

Approche ab-initio du transport électronique

Responsable : Laurent Chaput

Laboratoire : Institut Jean Lamour

E-mail : laurent.chaput@univ-lorraine.fr

Durée du module : 1h30

Objectifs

Dans ce module on expliquera comment les coefficients du transport électronique peuvent être calculés à partir des méthodes ab-initio.

Pour cela nous rappellerons quelques éléments de thermodynamique hors d'équilibre afin d'introduire les coefficients de Onsager. L'équation de Boltzmann sera ensuite utilisée pour en obtenir une expression microscopique.

Nous poursuivrons par la théorie de la fonctionnelle de la densité qui permet, en partie, de calculer les quantités précédentes.

Pour finir nous présenterons divers exemples de matériaux thermoélectriques étudiés par ce formalisme, et les différents codes de calcul utilisés pour cela.

Contenu - programme

- 1) Réponse linéaire et thermodynamique hors d'équilibre
- 2) Equation de Boltzmann et expression microscopique des coefficients de Onsager
- 3) DFT : théorie, méthode et review de codes de calcul
- 4) Applications à quelques exemples.