



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Licence

Filière : physique
Option : physique des matériaux

THÈME :

THEORIE DE LA FONCTIONNELLE
DE LA DENSITE

Préparé par :
-Laoubi Messaouda
-Meguellati Amal
-Belaref Hafida

Année Universitaire 2015

Résumé :

La théorie de la fonctionnelle de la densité (**DFT**, sigle pour Density Functional theory) est une méthode de calcul quantique permettant l'étude de la structure électronique, en principe de manière exacte. Il s'agit de l'une des méthodes les plus utilisées dans les calculs quantiques aussi bien en physique de la matière condensée qu'en chimie quantique en raison de son application possible à des systèmes de tailles très variées, allant de quelques atomes à plusieurs centaines. Les méthodes traditionnelles dans les théories de la structure électronique de la matière, en particulier la théorie Hartree-Fock et les méthodes dérivées de ce formalisme, se fondent sur une fonction d'onde multiélectronique. L'objectif principal de la théorie de la fonctionnelle de la densité est de remplacer la fonction d'onde multiélectronique par la densité électronique en tant que quantité de base pour les calculs.

Mots clés :

DFT ; théorie de la fonctionnelle de la densité, méthode abinitio, théorie Hartree-Fock

Abstract

The density functional theory (**DFT**) is a method of quantum computation to study the electronic structure, in principle exactly. This is one of the most used in quantum calculations both in the physics of condensed matter and quantum chemistry because of its possible application to systems of very different sizes, ranging from a few atoms to several hundreds. Traditional methods in the theory of electronic structure of the material, especially the Hartree-Fock and the derivatives of these formalism methods are based on a multielectronic wave function. The main density functional theory objective is to replace the multielectronic wave function by the electron density as a basis for the amount of calculations.

Key words:

DFT; density functional theory, method Abinitio, theory Hartree-Fock