République Algérienne Démocratique et Populaire

Ministère d'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Ferhat Abbas Sétif

Faculté des sciences

Domaine des sciences de la matière
Filière : Physique
Spécialité : Physique des matériaux

Mémoire de master

Thème :

Etude du premier principe des propriétés structurales, élastique et électronique du Sc_2SnC (phase Max)

Présenté par : Bekhoukh Sara

Jury de soutenance :

Président	:	Amrani Naima	prof	Université Sétif
Encadreur	:	Lebga Noudjoud	MCA	Université Sétif
Examinateur	:	Daoud Khadidja	MCB	Université Sétif

Année Universitaire : 2025-2026

Table des matières

Introduction générale 7

Chapitre 1 : Rappel théorique sur les méthodes de calcul Ab-initio 7

1.1 Introduction 4

1.2 L'équation de Schrödinger 4

1.3 Approximation de Born-Oppenheimer 5

1.4 Approximation de Hartre 7

1.5 Approximation de Hartree-Fock 8

1.6 La théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) 10

1.6.1 Les théorèmes de Hohenberg et Kohn 10

1.6.2 Les équations de Kohn-Sham 13

1.6.3 La fonctionnelle d'échange-corrélation 15

1.6.3.1 L'approximation de la densité Locale (LDA) 15

1.6.3.2 Approximation de Gradient généralisé (GGA) 16

1.7 La méthode de pseudo potentiels 17

1.7.1 Approximation du cœur gelé 18

1.7.2 Construction des pseudos potentiels 18

1.8 Structure électroniques et périodicité 20

1.8.1 Théorème de Block 20

1.8.2 La base d'onde plane 21

1.8.3 Echantillonnage de la zone de Brillouin 22

Chapitre 2 : Propriétés structurales, élastiques et électroniques 23

2.1 Introduction 24

2.2 Les propriétés structurales 24

2.2.1 Structure cristalline de Sc_2SnC 24

2.3 propriétés élastique 26

2.3.1 Les Tenseurs 26

2.3.1.1 Le tenseur de déformation 26

2.3.1.2 Le tenseur des contraintes 27

2.3.2 La loi de Hook 28

2.3.3 modules de young E 31

2.3.4 Coefficient de Poisson 31
2.3.5 Module de compression B et module de cisaillement G 32
2.3.6 Anisotropie 33
2.3.7 Vitesses de propagation des ondes élastiques, température de Debye, conductivité thermique et température de fusion 34
2.3.8 Critères de stabilité de mécanique 35
2.4 Propriétés Electroniques 36
2.4.1 Structure de bandes électroniques 36
2.3.2 Densité d'états électroniques (DOS) 37
Chapitre 3 : Résultat et discussion 38
3.1 Introduction 39
3.2 Généralités sur les phases MAX 39
3.2.1 Définition des phases MAX 39
3.2.2 Historique des phases MAX 40
3.2.3 Propriétés générales des phases MAX 41
3.2.4 Applications des phases MAX 42
3.2.5 Synthèse et présentation du composé Sc_2SnC 42
3.3 Présentation du code CASTEP 43
3.4 Méthode de calcul 43
3.5 convergences de l'énergie de coupure et du K-point 44
3.5.1 Convergence de l'énergie de coupure 44
3.5.2 Convergence du K-point 45
3.6 Les propriétés structurels 46
3.7 Les propriétés élastiques 46
3.7.1 Les constants élastiques 47
3.7.2 Les module d'élasticité 47
3.7.3 Anisotropie 49
3.7.4 températures de Debye 49
3.8 Propriétés électroniques 50
3.8.1 Structure de bandes d'énergie 50
3.8.2 Densités d'états électroniques (DOS) 51
Conclusion générale 56

Résumé

Une investigation a été traitée en utilisant la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) dans l'approximation du gradient généralisé (GGA-PBE), telle qu'implémentée dans le code CASTEP. Cette étude concerne les propriétés structurales, élastiques et électroniques de la phase MAX Sc_2SnC qui fait l'objet de ce travail. Les paramètres de maille calculés (a = 3,352 Å, c = 14,790 Å) sont en bon accord avec les valeurs expérimentales. Le composé Sc_2SnC montre un caractère métallique avec une densité d'états non nulle au niveau de Fermi. Les constantes élastiques (C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}) et les modules de compression (B = 101,65) et de cisaillement (G = 73,05) montrent que le composé Sc_2SnC est mécaniquement stable et fragile (B/G = 1,39). Les indices d'anisotropie indiquent un comportement quasi-isotrope.

Abstract

An investigation was carried out using density functional theory (DFT) within the generalized gradient approximation (GGA-PBE), as implemented in the CASTEP code. This study concerns the structural, elastic and electronic properties of the Sc_2SnC MAX phase which is the object of this work. The calculated lattice parameters (a = 3.352 Å, c = 14.790 Å) are in good agreement with experimental values. The Sc_2SnC compound shows a metallic character with a non-zero density of states at the Fermi level. The elastic constants (C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{33}, C_{44}bulk modulus (B = 101.65) and shear modulus (G = 73.05) show that Sc_2SnC is mechanically stable and brittle (B/G = 1.39). The anisotropic indexes indicate a quasi-isotropic behavior.

ملخص

أُنجزت هذه الدراسة باستعمال نظرية دالة الكثافة ضمن إطار تقريب التدرج المعمم، بهدف دراسة الخصائص البنيوية والمرنة والإلكترونية لطور ماكس موضوع هذا العمل.

أظهرت النتائج أن معاملات الشبكة المحسوبة متوافقة بشكل جيد مع القيم التجريبية، مما يؤكد دقة الحسابات المنجزة .

كما بيّنت الدراسة أن المركب المدروس يمتلك سلوكًا معدنيًا، حيث تبقى كثافة الحالات الإلكترونية غير منعدمة عند مستوى فيرمي .

.وأوضحت الثوابت المرنة ومعامل الانضغاط ومعامل القص أن المركب مستقر ميكانيكيًا ويتصف بالهشاشة .

وتشير مؤشرات اللاتجانس إلى أن المركب يُظهر سلوكًا شبه متساوي الخواص.