

## Introduction

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

La compréhension des propriétés électroniques et structurales des métaux, alliages et semiconducteurs repose sur des interprétations cohérentes d'expériences variées. La cohérence de ces interprétations se fonde en dernier ressort sur une représentation correcte de la structure électronique de ces matériaux, dont le cadre général est fourni par la théorie des bandes.

Les techniques de calcul de la structure électronique mises au point au cours des dernières décennies sont nombreuses, et en particulier, les méthodes *ab-initio* qui sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés électroniques et structurales des systèmes les plus complexes. Elle sont aussi un outil de choix pour la prédiction de nouveaux matériaux, et elles ont parfois pu remplacer des expériences très coûteuses ou même irréalisables en laboratoire.

Les études *ab-initio* menées sur l'ensemble des matériaux existants sont nombreuses, et ont donné des résultats fiables en les comparant avec les mesures expérimentales. Parmi ces méthodes *ab-initio*, la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) est l'une des plus précises, actuellement, pour le calcul de la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Elle est semblable à la méthode APW avec tous les avantages de la méthode OPW pour traiter les semiconducteurs. Ainsi, la rapidité de calcul de la méthode FP-LAPW est impressionnante par rapport aux autres méthodes de premier principe.

Cette thèse a pour but de contribuer à la détermination des propriétés structurales et électroniques de matériaux à base de bore et de cuivre à liaisons tétraédriques en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).

Nous avons étudié, en particulier, les nitrure, phosphure, arséniure et antimoniure de bore, BN, BP, BAs et BSb de la famille des semiconducteurs III-V, ainsi que les propriétés structurales et l'effet du désordre dans l'alliage  $C_x(\text{BN})_{1-x}$ .

En ce qui concerne les halogénures de cuivre, la méthode FP-LAPW s'avère une des plus précises pour le calcul de la structure électronique, compte tenu des difficultés liées à l'hybridation des états 3d du cuivre avec les états p de l'halogène. Nous avons, en outre, étudié les propriétés structurales et électroniques ainsi que le paramètre de désordre (bowing) des alliages ternaires formés à partir des halogénures de cuivre CuCl, CuBr et CuI.

Le travail que nous présentons dans ce mémoire comprend plusieurs parties.

Dans le premier chapitre, nous rappelons le principe de la méthode FP-LAPW, ainsi que le calcul de la densité de charge électronique et de l'ionicté.

Dans le second, nous effectuons une étude structurale (pas du réseau, module de rigidité et sa dérivée) des composés à base de bore BN, BP, BAs et BSb à l'équilibre et sous l'effet d'une pression hydrostatique. Nous déterminons, à partir de la structure blende initiale, la nouvelle structure cristallographique la plus probable.

Dans le troisième chapitre, nous calculons les propriétés électroniques (structure de bandes, densité d'états et densité de charge) de BN, BP, BAs et BSb et les effets de la pression hydrostatique sur ces composés.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude des halogénures cuivreux CuCl, CuBr et CuI. Les études sont de même nature que précédemment. Nous calculons les propriétés structurales (pas du réseau, module de rigidité et sa dérivée) ainsi que les constantes élastiques, les masses effectives, l'ionicité et les propriétés électroniques pour chacun de ces composés.

Enfin, le dernier chapitre est dédié aux calculs des propriétés physiques et à la stabilité (paramètres de désordre) des alliages de bore  $C_x(\text{BN})_{1-x}$  et de cuivre  $\text{CuCl}_x\text{Br}_{1-x}$ ,  $\text{CuCl}_x\text{I}_{1-x}$  et  $\text{CuBr}_x\text{I}_{1-x}$  par la méthode de Zunger.