

Sommaire

Introduction générale.....	1
Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	
I.1. Introduction	4
I.2. Équation de Schrödinger.....	5
I.3. Approximation de Born- Oppenheimer	6
I.4. Approximation de Hartree – Fock.....	7
I.5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	11
I.5.1. L’approche de Thomas-Fermi	11
I.5.2. Les théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	13
I.5.3. Les équations de Kohn- Sham.....	14
I.5.4. Solution de l’équation de Kohn-Sham... ..	15
I.6. Les différents types de fonctionnelles d’échange-corrélation.....	16
I.6.1. L’approximation de la densité locale (LDA).....	16
I.6.2. La méthode $X\alpha$	17
I.6.3. l’approximation de Ceperley et Alder.....	17
I.6.4. L’approximation de Hedin et Lundqvist	18
I.6.5. La généralité de L’approximation LDA (LSDA)	19
I.6.6. L’approximation du gradient généralisé (GGA)	19
I.6.7. L’approximation EV-GGA.....	20
I.7. L’auto-cohérence dans les calculs.....	20
Chapitre II : la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	
II.1. Introduction	23
II.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW)	24
II.3. La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW).....	26
II.4. Effet de l’énergie de linéarisation	27
II.5. Constructions des fonctions radiales.....	28
II.5.1. Les fonctions radiales non relativistes	28
II.5.2. Les fonctions radiales relativistes	29
II.6. Amélioration de la méthode (FP-LAPW)	31
II.6.1. Les fenêtres d’énergie multiples	32
II.6.2. Développement en orbital local (LAPW+LO)	32

II.7.Description et utilisation du WIEN2k	33
II.7.1.Description générale du code de simulation WIEN2k	33
II.7.2.L'algorithme du WIEN2k	34
Chapitre III : résultats et discussions	
III.1.Introduction	37
III.2.La structure cristalline des composés CeX (X=N, P, As, Sb, Bi).....	38
III.3.Détails de calcul	39
III.4.Les Propriétés Structurales et transition de phase.....	41
III.4.1.Détermination des paramètres structuraux	41
III.4.2.Etude de la stabilité des phases	46
III.4.3. Transformation structurales des phases à haute pression.....	48
III.4.3.1.Rappel de la thermodynamique	48
III.4.3.2. Détermination de la pression de transition.....	48
III.5.les Propriétés électroniques des CeX (X=N, P, As, Sb et Bi).....	50
III.5.1.La structure de bande	51
III.5.2.La densité d'états électronique	59
III.6.Les propriétés magnétiques CeX (X=N, P, As, Sb et Bi).....	69
III.6.1.Rappel de magnétisme.....	69
III.6.2. moment magnétique des CeX (X=N, P, As, Sb et Bi).....	69
III.7.Les propriétés thermique des CeX (X=N, P, As, Sb et Bi).....	72
III.7.1.Modèle de Debye	72
III.7.2.Loi de Dulong et Petit	72
III.7.3. Formalisme du Modèle Quasi Harmonique de Debye.....	72
III.7.4.Gibbs2.....	74
III.7.4.1.11'utilisation de Gibbs2.....	74
III.7.5. Effet de la température et de la pression.....	74
III.7.5.1.La capacité calorifique à volume constante C_V et à pression	
Constante C_p	74
Conclusion générale.....	79
Références	81

Sommaire