

# PLAN

<b>Introduction</b> .....	4
<b>I. LA METHODE DE CALCUL DES ONDES PLANES AUGMENTEES LINEARISEES (FP-LAPW)</b> .....	6
<b>I.1. Equation de Schrödinger à un électron</b> .....	7
I.1.1. Hamiltonien exact du cristal.....	7
I.1.2. Approximation de Born-Oppenheimer.....	7
I.1.3. Approximation des électrons libres (Hartree).....	8
<b>I.2. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)</b> .....	9
<b>I.3. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)</b> .....	14
I.3.1. La méthode APW.....	14
I.3.2. Principe de la méthode FP-LAPW.....	16
I.3.3. Les rôles des énergies de linéarisation ( $E_l$ ).....	17
I.3.4. Construction des fonctions radiales.....	18
I.3.4.1. Les fonctions radiales non relativistes.....	18
I.3.4.2. Les fonctions radiales relativistes.....	19
I.3.5. Détermination des coefficient $A_{lm}$ et $B_{lm}$ .....	24
I.3.6. Détermination des potentiels.....	25
I.3.6.1. La résolution de l'équation de Poisson.....	26
I.3.6.2. Potentiel d'échange et de corrélation.....	27
I.3.7. Les équations variationnelles.....	28
I.3.7.1. La contribution interstitielle.....	29
I.3.7.2. Les termes sphériques.....	31
I.3.7.3. Les éléments de matrice non-sphériques.....	32
I.3.8. Traitement des effets de spin-orbite.....	34
I.3.9. Amélioration de la méthode FP-LAPW.....	34
I.3.9.1. Les fenêtres d'énergie multiple.....	35
I.3.9.2. Le développement en orbitales locales.....	35
I.3.10. Densité de charge de valence.....	36
<b>I.4. Ionicité</b> .....	38
I.4.1. Modèle de Phillips.....	39

I.4.2. Modèle de Gracia et Cohen.....	39	
I.4.3. Modèle de Zaoui.....	40	
Références.....	41	
<b>II. LES PROPRIETES STRUCTURALES DE BN, BP, BAs ET BSb.</b>		
<b>EFFET DE LA PRESSION.....</b>	<b>44</b>	
Introduction.....	45	
<b>II.1. Nitrure de bore BN.....</b>	<b>46</b>	
<b>II.2. Phosphure de bore BP.....</b>	<b>51</b>	
<b>II.3. Arséniure de bore BAs.....</b>	<b>55</b>	
<b>II.4. Antimoniure de bore BSb.....</b>	<b>58</b>	
Références.....	62	
<b>III. LES PROPRIETES ELECTRONIQUES DES BORURES BN, BP,</b>		
<b>BAs ET BSb .....</b>	<b>65</b>	
<b>III.1. Structure de bandes et densité d'états (DOS).....</b>	<b>66</b>	
III.1.1. Nitrure de bore BN.....	66	
III.1.2. Phosphure de bore BP.....	69	
III.1.3. Arséniure de bore BAs.....	73	
III.1.4. Antimoniure de bore BSb .....	77	
<b>III.2. Densité de charge.....</b>	<b>80</b>	
III.1.1. Nitrure de bore BN.....	80	
III.1.2. Phosphure de bore BP.....	84	
III.1.3. Arséniure de bore BAs.....	87	
III.1.4. Antimoniure de bore BSb .....	90	
Références.....	93	
<b>IV. LES HALOGENURES DE CUIVRE CuX (X=Cl, Br, I).....</b>		<b>95</b>
Introduction.....	96	
<b>IV.1. Les paramètres du calcul.....</b>	<b>97</b>	
<b>IV.2. Les propriétés structurales.....</b>	<b>99</b>	
IV.2.1. Chlorure cuivreux CuCl.....	99	
IV.2.2. Bromure cuivreux CuBr.....	100	

---

IV.2.3. Iodure cuivreux CuI.....	101
IV.2.4. Constantes élastiques.....	102
<b>IV.3. Les propriétés électroniques.....</b>	<b>106</b>
IV.3.1. Structure de bandes et densité d'états.....	106
IV.3.2. Masses effectives.....	115
IV.3.3. Densité de charge et ionicité.....	116
Références.....	121
<b>V. ETUDE DES PROPRIETES STRUCTURALES ET ELECTRONIQUES DES ALLIAGES <math>C_x(BN)_{1-x}</math>, <math>CuCl_xBr_{1-x}</math>, <math>CuCl_xI_{1-x}</math> et <math>CuBr_xI_{1-x}</math>.....</b>	<b>124</b>
Introduction.....	125
<b>V.1. La méthode de calcul.....</b>	<b>126</b>
<b>V.2. Propriétés structurales et électroniques de l'alliage <math>C_x(BN)_{1-x}</math>.....</b>	<b>127</b>
V.2.1. Etudes structurales.....	127
V.2.2. Propriétés électroniques du $C_x(BN)_{1-x}$ .....	130
<b>V.3. Propriétés structurales et électroniques des alliages <math>CuCl_xBr_{1-x}</math>, <math>CuCl_xI_{1-x}</math> et <math>CuBr_xI_{1-x}</math>.....</b>	<b>133</b>
Références.....	141
<b>Conclusion.....</b>	<b>144</b>