



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
République Algérienne Démocratique et Populaire
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
جامعة محمد المهدى بن باديس - مستغانم
Université Abdel Hamid Ben Badis – Mostaganem
كلية العلوم والتكنولوجيا
Faculté des Sciences et de la Technologie



N° d'ordre : M2/IP/2020

MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Industries pétrochimiques
Spécialité : Génie pétrochimique

*Étude par simulation des propriétés structurales,
élastiques et thermoélectriques d'un alliage Heusler*

Présenté par :

1. Boutiba Imene
2. Hachemi Nourelhoda

Soutenu le 25/06/ 2020 devant le jury composé de :

Président :	Sefir Yamina	Grade	MCB	U - Mostaganem
Examineur:	Terkhi Sabria	Grade	MCA	U - Mostaganem
Encadreur :	Bendahma Fatima	Grade	MCA	U - Mostaganem

Année Universitaire : 2019 / 2020

Remerciements

Nous remercions en premier lieu ALLAH le tout puissant qui nous a éclairé le bon chemin et de nous avoir accordé la puissance, la volonté et la santé pour achever ce travail.

Ce mémoire de Master a été réalisé au laboratoire « Technologie et propriétés des solides » (TPS), Département de Génie des procédés, Faculté des Sciences et de la Technologie, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.

*Nous exprimons toute notre gratitude et notre profonde reconnaissance à notre encadreur Madame **Bendahma Fatima**, Maître de conférences à l'université de Mostaganem. Nous sommes particulièrement honorés par la présence de madame **Sefir Yamina**, Maître de conférences à l'université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem qui a bien accepté de présider ce jury de mémoire. Nos vifs remerciements s'adressent à madame **Terkhi Sabria** Maître de conférences à l'université de Mostaganem pour avoir bien voulu faire partis du jury et d'avoir accepté d'examiner ce travail.*

Merci.....

Dédicaces

A mon très cher père

*Tu as toujours été à mes côtés pour me
soutenir et m'encourager.*

*Que ce travail traduit ma gratitude et mon
affection.*

A ma très chère mère

*Je dédie ce modeste travail à celle qui m'a
donné la vie, qui a sacrifié pour mon bonheur
et ma réussite*

A mon adorable sœur Fatima

A mes frères

A mes très chers amis

A tous ceux qui m'aiment

A tous ce que j'aime

*A tous ceux qui m'ont aidé de loin où de près
à ce travail.*



Imene.

Dédicaces

Je dédie ce travail :

*A mes chers parents, ma mère et mon père
pour leur patience, leur amour, leur soutien
et leurs encouragements.*

A mes sœurs et mon frère

A mes très chers amis

A tous ceux qui m'aiment

A tous ce que j'aime

*A tous ceux qui m'ont aidé de loin où de près
à ce travail.*



Nour Elhoda.

Résumé

Nous avons étudié et réalisé un calcul théorique en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), implémenté dans le code wien2k, pour déterminer les propriétés structurales, élastiques et thermoélectriques du composé PdHfGe. Le potentiel d'échange et de corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé (GGA). La théorie semi-classique de Boltzmann moyennant le code BoltzTrap a été considérée pour le calcul des propriétés thermoélectriques. Les résultats obtenus montrent que le PdHfGe est un semi-conducteur, ductile et anisotrope. Vu son facteur de mérite élevé, le PdHfGe présente une efficacité dans le domaine thermoélectrique.

Mots-clés: Heusler, semi-conducteur (SC), approximation du gradient généralisé (GGA), propriété thermoélectrique.

Abstract

We have studied and carried out a theoretical calculation using the method of increased linear waves linearized with total potential (FP-LAPW) based on the theory of the density functional (DFT), implemented in the code wien2k, to determine the structural, elastic and thermoelectric properties of the PdHfGe compound. The exchange and correlation potential is treated by the generalized gradient approximation (GGA). The semi-classical Boltzmann theory using the BoltzTrap code was considered for the calculation of the thermoelectric properties. The results obtained show that PdHfGe is a semiconductor, ductile and anisotropic. Given its high merit factor, PdHfGe has an efficiency in the thermoelectric field

Keywords: Heusler, semiconductor (SC), generalized gradient approximation (GGA), thermoelectric property.

ملخص

لقد درسنا ونفذنا حسابًا نظريًا باستخدام طريقة زيادة الموجات الخطية الخطية ذات الإمكانيات الكلية (FP-LAPW) استنادًا إلى نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) ، المنفذة في الكود wien2k ، لتحديد الخصائص الهيكلية ومرنة وكهروحرارية للمركب PdHfGe. يتم التعامل مع إمكانيات التبادل والارتباط من خلال تقريب التدرج المعمم (GGA). تم النظر في نظرية بولتزمان شبه الكلاسيكية باستخدام رمز BoltzTrap لحساب الخصائص الحرارية الكهربائية. أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن PdHfGe هو أشباه الموصلات والدكتايل ومتغير الخواص. نظرًا لعامل الجدارة العالية ، تتمتع PdHfGe بكفاءة في المجال الكهروحراري.

الكلمات المفتاحية: Heusler ، أشباه الموصلات (SC) ، تقريب التدرج المعمم (GGA) ، الخاصية الكهروحرارية.

Sommaire

Remerciements	i
Dédicaces	ii
Résumé.....	iii
Sommaire.....	iv
Introduction générale.....	1
Références.....	3

Chapitre I

Alliages Heusler et effets thermoélectriques

I. Alliages Heusler	5
I.1 Introduction.....	5
I. 2 Nomenclature des alliages Heusler.....	5
I.2.1 Alliages semi-Heusler	5
I.2.2 Alliages Full-Heusler	5
I.3 Structure cristalline	6
I.3.1 Heusler « Full-Heusler »	6
I.3.2 Demi-Heusler « Half-Heusler »	6
I.4 Thermoélectricité.....	7
I.4.1 Introduction.....	7
I.4.2 Propriétés thermoélectriques.....	8
I.4.2.1 Effet de Seebeck	8
I.4.2.2 Effet Peltier.....	9
I.4.2.3 Effet Thomson	9
I.4.2.4 Module thermoélectrique	10
I.4.2.5 Figure de mérite (ZT)	11
I.4.3 Différentes classes des matériaux utilisés en thermoélectricité	12

Références	13
------------------	----

Chapitre II

Méthodes de calcul

II.1 Introduction	15
II.2 Equation de Schrödinger	15
II.3 Approximation de Born Oppenheimer	16
II.4 Approximation de Hartree et de Hartree-Fock.....	16
II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	17
II.5.1 Modèle de Thomas-Fermi.....	17
II.5.2 Equations de Kohn-Sham.....	17
II.5.3 Approximation du gradient généralisé (GGA	19
Références	20

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction	22
III.2 Propriétés structurales	22
III.3 Propriétés électroniques.....	23
III.4 Propriétés élastiques.....	24
III.5 Propriétés thermoélectriques.....	26
Références	30
Conclusion générale	31

Introduction Générale

Les dernières années ont été témoin d'un immense développement dans le domaine de la physique des semi conducteurs et dans l'utilisation de ces matériaux pour des applications optoélectroniques et thermoélectriques. Cet essor considérable de l'industrie du semi-conducteur a été possible notamment grâce à l'augmentation perpétuelle des performances du transistor MOS (brique élémentaire des circuits intégrés). La demande importante de nouveaux dispositifs, de plus en plus performants et miniaturisés, conduit au développement de nouvelles fonctionnalités de spintroniques [1], thermodynamiques [2], thermoélectriques [3] et optoélectroniques [4]. Les demi-Heuslers de formule chimique XYZ, où X et Y sont des métaux de transition et Z désigne un élément de la colonne III-V, cristallisent dans la structure MgAgAs avec le groupe d'espace F43m. Leurs structures électroniques et leurs propriétés sont déterminées grâce au nombre d'électrons de valence.

Les différentes méthodes de calculs sont décrites, de la méthode empirique et semi-empirique, en axant spécialement sur la méthode ab-initio, qui utilise seulement les constantes atomiques comme paramètre d'entrée pour la résolution de l'équation de Schrödinger. Un certain nombre de techniques permettant d'étudier les propriétés structurales, élastiques et thermoélectriques du matériau semi-conducteur étudié.

En raison des problèmes actuels de crise énergétique et de pollution de l'environnement, les activités d'investigations dans la recherche de matériaux thermoélectriques nouveaux se développent rapidement ces dernières années. Les alliages demi-Heuslers tel que CoTiSb, FeVSb, NiTiSn, NiZrSn montrent de grandes performances thermoélectriques en raison de leurs atoxicités et leurs stabilités même à des températures élevées dans l'air [5]. Ils permettent une récupération de la chaleur résiduelle qui par la suite sera utilisé pour améliorer l'efficacité énergétique de tout processus générateur de chaleur [6].

L'utilisation du programme Wien2k qui repose sur un traitement trous électrons du matériau et constitue un logiciel complet pour le calcul des propriétés structurales, élastiques et thermoélectriques du matériau PdHfGe.

Cette recherche s'articule autour de trois chapitres:

- Le premier chapitre, débute par la présentation des propriétés générales des systèmes étudiés à savoir les demi-Heuslers.

- Le détail du formalisme de calcul des propriétés structurales et électroniques basé sur la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ainsi que les résultats de l'optimisation, de la structure de bande et de la densité d'état sont donnés au deuxième chapitre.

- Le troisième chapitre est consacré aux résultats et discussions.

Enfin, le manuscrit se termine par une conclusion générale qui résume les principaux résultats obtenus dans le cadre de cette étude et des perspectives de ce travail sont proposées.

Références

- [1] I.Galanakis, P.Mavropoulos, P.H.Dederichs, J.Phys. D.Appl. Phys. 39: 765 (2006).
- [2] V.A.Dinh, K.Sato, H.K.Yoshida, J Supercond Nov Magn 23: 75 (2010).
- [3] Lihong Huang, et al, Recent progress in half-Heusler thermoelectric materials, Materials Research Bulletin, 76 : 107-112 (2016).
- [4] D.Kieven, R.Klenk, S.Naghavi, C.Felser, and T.Gruhn, I-II-V half-Heusler compound for optoelectronics: Ab initio calculations, Phys. Rev. B81, 075208 (2010).
- [5] C.Uher, J.Yang, S.Hu, D.T.Morelli, G.P.Meisner, Phys. Rev. B 59: 8615 (1999).
- [6] D.M.Rowe, Thermoelectrics and its Energy Harvesting, Boca Raton ed, CRCPress,(2012).

Chapitre I

Alliages Heusler et effets

thermoélectriques

I. Alliages Heusler

I.1 Introduction

Tout a commencé en 1903 avec l'historique découvert de Fritz Heusler, où un alliage avec une formule de type Cu_2MnAl est trouvé comme un matériau ferromagnétique, bien qu'aucun de ces éléments constitutifs ne soit un matériau magnétique [1]. C'est la naissance d'une nouvelle classe des matériaux des plus passionnants. Cette classe de matériaux comprend actuellement une grande collection avec plus de 1000 composés, connus sous le nom de Composés ou alliages Heusler. Une première classe est constituée avec des matériaux ternaires semiconducteurs ou métalliques avec une stoechiométrie de type 1:1:1 (connus sous le nom demi-Heusler "Half-Heusler"), et une autre classe de type 2:1:1 (connus sous le nom "Full-Heusler").

Selon l'orientation du spin, les alliages d'Heusler demi-métalliques ferromagnétiques HMF peuvent se classer en matériaux métalliques pour une telle orientation, et semi-conducteurs pour l'orientation opposée, avec une polarisation de spin à 100% pour les électrons de conduction, ce qui les rend meilleurs candidats aux applications technologiques du domaine spintronique, que leur température de Curie est élevée [2]. Parmi ces applications, on cite les jonctions tunnel magnétique (TMR) [3].

I. 2 Nomenclature des alliages Heusler

I.2.1 Alliages semi-Heusler

Les alliages semi-Heusler XYZ peuvent être compris comme des composés constitués de deux parties, une partie covalente et une autre partie ionique. Les atomes X et Y ont un caractère cationique distinct, tandis que Z peut être considéré comme l'équivalent anionique. Le choix de position atomique pour les éléments X, Y et Z ne peut pas être directement dérivé de cette nomenclature parce que souvent de mauvaises positions utilisés dans les modèles mènent à de mauvais résultats.

I.2.2 Alliages Full-Heusler

Les alliages de cette famille sont décrits par la formule X_2YZ , où X et Y sont des métaux de transition et Z est un élément principal du groupe s-p. Selon les sites atomiques occupés par les atomes X, Y et Z dans la maille élémentaire, l'alliage peut adopter différentes structures avec un désordre atomique (Figure.1).

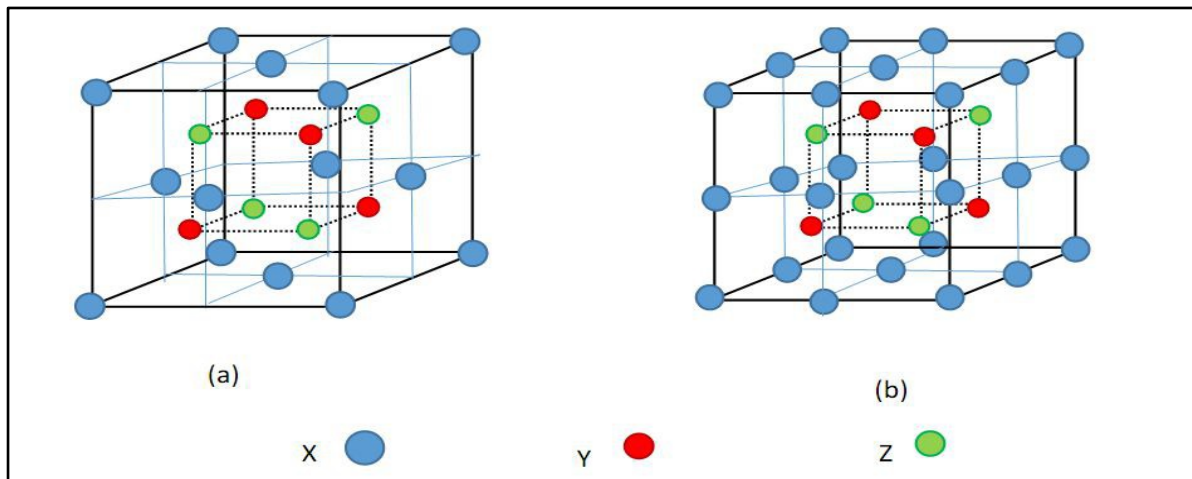


Figure.1: Structure cristalline de Half Heusler alliage XYZ (a) et de Full Heusler alliage X₂YZ (b)

I.3 Structure cristalline

I.3.1 Heusler « Full-Heusler »

La première famille est celle des alliages Heusler ou full-Heusler de type X₂YZ qui cristallisent dans le groupe d'espace cubique Fm-3m (groupe d'espace N° 225) avec Cu₂MnAl (L21) comme prototype [4].

Les atomes X occupent la position 8c (1/4, 1/4, 1/4), les atomes Y et les atomes Z sont situés aux positions 4a (0, 0, 0) et 4b (1/2, 1/2, 1/2), respectivement. Cette structure se compose de quatre sous-réseaux cfc interpénètrents, deux sont occupés par l'atome X. Une structure de type rock salt est formée par les éléments les moins et les plus électropositifs (atomes Y et Z).

En raison du caractère ionique de leur interaction, ces éléments ont les coordonnées octaédriques. D'autre part, tous les sites tétraédriques sont occupés par l'atome X. Cette structure peut aussi être considérée comme une structure zinc blende.

I.3.2 Demi-Heusler « Half-Heusler »

Les alliages de la deuxième famille ont la formule générale XYZ et cristallisent selon une structure cubique non Centro-symétrique (groupe spatial no. 216, F43m C1B), qui est un système ternaire de structure CaF₂ et peut être déduit de la structure tétraédriques de type ZnS en remplissant les sites du réseau octaédriques (Figure 2).

Ce type de structure semi-Heusler peut être caractérisé par l'interpénétration de trois sous-réseaux cubique à faces centrées (cfc), dont chacun est occupé par les atomes X, Y et Z [5].

Les positions occupées sont 4a (0, 0, 0), 4b (1/2, 1/2, 1/2), et 4c (1/4, 1/4, 1/4). En principe,

trois arrangements atomiques non équivalents sont possibles dans ce type de structure telle que résumés dans le Tableau.1.

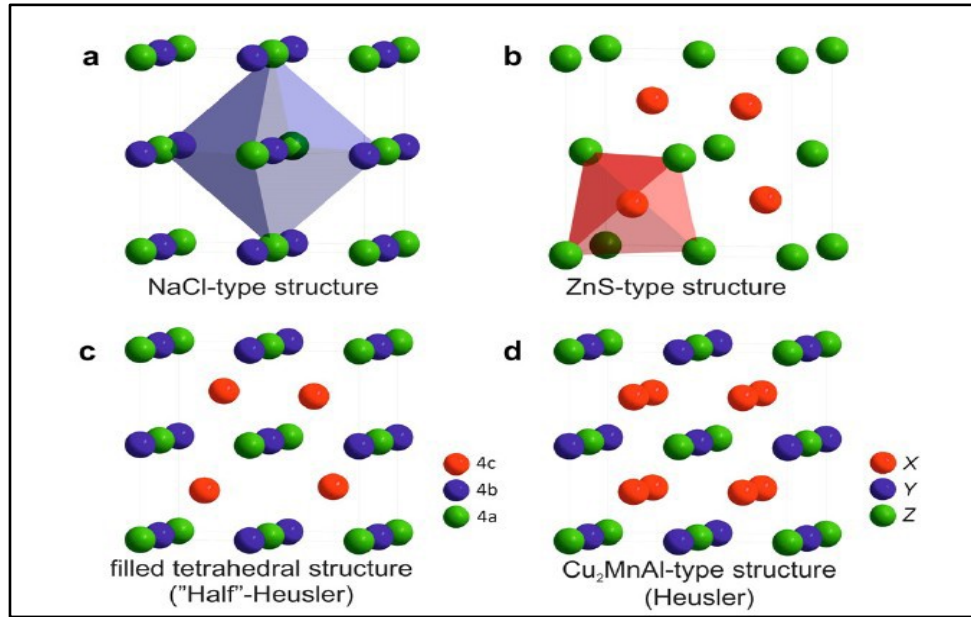


Figure.2: (a) la structure Rock salt, (b) la structure zinc blende et leurs relations avec la structure semi-Heusler (c) et avec la structure Heusler (d)

Tableau .1 : Différents type d'occupations dans la structure de type C1_b.

	4a (0,0, 0)	4b (1/2,1/2,1/2)	4c (1/4,1/4,1/4)
Type I	X	Y	Z
Type II	Z	X	Y
Type III	Y	Z	X

la structure demi-Heusler peut être considérée comme un sous-réseau ZnS (positions de Wyckoff (4a et 4c) ou les sites octaédriques (4b) sont occupés.

I.4 Thermoélectricité

I.4.1 Introduction

La thermoélectricité est une propriété intrinsèque aux matériaux qui leur confère la possibilité de convertir de l'énergie thermique en énergie électrique. Leurs rendements de conversion de la chaleur en électricité étant encore relativement faible, plusieurs méthodes sont

mises œuvre dans le but de les améliorer. Il existe de nombreux matériaux thermoélectriques dont les propriétés trouvent des applications dans la plupart des domaines de la physique de la matière

condensée. Les alliages half-Heusler les plus étudiés pour la thermoélectricité sont des intermétalliques semi-conducteurs. [6]

I.4.2 Propriétés thermoélectriques

Les effets thermoélectriques sont observés lorsqu'il y a simultanément dans un conducteur, écoulement de chaleur et de charge électriques. On dénombre trois effets : l'effet Seebeck, l'effet Peltier et l'effet Thomson qui régissent la conversion d'énergie thermique en énergie électrique, ou vice versa. [7]

I.4.2.1 Effet de Seebeck

L'effet Seebeck (S), fut découvert par Thomas Johann Seebeck en 1821. Si un matériau est soumis à un gradient de température, on observe donc une différence de potentiel électrique aux bornes de ce matériau (figure 3).

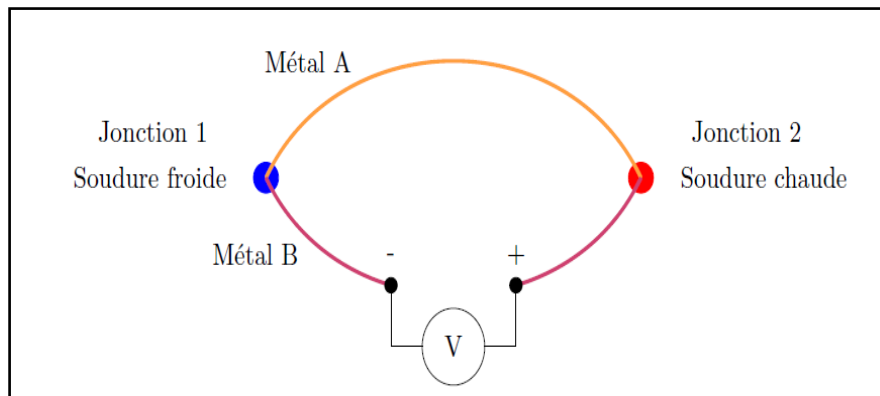


Figure.3: Schéma illustrant l'effet Seebeck.

La mesure d'une différence de température ΔT entre les jonctions de deux matériaux A et B implique la différence de potentiel électrique ΔV , tel que :

$$S_{AB} = \frac{\Delta V}{\Delta T} \quad (\text{en } V/K) \quad (\text{I. 1})$$

Les coefficients de Seebeck des deux matériaux sont reliés au coefficient de Seebeck du couple par :

$$S_{AB} = S_A - S_B \quad (\text{I. 2})$$

I.4.2.2 Effet Peltier

L'effet Peltier fut découvert en 1834, par le physicien Français Jean Peltier. Dans ce cas, un courant I est imposé à un circuit composé de deux matériaux entraînant une libération de chaleur Q (figure 4).

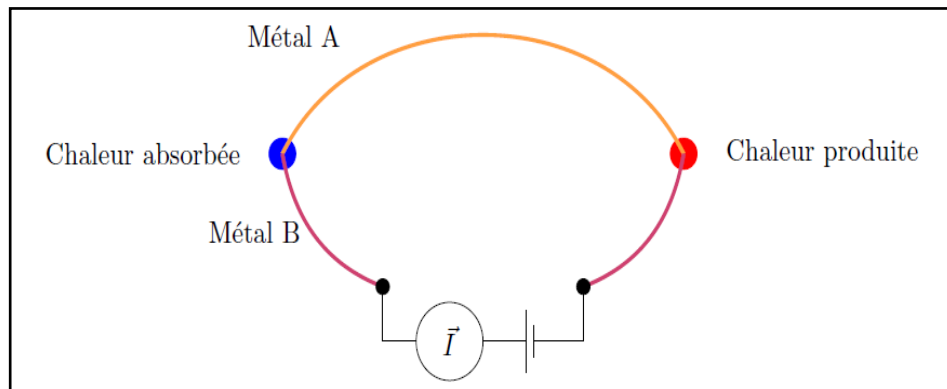


Figure.4: Schéma illustrant l'effet Peltier.

Le flux de chaleur est associé à la circulation du courant électrique par la relation :

$$Q = \Pi_{AB} \times I \quad (\text{I. 3})$$

Tel que Π_{AB} représente le coefficient de Peltier du matériau.

De plus les coefficients de Seebeck et Peltier sont reliés par la relation suivante:

$$\Pi_{AB} = S_{AB} \times T \quad (\text{I. 4})$$

I.4.2.3 Effet Thomson

Au contraire des coefficients de Seebeck et de Peltier, le coefficient de Thomson peut être directement défini pour un seul matériau. La présence simultanée d'un gradient de température et d'un courant induit une génération ou une absorption de chaleur dans chaque segment du matériau pris individuellement (figure 5) [8].

Le gradient de flux thermique au sein du matériau est :

$$\frac{dQ}{dT} = I \frac{dT}{dx} \tau \quad (\text{I.5})$$

Où τ est le coefficient de Thomson.

Il existe des relations entre les coefficients de Seebeck, de Peltier et de Thomson :

$$\tau_A - \tau_B = T \frac{dS_{AB}}{dT} \quad (\text{I.6})$$

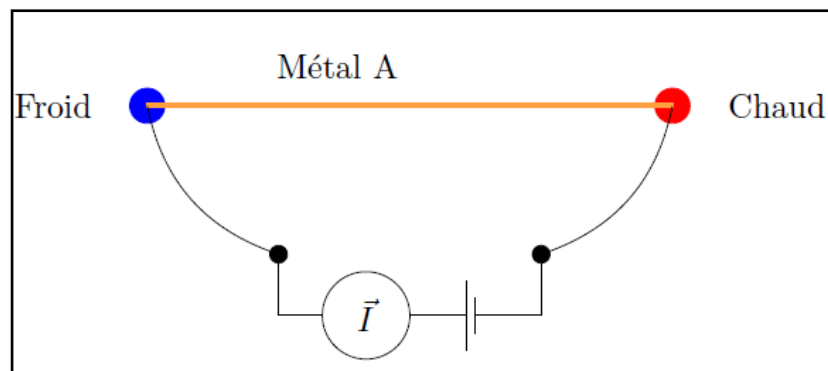


Figure.5: Schéma illustrant l'effet Thomson.

I.4.2.4 Module thermoélectrique

Deux matériaux sont nécessaires pour fabriquer un module thermoélectrique. Sa performance est d'autant plus importante que la valeur de la différence des coefficients de Seebeck de chaque matériau est grande. On utilise le plus généralement des couples de semi conducteurs. L'un des matériaux est un semi conducteur de type p (présentant un coefficient de Seebeck $S > 0$) l'autre de type n (présentant un coefficient de Seebeck $S < 0$) (figure 6) [9].

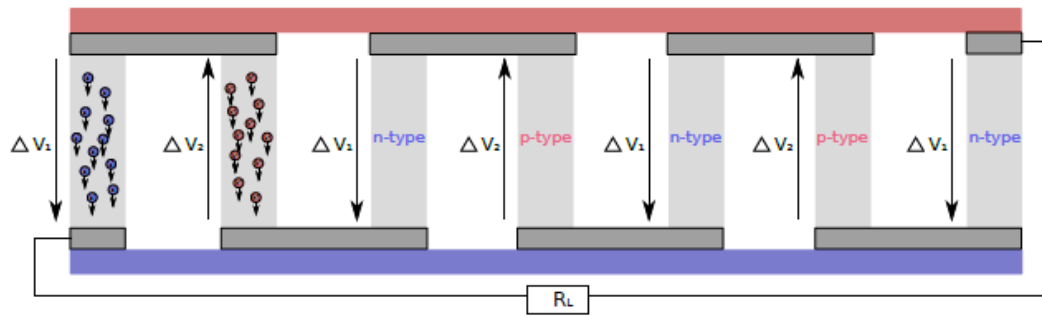


Figure.6: Module thermoélectrique combinant des semi-conducteurs de type p et de type n.

I.4.2. 5 Figure de mérite (ZT)

Les qualités d'un matériau thermoélectrique se mesurent par un nombre sans dimension, appelé facteur de mérite ZT donné par la relation [10] :

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa} \quad (\text{I. 7})$$

- **T** la température absolue (K)
- **S** le pouvoir thermoélectrique ou coefficient Seebeck (V.K^{-1})
- σ la conductivité électrique ($\Omega^{-1}.\text{m}^{-1}$)
- κ la conductivité thermique (W/m.K)

Afin d'obtenir un facteur de mérite élevé, il faut simultanément un pouvoir thermoélectrique important pour convertir efficacement un gradient de température en différence de potentiel (ou un flux de chaleur en électricité), une faible résistivité électrique pour limiter l'effet Joule et une faible conductivité thermique pour imposer un gradient le plus grand possible.

Dans un solide, il y a deux contributions à la conductivité thermique, une du réseau par le biais des phonons κ_L et une autre directement par les électrons κ_e :

$$\kappa = \kappa_L + \kappa_e \quad (\text{I. 8})$$

La contribution des électrons à la conductivité thermique (κ_e), peut être liée à la conductivité électrique par [11]:

$$\kappa_e = L \sigma T \quad (\text{I. 9})$$

Où L est le facteur de Lorenz, qui vaut : $2.4 \cdot 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2}$. L'optimisation de ZT dépend à la fois du κ_e et de σ

I.4.3 Différentes classes des matériaux utilisés en thermoélectricité

Il existe trois types de matériaux, les métaux (sans gap), les semi-conducteurs (gaps petits) ainsi que les isolants (grands gaps). Le tableau I.1 donne quelques ordres de grandeur des propriétés thermoélectrique.

Tableau I.1 : Propriétés thermoélectriques des métaux, semi-conducteurs et isolants.

Propriétés	Métaux	Semi-conducteurs	Isolants
$S \text{ (}\mu\text{.V.K}^{-1}\text{)}$	~ 5	~ 200	$\sim 10^3$
$\sigma \text{ (}\Omega^{-1}\text{.cm}^{-1}\text{)}$	$\sim 10^6$	$\sim 10^3$	$\sim 10^{-12}$
$\alpha \text{ (K}^{-1}\text{)}$	$\sim 3 \cdot 10^{-6}$	$\sim 2 \cdot 10^{-3}$	$\sim 5 \cdot 10^{-17}$

L'évaluation d'un matériau thermoélectrique passe donc par la recherche d'un matériau possédant un pouvoir thermoélectrique élevé, une faible résistivité électrique et une faible conductivité thermique. L'ensemble de ces considérations fait que les matériaux les plus intéressants sont les semi-conducteurs.

Références

- [1] F.Heusler. Verh. d. DPG, 5: 219 (1903).
- [2] C.Uher, J.Yang, S.Hu, D.T.Morelli, G.P.Meisner, Phys. Rev. B 59: 8615 (1999).
- [3] V.A.Dinh, K.Sato, H.K.Yoshida, J Supercond Nov Magn 23: 75 (2010).
- [4] K.Endo, T.Ohoyama, and R.Kimura.. Journal of the Physical Society of Japan, 19: 1494–1495 (1964).
- [5] W.Wunderlich, X.Motoyama. *Mater. Re. Soc. Symp. Proc*, 1129, 1128-U01-10 (2009).
- [6] G.J. Snyder and E.S. Tobererk, Nat. Mater., 7 (2008)105.
- [7] F.J. DiSalvo, Science, 285 (1999) 703.
- [8] S. Yousuf and D.C. Gupta, *Mater. Sci. Eng. B*, **221** (2017) 73.
- [9] T. Fang, S. Zheng, T. Zhou, L. Yana and P. Zhang, Phys. Chem. Chem. Phys., 19 (2017) 4411.
- [10] T.M. Bhat and D.C. Gupta, J. Magn. Magn. Mater., 435 (2017) 173.
- [11] G.A. Slack, J. Phys. Chem. Solids, 34 (1973) 321.

Chapitre II

Méthodes de calcul

II.1 Introduction

Les simulations numériques ont acquis depuis quelques années une place de choix dans les sciences physiques. Il est devenu courant de parler à leur sujet « d'expériences numériques ». Cette appellation définit de fait un champ de la physique apparenté à la fois aux approches expérimentales et théoriques. Il s'agit d'une part d'observer aussi finement que possible le comportement de la matière à l'échelle désirée: en cela, les simulations numériques peuvent seconder les expériences (voire même s'y substituer) [1]. Les méthodes de type ab-initio sont basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger. Ces méthodes permettent de déterminer les grandeurs physiques et chimiques d'un système telles que sa structure électronique, son énergie d'ionisation.... Dans ce chapitre, nous allons exposer les deux méthodes utilisées pour la résolution de l'équation de Schrödinger (HF et DFT) avec ces différents niveaux d'approximations qui permettent de traiter des systèmes de taille importante (système complexe).

II.2 Equation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est une équation qui représente un solide (noyaux + électrons) dans un système quantique. Le point de départ pour étudier les propriétés des matériaux d'un point de vue théorique est la résolution de l'équation de Schrödinger [2]. Pour un système à N électrons et M noyaux l'équation de Schrödinger indépendante du temps (stationnaire), s'écrit sous la forme :

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

E: est l'énergie totale de système.

Ψ : est la fonction d'onde indépendante de temps.

La résolution de l'équation de *Schrödinger* est extrêmement difficile car elle contient N+M corps avec 3 positions dans l'espace de chaque corps. Donc il s'agit de suivre certaines approximations pour obtenir la solution. La première approximation est l'approximation adiabatique de *Born-Oppenheimer*.

II.3 Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de *Born-Oppenheimer* [3], suppose que l'on peut découpler le mouvement des électrons de celui des noyaux, partant du simple constat que les électrons sont beaucoup moins lourds que les noyaux et que leur mouvement est beaucoup plus rapide, une première approximation prend en compte une évolution des électrons dans un potentiel créé par des atomes fixes [4].

Selon cette approximation, l'énergie cinétique des noyaux devient nulle ($T_N = 0$) et l'énergie d'interaction noyaux-noyaux devient constante, alors on peut simplifier l'Hamiltonien de système en un Hamiltonien électronique qui s'écrit comme suit :

$$H = T_e + T_N + V_{ee} + V_{NN} + V_{Ne} \quad (\text{II. 2})$$

T_e : Énergie cinétique de N électrons de masse m

T_N : Énergie cinétique des noyaux.

V_{ee} : L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

V_{NN} : L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

V_{Ne} : L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électron.

La première approximation qui peut être introduite est l'approximation de Born-Oppenheimer.

$$H_T = T_e + V_{ee} + V_{Ne} \quad (\text{II. 3})$$

II.4 Approximation de Hartree et de Hartree-Fock

L'équation (I.1) ne peut-elle non plus; être résolue à moins de la réduire à une équation concernant une seule particule, il faut donc trouver un moyen qui permettrait de tenir en compte des interactions entre les électrons. Tout en substituant un système d'électron indépendant à un système d'électrons en interaction [5]. Dans l'approximation de Hartree [6], On considère les électrons comme indépendants, dans lequel chaque électron se déplace dans un champ moyen

créé par les noyaux et les autres électrons, désignant par l'énergie potentielle de l'électron dans ce champ, à chaque électron correspond une orbitale et la fonction d'onde totale s'écrit comme un produit de fonction d'onde mono-électronique, de sorte que [7]:

$$\Psi = \Psi_1(r_1) \Psi_2(r_2) \Psi_3(r_3) \dots \dots \Psi_n(r_n) \quad (\text{II. 4})$$

L'approximation de Hartree-Fock permet de réduire le problème de N corps à un problème d'un seul corps, ou chaque électron soumis à un potentiel effectif généré par les autres électrons. Notamment pour les systèmes du plusieurs électrons le calculs doit être difficiles, pour cela on recourt à la théorie de la fonctionnelle de la densité.

II.5 Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

L'approche de la DFT (Density Functional Theory) permet d'atteindre une bonne précision de calcul, pour une taille réaliste du système. L'idée principale de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est que l'énergie d'un système d'électrons peut être exprimée en fonction de la densité électronique $\rho(r)$. Pour un système de N électrons, $\rho(r)$ correspond à la densité électronique au point de l'espace r [8]. La DFT est basée sur deux théorèmes fondamentaux introduits par Hohenberg et Kohn et ensuite étendus par Kohn et Sham [9, 10].

II.5.1 Modèle de Thomas-Fermi

Le concept fondamental de la DFT est que l'énergie d'un système électronique peut être exprimée en fonction de sa densité. C'est en fait une idée ancienne datant principalement des travaux de Thomas [11] et Fermi [12]. L'avantage de ce modèle que la densité ne dépend pas des trois coordonnées spatiales des électrons de système étudié. Ce modèle comportait quelques points faibles, car quantitativement il décrivait mal les propriétés des molécules et des solides. Slater, Hohenberg et Kohn ont proposé une théorie exacte et plus élaborée, c'est la DFT qui est la méthode déterminant la densité de l'état fondamental. La DFT peut traiter de nombreux types de problèmes et d'être suffisamment précise.

II.5.2 Equations de Kohn-Sham

Kohn et Sham [13] ont démontré que la densité électronique exacte était donnée par une solution auto-cohérente d'un ensemble d'équations mono-électroniques, de type Schrödinger, appelées équations de Kohn-Sham:

$$\rho(r) = \sum_i |\Psi(r)|^2 \quad (\text{II. 5})$$

Les particules étant indépendantes, les fonctions d'ondes associées sont orthogonales et l'Hamiltonien est symétrique.

La fonctionnelle de Kohn-Sham s'écrit :

$$E_{KS}(n) = T_{KS} + E_H(n) + E_{xc}(n) + \int V_{ext}(r)n(r)dr \quad (II.6)$$

Avec T_{KS} l'énergie cinétique.

$$T_{KS} = \sum_{i=1}^N \left\langle \Psi_i \left| \frac{\nabla_i^2}{2} \right| \Psi_i \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \Psi_i(r)|^2 \quad (II.7)$$

E_H l'énergie d'Hartree :

$$E_H[n] = \frac{1}{2} \iint \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} dr dr' \quad (II.8)$$

Et E_{xc} l'énergie d'échange-corrélation.

Les fonctions d'onde Ψ sont alors obtenues par la solution d'une équation de type *Schrödinger* avec un potentiel effectif:

$$H_{KS}\Psi_i(r) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff} \right] \Psi_i(r) = \varepsilon_i \Psi_i(r) \quad (II.9)$$

Avec :

$$V_{eff} = V_H + V_{ext} + V_{xc} \quad (II.10)$$

Et :

$$V_H(r) = \frac{\delta E_H[n]}{\delta n} = \int \frac{n(r')}{|r-r'|} dr' \quad (II.11)$$

$$V_{xc}(r) = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\rho(r)} \quad (II.12)$$

Où on définit le terme d'échange et de corrélation :

$$E_{xc}[n(r)] = \{V_{ee}[n(r)] - E_H[n(r)]\} + \{T[n(r)] - T_s[n(r)]\} \quad (II.13)$$

$E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ Comprend la correction à l'énergie cinétique pour un gaz d'électrons en interaction et la correction à l'énergie de Hartree dans l'interaction électron-électron.

La bonne description de la densité électronique du système de particules devient alors totalement dépendante de la qualité de la fonctionnelle et de sa partie échange-corrélation.

D'une part cette fonctionnelle va permettre de prendre en compte l'énergie d'échange d'Hartree-Fock et d'autre part elle va prendre en compte l'énergie de corrélation entre les électrons.

II.5.3 Approximation du gradient généralisé (GGA)

Dans le cadre de la GGA [14], la contribution de chaque unité de volume à l'énergie d'échange-corrélation du système ne dépend pas seulement de la densité locale au sein de ce volume, mais également de la densité au sein des autres volumes voisins. L'énergie d'échange-corrélation sera donc exprimée en fonction de la densité électronique mais aussi du gradient de celle-ci :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|] d^3\vec{r} \quad (\text{II. 14})$$

$\varepsilon_{XC}^h[\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|]$: représente l'énergie d'échange-corrélation par électron dans un système d'électrons en interaction mutuelle de densité non uniforme.

Où f est une fonctionnelle de la densité locale et son gradient dépendante de la densité électronique et de son gradient. L'approximation GGA donne des meilleurs résultats pour les énergies totales, les énergies de cohésion, les volumes à l'équilibre et les modules de compressibilité que la LDA. Toutefois, les largeurs de bandes pour les isolants et les semi-conducteurs restent trop faibles.

Références

- [1] O.Allal, Etude des propriétés structurales, électroniques, élastiques et optiques de l'Oxyde de Magnésium (MgO), Thèse de doctorat, université Mohamed Bodiaf, Oran, 2010.
- [2] H. Zenasni, Etude théorique des propriétés Magnétiques, électroniques et structurales des alliages Heusler, Thèse de doctorat, Université de ABOU BAKR BELKAID, Telemcen, 2013.
- [3] H.A. Goodwin, Top. Curr. Chem. **234** (2004).
- [4] Y. Garcia, P. Gülich, Top. Curr. Chem. **234** (2004) 49.
- [5] D.R.Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. **24**, **89** (1928).
- [6] J.E. Enderby, A.C. Barnes, Rep. Prog. Phys. **53** (1990) 85.
- [7] B. E. Mellander, Phys. Rev. B **26**, (1982) 5886.
- [8] K.Hamar. Etude «ab initio» des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des couches d'alliages FePt L10, mémoire de master académique, Université de MOULOUD MAMMERI, Tizzi Ouezzo.
- [9] P. Hohenberg et W. Kohn, Phys. Rev. **1**, **36**, B 864 (1964).
- [10] W. Kohn et L.J Sham, Phys. Rev. **140**, A1113 (1965).
- [11] L.H. Thomas, Proc. Cambridge Philos. Soc. **23**, 542 (1927).
- [12] E. Fermi, Z. Phys. Rev. **53**, (1951).
- [13] Kohn, W. and L.J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. Physical Review, 1965. **140**(4A): p. A1133-A1138.
- [14] Perdew, J.P. and A. Zunger, Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems. Physical Review B, 1981. **23**(10): p. 5048-5079.

Chapitre III

Résultats et discussions

III.1 Introduction

Les résultats des calculs donnés dans cette partie sont obtenus par le code WIEN2k basé sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). Ce code est une implémentation de la méthode des ondes planes augmentées linéarisées à potentiel total (FP-LAPW).

L'énergie d'échange et de corrélation est décrite par l'approximation du gradient généralisé (GGA) de Perdew, Burk et Ernzerhof [1]. Dans la méthode FP-LAPW les fonctions d'onde de Kohn et Sham sont développées en termes d'harmoniques sphériques à l'intérieur des sphères MT pour une valeur maximale de $l_{max}=10$ et en série de Fourier dans la région interstitielle. Les ondes planes sont limitées à $RMT.K_{max}=7$ (ou RMT est le plus petit rayon de la sphère MT et K_{max} est le maximum du vecteur d'onde K). Le nombre de K point utilisé pour échantillonner la première zone de Brillouin dans l'espace réciproque est pris égal à 455 valeur suffisante pour converger l'énergie totale. Le processus des itérations self-consistant est répété jusqu'à l'énergie de convergence inférieure ou égale à la valeur de 10^{-4} Ry.

III.2 Propriétés structurales

L'étude des propriétés structurales présente un intérêt majeur, car elle permet de recueillir des informations sur la structure microscopique des matériaux et aura donc un impact relativement important sur la prédiction des autres propriétés.

Les courbes donnant l'énergie totale en fonction du volume de la maille élémentaire sont ajustées à l'aide de l'équation de Murnaghan [2].

Les résultats des propriétés structurales du composé PdHfGe obtenus à partir des calculs auto-cohérent sont présentés dans le tableau III.1.

Tableau III.1: Paramètres du réseau de l'équilibre, module de compressibilité (B) et sa dérivée (B') pour le PdHfGe.

Matériau	a_0	V_0	B	B'	E_0
PdHfGe	11.62	394.11	137.33	4.22	- 44488.094061

La figure.1 donne la variation de l'énergie en fonction du volume obtenu par l'approximation GGA montre que l'état non magnétique (NM) est plus favorable car il a l'énergie inférieure à la

configuration ferromagnétique (FM) ou antiferromagnétique (AFM) correspondante dans la structure cubique.

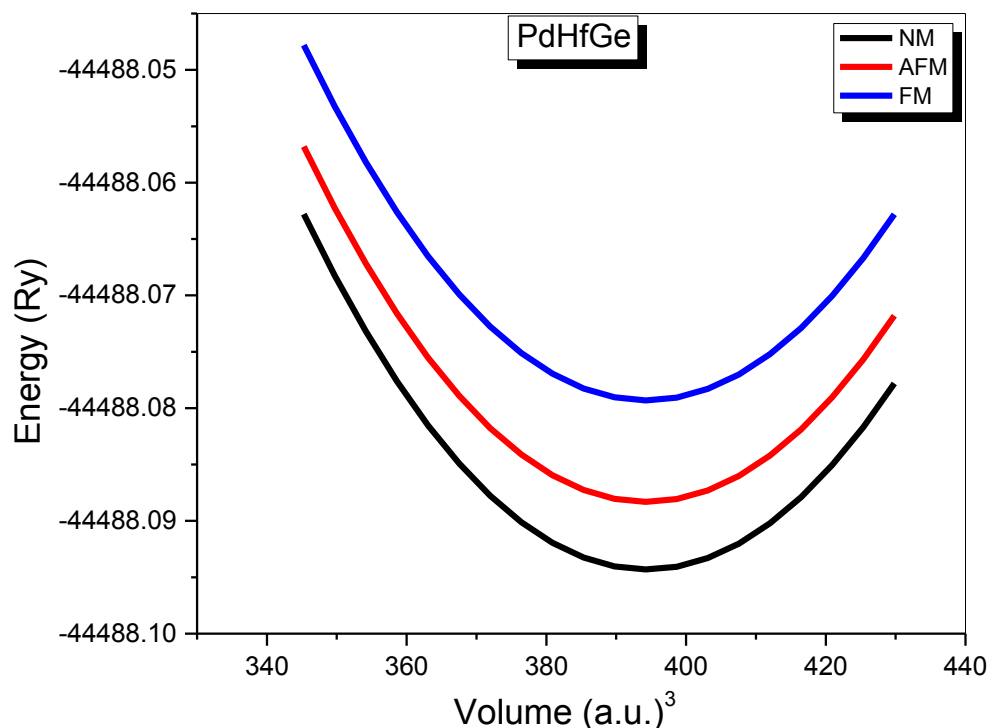


Figure.1: Variation de l'énergie totale du composé ternaire PdHfGe en fonction du volume.

III.3 Propriétés électroniques

L'importance de cette partie réside dans le fait qu'elle nous permet de déterminer et d'analyser la nature d'un composé.

La structure électronique de bande du composé PdHfGe est calculée comme le montre la figure.2.

Le maximum de bande de valence (VBM) est de 0 eV au point Γ mais le minimum de bande de conduction (CBM) est de 0,55 eV au point X. Cela confirme que PdHfGe est un semi-conducteur a une bande interdite (gap) indirecte égale à 0,55 eV.

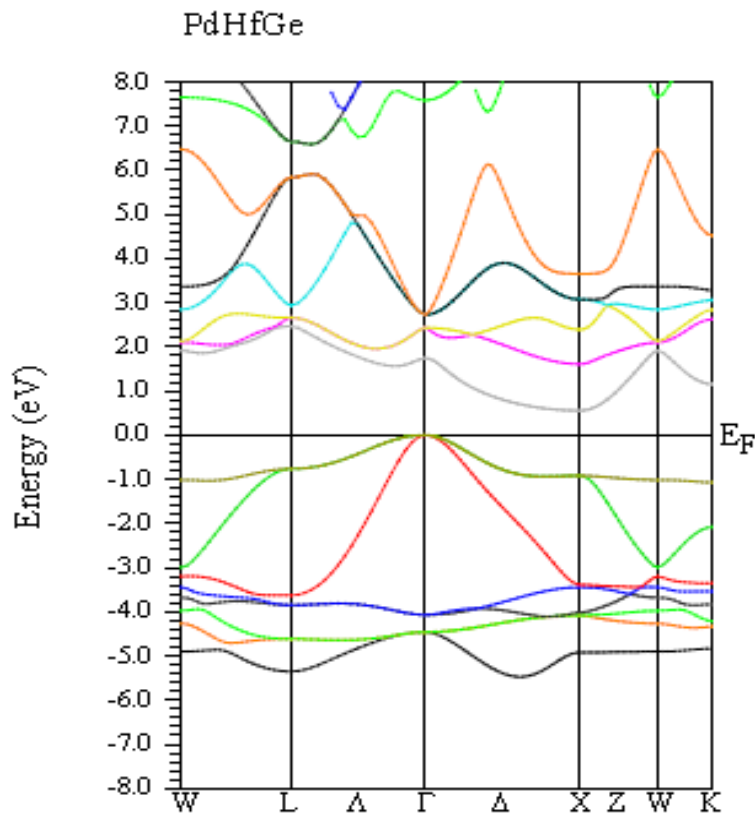


Figure. 2: Structure de bandes du composé ternaire PdHfGe.

III.4 Propriétés élastiques

La méthode contrainte-déformation a été utilisée pour déterminer les constantes élastiques du composé étudié afin de confirmer sa stabilité. Nous avons remarqué qu'il n'y a que trois constantes élastiques indépendantes C_{ij} , à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} pour un système cubique. Les valeurs sont résumées dans le tableau 2; les critères ci-dessus sont satisfaits, ce qui signifie que PdHfGe est mécaniquement stable. Nous remarquons que le module de volume calculé à partir des constantes élastiques telles que $B = (1/3) (C_{11} + 2 C_{12})$ a presque la même valeur que celui obtenu à partir de l'équation d'état de l'EOS de Birch Murnaghan (voir le tableau 1).

De plus, d'autres paramètres macroscopiques tels que le facteur d'anisotropie A , le module de cisaillement G , le coefficient de Poisson ν et le module de Young E ont également été étudiés dans cette étude. Ces paramètres ont été calculés en utilisant les approximations de Voigt-Reuss-Hill pour les structures cubiques [3–5]:

$$B_V = B_R = (C_{11} + 2C_{12})/3 \quad (\text{III. 1})$$

$$G_V = (C_{11} - C_{12} + 3C_{44})/5 \quad (\text{III. 2})$$

$$G_R = 5C_{44}(C_{11} - C_{12})/[4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})] \quad (\text{III. 3})$$

$$A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12}) \quad (\text{III. 4})$$

$$G = (G_V + G_R)/2 \quad (\text{III. 5})$$

Le module de Young E et le coefficient de Poisson ν sont donnés par les équations suivantes:

$$E = 9BG/(3B + G) \quad (\text{III. 6})$$

$$\nu = (3B - 2G)/[2(3B + G)] \quad (\text{III. 7})$$

On constate que pour un cristal cubique, les conditions de stabilité mécanique nécessaires doivent être ($C_{11} - C_{12} > 0$); ($C_{11} + 2C_{12} > 0$); ($C_{44} > 0$) et ($C_{12} < B < C_{11}$) [6].

Les résultats obtenus (tableau 2) vérifient clairement ces conditions et donnent de la crédibilité à cette étude. Selon Pugh [7], le rapport module en masse / cisaillement B / G est un indicateur des caractéristiques plastiques des matériaux. Un matériau est ductile pour un rapport supérieur à 1,75; sinon, il sera fragile et dur. Dans cette étude, le rapport B / G était égal à 2,56 pour PdHfGe; indiquant alors que le matériau est ductile. Le coefficient de Poisson peut également être utilisé pour estimer la ductilité d'un matériau. Selon la règle de Frantsevich [8], si le coefficient de Poisson est $\nu > 1/3$, le matériau est considéré comme ductile, sinon le matériau est cassant. Sur la base des résultats pour les valeurs ν présentés dans le tableau 2, nous pouvons dire que PdHfGe est ductile. Notons également que le composé étudié a une valeur A supérieure à la valeur critique ($A = 1$) du matériau isotrope. Ainsi, nous pouvons conclure que ce matériau est anisotrope. De plus, nous avons le module de Young (E) (indiqué 143,0 GPa pour PdHfGe), pour fournir une mesure de la rigidité solide, plus la valeur du module de Young plus rigide sera le composé.

Tableau III.2: Constantes élastiques C_{ij} , module de masse B (GPa), facteur d'anisotropie A, module de cisaillement G (GPa), module de Young E (GPa) et coefficient de Poisson ν du composé PdHfGe Half-Heusler.

Matériau	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B	A	G	E	B/G	ν
PdHfGe	179.16	117.36	90.78	137.96	2.94	53.87	143.0	2.56	0.35

III.5 Propriétés thermoélectriques

L'évolution des données de conductivité électrique (σ / τ) par temps de relaxation ($\tau \approx 10^{-15}$ s) dans une plage de température de 0 à 1100 K est représentée sur la figure 3.

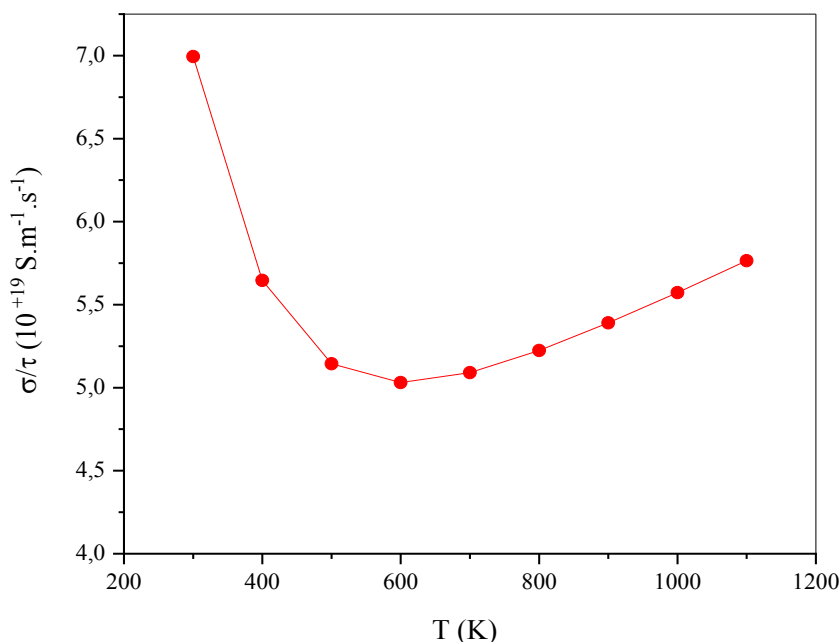


Figure. 3: Conductivité électrique en fonction de la température de PdHfGe.

À partir de la courbe, nous pouvons observer deux régions différentes: Dans la première région de température (300 - 600 K), nos résultats montrent que la conductivité électrique obtenue est de $6,98 \times 10^{19} (\Omega \text{ ms})^{-1}$ pour PdHfGe, à la température ambiante (300 K). Au-delà de cette valeur de température, la conductivité électrique diminue à mesure que la température augmente. Dans la deuxième région (lorsque $600 \leq T \leq 1100$ K), la conductivité électrique augmente lentement avec la température. Cette dépendance à la température est essentiellement due à la fois aux bandes interdites intrinsèquement étroites (0,55 eV) de (PdHfGe), ce qui donne lieu à un grand σ , et à la forte augmentation de la densité des états autour du niveau de Fermi. Le coefficient de Seebeck (S) est lié au fait que les électrons sont à la fois porteurs d'électricité et de chaleur. Pour un bon dispositif thermoélectrique, nous avons besoin d'un coefficient de Seebeck élevé. Les valeurs obtenues du (S) pour le composé PdHfGe sont représentées en fonction de la température sur la figure 4.

On observe clairement que la valeur la plus élevée du (S) est atteinte à des températures élevées (coefficient de Seebeck autour de $138 \mu\text{V} / \text{K}$ à 1100 K).

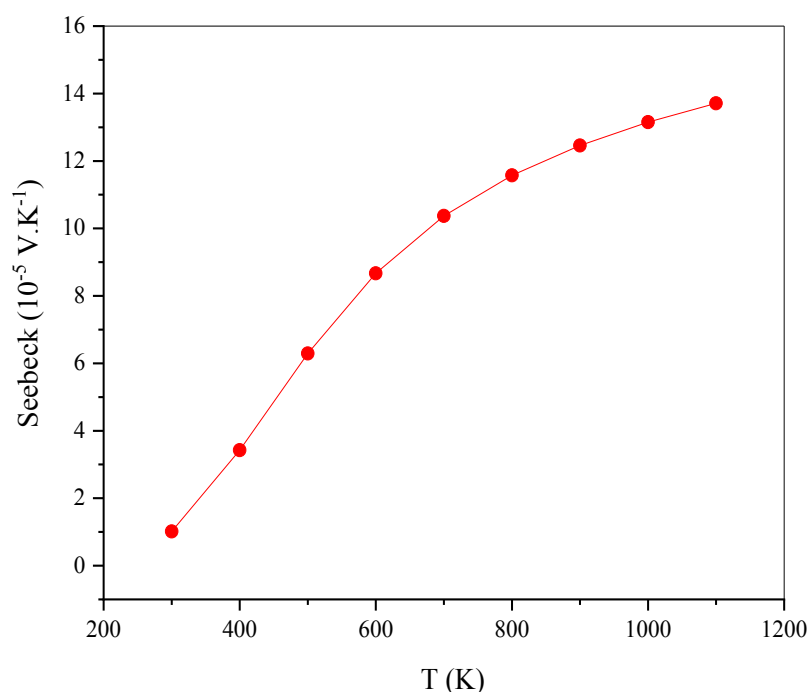


Figure. 4: Variation du coefficient de Seebeck en fonction de la température de PdHfGe.

De plus, le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont à de faibles points d'asymétrie de la zone de Brillouin, qui présentent des propriétés électroniques de performance de notre matériau qui sont responsables de grands coefficients de Seebeck [9]. Cela signifie que le comportement semi-conducteur des composés HH est de bons dispositifs thermoélectriques. La conductivité thermique d'un matériau est une mesure de sa capacité à transférer de l'énergie sous forme de chaleur. Où la conductivité thermique (K) est définie comme: $K = K_e + K_l$, où K_e et K_l sont respectivement les vibrations électriques et du réseau de la conductivité thermique totale K [10]. Dans nos recherches, le code BoltzTraP utilisé néglige la partie vibrations du réseau (K_l) devant la partie électronique (K_e). Selon la loi de Wiedemann - Franz, la conductivité thermique électronique (K_e) est définie comme suit: $K_e = L \sigma T$, (L est le nombre de Lorentz = $2,44 \times 10^{-8} \text{ W}.\Omega. \text{K}^{-2}$ pour les électrons libres). Sur la figure 5, nous présentons la conductivité thermique en fonction de la température.

À la température ambiante, la conductivité thermique est de $1,16 \times 10^{-14}$ W / m.K.s. Selon cette valeur calculée, la conductivité thermique à température ambiante est inférieure à celles correspondant à (T) dépassant 300 K. L'augmentation de la conductivité thermique lorsque $T > 300$ K est liée à la force d'attraction entre les atomes qui provoque les vibrations du réseau et

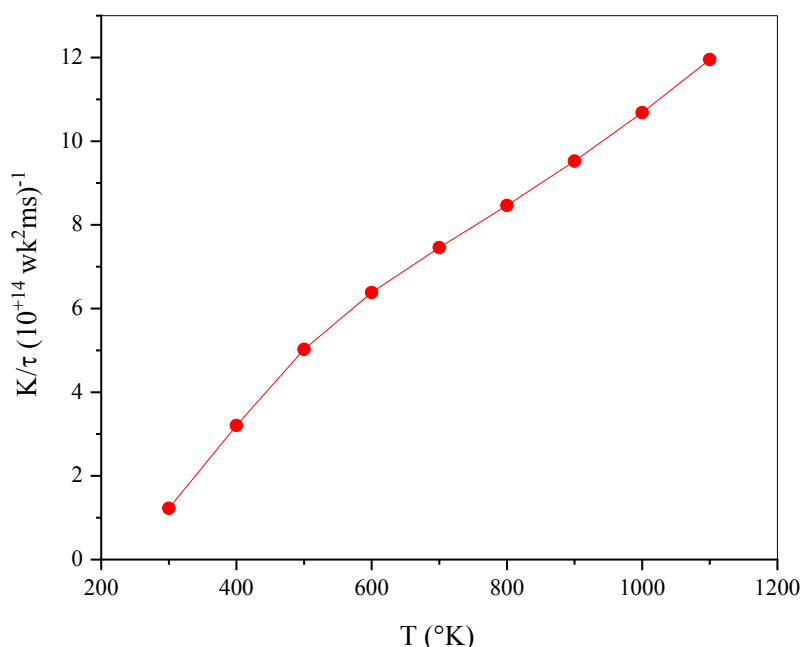


Figure. 5: Variation de la conductivité thermique en fonction de la température de PdHfGe.

augmente la conductivité thermique du matériau. De plus, à la température ambiante, la conductivité thermique inférieure est proportionnelle à la conductivité électrique supérieure trouvée précédemment. Ce résultat est en bon accord avec la loi de Wiedemann – Franz, ce qui signifie qu'un bon matériau thermoélectrique nécessite une faible conductivité thermique, avec une conductivité électrique élevée [11]. L'efficacité de la conversion d'énergie thermoélectrique TE dépend des coefficients de transport des matériaux constitutifs à travers la valeur de mérite $ZT = S^2 \sigma T / K$, où S, σ , K et T sont le coefficient de Seebeck, la conductivité électrique, la conductivité thermique et la température absolue, respectivement [12]. Le matériau défini par un ZT supérieur ou égal à l'unité (1) représente le meilleur élément pour les dispositifs thermoélectriques [13,14]. Dans ce contexte, nous avons représenté l'évolution du ZT en fonction de la température pour PdHfGe sur la figure 6.

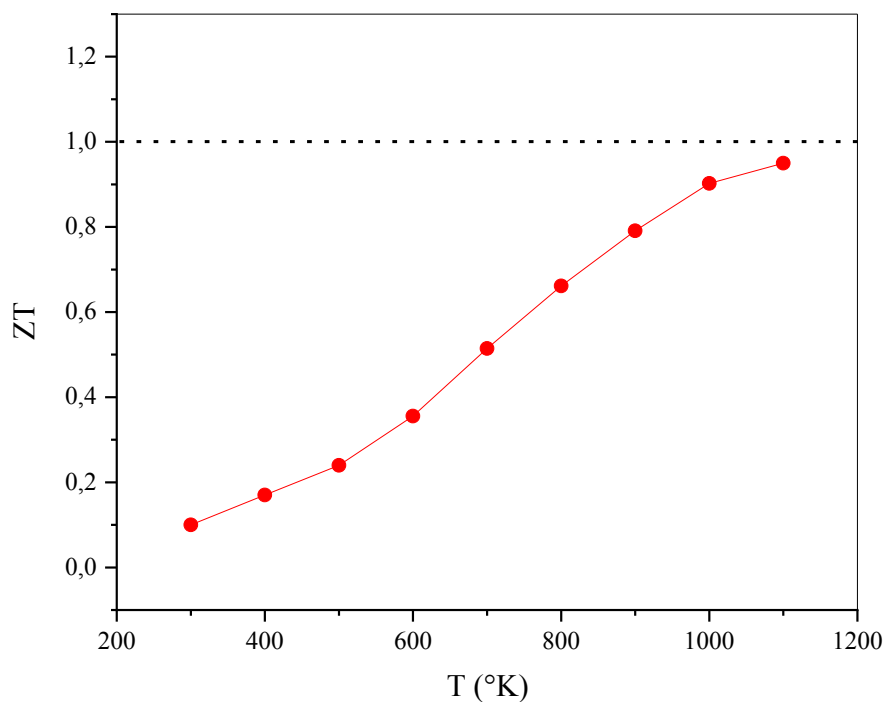


Figure. 5: Variation du figure de mérite en fonction de la température.

Selon un profil quasi-linéaire on observe, avec l'augmentation de la température, une augmentation de ZT pour notre composé, qui concorde avec le comportement du coefficient de Seebeck trouvé précédemment. Nos résultats montrent que la valeur maximale du facteur de mérite est de 0,95 à 1100 K pour PdHfGe. Cette valeur de ZT est nettement supérieure à celles rapportées pour les composés HH tels que ZrNiSn (0,3) [15], ZrNiSn dopé Ta (0,75) [16], TaIrSn (0,61) [17] et TaRhSn (0,55) [18].

Références

- [1] W.Zhigang and R.E.Cohen. Phys.Rev.B 73, 235116 (2006).
- [2] F. D. Murnaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 30, 5390(1944).
- [3] W. Voigt, Lehrburch der Kristallphysik, Teubner, Leipzig (1928).
- [4] A. Reuss and Z. Angew, Math. Mech. 9, 49 (1929).
- [5] D.C. Wallace , Thermodynamics of Crystals, Courier Corporation, New York, (1972).
- [6] R. Hill, Proc. Phys. Soc. London 65, (1952) 350.
- [7] S. F. Pugh, Philos. Mag. 45, (1954) 43.
- [8] I. N. Frantsevich, F. F. Voronov and S. A. Bokuta, In elastic constants and elastic moduli of metals and insulators.
- [9] D. I. Bilc, G. Hautier, D. Waroquiers, G.-M. Rignanese, and P. Ghosez, Phys. Rev. Lett. 114, (2015) 136601.
- [10] G. J. Snyder , E. S. Toberer , Nat. Mater. 7, (2008) 105.
- [11] Salameh Ahmad and S. D. Mahanti, Phys. Rev. B 81, (2010) 165203.
- [12] H.J. Goldsmid, in: D.M. Rowe (Ed.), Conversion Efficiency and Figure-of Merit,CRC Handbook of Thermoelectrics, Boca Raton, (1995).
- [13] Rabina. O, Y.M. Lin, and M.S. Dresselhaus, Anomalously high thermoelectric figure of merit in Bi 1- x Sb x nanowires by carrier pocket alignment. Applied Physics Letters,. 79(1), (2001) 81-83.
- [14] Takeuchi, T., Conditions of electronic structure to obtain large dimensionless figure of merit for developing practical thermoelectric materials. Materials transactions, 50(10), (2009) 2359-2365.
- [15] H. Muta, T. Yamaguchi, K. Kurosaki, S.Yamanaka, ICT 2005. 24th International Conference on IEEE 351, (2005).
- [16] D. P. Rai, A. Shankar, Sandeep, M. P. Ghimire, R. Khenata and R. K. Thapa, RSC Adv., 6, 13358 (2016).
- [17] K. Kaur, R. Kumar, Giant thermoelectric performance of novel TaIrSn Half Heusler compound, Physics Letters A, 381, (2017) 3760-3765.
- [18] K. Kaur, R. Kumar, High temperature thermoelectric performance of p-type TaRhSn half Heusler compound: A computational assessment, Ceramics International, 43, (2017) 15160-15166.

Conclusion générale

Ce mémoire de Master a été réalisé au laboratoire « Technologie et propriétés des solides » (TPS), Département de Génie des procédés, Faculté des Sciences et de la Technologie, Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem.

Les travaux de recherche effectués dans le cadre de ce mémoire portaient sur une étude théorique des propriétés structurales, électroniques, élastiques et thermoélectriques d'un demi-Heusler cubique (PdHfGe), en utilisant la méthode des ondes planes linéairement augmentées avec potentiel complet (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). L'énergie d'échange et corrélation est traitée par l'approximation du gradient généralisé (GGA).

L'énergie totale montre que l'état non magnétique (NM) est la configuration la plus favorable dans la structure cubique de MgAgAs (C1b) pour ce matériau.

En plus, La structure électronique confirme que PdHfGe est un semi-conducteur a une bande interdite (gap) indirecte égale à 0,55 eV. Ensuite, les constantes élastiques C_{ij} obéissent aux conditions de stabilité cubique et indiquent que PdHfGe est ductile et anisotrope. Nous remarquons que le module de volume calculé à partir des constantes élastiques telles que $B = (1/3) (C_{11} + 2 C_{12})$ a presque la même valeur que celui obtenu à partir de l'équation d'état de l'EOS de Birch Murnaghan.

Nous avons également étudié les propriétés thermoélectriques en utilisant le code BoltzTraP dans le programme Wien2k. Nos résultats montrent que le facteur élevé de mérite ZT de 0,95 au-dessus de 1100 K a été atteint pour PdHfGe. Enfin, nous précisons que nos prédictions qui démontrent que PdHfGe a un candidat potentiel pour la génération d'énergie à haute température (HTPG) et conduira à des avancées fondamentales dans la conception de futurs matériaux d'énergie renouvelable pour des applications thermoélectriques sont ouvertes à des vérifications expérimentales.