ν), Nous avons tracé les surfaces (3D) et les contours planes des modules (E et B à plusieurs plans cristallographiques, pour révéler leur anisotropie élastique.

Mots clés : DFT, Pseudo potentiels (PP), TiB, Castep, Limite élastique – plastique.

Abstract:

The aim of this work is the ab initio calculation of the properties: structural, electronic, and elastic anisotropy of a single boride TiB. The calculation was conducted in the framework of the functional theory of density (DFT) through the pseudo potential method (PP) with the generalized gradient approximation of Perdew-Burke Ernzerhof (GGA-PBE), which is implanted in the CASTEP code. The results were discussed and compared with experimental data. A good agreement was found between the results in the fundamental state and those from the literature. For a comprehensive description of the mechanical behavior of the considered without the effect of pressure, we first calculated their elastic constants of single crystal state. The values obtained for the C_{ij} were used to quantify the acoustic wave velocities along the main directions. The compound is mechanical stable. The projections of Young's and bulk modulus are plotted in 3D and 2D.

Key words: DFT, Pseudo potential method (PP), TiB, Castep, Elastic limit.