

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF M'SILA

FACULTE:DES SCIENES

DEPARTEMENT: PHYSIQUE

N° : PhAPP 10/2019



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : PHYSIQUE APPLIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Henanou Khadidja

Intitulé

**Étude des propriétés fondamentales de carbure
d'yttrium**

Soutenu le 04 /07 /2019 devant le jury composé de:

Nadir Bouarissa

Université de M'sila

Président

Saib Salima

Université de M'sila

Rapporteur

Mezrag Fadila

Université de M'sila

Examineur

2018/2019



Remerciement

Je remercie Dieu le tout puissant de m'avoir donnée courage, patience et force durant toutes ces années d'étude.

Je suis très heureuse de témoigner de ma profonde estime à mon encadreur Mme [SAIB SALIMA](#), je lui suis très reconnaissante de m'avoir fait bénéficier de ses compétences scientifiques et d'avoir proposé et dirigé ce travail.

Je tiens nous tenons aussi à remerciera les membres de mon jury de thèse, pour avoir eu le courage et la patience de lire et juger mon manuscrit de thèse. Merci à messieurs [Bouarisa Nadir, mezrag fadila](#)

Enfin Mes remerciements les plus sincères à toutes les personnes qui auront contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce mémoire ainsi qu'à la réussite de cette formidable année universitaire



إهداء

❖ الى الوالدين الكريمين حفظهما الله

❖ الى كل افراد اسرتي

❖ الى فتحي هواربي، خليفة زقاد، مريم اودينا والى

كل من لم يدخر جهدا في مساعدتي.

❖ والى كل من ساهم في تكويني في حياتي الدراسية

Introduction générale	1
CHAPITRE I: Formalisme de La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité(DFT)	
I.1 Introduction	3
I.2 La résolution de l'équation de Schrödinger	3
I.2.1 Approximation de Born-Oppenheimer	4
I.2.2 L'approximation de Hartree	4
I.2.3 Méthode de Hartree-Fock	5
I.3 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	5
I.4 Théorème de Hohenberg - Kohn	6
I.5 Méthode de Kohn-Sham	7
I.6 Fonctionnelle d'échange-corrélation	8
I.6.1 Approximation de la densité locale LDA	8
I.6.2 L'approximation de gradient généralisée (GGA)	10
I.7. Théorie du pseudo potentiel	10
I.7.1. Introduction	10
I.7.2. Transférabilité des pseudo-potentiels	11
I.7.3. Construction d'un pseudo-potentiel	11
I.7.4. Pseudopotentiel à norme conservée	12
I.7.4.1. Méthodologie	12
I.7.4.2. Condition de la « norme conservée »	13
I.7.5. Théorème de Bloch	14
I.7.6. Méthode des ondes planes (PW)	14
Références	16
Chapitre II : Propriétés thermoélectrique	
II.1. Introduction	18
II.2. la thermoélectricité	18
II.3. Propriétés électrique et de transport	19
II.3.1. Théorie du transport de Boltzmann	19

II.3.2. La conduction thermique	21
II.3.3. La capacité thermique	24
II.3.4. La susceptibilité magnétique	24
II.3.5. L'effet Hall	25
Références	27
Chapitre III : Résultats et discussions	
III.1. Le code Quantum-ESPRESSO	28
III. 1.1. Introduction	28
III. 1.2. Détails des calculs	29
III.1.3. Propriétés structurales	30
III. 2. Propriété électronique	32
III.2.1. Structure de bandes	32
III.2.2. Densité d'états	33
III.2.3. les surfaces de Fermi	35
III.3. Propriétés thermoélectrique	35
III.3.1. Coefficient Seebeck	35
III.3.2. Conductivité électrique	36
III.3.3. La conductivité thermique électronique	37
III.3.4. Chaleur spécifique électronique (c)	38
III.3.5. La constante de hall	38
Références	40
Conclusion générale	42

Liste des figures:

Titre	page
Chapitre. I: Formalisme de La Théorie de la Fonctionnelle de la Densité(DFT)	
Figure(I.1): (a) Système réel constitué de plusieurs électrons en interaction mutuelle, (b) Système fictif de fermions indépendants de même énergie et de même densité électronique que le système réel.	07
Figure (I.2): Différents type des pseudo-potentiels.	12
Chapitre. II:	
Figure (II.1): Schéma de principe d'un effet thermoélectrique.	16
Figure (II.2): Schéma présentant l'évolution des porteurs dans un métal lorsqu'il est soumis à la fois à un champ électrique et à un champ magnétique.	23
Chapitre .III: Résultats et discussions	
Figure(III.1): La structure cristalline YC_2 .	29
Figure(III.2): La variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire (YC_2) dans l'approximation GGA.	31
Figure(III.3): structure des bandes de YC_2 et L'énergie zéro représente le Niveau de Fermi.	33
Figure(III.4): Les densités d'états électroniques totales et partielles de Y.	34
Figure(III.5): Les densités d'états électroniques totales et partielles de C.	34
Figure (III.6): les surfaces de fermi YC_2 .	35
Figure (III.7): représente l'évolution du coefficient de Seebeck en fonction de la température.	36
Figure (III. 8): Evolution de la conductivité électrique en fonction de la température.	37
Figure (III. 9): Evolution de la conductivité thermique électronique en fonction de la température.	37
Figure (III. 10): La chaleur spécifique électronique en fonction de la température.	38
Figure (III. 11): La constante de hall en fonction de la température.	39

Liste des tableaux:

Titre	page
Chapitre. III: Résultats et discussions	
Tableau(III.1): Le paramètre de réseau calculé, le module de compressibilité et sa dérivée de (YC_2)	31
Tableau(III.2): Les distances interatomiques comparées à d'autres résultats expérimentaux et théoriques	32

Introduction générale

La Physique des Matériaux a joué et continue à jouer un rôle fondamental dans le développement de notre société moderne en permettant l'avènement de nombreuses applications technologiques: L'électronique, le stockage de données, les communications, les capteurs et les transducteurs, requièrent l'utilisation de matériaux aux propriétés spécifiques qui, à travers leur comportement particulier, vont pouvoir jouer un rôle actif au sein des dispositifs et y assurer une certaine fonction. L'existence même de nombreux dispositifs ainsi que l'évolution récurrente de leurs performances (rapidité, sensibilité, diminution de taille) reposent souvent de manière cruciale sur la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés uniques ou exacerbées. La science des matériaux a pour objectif la détermination des relations qui existent entre les structures et les propriétés des matériaux, tandis que le génie des matériaux est axé sur la mise au point et la conception des matériaux ayant des structures et des propriétés déjà connues.

Avec l'avènement de la théorie de la fonctionnelle de densité « DFT » qui a remplacé l'équation de Schrödinger par une autre, équivalente mais ayant pour seule variable la densité électronique. Ce qui a permis aux méthodes quantiques, dites aussi méthodes des premiers principes (Ab initio), de se développer et d'arriver à un stade très élaboré qui a rendu possible le calcul de l'énergie totale, la structure de bande et toutes les propriétés qui en découlent, avec une précision très satisfaisante . Ces méthodes de calcul Ab-initio sont un outil très puissant pour la prédiction et l'étude de nouveaux matériaux, sous différentes conditions où l'expérience est presque impossible à réaliser, voir même dangereuse, destructive ou polluante

Parmi les méthodes ab-initio, la méthode des ondes planes (PW-PP) est l'une des plus précises pour calculer la structure électronique des solides dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), et l'approximation de l'énergie d'échange de corrélation utilisée dans ce travail est l'approximation du gradient généralisé (GGA). L'utilisation de cette méthode nous permet de déterminer les propriétés structurales (paramètres de maille, module de compressibilité et son dérivé), électroniques (structure de bandes, densité d'état).

Notre objectif c'est l'étude des propriétés structurales, électroniques et thermoélectrique du composé YC₂. Un intérêt particulier est porté à cause de leurs utilisations dans les différents domaines physique et technologique : il est stable à haute température et peut être utilisé comme revêtement, pour les outils de coupe, les surfaces résistantes à l'usure, dans les matériaux réfractaires et comme barrières conductrices dans l'industrie électrique.

La présentation de ce manuscrit est répartie en trois parties :

Dans le premier chapitre, chapitre sera consacré à la théorie de la DFT qui possède pour principal résultat l'écriture de l'énergie totale comme une fonctionnelle de la densité dans l'état fondamental. Et nous discuterons l'approximation du pseudo-potential de qui se sont révélée efficace l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides

Le deuxième chapitre sera consacré à donnera une introduction sur la thermoélectricité. Ainsi que les principaux effets de transport

Le troisième chapitre démontrera nos résultats numériques obtenus, concernant les propriétés structurales, électroniques, Propriétés de transport thermoélectrique du composé YC₂ thermoeiques de leurs interprétation, et leurs comparaisons avec certain travaux théoriques et expérimentaux disponibles dans la littérature et nous finirons notre mémoire par une conclusion générale.

Chapitre I :

*Formalisme de La Théorie de la
Fonctionnelle de la Densité(DFT)*

I.1. Introduction:

Les codes de calcul dans tous les domaines et spécialement l'état de la matière, solide liquide ou gaz ont été mis en service ces deux ou trois dernières décennies, devenus de plus en plus sophistiqués pour décrire plus précisément l'interaction déphasées. Ces codes utilisent les méthodes Ab initio ou de premier principe, utilisant les constantes atomiques pour résoudre l'équation de Schrödinger. La DFT (densité fonctionnelle théorie) implantée dans ces codes c'est imposée comme meilleure méthode, pour le calcul quantique de la structure électronique de la matière. L'objectif principal de la DFT est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique, par la densité électronique de charges [1].

I.2. La résolution de l'équation de Schrödinger:

Un solide est constitué d'un très grand nombre d'électrons et de noyaux en interactions. Pour déterminer les propriétés d'un solide on résoudra l'équation de Schrödinger :

$$H\Psi = E\Psi \quad (\text{I.1})$$

Où

H est l'opérateur Hamiltonien, Ψ sa fonction propre et E l'énergie propre.

L'opérateur Hamiltonien H du système $\{N \text{ noyaux} + n \text{ électrons}\}$ et s'écrit :

$$H = T_e(\mathbf{r}^{\rightarrow}) + U_{ee}(\mathbf{r}^{\rightarrow}) + U_{eN}(\mathbf{r}^{\rightarrow}, \mathbf{R}^{\rightarrow}) + T_N(\mathbf{R}^{\rightarrow}) + U_{NN}(\mathbf{R}^{\rightarrow}) \quad (\text{I.2})$$

Avec :

- T_e : Energie cinétique des électrons.

- U_{ee} : Energie d'interaction électrons-électrons.

- U_{eN} : Energie d'interaction électrons-noyaux.

- T_N : Energie cinétique des noyaux.

- U_{NN} : Energie d'interaction noyaux-noyaux.

Ψ : la fonction d'onde du système, E : Son énergie propre

En réalité, la simplicité de cette formulation cache plusieurs problèmes insolubles. Pour y remédier, plusieurs approximations ont été développées [2].

I.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer :

Cette approximation simplifie la résolution de l'équation de Schrödinger. Elle sépare le mouvement d'électrons de celui des noyaux, puisque la masse d'un noyau est **1836** fois plus lourde que celle de l'électron, les noyaux sont considérés immobiles. L'équation de Schrödinger est résolue en deux étapes : tout d'abord, on résout l'équation électronique en posant les noyaux fixes puis on résout l'équation nucléaire dans le potentiel créé par les électrons.

L'approximation de Born-Oppenheimer n'est valable que lorsque les couplages des mouvements électroniques et nucléaires sont négligeables, c'est-à-dire quand la fonction d'onde ψ ne subit pas de variations brusques lorsque les noyaux varient.

On peut alors écrire l'hamiltonien sous la forme suivante :

$$H_e = T_e + U_{ee} + U_{eN} \quad (I.3)$$

On peut également l'écrire comme suit :

$$H^S = H_e = \sum_i h_i + U_{eN} \quad (I.4)$$

Le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger se réduit à celui du comportement des électrons, Grâce à l'approximation de Born-Oppenheimer, mais il reste encore très difficile car l'équation de Schrödinger n'admet pas de solution analytique sauf dans des cas très simples comme celui de l'atome d'hydrogène, donc pour donner une solution à cette équation on passe à d'autres approximations.

I.2.2. L'approximation de Hartree:

Hartree [3] simplifie le problème à N corps en interaction à celui d'un problème d'électrons indépendants, où chaque électron se déplace dans un champ moyen créé par les noyaux et les autres électrons. L'Hamiltonien peut être écrit comme une somme d'Hamiltoniens décrivant un seul électron Avec :

$$H_e = \sum_i^{N_e} H_i \quad (I.5)$$

Donc :

$$H_i \Psi_i = E_i \Psi_i \quad (I.6)$$

Dans cette approximation l'électron est dans le champ moyen créé par les autres électrons et les noyaux, les effets d'échange-corrélation sont négligés et le principe d'exclusion de Pauli n'est pas pris en compte.

I.2.3. Méthode de Hartree-Fock (1930):

En 1930, Fock [4] a montré que la fonction d'onde de Hartree viole le principe d'exclusion de Pauli parce qu'elle n'est pas antisymétrique, il ajoute un terme correctif pour corriger le problème. La fonction d'onde $\psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ est remplacée par le déterminant de Slater. Ou il contient des fonctions d'onde mono-électroniques anti symétriques, ceci nous permet de résoudre l'équation de Hartree-Fock :

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{ext} + \Phi \right] \Phi_i(r) + V_{exch} \Phi_i(r) = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (I.7)$$

Ou, $V_{exch}(\mathbf{r})$ représente le terme correctif d'échange et corrélation :

$$V_{exch} \Phi_i(r) = - \sum_{i \neq j} \int dr \frac{\Phi_j^*(r') \Phi_i^*(r')}{|r - r'|} \Phi_j(r) \quad (I.8)$$

En exprimant Φ à l'aide d'un déterminant de Slater, l'approximation de Hartree-Fock [4, 5] tient compte plus des interactions. La fonction Φ est exprimée à l'aide d'une combinaison linéaire de déterminants, faisant apparaître les effets de la corrélation des électrons. L'objectif de cette opération est d'aboutir à une solution numérique exacte de l'équation de Schrödinger. Le malheur est que le nombre de configurations augmente plus rapidement avec le nombre d'électrons mis en jeu, ce qui limite la portée de ces calculs à de très petits systèmes. Hartree, Fock et Slater [6] ont proposé une autre classe de solutions qui vérifient le principe de Pauli, sous forme de déterminants de Slater:

$$\Psi(r_1 \sigma_1, r_2 \sigma_2, \dots, r_n \sigma_n) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \Phi_1(r_1, \sigma_1) & \dots & \Phi_1(r_n, \sigma_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \Phi_n(r_1, \sigma_1) & \dots & \Phi_n(r_n, \sigma_n) \end{vmatrix} \quad (I.9)$$

La variable d'espace \mathbf{r}_i attachée aux orbitales Φ_i qui sont des fonctions orthonormées. Cette méthode donne des bons résultats numériques cependant, l'erreur entre l'énergie exacte et l'énergie fondamentale de Hartree-Fock peut devenir très grande si l'on augmente la distance entre les noyaux [7].

I.3. Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) :

La DFT est une reformulation du problème quantique d'un système compliqué. Elle permet de déterminer les grandeurs physiques et chimiques de ce système. Comme son nom l'indique, c'est une théorie qui utilise uniquement la densité électronique en tant que fonction fondamentale au lieu de la fonction d'onde comme le cas dans la méthode de Hartree et Hartree-Fock [3, 4].

I.4. Théorème de Hohenberg - Kohn :

Les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn offrent un cadre théorique permettant d'envisager la résolution de l'équation de Schrödinger via la densité électronique comme variable Principale.

❖ Théorème d'Hohenberg et Kohn n (o 1)

Si on considère un gaz d'électrons, le potentiel externe agissant sur ces particules détermine l'état fondamental de ce système et la densité de charge correspondante. Ainsi, toutes les quantités physiques concernant cet état (comme par exemple l'énergie totale du système) sont des fonctionnelles du potentiel externe. Comme cela a été démontré initialement par Hohenberg et Kohn, en raison de la correspondance biunivoque existant entre le potentiel externe V_{ext} et la densité électronique de l'état fondamental (ρ):

$\rho(r) \leftrightarrow V_{ext}$, permettant d'exprimer le premier comme une fonctionnelle de la deuxième, l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique, soit : $E = E[\rho]$

❖ Théorème d'Hohenberg et Kohn n (o 2)

Le deuxième théorème de Hohenberg et Khon [8] est un principe variationnel analogue à celui proposé initialement dans l'approche Hartee-Fock pour une fonctionnelle de la fonction d'onde :

$$\frac{\partial E(\psi)}{\partial(\psi)} = 0 \quad (\text{I. 10})$$

mais appliqué cette fois à une fonctionnelle de la densité électronique :

$$\left(\frac{\partial E[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \right)_{\rho_0(\vec{r})} = 0 \quad (\text{I. 11})$$

$\rho_0(\vec{r})$ est la densité électronique de l'état fondamental. Ce deuxième théorème stipule que pour tout système multiélectronique avec un nombre d'électron N et un potentiel extérieur V_{ext} . l'énergie totale du système $E[\rho(\vec{r})]$ atteint sa valeur minimale lorsque la densité $\rho(\vec{r})$ correspond à la densité exacte de l'état fondamental $\rho_0(\vec{r})$:

$$(\rho_0) = \min E(\rho) \quad (\text{I. 12})$$

La démonstration du fait que l'énergie totale d'un système à l'état fondamental soit une fonctionnelle de la densité électronique, Hohenberg et Khon ont exprimé cette fonctionnelle $E[\rho(\vec{r})]$ selon l'expression suivante :

$$E[\rho(\vec{r})] = F_{HK}[\rho(\vec{r})] + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3 \vec{r} \quad (\text{I. 13})$$

Dans laquelle $V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})$ représente le potentiel externe agissant sur ces particules et $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$ représente la fonctionnelle universelle de Hohenberg et Khon. Malheureusement, le théorème de Hohenberg et Khon ne donne aucune indication de la forme de $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$. Il n'existe pas une formulation exacte pour exprimer l'énergie cinétique comme une fonctionnelle de la densité électronique.

I.5. Méthode de Kohn-Sham:

La résolution des équations de Kohn et Sham constitue la base des calculs DFT, comme nous avons déjà mentionné la forme exacte de potentiel d'échange-corrélation V_{xc} est inconnue. En 1967 Kohn-Sham [9] proposent qu'il existe un système dit système auxiliaire ou fictif d'électrons non interagissant soumis à un potentiel extérieur $V_{ext}(\vec{r})$ tel qu'il ait la même densité électronique que le système réel. Par application du théorème de Hohenberg-Kohn, ce potentiel auxiliaire est défini de façon unique. La densité électronique peut alors s'identifier de façon exacte à la somme sur les états occupés :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^{N_{occ}} |\phi_i|^2 \quad (I.14)$$

Cette approche réalise une correspondance exacte entre la densité électronique, l'énergie de l'état fondamental d'un système constitué de fermions non interactifs placés dans un potentiel effectif et le système réel à plusieurs électrons en interaction soumis au potentiel réel. De ce fait, la densité électronique et l'énergie du système réel sont conservées dans ce système fictif.

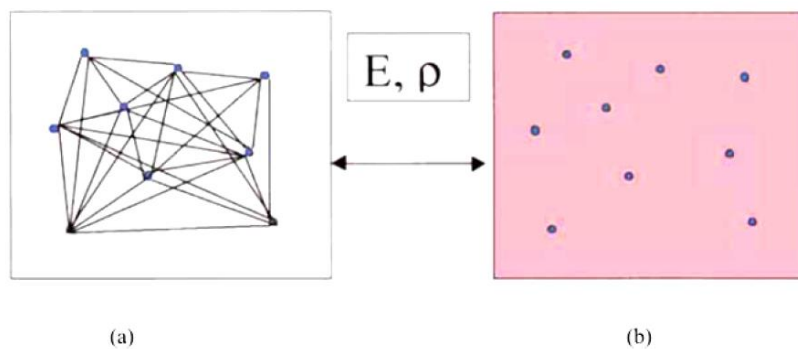


Figure I.1 : (a) Système réel constitué de plusieurs électrons en interaction mutuelle, (b) Système fictif de fermions indépendants de même énergie et de même densité électronique que le système réel.

Pour ce système fictif de particules de type fermions non interactifs, le théorème de Hohenberg et Kohn s'applique également. La fonctionnelle de la densité $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$ pour le système interactif peut de ce fait être exprimé comme la somme de l'énergie cinétique du gaz d'électrons non interactif caractérisé par la même densité que celle du système réel. L'interaction de Coulomb classique entre les électrons décrite à travers leur densité de charge (c'est-à-dire le terme d'Hartree) est une fonctionnelle additionnelle décrivant l'interaction inter électronique non fournie à partir du système non interactif. La différence entre l'énergie cinétique réelle et celle des électrons non interagissant ainsi que la différence entre l'énergie d'interaction réelle et celle de Hartree sont prises en compte dans l'énergie d'échange et de corrélation $E_{xc}[\rho(\vec{r})]$:

$$E_{xc}[\rho(\vec{r})] = [T_r\rho(\vec{r})] - T_0[\rho(\vec{r})] + V_{ee}[\rho(\vec{r})] - V_H[\rho(\vec{r})] \quad (I.15)$$

$T_r[\rho(\vec{r})]$: L'énergie cinétique d'un gaz d'électrons en interaction (réel)

$T_0[\rho(\vec{r})]$: L'énergie cinétique d'un gaz d'élections sans interaction.

V_H : Le terme de Hartree

La fonctionnelle de la densité $F_{HK}[\rho(\vec{r})]$ pour le système interactif peut être exprimée par l'expression suivante :

$$F_{HK}[\rho(\vec{r})] = T_0[\rho(\vec{r})] + V_H[\rho(\vec{r})] + E_{xc}[\rho(\vec{r})] \quad (I.16)$$

L'équation de Schrödinger à résoudre dans le cadre de l'approche de Kohn et Sham est de la forme suivante:

$$H_{KS}\phi_i(\vec{r}) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] |\phi_i(\vec{r})\rangle = \epsilon_i |\phi_i(\vec{r})\rangle \quad (I.17)$$

Où le potentiel effectif est de la forme :

$$V_{eff} = V_{ext} + V_H + V_{xc} \quad (I.18)$$

$$V_{eff} = V_{ext} + \frac{14}{\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\vec{r})}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3r + \frac{\partial E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\partial \rho(\vec{r})} \quad (I.19)$$

I.6. Fonctionnelle d'échange-corrélation :

Dans la résolution de l'équation de k-S la fonctionnelle d'échange de la corrélation est inconnue ce qui nécessite l'introduction des approximations pour la calculer.

I.6.1. Approximation de la densité locale (LDA) :

L'approximation de la densité locale LDA est l'approximation la plus importante et Certainement la plus utilisée pour résoudre le problème de la

fonctionnelle d'échange et de corrélation. Elle considère que le gaz de densité électronique non uniforme peut être découpé en portions de gaz de densité uniforme et que donc, localement, La LDA [10-11] suppose que la densité d'échange-corrélation au point \mathbf{r} soit de même que celle d'un gaz d'électron homogène $\rho(\mathbf{r})$. Ce qui est valable pour les densités lentement variables dans l'espace.

$$\varepsilon_{XC}^{non-hom}(\rho) = \varepsilon_{XC}^{hom}(\rho) \quad (\text{I. 20})$$

Cette approximation qui consiste à supposer que la densité fluctue assez lentement proposée originellement par Kohn et Sham dans leur article en 1965 [9] est de la forme :

$$E_{eX}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \varepsilon_{eX}^{LDA}[\rho(\vec{r})]\rho(\vec{r})d^3r \quad (\text{I. 21})$$

Où $\varepsilon_{eX}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie d'échange corrélation par électron pour un gaz homogène d'électrons de densité. Dès leur article original, Kohn et Sham ont remarqué que les solides peuvent souvent être considérés comme proches de la limite du gaz d'électrons homogène pour lequel les effets d'échange et de corrélation sont locaux. L'approximation de la densité locale (Local Densité Approximation, LDA) consiste à choisir pour l'énergie d'échange-corrélation celle d'un gaz homogène d'électrons de densité $\rho(\mathbf{r})$.

$$\varepsilon_{XC}^{LDA}[\rho(r)] = \varepsilon_{XC}^{LDA}(\rho(r)) = \varepsilon_{XC}^{gaz}(\rho(r)) \quad (\text{I. 22})$$

Le potentiel d'échange-corrélation s'écrit :

$$V_{xc}^{LDA}(r) = \frac{\delta[\rho(r)\varepsilon_{XC}^{LDA}[\rho(r)]]}{\delta\rho(r)} = \varepsilon_{XC}^{LDA}(\rho(r)) + \rho(r)\frac{d\varepsilon_{XC}^{LDA}}{d\rho} \quad (\text{I. 23})$$

La première méthode de la fonctionnelle densité qui décrit avec succès un système réel, fut introduite par Dirac et Slater [12] L'idée fut de remplacer le terme d'échange Hartree-Fock par la fonctionnelle d'échange locale définie par :

$$\varepsilon_X[\rho(\vec{r})] = \frac{3}{4}\left(\frac{3}{\pi}\right)\rho(\vec{r})^{3/4} \quad (\text{I. 24})$$

Ce perley et Adler [13], et plus récemment Ortiz et Ballone [14], ont déterminé numériquement la contribution des corrélations par des simulations de type Monte-Carlo quantique.

Enfin, L'approximation de la densité locale LDA ignore complètement les corrections d'échange –corrélation à effectuer lorsque la densité électronique n'est plus

localement homogène [15]. Cependant, la LDA est notamment efficace et son application aux atomes molécules se justifie par le succès de ses applications numériques.

I.6.2. L'approximation de gradient généralisée (GGA) :

Malgré la simplicité de la LDA, elle a donné des résultats fiables dans plusieurs cas, mais il y avait des cas où elle était en contradiction avec l'expérience. Pour cette raison on peut considérer que tous les systèmes réels sont inhomogènes, c'est densité électronique possède une variation spatiale. Dans la GGA l'expression de l'énergie d'échange et similaire à celle de la LDA. En remplaçant le terme par une fonction locale de la densité et de son gradient la fonctionnelle rend compte du caractère non uniforme du gaz d'électrons. La fonctionnel d'échange-corrélation s'écrit comme suit :

$$E_{ex}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int (\rho(\vec{r}) \cdot \nabla(\rho(\vec{r}))) d^3r \quad (I.25)$$

La GGA est donnée par différentes para métrisations, et ses par exemple les fonctionnelle GGA de Perdew Wang 91 (pw91) [16], la fonctionnelle de Perdew Burke et Ernzerhof (PBE) [17] est la fonctionnelle de Becke en 1988 (BLYP) [18] qui est une combinaison de la fonctionnelle d'échange de Becke et une fonctionnelle de corrélation de Lee, Yang et Pan (LYP) [19].

I.7. Théorie du pseudo potentiel:

I.7.1. Introduction :

La méthode empirique pseudo potentielle a été mise au point dans les années 1960 [20-21] pour résoudre l'équation de Schrödinger des cristaux de masse sans connaître exactement le potentiel expérimenté par un électron dans le réseau. Etant donné que les électrons interagissent avec le réseau cristallin, un calcul de structure de bande électronique pose de nombreux problèmes de corps (contrairement à ce qui se passe dans les calculs à cristaux photoniques, par exemple [22])

La technique du pseudo potentiel, introduite pour la première fois par Fermi (1934) s'est avérée très efficace dans l'investigation et la compréhension des propriétés électroniques des solides. L'idée du pseudo potentiel est de considérer que seuls les électrons de valence contribuent aux liaisons chimiques du système. La technique consiste à remplacer le potentiel d'interaction coulombien du noyau et les effets de l'électron dit « de cœur », considérés comme fortement liés, par un potentiel effectif

interagissant uniquement avec les électrons dits « de valence ». Cette approximation présente un grand intérêt dans le calcul théorique de la structure électronique de la matière, car elle permet de ne traiter explicitement que les électrons de faible énergie (qui sont constitutifs, par exemple, de liaisons chimiques) et crée ainsi un gain important des ressources informatiques nécessaires aux calculs.

I.7.2. Transférabilité des pseudo-potentiels:

La transférabilité est l'avantage principal de la technique pseudo-potentielle dans le cadre de la DFT. Le pseudo-potential doit reproduire le calcul de tous les électrons dans l'environnement dans lequel il a été généré. Ils peuvent également être employés sûrement pour n'importe quelle autre configuration atomique ou dans divers environnements à semi-conducteurs dus à la manière de laquelle ils sont produits, ce qui garantit les propriétés correctes de dispersion sur un grand choix d'énergie de coupure [23].

I.7.3. Construction d'un pseudo-potential:

Le pseudo-potential doit vérifier les propriétés suivantes :

- Il doit être additif, c'est à dire Le pseudo-potential totale de plusieurs atomes est la somme des pseudo-potential des atomes individuels.
- Il doit être transférable c'est-à-dire pour les environnements chimiques différents on doit pouvoir utiliser le même pseudo-potential.
- Il induit des variations de potential plus faibles que dans le cas du potential de cœur réel.
- Il est nécessaire d'avoir différents pseudo-potentiels pour les états s, p, d, c -à-d, le pseudo potential dépend du moment angulaire (pseudo-potential non-local). Ceci est illustré dans la figure (I.2) :

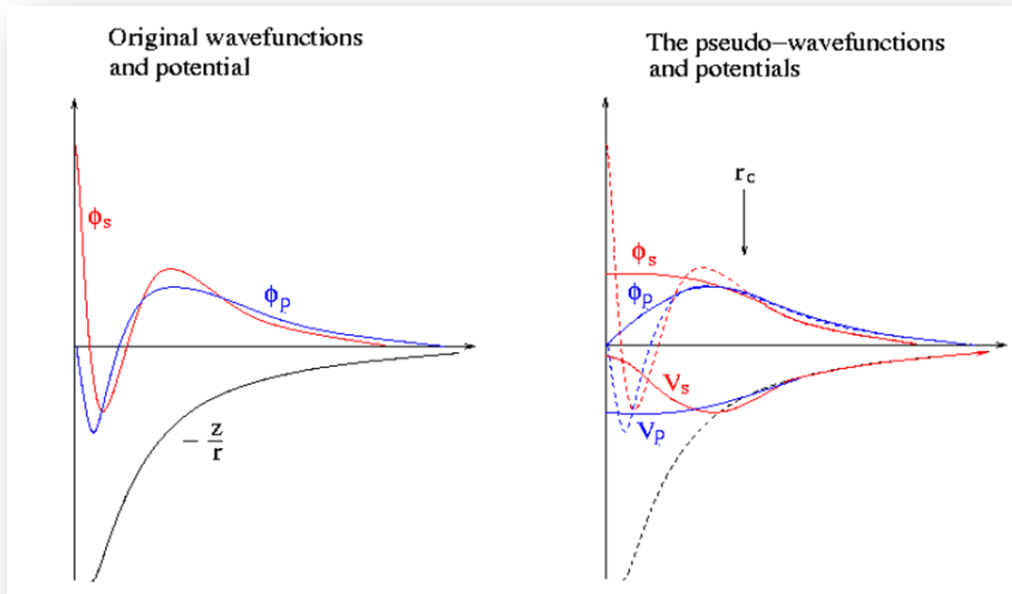


Figure I.2 : Différents type des pseudo-potentiels

Différents type des pseudo-potentiels De nombreuses méthodes pour générer des pseudo-potentiels ont donc été créées, chacune imposant ses propres conditions supplémentaires. Les méthodes de construction du pseudo potentiel sont divisées en deux catégories: les méthodes de conservation de la norme et les méthodes de non conservation de la norme [24].

I.7.4. Pseudopotentiel à norme conservée :

Un pseudo potentiel à norme conservée [25] représente la percée la plus significative dans le traitement des électrons de cœur. L'approche fut développée par Hamman, Schlüter et Chiang [26], puis Bachelet, Hamman et Schlüter [27] ou Troullier et Martins [28] ont est un potentiel doux car il nécessite peu d'ondes planes. Ce potentiel est transférable et généré pour une configuration atomique donnée, et peut être utilisé pour d'autres configurations de manière précise. Pour cela, on utilise le concept de conservation de norme. Dans ce concept, les pseudo potentiels sont formulés de façon à être égaux aux fonctions d'ondes réelles en dehors d'un certain rayon de cour r_c .

I.7.4.1. Méthodologie:

La première étape dans la génération d'un pseudo potentiel à norme conservée consiste à réaliser un calcul atomique ab initio tous-électrons. La configuration électronique de l'atome peut être choisie arbitrairement. Généralement il s'agit de

l'atome à l'état neutre. Le calcul se fait au départ de l'équation de Kohn-Sham écrite sous sa forme radiale :

La fonction d'onde réelle est ensuite remplacée par un pseudo fonction d'onde à laquelle est associé un potentiel modèle (le pseudo potentiel) choisi pour reproduire correctement Les propriétés des états de valence. Le schéma mathématique qui permet de générer le pseudo fonction d'onde n'est pas unique. Il existe du point de vue mathématique une certaine Liberté dans le choix de la méthode comme en témoignent les nombreuses publications qui présentent différentes manière de faire [26, 29, 30, 31, 32, 33, 34,35]

I.7.4.2. Condition de la « norme conservée »:

Pour obtenir un pseudo potentiel à norme conservée le plus efficace possible, le pseudo fonction d'onde doit répondre à une liste de critère précis [26]:

- 1· Les valeurs propres de valence dans les deux types de calculs (tout électron et pseudo) doivent être identiques pour la configuration atomique de référence.
- 2· Les fonctions et les pseudo-fonctions d'onde de valence sont identiques au-delà d'un rayon R_c (à l'extérieur de la région du cœur).
3. La dérivée logarithmique au rayon R_c est la même pour les deux types de fonctions d'onde.
- 4-L'intégration de 0 à R_C pour chaque fonction d'onde est identique (condition de conservation de la norme)

$$\int_0^{r_c} |\Psi_L^{ps}|^2 d^3 r = \int_0^{r_c} |\Psi_l^{AE}|^2 d^3 r \quad (I.26)$$

- 5· la fonction d'onde réelle et la pseudo-fonction d'onde ont la même première dérivée par rapport à l'énergie de la dérivée logarithmique.

Ce dernier peut être généré dans un environnement simple tel qu'un atome sphérique et ensuite utilisé dans un autre plus complexe. Pour une molécule ou un solide les fonctions d'onde et les valeurs propres changent, ainsi un pseudo potentiel qui satisfait le 5ième critère sera capable de reproduire ces changements à l'ordre linéaire dans le changement de la potentielle auto cohérente.

Hamann et al (1979) et (Christiansen et Pitzer 1979, Krauss et Stevens 1984) ont montré que le 5ième critère est impliqué par le 4ième. La condition "norme conservée" peut être induite directement suivant la dérivation de Shirley et d'autres.

I.7.5. Théorème de Bloch:

Un matériau réel contient un nombre extrêmement grand d'atomes et d'électrons, on se trouve donc dans un problème impossible à résoudre à cause du trop grand nombre de degré de liberté mais pour une structure cristalline la périodicité entraîne des simplifications importantes, en effet pour un potentiel périodique En 1928, Felix Bloch [38] a discuté des conséquences de la symétrie du solide sur les calculs de fonctions d'onde. Le théorème de Bloch dit que dans un solide périodique, chaque fonction d'onde peut et réécrite comme le produit d'une onde plane $\exp(ik, R)$ et d'une fonction $u_{i,k}(r)$ ayant la périodicité du réseau de Bravais, c'est-à-dire on peut écrire :

$$\varphi_i(r + R, k) = \exp(ik, R) \cdot u_i(r, k) \quad (I. 27)$$

$$u_{i,k}(r) = u_{i,k}(r + R) \quad (I. 28)$$

L'équation de Cohn-Sham peut être écrite sous cette forme

$$H_{\text{eff}} \varphi_i(r) = \varepsilon_i(k) \varphi_i(k, r) \quad (I. 29)$$

Ou, $\varphi_i(r)$ représente la fonction d'onde pour l'électron indexé par i et ε_i les valeurs Propres d'énergies correspondantes. Le vecteur k est un vecteur du réseau réciproque, il est confiné dans la première zone de Brillouin, la plus petite zone du réseau réciproque Permettant de reconstruire totalement le système par symétrie. Le problème peut alors être réduit à l'étude d'une maille élémentaire du cristal infini.

I.7.6. Méthode des ondes planes (PW):

L'ensemble des ondes planes est une base de projection des fonctions d'ondes, utilisée depuis 30 ans, on la retrouve dans de nombreux codes: CASTEP, CPMD, Abinit, VASP,...

La résolution des équations de Kohn et Sham en base d'ondes planes est explicitée dans l'article de Payne et autres [39]. Dans le cadre de la théorie de la DFT, la base des ondes planes sont associées à des conditions aux limites périodiques, très répandues, en particulier pour l'étude des solides, car elles satisfont par construction le théorème de Bloch. Suite au théorème de Bloch, la fonction d'onde en chaque point k peut être représentée En utilisant une base discrète d'ondes planes. Pour représenter la fonction d'onde on a besoin d'un très grand nombre d'ondes planes. Cependant, les coefficients de Fourier $C_j, k(G)$ diminuent avec l'augmentation de $|K + G|$ sont plus importants que ceux associés aux ondes planes avec grande énergie cinétique [40]. En conséquence En

conséquence, la base d'ondes planes peut être limitée aux ondes planes qui ont une énergie cinétique inférieure à une Valeur critique (énergie de coupure) E_{cut} .

$$\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right) |K + G|^2 \leq E_{cut} \quad (I.30)$$

La limitation de la base d'ondes planes conduit à des erreurs dans le calcul de l'énergie totale. L'ordre de grandeur de cette erreur peut être réduit en augmentant la valeur de l'énergie de coupure. La valeur de l'énergie de coupure doit être augmentée jusqu'à ce que l'énergie totale converge, ce qui signifie que le choix de E_{cut} détermine le degré d'exactitude du calcul. Le nombre d'ondes planes pris en compte dans le calcul est donc :

$$N_{PW} \simeq N_K \times \frac{1}{2\pi^2} \Omega E_{cut}^{3/2} \quad (I.31)$$

Où N_K est le nombre de vecteurs \mathbf{k} à l'aide desquels la zone de Brillouin est échantillonnée, et Ω est le volume de la cellule de simulation. Un développement des fonctions d'ondes sur une base d'ondes planes possède de nombreux avantages.

Références

Chapitre I

- [1]. C. H. I. H. I. Tayeb, Contribution à l'étude des nitrures à base de métaux de transition des groupes IV et V: phases stables et métastables. Diss. Université de Sétif 1-Ferhat Abbas (2012).
- [2]. J.M. Thijssen, Delft University of Technology, Computational Physics, Cambridge University press (1999).
- [3]. D. R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, 89 (1928).
- [4]. V. Fock, Z. Phys. 61:126 (1930).
- [5]. J. C. Slater, Phys. Rev. 35, 210 (1930).
- [6]. J. C. Slater. A simplification of the Hartree-Fock method Phys. Rev. 81. (1951).
- [7]. M. Gruning O.V. Gritsenko and E.J. Baerends. Exchange-correlation energy and potential as approximate functional of occupied and virtual H2 Kohn-Sham orbitals: Application to dissociating. J. Chem. Phys. 118 (2003).
- [8]. p. Hohenberg, W.Kohn, Phys, Rev.B136, 86455 (1964).
- [9]. W. Kohn et L. J. Sham, PHYS. Rev. A140, (1965).
- [10]. W.Kohn, L. Hedin, J .Phy .C5(1972).
- [11]. U. Van Barth, L, J, abler, phy. Rev. Lett.45(1980).
- [12]. J. C. Slater, Phys. Rev. 81 (1951).
- [13]. D. M. Ceperley, B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45 (1980).
- [14]. G. Ortiz et P. Ballone. Phys. Rev. B, 50 (1994).
- [15]. S.Aouadi, Thèse de DOCTORAT, calcul ab initio des propriétés structurales, électronique,élastique et thermodynamique des semi-conducteurs III-V à base de phosphor Université Badji Mokhtar-ANNABA (2009).
- [16]. J.P, Perdew, Y. Wang, Phys. Rev. B13, 4274(1976).
- [17]. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865, (1996).
- [18]. A. D. Becke, Phys. Rev. A 38, 3098(1988).
- [19]. C. Lee, Yang, R. G. Parr. Phys.Rev.B37, 785 (1988).
- [20]. J.C. Phillips, Phys. Rev. 112, 685 (1958).
- [21]. L. Kleinman et J.C. Phillips, Phys. Rev. 118, 1153 (1960).

- [22]. A. Maradudin, et A.R. McGurn, *J. of Mod. Optics*, 41, 275 (1994).
- [23]. V. Milman, B. Winkler, J. A. White, C. J. Pickard, M. C. Payne, E. V. Akhmatkaya, R. H. Nobes, *Int. J. Quantum Chem.* 77, 895 (2000).
- [24]. M. Ferhat, B. Bouhafs, A. Zaoui et al, *J. Phys. Phys. Rev.* 10 (1995).
- [25]. D. R. Hamann, M. Schülter et C. Chiang, *Phys. Rev.* 59, 208 (1929).
- [26]. D.R. Hamann, M. Schlüter, et C. Chiang, *Phys. Rev. Lett*, 43 (1979).
- [27]. G.B. Bachelet, D.R. Hamman, et M. Schlüter, *Phys. Rev, B* 26 (1982).
- [28]. N. Troullie, et J.L. Martins, *Phys. Rev, B* 43 (1991).
- [29]. J.P. Kerker, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, vol. 13, no 9, p. L189. (1980).
- [30]. G. B. Bache let, D. R.Hamann, et M. Schlüter, *Phys. Rev. B*, vol. 43, no 8, p. 4199.(1982).
- [31]. D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B*, vol. 32, no 12, p. 8412 . (1985).
- [32]. N. Troullier et J.L. Martins, *Solid State Comm.*, vol. 74, no 7, p. 613.(1990).
- [33]. N. Troullier et J.L Martins, *Phys.Rev.B*, vol. 43, no 3, p. 1993.(1991).
- [34]. S.Goedecker, M.Teter, et .J.Hutter, *Phys.Rev.B*, vol. 54, no 3, p. 1703. (1996).
- [35]. C. Hartwigsen, S. Goedecker, et J.Hutter, *Phys.Rev.B*, vol. 58, no 7, p. 3641. (1998).
- [36]. F. Bloch, *Z. Phys.* 52, 555 (1928).
- [37]. M. C. Payne, M. C. Teter, M. P. Allan, D. C. Arias, T. A. Joannopoulos, *J. D. Rev. Mod. Phys*, 64, 1045 (1992).
- [38]. A. Zaoui et F. Elhadj Hassan, *J. Phys, Condens-Matter.* 18 (2006).
- [39]. M.L.Cohen et J.R.Chelikosky, ‘in *electronic structure and optical proprieties of semiconductors*, Springer series in solid state sciences ed Springer New York (1988).
- [40]. J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.* 116, (1959).

Chapitre I.9:

Propriétés thermoélectrique

II.1. Introduction:

Ce chapitre donnera d'abord une introduction sur la thermoélectricité. Thermoélectrique ainsi que les principaux effets de transport tel que de la conductivité électrique, la conductivité thermique, le coefficient de Seebeck l'effet Hall, La capacité thermique et La susceptibilité magnétique. La méthode théorique la plus convenable pour procéder à une telle étude est la méthode fondée sur l'équation cinétique de Boltzmann. La résolution de cette équation ainsi que ces principaux résultats sont décrits dans ce chapitre.

II.2. La thermoélectricité:

La thermoélectricité correspond à un phénomène physique découvert au XIX^e siècle, d'abord dans des conducteurs métalliques puis dans des semi-conducteurs.

L'effet thermoélectrique est un phénomène physique présent dans certains matériaux : il y lie le flux de chaleur qui les traverse au courant électrique qui les parcourt. Cet effet est à la base d'applications, dont très majoritairement la thermométrie, Un matériau thermoélectrique transforme directement la chaleur en électricité, ou déplace des calories par l'application d'un courant électrique

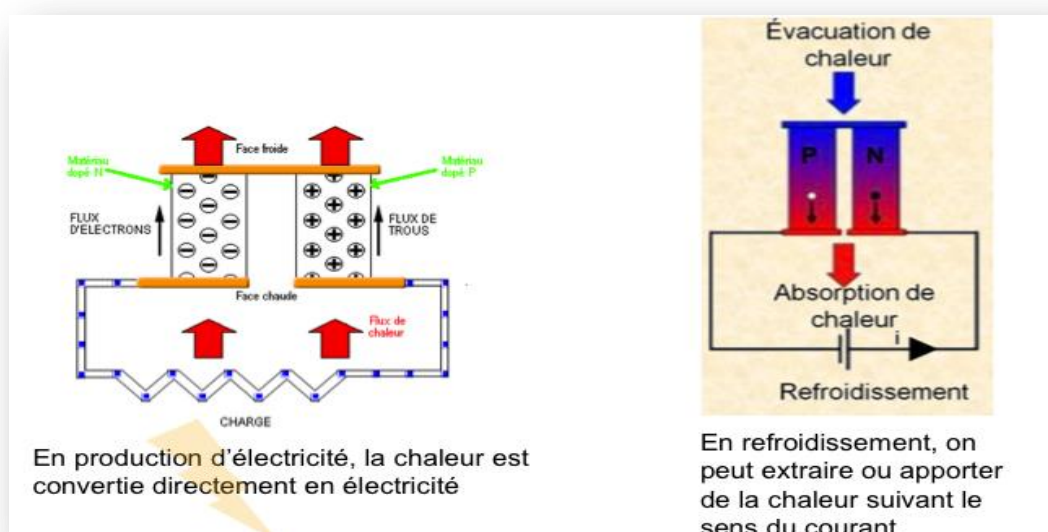


Figure (II.1) : Schéma de principe d'un effet thermoélectrique.

II. 3. Propriétés électrique et de transport:

II.3.1. Théorie du transport de Boltzmann:

Les calculs par simulation de la conductivité électrique et du coefficient de Seebeck peuvent être faits avec les calculs de premiers principes et l'équation de transport de Boltzmann. Le transport de charge se produit lorsqu'un champ électrique et /ou un gradient thermique est présent. Ce phénomène peut être décrit par [1] :

$$J = e \sum f v = \sigma E \quad (\text{II.1})$$

Où J est le flux de charge; e est la charge électronique; f est la distribution de charge; σ est la conductivité électrique; E est le champ électrique et v est la vitesse de charge.

Si nous connaissons la répartition de la charge par rapport au temps et à l'espace, le flux de la charge peut être déterminée. La répartition des charges en fonction du temps peut être décrite ainsi [2] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{dr}{dt} \cdot \nabla_r f + \frac{dp}{dt} \cdot \nabla_p f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (\text{II.2})$$

Où r est la position des électrons; p est la quantité de mouvement et c, indice signifiant la collision. Ainsi, l'équation (II.2) indique le changement dans la distribution de charge après la collision.

Ce temps de relaxation caractérise la vitesse de récupération de l'état 'équilibre: pour une courte durée temps de relaxation, de nombreuses collisions permettent au système de revenir à son état initial et inversement long temps de relaxation. En effet, un système récupérant d'un état stable mais non équilibré ($t = 0$) à son équilibre sans aucune force externe satisfera l'équation suivante:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{f - f_0}{\tau} \quad (\text{II.3})$$

Le système hors équilibre décroît ensuite de façon exponentielle avec le temps de relaxation qui le ramène à son équilibre:

$$f - f_0 = (f - f_0)_0 e^{-t/\tau} \Leftrightarrow f - f_0 = C e^{-t/\tau} \quad (\text{II.4})$$

Substituant les équations (II.2) et (II.3) dans l'équation (II.4), nous pouvons obtenir :

$$f = f_0 + e \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tau \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \quad (\text{II.5})$$

et quand nous remplaçons (II.1) par l'équation (II.5), la conductivité peut être décrite ainsi :

$$\sigma = e^2 \sum \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) v^2 \tau \quad (\text{II.6})$$

Cette équation peut être réécrite sous la forme tensorielle dans les calculs de la structure électronique.

$$\sigma(\varepsilon) = \frac{e^2}{N\Omega} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \sum_{n,k} \tau_{n,k} \vec{v}_{n,k} \vec{v}_{n,k} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,k}) \quad (\text{II.7})$$

Où Ω est le volume de la cellule unité; e est la charge du transporteur.

ε est l'énergie du groupe.

N est le nombre de k -points utilisés dans le calcul.

f_0 est la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

τ est le temps de relaxation; v est la vitesse de groupe des charges et

δ est la fonction delta [3]. Les indices k et n sont l'impulsion du cristal et l'indice de bande.

La vitesse, \mathbf{v} , peut être estimée à partir de la structure de la bande avec la relation suivante:

$$\vec{v}_{n,k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_{n,k}}{\partial \mathbf{k}} \quad (\text{II.8})$$

Où \hbar est la constante de Planck réduite.

Quand une différence de température est présente, le champ électrique total est différent de l'équation (II.1) en raison du champ provenant de l'effet Seebeck.

L'équation (II.1) devient :

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E} - \sigma S \nabla T \quad (\text{II.9})$$

et le flux de chaleur (q) produit à partir de la différence de température peut être décrit

Comme:

$$q = T J_S = S T J - \kappa \nabla T \quad (\text{II.10})$$

Où \mathbf{J}_s est le flux entropique.

Les équations (II.9) et (II.10) sont appelées relation Onsager [4]. En utilisant les équations d'Onsager nous pouvons obtenir le coefficient de Seebeck et la conductivité thermique électronique (κ_e) obtenus à partir du calcul de la structure de bande.

$$S = \frac{ek_B}{N\Omega} \sigma^{-1} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right) \sum_{n,k} \tau_{n,k} \vec{v}_{n,k} \vec{v}_{n,k} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,k}) \quad (\text{II.11})$$

$$\kappa_e = \frac{k_B^2 T}{N\Omega} \int d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left(\frac{\varepsilon - \mu}{k_B T} \right)^2 \sum_{n,k} \tau_{n,k} \vec{v}_{n,k} \vec{v}_{n,k} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{n,k}) T \sigma S^2 \quad (\text{II.12})$$

Où μ est le potentiel chimique, et k_B la constante de Boltzmann.

A partir des équations ci-dessus, nous pouvons identifier la conductivité électrique, le coefficient de Seebeck et la conductivité thermique électronique. Un seul paramètre que nous ne connaissons pas encore est la valeur du temps de relaxation. Si nous supposons que ce temps varie très faiblement dans la gamme d'énergie considérée, c.a.d, qu'on le suppose constant alors le coefficient de Seebeck peut être dérivé de la structure de bande sans avoir recours au paramètre d'ajustement parce que le constant temps de relaxation au numérateur et au dénominateur disparaît. Le temps de relaxation dépend de l'énergie de la bande dans les matériaux réels. La plupart des codes de calcul des propriétés de transport électronique telles que le BoltzTraP et le BoltzWann évaluent les propriétés avec l'approximation d'un temps de relaxation constant.

II.3.2. La conduction thermique:

La conduction thermique est un transfert thermique spontané d'une région de température élevée vers une région de température plus basse, et obéit à la loi dite de Fourier établie mathématiquement par Jean-Baptiste Biot en 1804 puis expérimentalement par Fourier en 1822 [5] la densité de flux de chaleur est proportionnelle au gradient de température.

$$\vec{\varphi} = -\lambda \overrightarrow{\text{grad}}(T) \quad (\text{II.13})$$

La constante de proportionnalité λ est appelée conductivité thermique du matériau. Elle est toujours positive. Avec les unités du dispositif international, la conductivité thermique λ s'exprime en $\text{J} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ ou, soit des $\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$. La conduction thermique est un phénomène de transport de l'énergie interne dû à une hétérogénéité de l'agitation moléculaire [6]. C'est par conséquent un phénomène irréversible. Dans les fluides (liquides et gaz) ce transport d'énergie résulte du non uniformité du nombre de chocs par unité de volume, de façon analogue au phénomène de diffusion [6]. Dans les solides, la conduction thermique est assurée conjointement par les électrons de conduction et les vibrations du réseau cristallin (phonons) [7].

Dans le dispositif mondial d'unités, la conductivité thermique est exprimée en watts par mètre par kelvin, ($\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$) où :

- le watt est l'unité de puissance
- le mètre est l'unité de longueur
- le kelvin est l'unité de température

La conductivité dépend essentiellement de :

- La nature du material.
- La température.
- D'autres paramètres comme l'humidité, la pression interviennent aussi.

En général, la conductivité thermique va de pair avec la conductivité électrique. A titre d'exemple, les métaux, bons conducteurs d'électricité sont aussi de bons conducteurs thermiques.

D'un point de vue atomique, la conductivité thermique est liée à deux types de comportements :

- le mouvement des porteurs de charges, électrons ou trous.
- l'oscillation des atomes autour de leur position d'équilibre.

Dans les métaux, le mouvement des électrons libres est prépondérant tandis que dans le cas des non-métaux, la vibration des ions est principale.

La conductivité thermique est par conséquent liée d'une part à la conductivité électrique (mouvement des porteurs de charge) et d'autre part à la structure même du matériau (vibrations des atomes). En effet dans un solide, les vibrations des atomes ne sont pas aléatoires et indépendantes les unes des autres, mais correspondent à des modes propres de vibration, aussi nommés «phonons». Ces modes propres de vibration correspondent à des ondes qui peuvent se propager dans le matériau, si sa structure est périodique (organisée). Cette contribution sera par conséquent plus importante dans un cristal,

Mathématiquement, la conductivité thermique λ peut par conséquent s'écrire comme la somme de deux contributions :

$$\lambda = \lambda_e + \lambda_p \quad (II.14)$$

Où

- λ_e est la contribution des porteurs de charge (électrons ou trous)
- λ_p est la contribution des vibrations des atomes (phonons)

La contribution des porteurs de charge est liée à la conductivité électrique σ du matériau par la relation de Wiedemann-Franz :

$$\lambda_e = LT\sigma \quad (II.15)$$

Où L est nommé «Facteur de Lorentz». Ce nombre L dépend des processus de diffusion des porteurs de charge (ce qui correspond plus ou moins à la façon dont ils sont gênés par des obstacles lors de leurs déplacements, voir aussi diffusion des ondes) mais aussi de la position du niveau de Fermi. Dans les métaux, il est identique au nombre de **Lorentz** L_0 , avec :

$$L_0 = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{K}{e} \right)^2 = 2,45 \cdot 10^{-8} V^2 K^{-2} \quad (II.16)$$

Où

- **k** est la constante de Boltzmann.
- **e** est la charge de l'électron.

II.3.3. La capacité thermique:

La capacité thermique (ou capacité calorifique) d'un corps est une grandeur qui mesure l'énergie qu'il faut transférer à un corps pour augmenter sa température d'un kelvin. Inversement, elle permet de quantifier la possibilité qu'a ce corps d'absorber ou de restituer de l'énergie par échange thermique au cours d'une transformation pendant laquelle sa température varie.

Elle s'exprime en joules par kelvin (J/K). C'est une grandeur extensive : plus la quantité de matière est importante, plus la capacité thermique est grande.

Il s'agit de la quantité de chaleur à fournir à un système pour élever sa température de 1°C. On distingue C_p , capacité calorifique à pression constante et C_v , à volume constant.

$$\left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = C_V \quad (\text{II. 17})$$

$$\left(\frac{\partial H}{\partial T}\right)_P = C_P \quad (\text{II. 18})$$

La capacité calorifique molaire en $\text{J} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ correspond à un système défini comme une mole d'un composé, (on emploie parfois l'expression 'chaleur spécifique').

II.3.4. La susceptibilité magnétique :

La susceptibilité magnétique est la mesure de la réponse d'un échantillon à un champ magnétique externe. Un corps soumis à un champ magnétique H développe une magnétisation induite M (ou aimantation) dont l'intensité et le sens dépendent de sa susceptibilité magnétique χ selon la loi:

$$M = \chi \cdot H \quad (\text{II.19})$$

Où

\mathbf{H} = champ magnétique appliqué.

\mathbf{M} = magnétisation induite.

χ = susceptibilité magnétique.

La mesure de la susceptibilité magnétique concerne donc bien le magnétisme induit et non le magnétisme rémanent lié au champ magnétique terrestre. La susceptibilité magnétique est fonction de la nature des minéraux constituant la roche, de leur concentration et de leur taille.

II.3.5. L'effet Hall :

a été découvert en 1879 par Edwin Herbert Hall[8], qui l'a énoncé comme suit : « un électrique traversant un matériau baignant dans un champ magnétique, engendre une tension perpendiculaire à ce dernier ».

Sous certaines conditions, cette tension croît par paliers, effet caractéristique de la physique quantique, c'est l'effet Hall quantique entier ou l'effet Hall quantique fractionnaire.

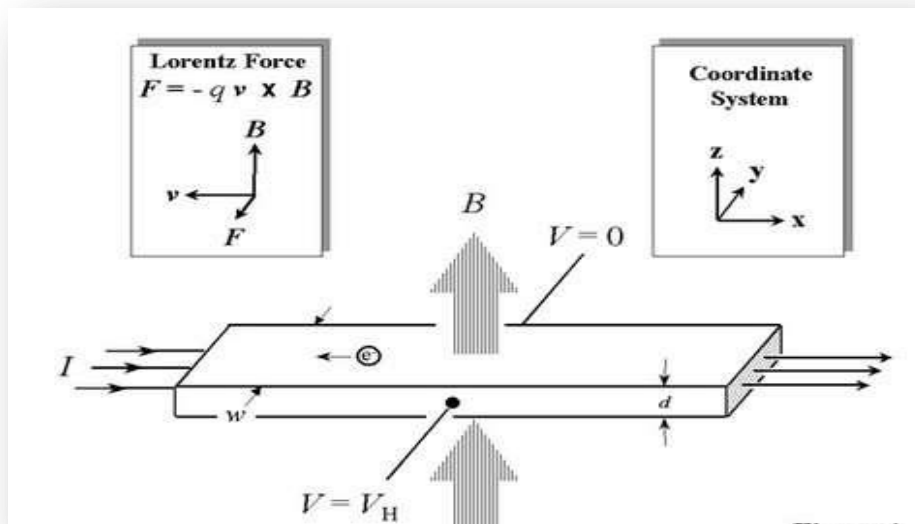


Figure (III.2): Schéma présentant l'évolution des porteurs dans un métal lorsqu'il est soumis à la fois à un champ électrique et à un champ magnétique.

Dans un métal, les porteurs sont majoritairement des électrons. De ce fait, la constante de Hall a pour valeur:

$$R_H = -\frac{1}{n_e} \quad (\text{II.20})$$

Où n représente le nombre d'électrons par unité de volume qui est égale à 10^{23} e/cm³
Il est judicieux de remarquer que la tension de Hall est proportionnelle au coefficient de Hall R_H , lui-même inversement proportionnel à dans le matériau. Plus un matériau possède de porteurs de charge et plus la tension de Hall qui peut potentiellement apparaitre est faible. C'est pourquoi on utilise des semi-conducteurs dans les applications de l'effet Hall.

Références

Chapitre II

- [1]. Pizzi, Giovanni, et al. Computer Physics Communications 185. (2014).
- [2]. GS. Nolas, J. Sharp, et HJ. Goldsmid, Thermoelectrics: Basic Principles et New Materials Developments; Springer-Verlag, Heidelberg, (2001).
- [3]. MW. Oh, DM. Wee, SD. Park, BS. Kim, et HW. Lee, Phys Rev B, 77 (2008).
- [4]. Snyder, G. Jeffrey, et Tristan S. Ursell. Physical review letters 91.14 (2003).
- [5]. Joseph Fourier, Théorie analytique de la chaleur, 1822.
- [6]. Pérez et Romulus 1993, p. 158.
- [7]. Pérez et Romulus 1993, p. 160. (2003).
- [8]. Hall, E. H. American Journal of Mathematics 2.3 (1879).

Chapitre III:

Résultats et discussions

III.1. Le code Quantum-ESPRESSO :

Les méthodes de chimie quantique ABINITIO sont des méthodes de chimie computationnelle basées sur la chimie quantique. [1] Le terme ABINITIO a d'abord été utilisé en chimie quantique par Robert Parr et ses collègues, dont David Craig dans une étude semi-empirique sur les états excités du benzène. [2-3] L'arrière-plan est décrit par Parr. [4] ABINITIO signifie "à partir des premiers principes" ou "depuis le début", ce qui implique que les seules entrées dans un calcul ab initio sont des constantes physiques. [5] Les méthodes de chimie quantique ab initio tentent de résoudre l'équation électronique de Schrödinger en fonction des positions des noyaux et du nombre d'électrons afin de fournir des informations utiles telles que les densités électroniques, les énergies et d'autres propriétés du système. La possibilité d'exécuter ces calculs a permis aux chimistes théoriciens de résoudre une série de problèmes et leur importance est mise en évidence par l'attribution du prix Nobel à John Pople et Walter KOHEN [6].

Quantum espresso est un programme de simulation. Il est développé par Stefano Baroni, Stefano de Gironcoli, Andrea Dal Corso (SISSA), Paolo Giannozzi (Univ. Udine), et plusieurs autres. C'est un logiciel en open source

emploie la DFT [7], pour simuler les propriétés des solides (structurales, thermodynamiques, électroniques, élastiques) les structure de bande, la densité d'états, les densités de charge, ce code sert à simuler l'énergie total par l'utilisation l'intégration spéciale des P_{oints} et l'énergie Coupure E_{cut} et pseudo-potentiel [8] dans la première zone de Brillouin.

III. 1.1.Introduction :

Dans ce chapitre nous allons utiliser la méthode principe est pseudo-potentiel et ondes planes [9], pour calculer les propriétés structurales du composant YC_2 . La disponibilité des données expérimentales pour ce dernier permettant alors de juger de la précision de nos calculs.

La détermination des propriétés structurales c'est la première étape importante qui précède l'obtention par calcul des propriétés physiques (structurales, électroniques, thermodynamiques,...) d'un matériau donné à partir de sa structure à l'échelle microscopique. De nos jours, il est possible de calculer l'énergie totale des solides de façon assez précise moyennant l'approximation de gradient général GGA (PBE) [10].

III.1.2. Détails des calculs :

Le carbure d'yttrium YC_2 cristallise dans le motif CaC_2 . Cette structure est une structure tétragonale centrée. La représentation de cette structure plus appropriée est montrée ci-dessous sur la figure(III.1). les atomes de yttrium occupent la position $2a(0,0,0)$ et les atomes de carbone aux positions $4e(0,0,u)$.

Les électrons de valence des atomes Y et C sont respectivement $4d 5s 5p$ (3 électrons de valence), et $2s^2 2p^2$ (4 électrons de valence), l'interaction entre les électrons de valence et les noyaux atomiques est remplacée par les pseudo-potentiels.

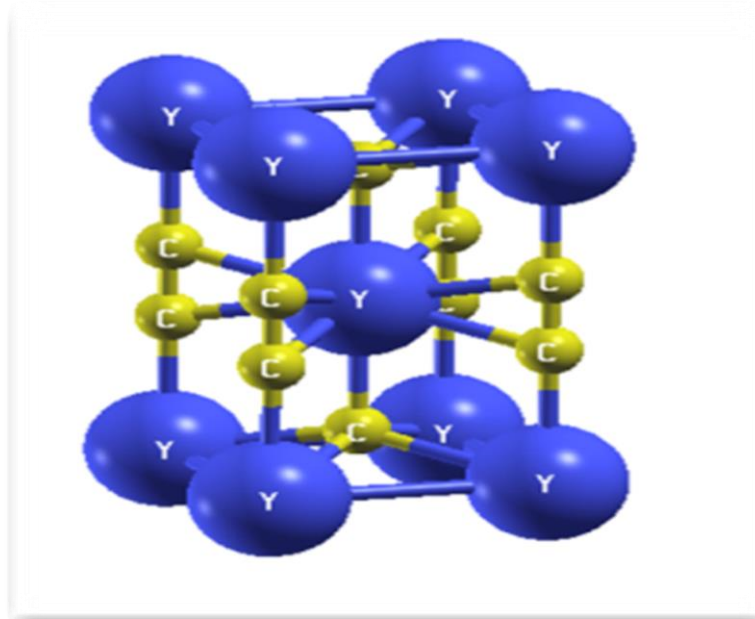


Figure III.1 : La structure cristalline YC_2 .

Pour le choix de pseudo-potentiels on a utilisé l'approximation du gradient générale (GGA) pour les pseudo-potentiels (GGA PBE) pour les deux éléments (Y) et (C) on utilisant la base de données des pseudo-potentiels de la page web du code de calcul QUANTUM ESPRESSO [11], implanté dans la théorie de la fonctionnelle de densité).

III.1.3. Propriétés structurales :

Nous calculons l'énergie totale à travers le Quantum espresso pour plusieurs valeurs des volumes apprises au voisinage de la valeur expérimentale, Ensuite, nous calculons le volume de maille élémentaire pour chaque valeur des paramètres du réseau a et c , et le paramètre interne (u) donné par :

$$V = \frac{a^2 C}{2} \quad (\text{III.1})$$

Nous traçons la courbe d'énergie en fonction de volume à travers le programme informatique origine, cela est montré sur la figure(III.2). Ensuite on ajuste l'énergie totale en fonction du volume par l'équation d'état de Murnaghan [6], cette équation à la forme suivante :

$$E(v) = E(v_0) + \frac{\beta_0 v}{\beta'_0} \left[\frac{(v_0/v)^{\beta'_0}}{\beta'_0 - 1} + 1 \right] - \frac{\beta_0 v_0}{\beta'_0 - 1} \quad (\text{III.2})$$

$E(v)$:l'énergie de la maile élémentaire de volume V .

$E(v_0)$:l'énergie de la maile élémentaire à pression nulle.

β_0 est le module de compressibilité, β'_0 est sa dérivée par rapport à la pression.

Le module de compressibilité β_0 est déterminé par :

$$\beta = -V \frac{dP}{dV} = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2} \quad (\text{III.3})$$

On remarque que à chaque fois le volume augmente l'énergie diminue jusqu'un $V_{\min}=286,698(\text{ bohr}^3)$ l'énergie commence à monter. Les résultats obtenus pour les paramètres de réseau en accord avec les valeur expérimentales de la référence [10] avec une erreur relative maximale de 1.07% , pour le module de compressibilité β , l'erreur est estimée de 8.9% [10]. Pour la dérivée β' Il n'y a pas de valeurs expérimentales pour faire la comparaison. Les valeurs obtenus par GGA(PBE) sont résumés dans le tableau (III.1).

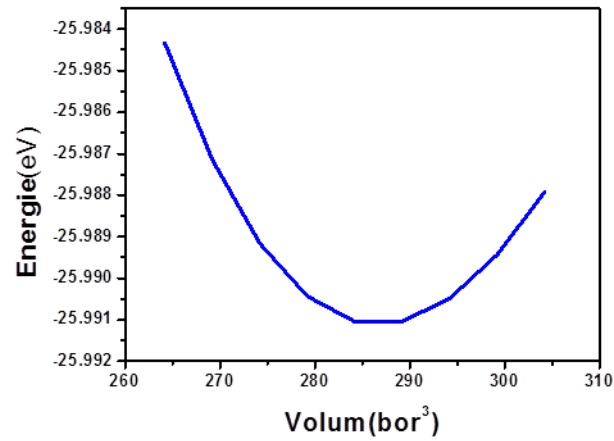


Figure (III.2): La variation de l'énergie totale en fonction du volume élémentaire (YC_2) dans l'approximation GGA(PBE).

	$a(\text{Å}^\circ)$	$c(\text{Å}^\circ)$	u	β_0 (Mbar)	β'_0
Valeur théorique	3.7212	6.1362	0.3944	0.9725	4.3786
Valeur expérimental	3.6813 ^{Expt.[12]}	6.1886 ^{Expt.[12]}	0.3947 ^{Expt.[12]}	1.06 ^{Expt.[12]}	4.41 ^{Expt.[12]}
Autres calculs	3.6614 ^{Expt.[13,14,15]} 3.6664 ^{Expt. [16]}	6.1725 ^{Expt.[13,14,15]} 6.1400 ^{Expt. [16]}	0.3957 ^{Expt.[13,14,15]}	– –	– –
L'erreur	1.07%	0.8%	0.07%	8.9%	–

Tableau (III.1): Les paramètres de réseau calculés, le module de compressibilité et sa dérivée de (YC_2).

Le Tableau(III.2) illustre les distances interatomiques comparées à d'autres résultats expérimentaux et théoriques, on remarque que nos résultats convergent bien avec ceux édités précédemment.

	Distances interatomiques (Å ⁰)		
	C-C (Å ⁰)	Y-Y (Å ⁰)	Y-C (Å ⁰)
Notre travail	1.2933	3.7196	2.4239
Autres résultats	-	3.69 ^{Expt. [17]}	2.72 ^{Expt. [17]}
	1.275 ^{Expt. [18]}	-	-

Tableau(III.2): Les distances interatomiques comparées à d'autres résultats expérimentaux et théoriques.

III. 2. Propriétés électroniques :

Les calculs de la structure des bandes électroniques leurs densité d'états électroniques totales, et partielles (dos) sont effectuées par le code Quantum espresso [19] à l'aide de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) dans le cadre de la GGA (PBE) combinée à la méthode des pseudo-potentiels avec une base d'onde planes (PW).

III. 2.1. Structure de bandes:

La structure de bandes de la phase CaC₂ de structure tétragonale centrée du composé YC₂ calculée, par l'approche GGA (PBE), dans la première zone de Brillouin entre -8 eV et 4 eV selon les directions des points de haute symétrie suivants : Γ , G, Z, Γ , X, P, Γ et N, les résultats de ce calcul sont présentées dans la figure (III.3), le niveau de Fermi est y représenté aussi, il est pris comme origine des énergies. Il y a deux bandes qui croisent le niveau de Fermi, ce qui engendre une continuité des états électroniques, ayant pour conséquence directe le caractère métallique de l'YC₂.

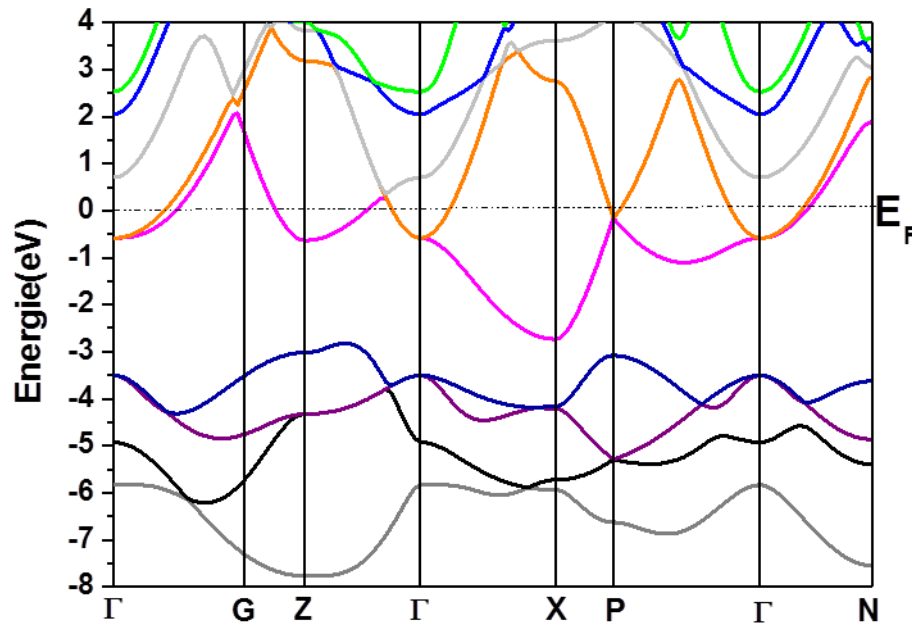


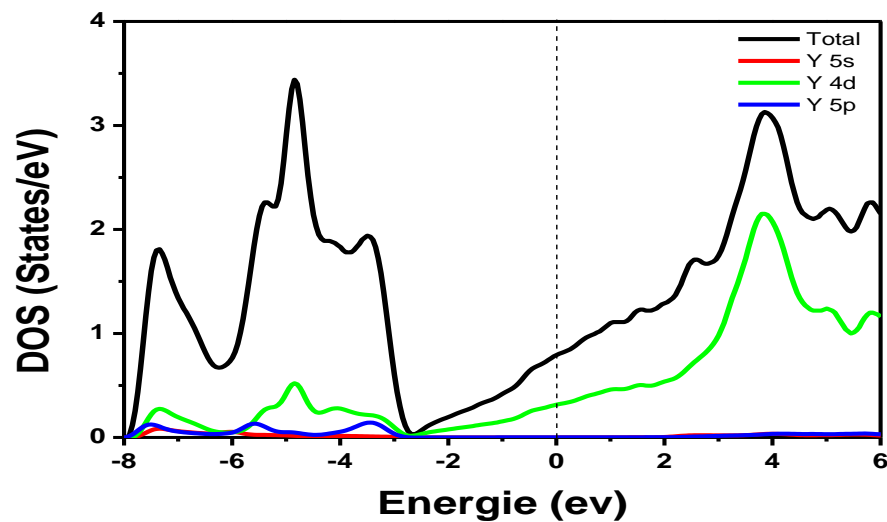
Figure III.3: structure des bandes de YC_2 et L'énergie zéro représente le Niveau de Fermi.

III.2.1. Densité d'états :

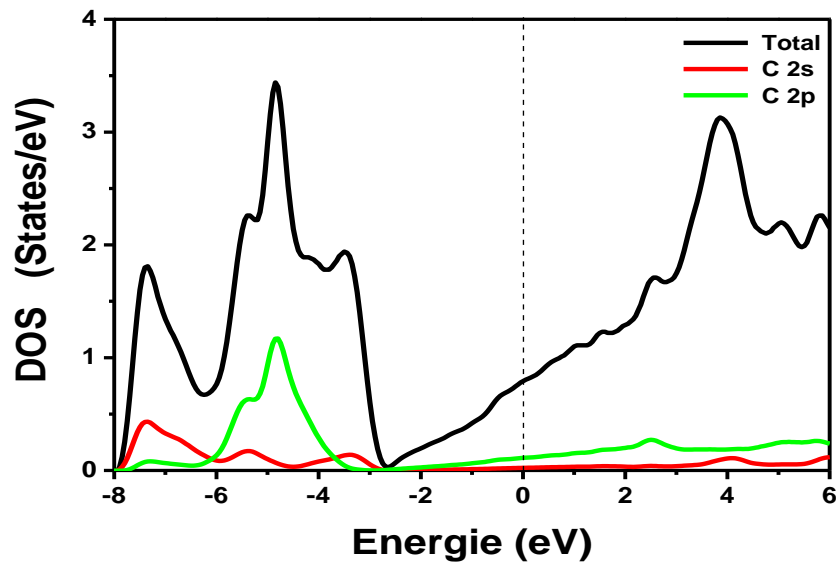
La densité des états électroniques est une grandeur essentielle pour calculer la distribution d'énergie électronique dans les bandes de valence et conduction [20]. Pour mieux comprendre la structure des bandes, il est intéressant de déterminer les spectres des densités d'états totales et partielles afin d'analyser et connaître le type d'hybridation et les états responsables de liaison. Dans notre étude, le calcul de la densité d'états apparaît comme un moyen de vérifier la validité des diagrammes de bande sur toute la zone de Brillouin, et pas seulement sur des directions privilégiées. La densité d'états, totale et partielles, du composé YC_2 ont été calculées par l'approximation GGA(PBE), les résultats de nos calculs sont représentés sur les figure (III.4) et la figure (III.5).

Dans la densité d'états totale de YC_2 on remarque le grand premier pic (autour la valeur d'énergie (-7.34 eV) est due aux électrons (4d) de l'atome Y et électrons (2s) de l'atome C ,le deuxième pic situé dans l'intervalle [-6.18 ; -2.69] est due aux électrons l'états (4d) de l'atome Y et électrons (2p) de l'atome C ;Les troisièmes et quatrièmes bandes sont dues aux états C 2p avec des contributions petites provenant des états Y 4d, Y 5s et C2. Ces bandes génèrent un pic à environ -3.8 eV dans la densité d'états électronique (dos) d' YC_2 . La bande la plus proche traversant le niveau de fermi

provenant des états Y 4d et C 2p. Il y a donc une nette hybridation entre les états Y 4d et C 2p présents dans la région d'énergie située entre -2 eV et le niveau de Fermi. Enfin, la liaison, métallique et covalente dans ce matériau est formée par hybridation des états Y 4d et C 2p, ce qui est clairement visible à partir de l'eDOS partiel. La liaison entre les atomes C1 et C2 a également un caractère covalent.



Figure(III.4): Les densités d'états électroniques totales et partielles de Y.



Figure(III.5): Les densités d'états électroniques totales et partielles de C.

III.2.1. Les surfaces de Fermi :

La figure(III.6) représente les surfaces des deux bandes qui traversent le niveau de fermi dans l'espace \vec{k} dans la première zone de Brillouin.



Figure III.6 : les surfaces de fermi YC_2

III.3. Propriétés thermoélectriques :

La thermoélectricité correspond à un groupe de phénomènes dans lesquels une différence de température est créée par un potentiel électrique ou vice versa. Divers métaux et semi-conducteurs sont généralement employés dans ces applications. Pour optimiser les systèmes thermoélectriques, les propriétés thermiques doivent être connues. La conductivité thermique a un impact direct sur l'efficacité d'un matériau thermoélectrique. Nous avons déterminés les propriétés de transport près du niveau de Fermi pour le composé YC_2 , comme le coefficient Seebeck (S), la conductivité électrique, la conductivité thermoélectrique à différentes températures (T) comprise entre 0 K et 1000 en utilisant la théorie de Boltzmann semi-classique implémentée dans le code de calcul de BoltzTrap .

III.3.1. Coefficient Seebeck:

Le coefficient Seebeck, également appelé « pouvoir thermoélectrique » dérive de la conductivité électrique. Pour chaque matériau, on peut définir un coefficient de

Seebeck, exprimé en $V.k^{-1}$ et qui caractérise la tension résultant d'un écart de 1K. Les métaux présentent ainsi généralement des coefficients de Seebeck de seulement quelques $v.k^{-1}$. Les semi-conducteurs, quant à eux, présentent des coefficients de Seebeck un peu plus importants grâce à leur faible conductivité thermique. Il est notable que le coefficient Seebeck est négative, à 300 K sa valeur est de $-4.0 \mu V/K$.

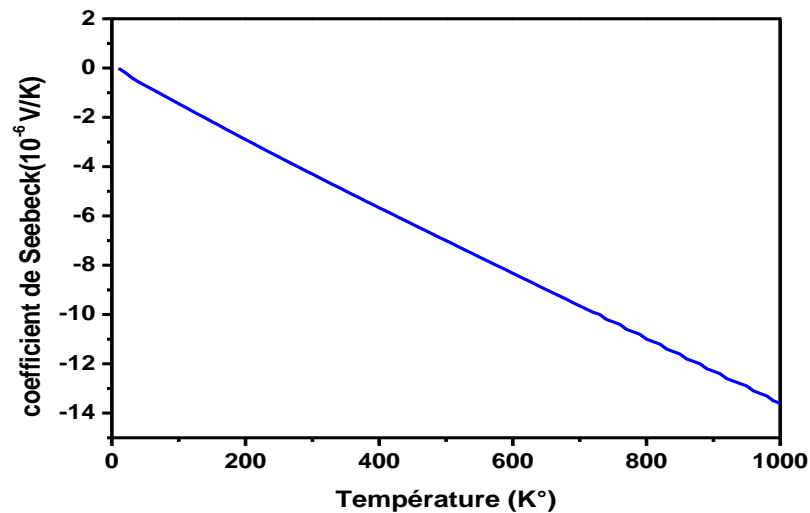


Figure (III.7) représente l'évolution du coefficient de Seebeck en fonction de la température de (YC_2).

III.3.2. Conductivité électrique:

La courbe de la conductivité électrique en fonction de la température est illustrée sur la figure(III.8). Dans l'approximation de temps de relaxation fixe, la conductivité électrique σ diminue avec la température ce qui montre le comportement supraconducteur de ce composé à basses températures, puis se stabilise aux températures les plus élevées. La densité d'états électronique possède une valeur importante près du niveau de fermi, correspondant au comportement métallique. La stabilisation de la conductivité à haute température reflète que la densité électronique est invariante avec la température.

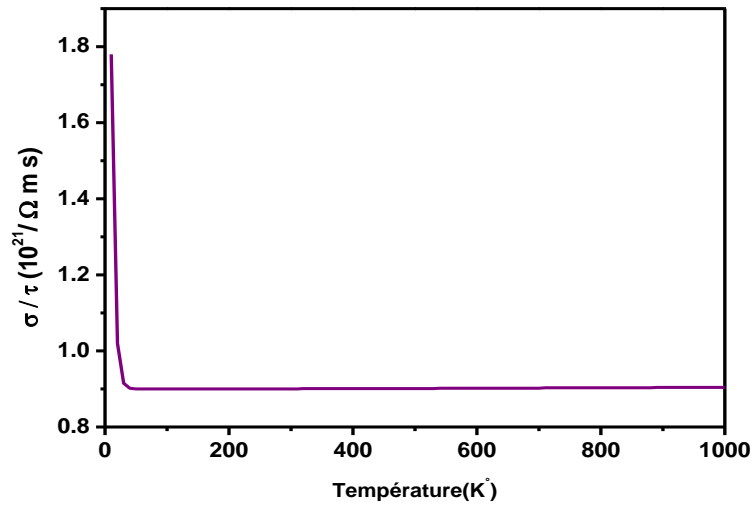


Figure (III. 8): La conductivité électrique versus la température de (YC_2).

III.3.3. La conductivité thermique électronique :

La figure III.9 représente la conductivité thermique des électrons qui suit une variation linéaire en accord avec la loi de Wiedemann-Franz

$$k_{ij}^{el} = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \sigma_{ij} T \quad (\text{III. 4})$$

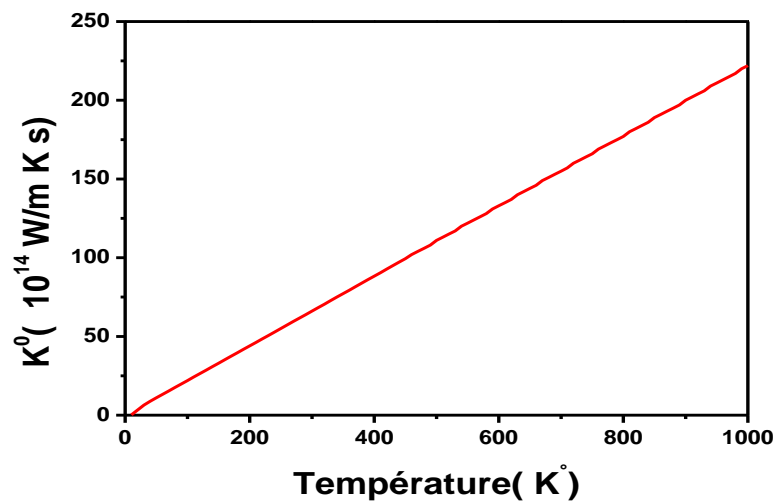


Figure (III. 9): Evolution de la conductivité thermique électronique en fonction de la température de (YC_2).

III.3.4. Chaleur spécifique électronique (c) :

La figure III.11 représente la variation de c en fonction de T , c augmente avec la température qui est prévu pour les métaux. En accord avec la relation linéaire entre la capacité thermique électronique (c) et la température suivante, $c=\gamma T$, où γ est la constante de Sommerfeld.

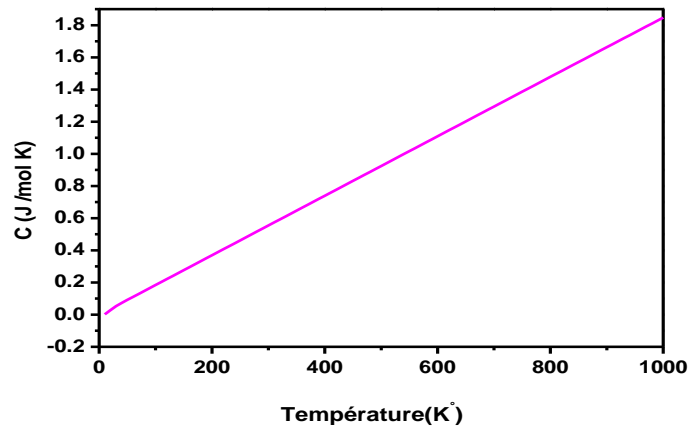


Figure (III. 10): La chaleur spécifique électronique en fonction de la température de (YC_2) .

III.3.5. La constante de hall :

La constante de hall versus T est tracée sur la figure (III.12), elle est négative sur toute la gamme des températures et suit un comportement similaire que celui de la conductivité électrique.

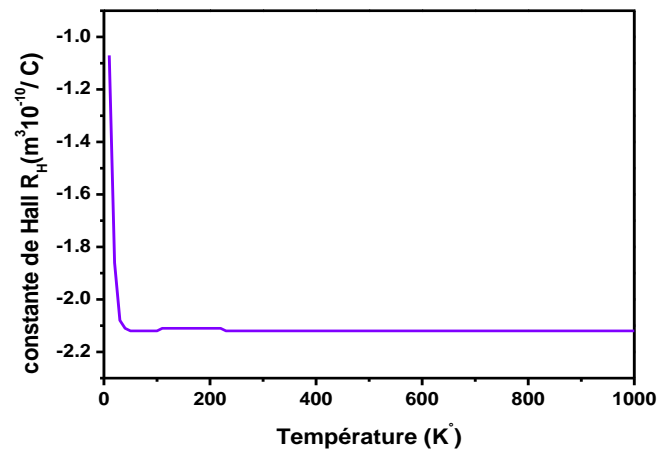


Figure (III. 11): La constante de hall en fonction de la température de (YC_2).

Références

Chapitre III

- [1]. Levine, Ira N. Quantum Chemistry. Englewood Cliffs, New jersey: Prentice Hall. pp. 455. ISBN 0-205-12770-3. (1991).
- [2]. Parr, Robert G. "History of Quantum Chemistry".
- [3]. Parr, Robert G. Craig D. P. Ross, I. G (1950). Journal of Chemical Physics. 18(12): 15611563. Bibcode: 1950 J Ch Ph.18.1561.
- [4]. Parr, R. G. Int. J. Quantum. Chem. 37 (4).327. (1990).
- [5]. Dr Andrew, Leach (2001-01-30). Molecular Modeling: Principles and Applications (2 ed.). Harlow: Prentice Hall.
- [6]. Friesner, Richard A. (2005-05-10). Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. 102 (19):6648-6653. Bib code: 2005PNAS.102.6648F.
- [7]. P.Hohenberg, W.Kohn, Phys.Rev136 B864. (1964).
- [8]. N. Troullier, J.L.Martins, Phys.Rev, B43(1991).
- [9]. P.Y.Yu et M. Cardon Fundamentals of Semiconductors and Materials Properties, Springer-Verlag (2001).
- [10]. M.C. Payne, M.P. Teter, D.C.Allan, T.A.Arais.
- [11]. Warren E. Pikett, Computer P hysicsRepport 9, (1989).

- [12]. Tütüncü, H. M. and G. P. Srivastava. *Journal of Applied Physics* 117.15 (2015).
- [13]. A. L. Giorgi, E. G. Szklarz, M. C. Krupka, T. C. Wallace, and N. H. Krikorian, J. *Less-Common Met.* 14, 247 (1968).
- [14]. M. Atoji, *J. Chem. Phys.* 35, 1950 (1961).
- [15]. D. W. Jones, I. J. McColm, R. Steadman, and J. Yerkess, *J. Solid State Chem.* 53, 376 (1984).
- [16]. Th. Gulden, R. W. Henn, O. Jepsen, R. K. Kremer, W. Schnelle, A. Simon, and C. Felser, *Phys. Rev. B* 56, 9021 (1997).
- [17]. Sharma, Ramesh, and Yamini Sharma. (2016).
- [11]. Atoji, Masao. (1961): 1950.
- [19]. The ABINIT Computer code is a common project of the University Catholique de Louvain Corning Incorporated, and other contributors. Available online at [hTTP://www.abinit.org](http://www.abinit.org).
- [20]. Z. Noubakhsh, *Journal of Alloys and Compounds* 505 (2010).

Conclusion générale

Ce travail est une contribution à l'étude des propriétés structurales, électroniques (structure de bandes, densité d'états), Propriétés de transport thermoélectrique (Conductivité électrique, Conductivité thermique, Le coefficient de Seebeck, l'effet Hall, La capacité thermique et La susceptibilité magnétique) du composé YC₂ Par la technique pseudo-potential couplée avec la méthode des ondes planes, cette technique est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), en utilisant l'approximation gradient généralisée (GGA), implémentée dans le code Quantum-ESPRESSO .

L'étude des propriétés structurales de ce composé a montré que les paramètres de réseau (a et c) et le module de compressibilité β_0 du composant YC₂, et Les distances interatomiques comparées à d'autres résultats expérimentaux et théoriques sont généralement en bon accord comparables avec les données expérimentales et théoriques disponibles dans la littérature. La courbe de la Structure de bandes montre que le niveau de Fermi est traversé par deux bandes électroniques qui signale la nature métallique du matériau. La bande la traversant le niveau de fermi provenant des états 4d de l'atome d'yttrium de et 2p de l'atome de carbone. Il y a donc une nette hybridation entre les états Y 4d et C 2p.

Nous avons effectué les propriétés de transport, certains grandeurs thermoélectriques sont représentés en fonction de température tel que la capacité calorifique, La susceptibilité magnétique, La constante de Hall, Le coefficient de Seebeck et la Conductivité thermique.

Résumé :

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques du composé YC_2 . Les calculs ont été effectués par la méthode du pseudo-potentiel et ondes planes (pp-pw) implémenté dans le code Quantum espresso qui se base sur théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). On a utilisé également l'approximation du gradient généralisée GGA. La théorie semiclassique de Boltzmann moyennant le code BoltzTrap a été considérée pour le calcul des propriétés thermoélectriques.

Mots Clés : Quantum espresso, la méthode de pseudo-potentiel, DFT, YC_2 , thermoélectriques.

المخلص:

في هذا العمل قمنا بدراسة الخواص البنيوية و الإلكترونية للمركب YC_2 . أجريت الحسابات باستخدام طريقة الكمون الوهمي و الموجات المستوية (PP-PW) المطبقة في برنامج Quantum espresso الذي يعتمد على نظرية الكثافة الوظيفية DFT كما استخدمنا نظرية التدرج العام GGA.

النظرية شبه الكلاسيكية ل Boltzmann المتواجدة في برنامج الحساب BoltzTrap لدراسة الخصائص الكهرو حرارية.

الكلمات المفتاحية : YC_2 , DFT, Quantum espresso, طريقة الكمون الوهمي, والموجة المستوية.

Abstract :

In this work, we have studied the structural and electronic properties of the YC_2 compound, calculations have been investigated by employing first principles method pseudo-potential and plane waves (PP-PW) implemented in the Quantum espresso package which based on density functional theory (DFT). The general gradient approximation GGA is also used. The Boltzmann semi-classical theory with the BoltzTrap code was considered for the calculation of thermoelectric properties.

Key words: Quantum espresso, DFT, YC_2 , thermoelectric. Pseudo-potentials.