$2^{ème}$ Partie :

Les méthodes des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (LAPW)

1-Ondes planes augmentées (APW) :

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : linearised augmented plane wave), développée par Andersen [19], est fondamentalement une modification de la méthode des ondes planes augmentées la APW développée par Slater, donc avant d'exposer le principe de LAPW, nous allons revoir les différents aspects de la méthode APW.

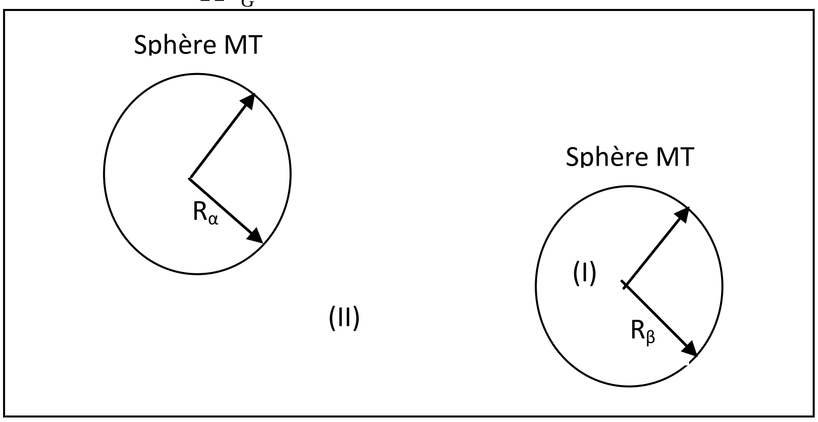
En 1937, Slater [20] proposa comme base les fonctions d'ondes planes augmentées (APW : Augmented Plane Wave) pour résoudre l'équation de Schrödinger à un seul électron, cette dernière correspond à l'équation de Kohn et Sham basée sur la DFT. La méthode APW est basée sur l'approximation « Muffin-tin » pour décrire le potentiel cristallin. Selon cette approximation la cellule unitaire est divisée en deux régions :

- Des sphères appelées « Muffin-tin » qui ne se chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome α de rayon *Rα.*
- Une région interstitielle délimitant l'espace résiduel non occupé par les sphères voir (Figure (II.1)), dans lesquelles deux catégories appropriées de bases sont utilisées :

- Des fonctions radiales multipliées par des harmoniques sphériques dans les sphères atomiques « Muffin-tin » (région I).
- Des ondes planes pour la région interstitielle (région II).

Soit :

$$\begin{cases} \varphi(\vec{r}) = \sum_{lm} a_{lm}^{\alpha} u_{lm}^{\alpha}(r, E) Y_{lm}(\vec{r}) \text{.......} r < R_{\alpha} \\ \varphi(\vec{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{G} C_G e^{i(\vec{G}+\vec{K})\vec{r}} \text{........} r > R_{\alpha} \end{cases}$$



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

Tel que :

$\varphi(\vec{r})$: La fonction d'onde.

Ω : Le volume de la cellule unitaire de simulation.

$u_{lm}^{\alpha}(r,E)$: La fonction radiale.

$Y_{lm}(\vec{r})$: L'harmonique sphérique.

C_G ,a_{lm}^{α} : Les coefficients du développement en ondes planes et en harmonique sphérique.

$\vec{K}$: Le vecteur d'onde dans la première zone irréductible de Brillouin (ZIB).

$\vec{G}$: Le vecteur du réseau réciproque.

$\vec{r}$: La position à l'intérieur des sphères α et β.

R_α, R_β:Les rayons des sphères Muffintin α et β.

La fonction $u_l^{\alpha}(r,E)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale dans le cas d'un atome libre α qui s'écrit sous la forme suivante :

$$\left\{-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+V^{\alpha}(r)-E_l\right\}ru_{\alpha}^{l}(r,E)=0$$

Dans laquelle $V^{\alpha}(r)$ représente la composante sphérique du potentiel à l'intérieur de la sphère « Muffin-tin ».

Slater a justifié l'utilisation de ces fonctions en notant que les ondes planes sont des solutions de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel est constant. Quand aux fonctions radiales, elles sont des solutions dans le cas d'un potentiel sphérique, lorsque E_l est égal à une valeur propre.

Les coefficients a_{lm} sont déterminés d'une manière à assurer la continuité de la fonction d'onde à la limite de la sphère « Muffin-tin ». Pour y faire, on va développer l'onde plane en fonction des fonctions sphériques de Bessel, ensuite on l'égalisera avec les fonctions à l'intérieur de la sphère « Muffin-tin ».On obtiendra :

$$a_{lm}=\frac{4\pi i^{l}}{\Omega^{\frac{1}{2}}u_l^{\alpha}(R_\alpha)}\sum_{G}C_G J_l\left(\left|\vec{K}+\vec{G}\right|\vec{R_\alpha}\right)Y_{lm}(\vec{K}+\vec{G}) \quad \text{................(II.36)}$$

Tel que : R_α est rayon de la sphère α .

A partir de l'équation (II.36) les a_{lm} sont déterminés par les coefficients C_G des ondes planes et les paramètres de l'énergie E_l.

Les fonctions d'ondes qui sont représentées par l'indice G et qui possèdent les deux formes, une onde plane dans la région interstitielle et une fonction radiale dans la région sphérique, sont appelées les ondes planes augmentées (APWs).

La méthode APW ainsi construite représente quelques difficultés de calcul, dont celles liées au problème de l'asymptote, car les coefficients a_{lm}^{α} donnés par l'équation (II.36) contiennent le terme $u_l^{\alpha}(R_{\alpha})$ au dénominateur. Il est donc possible de trouver des valeurs de l'énergie pour lesquels $u_l^{\alpha}(R_{\alpha})$s'annule à la limite de la sphère. C'est ce qu'on appelle le problème de l'asymptote. Les calculs deviennent plus compliqués quand les bandes apparaissent prés de l'asymptote.

Afin de surmonter ce problème plusieurs modifications à la méthode APW ont été apportées, notamment celles proposées par Andersen [19].

2-Ondes planes augmentées linéarisées :

Dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW : Linearized augmented plane wave), les fonctions de base à l'intérieur de la sphère « Muffin-tin » sont une combinaison linéaire des fonctions radiales $u_{lm}^{\alpha} y_{lm}$ et leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{u}_{lm}^{\alpha} y_{lm}$ .Les fonctions de bases sont données par:

$$\begin{cases} \frac{1}{\Omega} \sum_{G} C_G e^{i(\vec{G}+\vec{K})\vec{r}} ....r > R_{\alpha} \\ \sum_{lm} \left[a_{lm}^{\alpha} u_{lm}^{\alpha}(r) + b_{lm}^{\alpha} \dot{u}_{lm}^{\alpha}(r) \right] y_{lm}(r) ....r < R_{\alpha} \end{cases}$$

Où b_{lm}^{α} sont les coefficients correspondant à la fonction u_l et sont de même nature que les coefficients a_{lm}^{α} Dans la méthode LAPW on utilise les ondes planes dans la région interstitielle. Alors que dans la région des sphères « Muffin-tin » on utilise les ondes planes augmentées linéarisées.