

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université de 8 Mai 1945-Guelma

**Faculté des Mathématiques et de l'Informatique et des Sciences de
la Matière Département des Sciences de la Matière**

Mémoire de fin d'études

Master



Spécialité : Physique de la Matière Condensée

Présenté par

Zitouni hounaida

**Etude des propriétés structurales, électroniques et élastiques des
alliages demi Heusler**

Sous la Direction de :
Dr. Gous Mohamed Hadi

Juin 2022

Dédicace

Je dédie ce travail aux personnes les plus chères dans ma vie : ma mère et mon père .J'espère que vous soyez fières de moi aujourd'hui.

A mon frère et à mes sœurs.

A toute ma famille et à tous ceux qui m'ont encouragé.

A mon encadreur.

A mes amies son exception.

Et à tous ceux qui ont donné une Contribution à la réalisation de ce Mémoire.

Hounaida

Remerciements

Tout d'abord, je remercie ALLAH, le Tout-puissant, de m'avoir donné le courage, la volonté et la patience pour terminer ce présent travail.

Je tiens à remercier, très sincèrement, mon encadreur le docteur Gous Mohamed Hadi, j'ai eu l'honneur et la chance de bénéficier de ses connaissances, de ses précieux conseils et de son suivi tout au long de ce travail.

Je remercie pareillement l'ensemble des membres du jury d'avoir accepté de juger ce travail.

Ma reconnaissance plus sincères s'adressent à tous les enseignants et le Personnel du département de physique.

Enfin, ces remerciements ne seraient pas complets sans mentionner toute ma famille et mes amis qui, leur encouragements et leurs assistance morale, qui m'ont permis de réaliser ce mémoire dans de bonnes conditions.
Merci à tous!

Hounaida

Résumé :

Le but de ce travail est de vérifier les propriétés structurales, élastiques et électroniques des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs avec la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées avec potentielle total (FP-LAPW) basée sur la Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) et implémentée dans le code WIEN2K. Pour les propriétés structurales et élastiques nous avons utilisé l'approximation WC-GGA tandis que pour les propriétés électroniques nous avons utilisé l'approche TB-mBJ en plus de WC-GGA. Nos résultats des propriétés structurales et électroniques sont en bon accord avec d'autres résultats théoriques disponibles dans la littérature. Nous avons trouvé que ces alliages demi Heusler sont des semi-conducteurs à gap direct ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) de l'ordre 2 eV, mécaniquement stable, anisotrope et fragile. L'alliage demi Heusler NaMgN est le moins compressible et l'alliage demi Heusler NaMgAs est le plus compressible. Les valeurs des gaps de NaMgN et NaMgP sont proches et supérieures à celle de NaMgAs.

Mots-clés: FP-LAPW ; Semi-conducteurs ; Demi Heusler.

ABSTRACT :

The aim of this work is to verify the structural, elastic and electronic properties of the half-Heusler alloys NaMgN, NaMgP and NaMgAs with the Total Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method based on the Density Functional Theory (DFT) and implemented in the WIEN2K code. For the structural and elastic properties we used the WC-GGA approximation while for the electronic properties we used the TB-mBJ approach in addition to WC-GGA. Our results for the structural and electronic properties are in good agreement with other theoretical results available in the literature. We found that these half-Heusler alloys are direct-gap semiconductors ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) of order 2 eV, mechanically stable, anisotropic and brittle. The half-Heusler alloy NaMgN is the least compressible and the half-Heusler alloy NaMgAs is the most compressible. The gap values of NaMgN and NaMgP are close and higher than that of NaMgAs.

Key words: FP-LAPW ; Semi-conductors ; half Heusler.

ملخص

الهدف من هذا العمل هو التحقق من الخصائص الهيكلية والمرنة والإلكترونية لسبائك نصف هوسلر NaMgN و NaMgP و NaMgAs باستخدام طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً (FB-LAPW) بناءً على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، المطبقة في برنامج WIEN2K بالنسبة للخصائص الهيكلية والمرنة، استخدمنا تقريب WC-GGA بينما بالنسبة للخصائص الإلكترونية، استخدمنا نهج TB-mbj بالإضافة إلى WC-GGA. توافق نتائجنا الخاصة بالخصائص الهيكلية والإلكترونية بشكل جيد مع النتائج النظرية الأخرى المتوفرة في الأدبيات. وجدنا أن نصف سبائك هوسلر هي عبارة عن فجوة مباشرة من أشباه الموصلات ($\Gamma \rightarrow \Gamma$) من الرتبة 2 eV، مستقرة ميكانيكياً، متباينة الخواص، وهشة. سبيكة نصف هوسلر NaMgN هي الأقل انضغاطاً، بينما تعتبر سبيكة نصف هوسلر NaMgAs الأكثر انضغاطاً. قيم فجوات NaMgP و NaMgN قريبة وأعلى من قيم NaMgAs.

SOMMAIRE

Introduction Générale	1
Références	3
Chapitre I : Méthodes de calcul.....	6
I. 1. Introduction	7
I. 2. Equation de Schrödinger	7
I. 3. Approximation de Born-Oppenheimer.....	8
I. 4. Approximation de Hartree-Fock	8
I. 5. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	10
I. 5. 1. Théorème de Hohenberg et Kohn.....	10
I. 5. 2. Equations de Kohn-Sham	11
I. 5. 3. Fonctionnelle d'échange-corrélation	15
I. 5. 3. 1. Approximation de la densité locale (LDA).....	15
I. 5. 3. 2. Approximation du gradient généralisé (GGA)	16
I. 5. 3. 3. Approche Mbj	16
I. 6. Méthode des ondes planes augmentées APW	17
I. 7. Inconvénients de la méthode APW.....	20
I. 8. Méthode LAPW	20
I. 9. Méthode LAPW+LO.....	21
I. 10. Méthode APW + lo	21
I. 11. Code Wien2k.....	22
Références	25
Chapitre II : RESULTATS ET DISCUSSIONS.....	27
II.1.INTRODUCTION :	28
II.2 .Détails de calcul	28
II.3.Propriétés structurales	29
II.4.Propriétés élastiques.....	33
II.5.Propriétés électroniques	38
II.5.1 .Structures de bandes.....	38
II.5.2 .La Densité d'états électronique	41
Références	49
Conclusion général.....	51

Liste des figures

Figure I.1	Organigramme du cycle auto-cohérent	14
Figure I.2	Division de l'espace en deux régions : région des sphères MT et région interstitielle	18
Figure I.3	Organigramme des programmes du code Wien2k	24
Figure II.1	Les structures cristallines des alliages demi-Heusler NaMgX (X=P, N et As).	29
Figure II.2	Variation de l'énergie totale en fonction du volume de NaMgP.	30
Figure II.3	Variation d'énergie totale en fonction du volume de NaMgAs.	31
Figure II.4	Variation d'énergie totale en fonction du volume de NaMgN	31
Figure II.5	Structures de bandes d'énergies de NaMgP obtenu par TB-Mbj.	39
Figure II.6	Structures de bandes d'énergies de NaMgN obtenu par TB-Mbj.	39
Figure II.7	Structures de bandes d'énergies de NaMgAs obtenu par TB-Mbj.	40
Figure II.8	Densité d'états totale de NaMgN	42
Figure II.9	Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et N	42
Figure II.10	Densité d'états partiel de chaque atome Na, Mg et N.	43
Figure II.11	Densité d'états totale de NaMgP	44
Figure II.12	Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et N.	44
Figure II.13	Densité d'états partiel de chaque atome Na, Mg et P.	45
Figure II.14	Densité d'états totale de NaMgAs	46
Figure II.15	Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et As.	46
Figure II.16	Densité d'états partiel de chaque atome Na, Mg et As.	47

Liste des Tableaux

Tableau II.1	Valeurs du paramètre de réseau (a), module de compressibilité (B) et sa dérivé première (B') des demi Heusler NaMgN, NaMgAs et NaMgP	33
Tableau II.2	Valeurs calculées de C_{11} , C_{12} et C_{44} (en GPa) des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs	34
Tableau II.3	Valeurs calculées du facteur d'anisotropie A , du module de cisaillement G , du module de Young E , du coefficient de poisson ν , du module de compressibilité B , et Le rapport de Pugh (B/G)	37
Tableau II.4	Valeurs calculées des gaps des demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs	41

Introduction générale

En 1903, l'allemand Fritz Heusler a étudié les propriétés d'une série des alliages Cu_2MnX ($X = \text{Al}, \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}, \text{Bi}$), il trouve que le magnétisme de ces alliages change évidemment avec le changement de la température et les éléments chimiques qui constituent l'alliage [1]. Ces nouveaux alliages portent le nom alliages d'Heusler.

La structure cristalline de ces alliages n'a pas été comprise en détail en raison de la limitation des techniques et des instruments de la détermination des structures cristallines des matériaux à l'époque. En 1934, Bradley et Rodgers [2] trouvent que l'alliage d'Heusler Cu_2MnAl est ferromagnétique et se cristallise à température ambiante dans une structure cubique de type $L2_1$.

Maintenant les alliages d'Heusler sont très nombreux et on distingue les alliages d'Heusler, Quaternaire Heusler et Demi Heusler, dont leurs formules chimiques sont X_2YZ , $X'YZ$ et XYZ , respectivement.

Les structures cristallines des alliages d'Heusler, Quaternaire Heusler et Demi Heusler sont bien définies, dont les alliages d'Heusler qui ont la formule chimique X_2YZ et qui cristallisent dans la structure $L2_1$ avec le groupe d'espace $Fm-3m$ et Cu_2MnAl comme prototype, les atomes X , Y et Z occupent les positions de Wyckoff $8c$ ($1/4, 1/4, 1/4$), $(0, 0, 0)$ et $4b$ ($1/2, 1/2, 1/2$) respectivement. L'alliage Quaternaire Heusler apparait quand l'un des deux sites de X est occupé par X' , avec le groupe d'espace $F-43m$ et LiMgPdSb comme prototype. Maintenant si le site X' est vacant nous obtenons l'alliage demi Heusler XYZ dans la structure $C1_b$ avec le groupe d'espace $F-43m$ et MgAgAs comme prototype [3].

Les alliages demi-Heusler de formules chimiques XYZ , ont plusieurs domaines d'applications puisqu'ils présentent de nombreuses propriétés physiques intéressantes, on trouve par exemple les alliages demi Heusler qui sont demi-métalliques ferromagnétiques avec une haute température de Curie, comme CoMnSb , NiMnSb , PdMnSb et PtMnSb , ces alliages demie Heusler sont connus expérimentalement pour être des ferromagnétiques avec des températures de Curie élevées comprises entre 500 K et 700 K [4] donc ils sont très utiles dans le domaine de la spintronique.

D'autre part les alliages demi Heusler sont parmi les principaux matériaux candidats, pour la production d'énergie thermoélectrique à grande échelle, puisque à titre d'exemple les

Introduction générale

alliages demi-Heusler à base de FeNbSb de type p ont atteint un facteur de mérite (ZT) assez élevé de 1,5 à 1200 K [5], [6], tandis que le ZT dans le XNiSn de type n ($X = \text{Ti}, \text{Zr}$ et Hf) a atteint un maximum de 1,0 à 820 K et le XCoSb de type p ($X = \text{Ti}, \text{Zr}$ et Hf) a atteint le même ZT à 1073 K [7], [8], [9], [10].

En général, les alliages demi Heusler ont suscité un grand intérêt en raison de leurs propriétés électriques et mécaniques de haute qualité, de leur point de fusion élevé et de leur permanence thermique à haute température [11], qui en font des candidats potentiels pour les semi-conducteurs, les supraconducteurs, les diodes laser, les boucliers contre les rayonnements UV, cellule solaire, fabrication de dispositif acoustique à haute température, transfert de chaleur et d'autres applications thermoélectriques [12], [13], [14], [15], [16], [17], [18], [19].

Références

- [1] Heusler, F. (1903). *Verhandlungen Dtsch. Phys. Ges*, 5, 219.
- [2] Bradley, A. J., & Rodgers, J. W. (1934). The crystal structure of the Heusler alloys. *Proceedings of the royal society of london. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 144(852), 340-359.
- [3] Li, X. Z., Zhang, W. Y., Valloppilly, S., & Sellmyer, D. J. (2019). New Heusler compounds in Ni-Mn-In and Ni-Mn-Sn alloys. *Scientific reports*, 9(1), 1-7.
- [4] P.J. Webster, K.R.A. Ziebeck, in *Alloys and Compounds of d-Elements with Main Group Elements. Part 2. Landolt-Börnstein, New Series, Group III, vol 19c*, ed. by H.R.J. Wijn (Springer, Berlin 1988) pp. 75–184
- [5] Fu, C., Zhu, T., Liu, Y., Xie, H., & Zhao, X. (2015). Band engineering of high performance p-type FeNbSb based half-Heusler thermoelectric materials for figure of merit $zT > 1$. *Energy & Environmental Science*, 8(1), 216-220.
- [6] He, R., Kraemer, D., Mao, J., Zeng, L., Jie, Q., Lan, Y., ... & Ren, Z. (2016). Achieving high power factor and output power density in p-type half-Heuslers Nb_{1-x}Ti_xFeSb. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 113(48), 13576-13581.
- [7] Chen, S., Lukas, K. C., Liu, W., Opeil, C. P., Chen, G., & Ren, Z. (2013). Effect of Hf concentration on thermoelectric properties of nanostructured n-type half-Heusler materials Hf_xZr_{1-x}NiSn_{0.99}Sb_{0.01}. *Advanced Energy Materials*, 3(9), 1210-1214.
- [8] Chai, Y. W., Oniki, T., & Kimura, Y. (2015). Microstructure and thermoelectric properties of a ZrNi_{1.1}Sn half-Heusler alloy. *Acta Materialia*, 85, 290-300.
- [9] Yan, X., Liu, W., Chen, S., Wang, H., Zhang, Q., Chen, G., & Ren, Z. (2013). Thermoelectric Property Study of Nanostructured p-Type Half-Heuslers (Hf, Zr, Ti) CoSb_{0.8}Sn_{0.2}. *Advanced Energy Materials*, 3(9), 1195-1200.

- [10] Rausch, E., Balke, B., Ouardi, S., & Felser, C. (2014). Enhanced thermoelectric performance in the p-type half-Heusler (Ti/Zr/Hf) $\text{CoSb}_{0.8}\text{Sn}_{0.2}$ system via phase separation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16(46), 25258-25262.
- [11] Fu, C., Bai, S., Liu, Y., Tang, Y., Chen, L., Zhao, X., & Zhu, T. (2015). Realizing high figure of merit in heavy-band p-type half-Heusler thermoelectric materials. *Nature communications*, 6(1), 1-7.
- [12] Ahmad, R., & Mehmood, N. (2018). A density functional theory investigations of half-Heusler compounds RhVZ ($Z = \text{P, As, Sb}$). *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 31(5), 1577-1586.
- [13] Shrivastava, D., & Sanyal, S. P. (2019). Theoretical study of structural, electronic, phonon and thermoelectric properties of KScX ($X = \text{Sn and Pb}$) and KYX ($X = \text{Si and Ge}$) half-Heusler compounds with 8 valence electrons count. *Journal of Alloys and Compounds*, 784, 319-329.
- [14] Shah, S. H., Khan, S. H., Laref, A., & Murtaza, G. (2018). Optoelectronic and transport properties of LiBZ ($B = \text{Al, In, Ga}$ and $Z = \text{Si, Ge, Sn}$) semiconductors. *Journal of Solid State Chemistry*, 258, 800-808.
- [15] Anissa, B., Radouan, D., & Benaouda, B. (2019). Optical and thermoelectric response of RhTiSb half-Heusler. *International Journal of Modern Physics B*, 33(22), 1950247.
- [16] Vikram, Sahni, B., Barman, C. K., & Alam, A. (2019). Accelerated discovery of new 8-electron half-Heusler compounds as promising energy and topological quantum materials. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(12), 7074-7080.
- [17] Afaq, A., Rizwan, M., & Bakar, A. (2019). Computational investigations of XMgGa ($X = \text{Li, Na}$) half Heusler compounds for thermo-elastic and vibrational properties. *Physica B: Condensed Matter*, 554, 102-106.
- [18] Ju, S., & Shiomi, J. (2019). Materials informatics for heat transfer: recent progresses and perspectives. *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, 23(2), 157-172.

[19] Hoat, D. M. (2019). Electronic structure and thermoelectric properties of Ta-based half-Heusler compounds with 18 valence electrons. *Computational Materials Science*, 159, 470-477.

Chapitre I : Méthodes de calcul

Chapitre I *Méthodes de calcul*

I. 1. Introduction

L'étude théorique des propriétés des matériaux solides contenant plusieurs électrons et noyaux en interactions se fait par la résolution de l'équation de Schrödinger pour cela nous allons donc dans ce chapitre déterminer les différentes approximations nécessaires pour résoudre cette équation. La première approximation utilisée est celle de Born et Oppenheimer, puis celle de Hartree-Fock Ensuite nous faisons intervenir le concept de la fonctionnelle de la densité électronique (*DFT*) qui basé sur les deux théorèmes d'Hohenberg et Kohn (1964) et l'approche de Kohn et Sham (1965). Dans la suite, nous présentons le potentiel d'échange et de corrélation traité par les différentes approximations (LDA, GGA, TBmjb) aussi nous rappelons les principes de base de la méthode utilisée qui est : la méthode des ondes planes augmentées avec linéarisation et potentiel total (FP-LAPW) et enfin il y aura une description en détail de code Wien2k

I. 2. Equation de Schrödinger

Théoriquement l'étude des propriétés physiques d'un matériau solide constitue par une association de particules légères (électrons) et lourds (noyaux) est basée sur la mécanique quantique par la résolution de l'équation de Schrödinger, mentionnée ci-dessous (eq I. 1)

$$\mathbf{H} \Psi = \mathbf{E} \Psi \quad \text{I.1}$$

Dans cette équation, \mathbf{E} est l'énergie totale du système, \mathbf{H} est l'Hamiltonien et Ψ est la fonction d'onde. L'Hamiltonien total du système comme le montre l'équation I.2, contient plusieurs termes : les énergies cinétiques des électrons T_e et des noyaux T_n et les énergies potentielles représentant les interactions coulombiennes répulsives entre les électrons V_{ee} , entre les noyaux V_{nn} et attractives entre les électrons et les noyaux V_{en} .

$$\mathbf{H}_{tot} = T_e + T_n + V_{ee} + V_{nn} + V_{en} \quad \text{I.2}$$

Du fait du très grand nombre de particules et d'interactions mises en jeu, l'équation de Schrödinger reste très complexe et impossible à résoudre sauf pour certains systèmes très simples, comme les systèmes hydrogénéoides. En raison de cette difficulté, des approximations ont été développées, dont la première a été créée en 1927 par Max Born et Julius Robert Oppenheimer [1].

I. 3. Approximation de Born-Oppenheimer

Cette approximation se base sur le fait que la masse des noyaux est beaucoup plus supérieure à celle des électrons dans cette condition le mouvement de noyaux par rapport aux électrons peut être négligée c'est-à-dire les noyaux seront considérés comme immobile alors leurs énergie cinétique est nul et l'énergie potentielle due à la répulsion entre noyaux devient une constante. Autrement dit, les mouvements nucléaires et électroniques sont découplés. Ce concept a permis d'établir un Hamiltonien électronique $H_{\hat{e}}$ (éq : I. 3) et une fonction d'onde électronique $\varphi_{\hat{e}}$.

$$H_{\hat{e}} = T_{\hat{e}} + V_{\hat{e}\hat{e}} + V_{\hat{e}n} \quad I.3$$

Cette approximation ne peut nous permettre de trouver une solution exacte de l'équation de Schrödinger à cause de la complexité des interactions électron-électron, pour cela d'autres approximations sont introduites comme la méthode de Hartree Fock

I. 4. Approximation de Hartree-Fock

L'approximation proposée par Hartree [2] consiste à réduire le problème de N électrons en interaction et le simplifie pour N problèmes à 1 électron en considérant que chaque électron se déplace indépendamment dans le champ moyen créé par les autres électrons et les noyaux ce qui permet à réécrire la fonction d'onde électronique de électrons sous forme d'un produit de fonctions d'ondes mono-électroniques (éq : I. 4)

$$\varphi_{\hat{e}} = \prod_{i=1}^N \phi_i = \phi_1 \cdot \phi_2 \cdot \phi_3 \dots \phi_N \quad I.4$$

L'Hamiltonien électronique $H_{\hat{e}}$ devient la somme des Hamiltoniens mono-électroniques H_i (éq : I. 5) :

$$H_{\hat{e}} = \sum_{i=1}^N H_i = H_1 + H_2 + H_3 + \dots + H_N \quad I.5$$

La fonction d'onde de Hartree ne tient pas compte le principe d'exclusion de Pauli car elle n'est pas antisymétrique par rapport à l'échange des deux électrons, ceci a été corrigé par FOCK[3][4] qui a montré que la fonction d'onde du système est maintenant représentée par un seul déterminant de Slater construit à partir des fonctions d'ondes mono-électronique, la fonction d'onde électronique devient alors :

$$\varphi_{\hat{e}} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{bmatrix} \phi_1(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_1(\mathbf{r}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_n(\mathbf{r}_1) & \dots & \phi_n(\mathbf{r}_n) \end{bmatrix} \quad I.6$$

Où :

$\frac{1}{\sqrt{N!}}$: La constante de normalisation.

Grace à Fock, la fonction d'onde électronique devient antisymétrique. Les équations de Hartree-Fock

$$H_i = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{noyaux} + V_H + V_x \quad I.7$$

Où : le premier terme est l'énergie cinétique, le second terme (V_{noyaux}) représente le potentiel généré par les noyaux, le troisième terme (V_H) est le potentiel de Hartree, potentiel généré par tous les autres électrons, tandis que le quatrième terme (V_x) est le potentiel d'échange.

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

Au début des années 1920, Lewellyn Thomas et Enrico Fermi [5] [6] étaient les premiers à donner une approche sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) ont proposé un modèle basé sur l'utilisation de la densité électronique qui ne dépend plus que 3 variable au lieu de la fonction d'onde qui dépend de $3N$ variable, si en considère le spin la densité électronique ne dépend que de 6 variables tandis que la fonction d'onde dépend de $6N$ variables

Les fondements de la DFT ont été réellement établies avec la publication de deux article de Hohenberg-Kohn et Kohn-Sham en 1960[7][8] qui sont la base de cette théorie elle permet reformuler le problème quantique à N corps en un problème monocorps avec comme variable la densité électronique. Dans cette partie, nous allons décrire les fondements essentiels de cette théorie.

I. 5. 1. Théorème de Hohenberg et Kohn

Les fondements de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) sont basés sur les deux théorèmes Hohenberg et Kohn :

a. Premier Théorème

L'énergie totale de l'état fondamental E pour un système à plusieurs électrons en interaction soumis à un potentiel externe (V_{ext}), est une fonctionnelle unique de la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$:

$$E = E[\rho] \quad \mathbf{I.8}$$

Notons ici que, pour un système polarisé en spin, E devient une fonctionnelle des deux orientations de spin :

$$E[\rho] = E[\rho^\uparrow, \rho^\downarrow] \quad \mathbf{I.9}$$

b. Deuxième théorème

Le deuxième théorème énonce que la valeur minimale de cette fonctionnelle c'est l'énergie de l'état fondamental, et la densité qui lui est associée cette énergie correspond à la densité exacte de l'état fondamental.

La fonctionnelle d'énergie totale est donnée par :

$$E[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int \rho(\mathbf{r}) V_{ext}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad I.10$$

Où $F_{HK}[\rho]$ est la fonctionnelle universelle de Hohenberg-Kohn, elle contient l'énergie cinétique T et l'énergie potentielle due à l'interaction électron-électron E_{ee} :

$$F_{HK}[\rho] = T[\rho] + E_{ee}[\rho] \quad I.11$$

Il ne reste que la connaissance des expressions des deux termes de la fonctionnelle universelle de Hohenberg et Kohn.

I. 5. 2. Equations de Kohn-Sham

Kohn et Sham introduit la notion qu'il est possible de remplacer le système réel d'électrons interagissant dans un potentiel externe par un système fictif à N électrons sans interaction de sorte que la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ des deux systèmes est la même.

La fonctionnelle $E(\rho)$ a la forme :

$$E(\rho) = T_S(\rho) + E_H(\rho) + E_{xc}(\rho) + \int \rho(\mathbf{r}) V_{ext}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad I.12$$

Avec :

$T_S(\rho)$: L'énergie cinétique du système d'électrons non-interagissant.

$E_H(\rho)$: Terme de Hartree, l'interaction Coulombienne classique.

$E_{xc}(\rho)$: L'énergie d'échange et de corrélation, donnée par :

$$E_{xc}(\rho) = [T(\rho) - T_S(\rho)] + [E_{\text{éé}}(\rho) - E_H(\rho)] \quad I.13$$

A ce stade, Kohn et Sham fournissent trois équations :

➤ La première est l'équation effective d'une particule :

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right\} \varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}) \quad I.14$$

➤ La seconde équation représente le potentiel effectif :

$$V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + V_H(\mathbf{r}) + V_{xc}(\mathbf{r}) \quad I.15$$

Avec :

$V_{xc}(\mathbf{r})$: Potentiel d'échange-corrélation.

➤ La troisième équation représente la densité électronique :

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\mathbf{r})|^2 \quad I.16$$

Maintenant, il ne reste que la connaissance de l'énergie $E_{xc}[\rho]$ et le potentiel $V_{xc}[\rho]$ d'échange et de corrélation car si ces deux termes sont connus, la résolution des

équations de Kohn et Sham (I. 15, I. 16 et I. 17) devient possible, elle se fait d'une manière itérative, commençant par une densité électronique initiale notée (ρ_i^{in}), nous pouvons obtenir le potentiel ($V_{\text{eff}}(r)$), On résout l'équation de Kohn-Sham I. 16, puis on calcule une nouvelle densité notée (ρ_i^{out}), si cette dernière se diffère de (ρ_i^{in}) les deux densités (ρ_i^{in} et ρ_i^{out}) sont mixer et une nouvelle densité (ρ_{i+1}^{in}) obtenue comme suit: [9]

$$\rho_{i+1}^{\text{in}} = \alpha \rho_i^{\text{out}} + (1 - \alpha) \rho_i^{\text{in}} \quad \text{I. 17}$$

Dont, (i) représente l' (i^{ème}) itération, tandis que (α) est un paramètre de mixage. Ceci est répété jusqu'à la convergence, comme il est représenté sur la Figure-I.1.

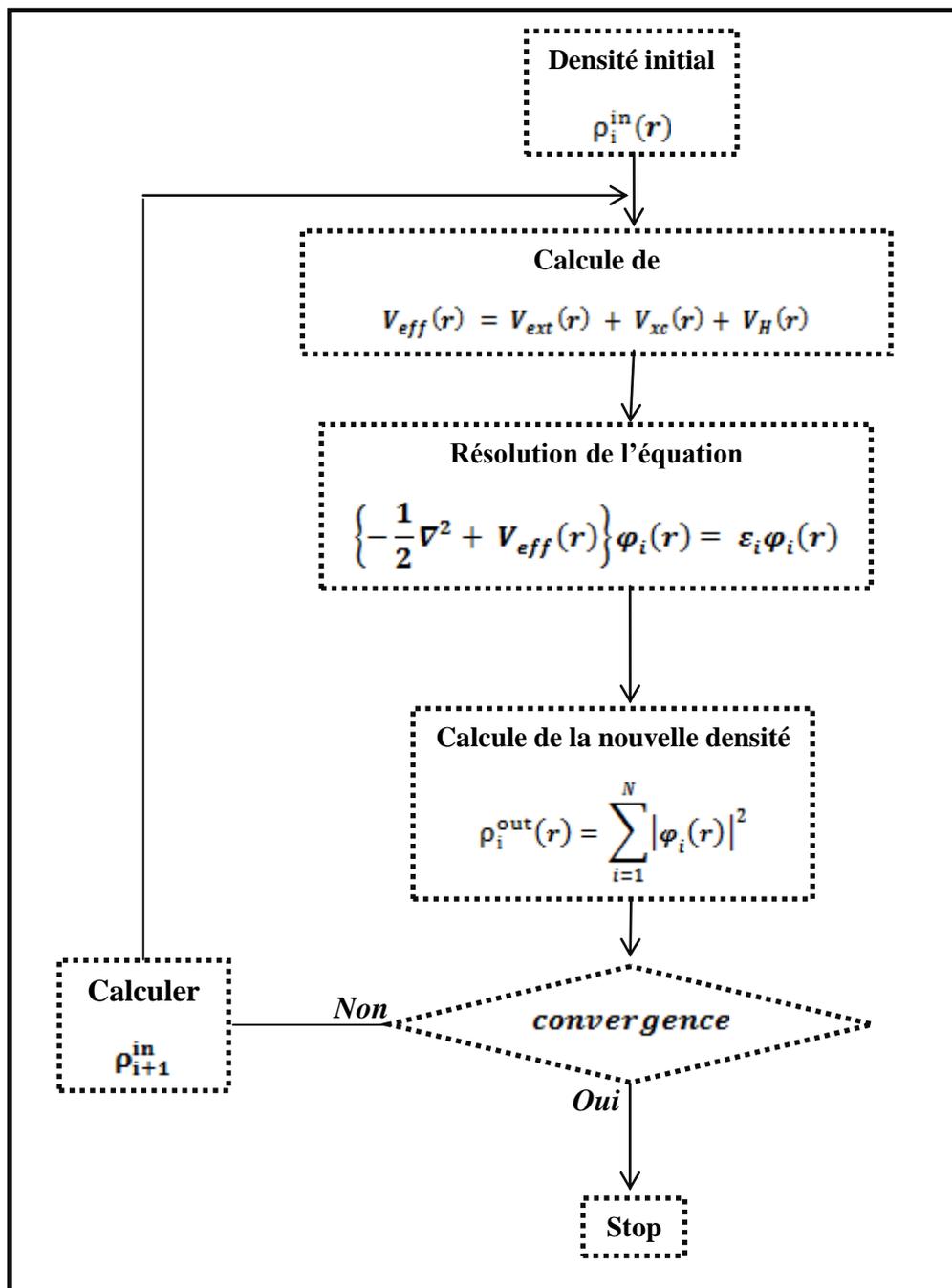


Figure-I.1: Organigramme du cycle auto-cohérent [9].

I. 5. 3. Fonctionnelle d'échange-corrélation

La seule fonctionnelle de la densité qui demeure inconnue dans les équations de Kohn et sham est la fonctionnelle d'échange -corrélation. Pour cela plusieurs approximations ont été formulées et proposées pour simplifier l'expression de cette fonctionnelle.

Nous allons présenter dans la suite quelques définitions des approximations les plus importantes utilisées durant cette étude qui sont : l'approximation de la densité locale(LDA) et l'approximaton du gradient généralisé (GGA).

I. 5. 3. 1. Approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale (LDA) Est l'approximation la plus simple pour exprimer l'énergie d'échange et de corrélation introduit par kohn et sham en 1965 [10] l'idée générale de LDA consiste à traiter un système inhomogène comme localement homogène, et la densité électronique est supposée localement uniforme.

L'énergie d'échange- corrélation s'exprime alors de la manière suivante :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})] = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \quad I. 18$$

Où $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]$ est l'énergie d'échange-corrélation par électron d'un gaz d'électrons homogène de densité $\rho(\mathbf{r})$, elle est la somme de deux énergies : l'énergie de corrélation $\varepsilon_c^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]$, qui peut être calculée avec plusieurs paramétrisations proposées, et l'énergie d'échange $\varepsilon_x^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]$ qui peut être calculée par la fonctionnelle d'énergie d'échange formulée par Dirac [11].

Le potentiel d'échange et de corrélation est donné par :

$$V_{xc}^{LDA}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}^{LDA}[\rho(\mathbf{r})]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad I. 19$$

Notons ici que, dans le cas de spin polarisé :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho^\uparrow(\mathbf{r}), \rho^\downarrow(\mathbf{r})] = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho^\uparrow(\mathbf{r}), \rho^\downarrow(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \quad I.20$$

I. 5. 3. 2. Approximation du gradient généralisé (GGA)

Une autre approximation très intéressante suggérée pour améliorer certaines difficultés rencontrées dans LDA ; elle est nommée ‘approximation du gradient généralisé’ (Generalized Gradient Approximations GGA) ; elle prend en compte les inhomogénéités de densité électronique et permet d’exprimer l’énergie d’échange et de corrélation en fonction de la densité d’électron $\rho(\mathbf{r})$ et de son gradient $\nabla\rho(\mathbf{r})$:

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(\mathbf{r})] = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{GGA}[\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \quad I.21$$

$\varepsilon_{xc}^{GGA}[\rho(\mathbf{r}), \nabla\rho(\mathbf{r})]$: La fonctionnelle d’échange-corrélation dépend de la densité électronique $\rho(\mathbf{r})$ et de son gradient $\nabla\rho(\mathbf{r})$.

Notons ici que, dans le cas de spin polarisé :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho^\uparrow(\mathbf{r}), \rho^\downarrow(\mathbf{r})] = \int \rho(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}^{GGA}[\rho^\uparrow(\mathbf{r}), \rho^\downarrow(\mathbf{r}), \nabla\rho^\uparrow(\mathbf{r}), \nabla\rho^\downarrow(\mathbf{r})] d^3\mathbf{r} \quad I.22$$

I. 5. 3. 3. Approche Mbj [9]

Comme il est connu, les approximations LDA et GGA sous-estiment beaucoup l’énergie du Gap surtout pour le cas des semiconducteurs ; bien évidemment il existe d’autres méthodes qui fournissent des résultats plus proches de ceux détenus expérimentalement comme les fonctionnels hybrides et la méthode GW; mais malheureusement ces dernières, sont plus couteuses. Pour améliorer les résultats prédits, en 2006 Becke et Johnson ont

combiné leur propre potentiel d'échange, noté BJ, au potentiel de corrélation de la LDA, donnant naissance à une nouvelle approche nommée BJLDA.

En 2007 Tran et Blaha ont étudié une série de matériaux avec l'approche nommée BJLDA, mais les résultats trouvés n'étaient pas convainquant, l'énergie du gap est toujours sous-estimée. Tran et Blaha, en se basant sur la BJLDA, ont amélioré les résultats prédits d'une façon appréciable en introduisant une modification au potentiel d'échange BJ qui devient mBJ (modified Becke Johnson) et qui est souvent désigné par TB, c'est-à-dire Tran et Blaha. Une grande amélioration des énergies du gap a été observée suite à l'utilisation de la mBJLDA (Figure-I. 2).

Le potentiel mBJLDA est de la forme [12]:

$$V_{x,\sigma}^{\text{mBJ}}(r) = c V_{x,\sigma}^{\text{BR}}(r) + (3c - 2) \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{5}{12}} \sqrt{\frac{2t_{\sigma}(r)}{\rho_{\sigma}(r)}} \quad \text{I. 23}$$

Le terme $V_{x,\sigma}^{\text{BR}}(r)$ représente le potentiel de Becker-Roussel (BR) [13] modélisant le potentiel coulombien créé par les trous d'échange, $\rho_{\sigma}(r)$ est la densité électronique dépendante du spin, $t_{\sigma}(r)$ représente la densité d'énergie cinétique et enfin, nous avons le paramètre c (I. 26):

$$c = \alpha + \left(\beta \frac{1}{V_{\text{cell}}} \int \frac{|\nabla\rho(r)|}{\rho(r)} d^3r \right)^{1/2} \quad \text{I. 24}$$

α et β sont des paramètres réglables (par défaut, leur valeurs sont : $\alpha = -0.012$ et $\beta = 1.023 \text{ Bohr}^{1/2}$), tandis que V_{cell} est le volume de la cellule unitaire.

I. 6. Méthode des ondes planes augmentées APW

En 1937 Salter [14] a établi la nouvelle méthode des ondes planes augmentées notée (APW) pour résoudre les équations de *Kohn-Sham*. Cette méthode considère que l'espace est divisé en deux régions comme la montre la Figure-I 3.

la région Muffin-Tin : au voisinage du noyau atomique définie par des sphères appelées «Muffin-tin » qui ne chevauchent pas et qui sont centrées sur chaque atome de rayon R_α , où le potentiel possède la symétrie sphérique et les fonctions d'ondes sont des fonctions radiales.

La région interstitielle : est l'espace vide entre les sphères MT (Muffin-Tin) dans cette région le potentiel est considéré constant et les fonctions d'ondes sont des ondes planes

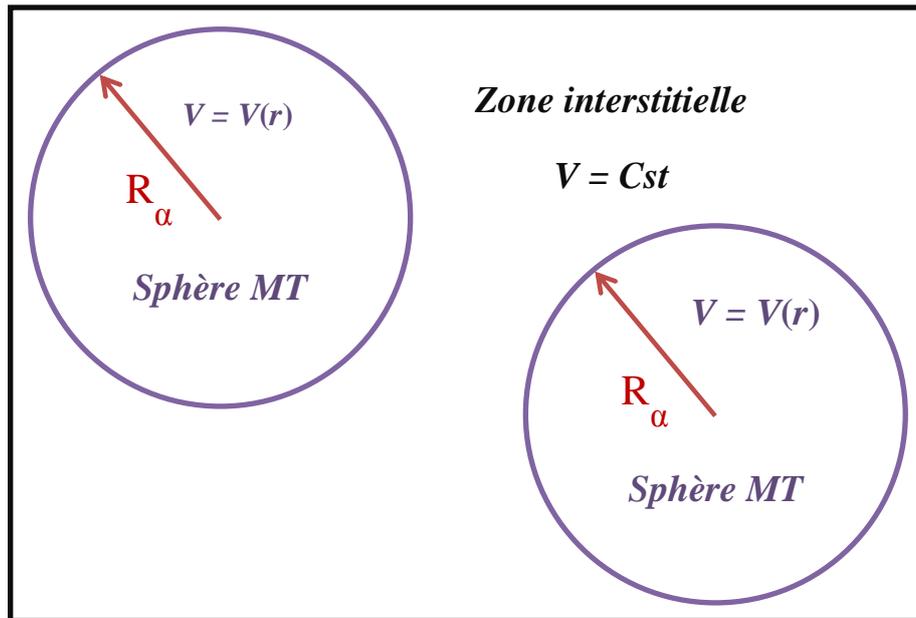


Figure I.2: Division de l'espace en deux régions : région des sphères MT et région interstitielle [9].

Le potentiel est défini comme suit :

$$V(r) = \begin{cases} V(r) & r > R_\alpha \\ \text{Constant} & r < R_\alpha \end{cases} \quad \text{I. 25}$$

$V(r)$: Représente le potentiel Muffin-Tin.

Les fonctions de base sont définies comme suit :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\mathbf{r}} & \mathbf{r} > R_{\alpha} \\ \sum_{lm} A_{lm} U_l(r) Y_{lm}(\mathbf{r}) & \mathbf{r} < R_{\alpha} \end{cases} \quad I.26$$

Avec :

Ω : Le volume de la cellule élémentaire.

$C_{\mathbf{G}}$ et A_{lm} : Les coefficients du développement.

$Y_{lm}(\mathbf{r})$: Les harmoniques sphériques.

\mathbf{G} : Le vecteur du réseau réciproque.

\mathbf{K} : Le vecteur d'onde dans la zone irréductible de Brillouin.

La fonction $U_l(r)$ est la solution radiale de l'équation :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l(r, E_l) = 0 \quad I.27$$

Afin d'éviter la discontinuité de la fonction $\varphi(\mathbf{r})$ à la surface de la sphère MT, les coefficients A_{lm} doivent être développés en fonction des coefficients $C_{\mathbf{G}}$ des ondes planes correspondant aux régions interstitielles :

$$A_{lm} = \frac{1}{\Omega^2} \frac{\pi i^l}{U_l(R_{\alpha})} \sum_{\mathbf{G}} C_{\mathbf{G}} j_l(|\mathbf{K} + \mathbf{G}| R_{\alpha}) Y_{lm}^*(\mathbf{K} + \mathbf{G}) \quad I.28$$

j_l : La fonction de Bessel.

I. 7. Inconvénients de la méthode APW

Le problème principal rencontré dans la méthode APW est que si la fonction $U_l(\mathbf{r}, E_l)$ prend une valeur nulle à la surface de la sphère MT, entraînant une séparation entre la fonction radiale et l'onde plane, on appelle cela le problème asymptote, qui représente l'inconvénient majeur de la méthode APW.

I. 8. Méthode LAPW

Dans la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (LAPW)], les fonctions de base dans les sphères MT sont des Combinaisons linéaires des fonctions radiales $U_l(r) Y_{lm}(r)$ et de leurs dérivées $U_l'(r) Y_{lm}(r)$ par rapport à l'énergie. Les fonctions U_l sont définies comme dans la méthode APW et les fonctions $U_l'(r) Y_{lm}(r)$ doit satisfaire l'équation suivante [15] :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r) - E_l \right\} r U_l'(r, E_l) = r U_l(r, E_l) \quad I.29$$

$$U_l' = \frac{\partial U_l}{\partial E_l} \quad I.30$$

On a donc:

$$\varphi(r) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^2} \sum_G C_G e^{i(G+K)r} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r) + B_{lm} U_l'(r)] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad I.31$$

Alors: A_{lm} sont des coefficients correspondant à la fonction U_l

B_{lm} : sont des coefficients correspondants à la fonction $U_l'(r)$.

Dans les sphères MT, les coefficients B_{lm} sont de même nature que A_{lm} .

Lorsque E_l diffère un peu de l'énergie de bande E , une combinaison linéaire est utilisée pour mieux représenter la fonction radiale $U_l(r)$:

$$U_l(E, r) = U_l(E_l, r) + (E - E_l)U_l'(E, r) + \mathbf{0}((E - E_l)^2) \quad \text{I.32}$$

Notons que, par rapport à la méthode APW, les erreurs sur les fonctions d'onde et sur l'énergie de bande sont respectivement de l'ordre de $(E - E_l)^2$ et $(E - E_l)^4$.

Le problème d'asymptote est éliminé définitivement puisque, même si U_l est égale à zéro à la surface de la sphère, U_l' sera différent de zéro.

I. 9. Méthode LAPW+LO

La méthode des ondes planes augmentées linéarisées plus orbitales locales, notée (LAPW+LO), est introduite pour la première fois par Singh [16] pour traiter les états semi-cœurs. Cette méthode donne les orbitales, notées « LO » sous forme d'une combinaison linéaire de deux fonctions radiales correspondantes à deux énergies différentes et de la dérivée par rapport à l'énergie de l'une de ces fonctions [9] :

$$\varphi(r) = \begin{cases} \mathbf{0} & r > R_\alpha \\ [A_{lm} U_l(r, E_{l,1}) + B_{lm} U_l'(r, E_{l,1}) + C_{lm} U_l(r, E_{l,2})] Y_{lm}(r) & r < R_\alpha \end{cases} \quad \text{I.33}$$

Où les coefficients (C_{lm}) sont de même nature que les coefficients (A_{lm}) et (B_{lm}). Cette modification diminue l'erreur commise dans le calcul des bandes de conduction et de valence.

I. 10. Méthode APW + lo

Sjösted, Nordström et Singh [17] ont proposé une autre méthode, qui combine les avantages des deux premières méthodes (la méthode APW et la méthode LAPW+LO), aboutissant à une méthode nommée « APW+lo », qui correspondent à une base indépendante

de l'énergie (comme l'était la méthode LAPW+LO) et avec la même taille que la base utilisée dans la méthode APW.

Les orbitales locales (lo) dans la méthode APW + lo sont définies comme suit :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(r, E_{l,1}) + B_{lm} U_l^*(r, E_{l,1})] Y_{lm}(\mathbf{r}) & r < R_\alpha \end{cases} \quad I.34$$

Les APW's avec un ensemble d'énergies E_l fixées sont définies comme suit :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{G}+\mathbf{K})\mathbf{r}} & r > R_\alpha \\ \sum_{lm} [A_{lm} U_l(\mathbf{r}) + B_{lm} U_l^*(\mathbf{r})] Y_{lm}(\mathbf{r}) & r < R_\alpha \end{cases} \quad I.35$$

I. 11. Code Wien2k

En 1990 à l'université Technique de Vienne (Autriche) on a développé Le code de simulation WIEN2K[12] par Peter Blaha et Karlheinz Schwartz [18] et un programme basé sur la théorie de la fonctionnelle de la densité et la méthode FP-LAPW qui est utilisée pour calculer les structures électroniques des solides. Ce code comporte plusieurs programmes indépendants rédigés en FORTRAN 90 et ils sont liés par le C-SHEL SCRIPT. Les programmes de l'initialisation sont résumés comme suit :

NN: C'est un programme qui donne les distances entre les plus proches voisins, ce qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère MT et vérifie le non chevauchement des sphères

LSTART : il permet de générer les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme les états du cœur avec ou sans orbitales locales.

SYMMETRY : il permet de générer Génère les opérations de symétrie du groupe spatial, détermine le groupe ponctuel des sites atomiques individuels, génère l'expansion LM pour les harmoniques du réseau et détermine les matrices de rotation locale.

KGEN : Génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART : il génère une densité de départ pour le cycle auto-cohérent (le cycle SCF) par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

La deuxième étape est nommée le cycle auto-cohérent ou champ auto-cohérent noté SCF (Self

Consistent Field) dans cette étape Le cycle SCF est initialisé et répété jusqu'à ce que la convergence soit vérifiée. Ce cycle passe par les étapes suivantes :

LAPW0 : calcule le potentiel total à partir de la densité.

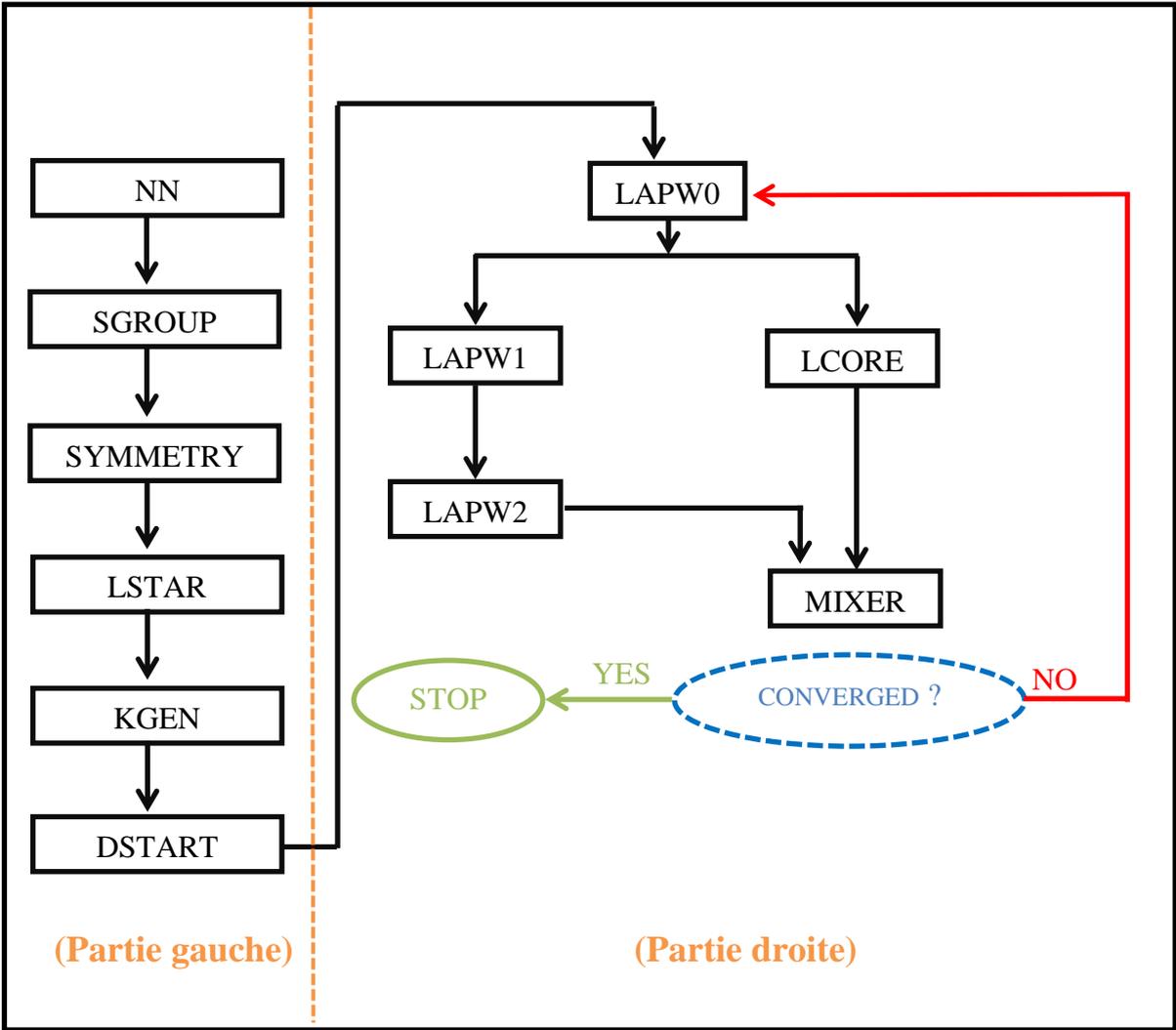
LAPW1 : Calcul les bandes de valence, les valeurs propres et les vecteurs propres.

LAPW2 : Calcul les densités de valence à partir les vecteurs propres.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : Mélange les densités d'entrées et de sorties (de départ, de valence et de cœur).

Détermination des propriétés : Après le calcul auto-cohérent (SCF) terminé, les Propriétés de l'état fondamental (structure de bande, densité d'états, densité de charge, propriétés optiques, etc) peuvent être déterminées



FigureI.3 : Organigramme des programmes du code Wien2k [9].

Références

- 1 - Born, M., & Oppenheimer, R. (1927). Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389(20), 457-484.
- 2 - Hartree, D. R. (1928, January). The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (Vol. 24, No. 1, pp. 89-110). Cambridge University Press.
- 3 - Fock, V. (1930). Näherungsmethode zur Lösung des quanten mechanischen Mehrkör per problems. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 61(1), 126-148.
- 4 - Fock, V. (1930). „Selfconsistent field “mit Austausch für Natrium. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 62(11), 795-805.
- 5 - Thomas, L. H. (1927, January). The calculation of atomic fields. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (Vol. 23, No. 5, pp. 542-548). Cambridge University Press.
- 6 - Fermi, E. (1928). Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Zeitschrift für Physik*, 48(1-2), 73-79.
- 7 - Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B), B864.
- 8 - Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.
- 9- GOUS, M. H. (2018). Calcul des propriétés structurales, élastiques, électroniques et magnétiques des semi-conducteurs magnétiques dilués à base de MgS et des alliages demi-heusler demi-métalliques CoVTe et RuVTe (Doctoral dissertation, GUELMA).
- 10 - Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133.]
- 11- Dirac, P. A. (1930, July). Note on exchange phenomena in the Thomas atom. In *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* (Vol. 26, No. 3, pp. 376-385). Cambridge University Press.
- 12- Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K. H., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2014). WIEN2k: An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties User's Guide, WIEN2k 14.2.

- 13- Becke, A. D., & Roussel, M. R. (1989). Exchange holes in inhomogeneous systems: A coordinate-space model. *Physical Review A*, 39(8), 3761.
- 14 -Ziman, J. M. (1972). *Principles of the Theory of Solids*. Cambridge university press.
- 15- HAMRI, B. (2016). Investigation théorique des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages heusler Ti_2VZ ($Z= Ge, Sn, Pb$) (Doctoral dissertation).
- 16- Singh, D. (1991). Ground-state properties of lanthanum: Treatment of extended-core states. *Physical Review B*, 43(8), 6388.
- 17- Sjöstedt, E., Nordström, L., & Singh, D. J. (2000). An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method. *Solid state communications*, 114(1), 15-20.
- [18]- P. Blaha, K.Schwarz, P.Sorantin, S.B. Trickey, *Comput. Phys. Commun.*59,399 (1990).

Chapitre II : RESULTATS ET DISCUSSIONS

Chapitre II
RESULTATS ET DISCUSSIONS

II.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre nous avons présenté les résultats qu'on a trouvé des propriétés structurales, élastiques et électroniques des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgAs et NaMgP, ainsi que d'autres résultats disponibles dans la littérature pour les comparer avec nos résultats.

II.2 .Détails de calcul

Dans cette étude, nous avons effectué nos calculs en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéairement à plein potentiel (FP-LAPW) [2] telle qu'implémentée dans le code WIEN2k [3] basé sur la DFT. Le fonctionnel gradient généralisé avec la paramétrisation de Wu-Cohen (WC-GGA) [4] a été utilisé pour évaluer les propriétés structurales, électroniques et élastiques des matériaux. Cette fonctionnelle de corrélation d'échange a été choisie car cette fonctionnelle est considérée comme simple et plus précise pour les solides [5].

Cependant pour le calcul des propriétés électroniques (structures de bandes et densité d'états) nous avons utilisé en plus de l'approximation précédente l'approximation développée par Becke et Johnson (mBJ) modifiée par Tran et Blaha (TB-mBJ) [6]. cette approche est conçue pour améliorer les valeurs des gaps énergétiques.

Dans la méthode FP-LAPW Les fonctions d'onde, les densités électroniques et le potentiel sont développés en combinaison harmoniques sphériques autour des sites atomiques c'est-à-dire dans les sphères Muffin-tin et en série de Fourier dans la région interstitielle avec un Cut off (rayon de coupure) $R_{MT} \cdot K_{max} = 7$, (R_{MT} est le plus petit rayon de la sphère MT et K_{max} est la norme du plus grand vecteur d'onde). G_{max} est la norme du plus grand vecteur d'onde utilisé pour le développement en Ondes planes de la densité de charges (G_{max} a été choisi=12).Le nombre de K points utilisés pour échantillonner la première zone de Brillouin dans l'espace réciproque est pris égal à 1000 valeur suffisante pour converger l'énergie totale.

Dans nos calculs, l'énergie qui sépare les états de valence et ceux du cœur a été prise égale à -6 .0 Ry.

II.3. Propriétés structurales

Les alliages demi Heusler NaMgN, NaMgAs et NaMgP se cristallisent dans une structure cristalline cubique avec le groupe d'espace F-43m et MgAgAs comme prototype, les atomes Na, Mg et N/As ou P occupent les positions (1/2, 1/2, 1/2), (1/4, 1/4, 1/4) et (0, 0, 0) dans les coordonnées de Wyckoff, respectivement.

Donc nous avons une combinaison de deux structures cristallines dont l'une de type Rocksalt formée par l'élément le moins électronégatif (Na) et N/As ou P tandis que l'autre est de type zinc-blende formée par l'élément le plus électronégatif (Mg) et N/As ou P.

Les structures cristallines de nos alliages demi-Heusler NaMgX (X=P, N et As) sont représenté dans la figure II-1.

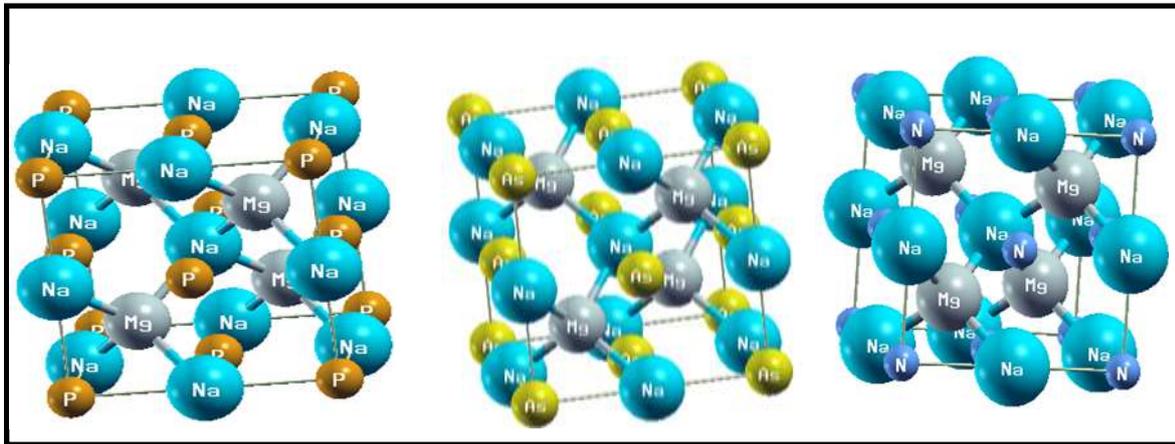


Figure II-1 : Les structures cristallines des alliages demi-Heusler NaMgX (X=P, N et As).

Afin d'obtenir les propriétés structurales tel que le paramètre de réseau (a), le module de compressibilité (B) et la dérivée première de ce dernier (B') nous avons calculé l'énergie totale pour plusieurs volumes par l'approximation WC- GGA puis nous avons adapté ces énergies totales à l'équation d'état de Birch-Murnaghan [7] donnée par (II.1):

$$E(V) = E_0 + \frac{9B_0V_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B' + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 [6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3}] \right\} \quad \text{II.1}$$

Où E_0 , V_0 , B et B' sont respectivement l'énergie totale, le volume à l'équilibre le module de compressibilité et sa dérivée première.

Le module de compressibilité est déterminé par l'équation (II.2):

$$B = V \frac{\partial^2 E}{\partial V^2}$$

II.2

Les Figures II-2, II-3 et II-4 représentent les courbes de la variation de l'énergie totale en fonction du volume pour Nos demi Heusler NaMgX (X=P, As et N)

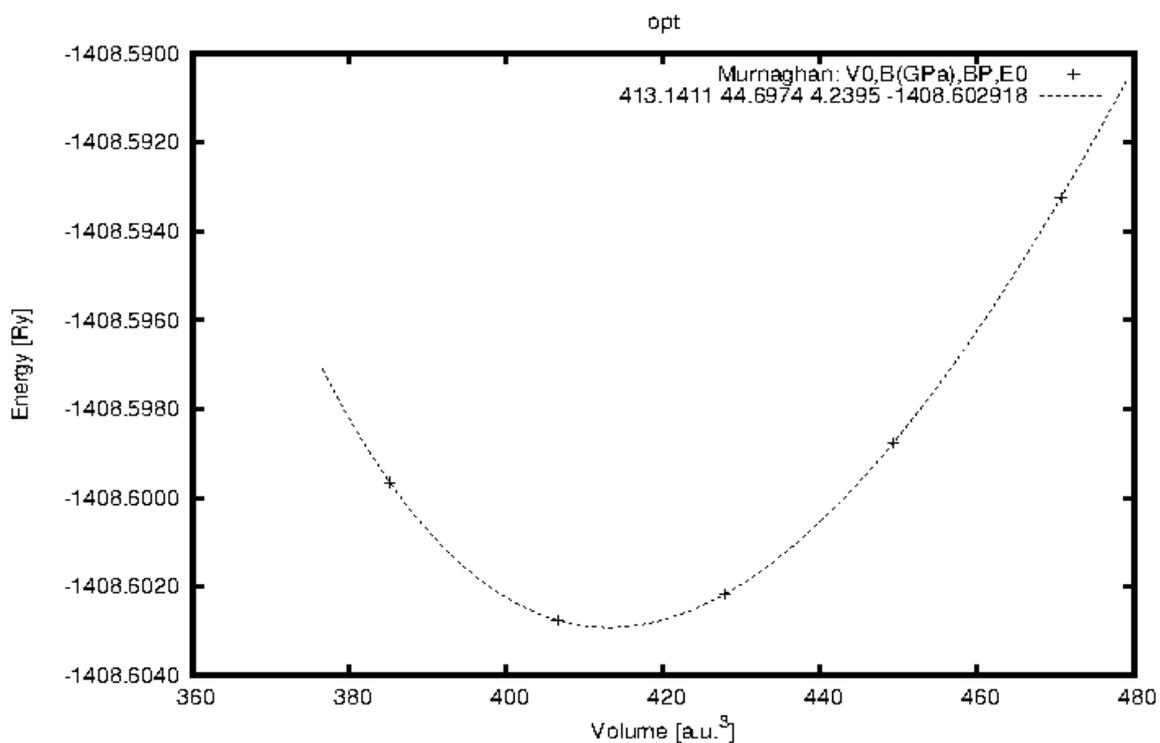


Figure II-2 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de NaMgP.

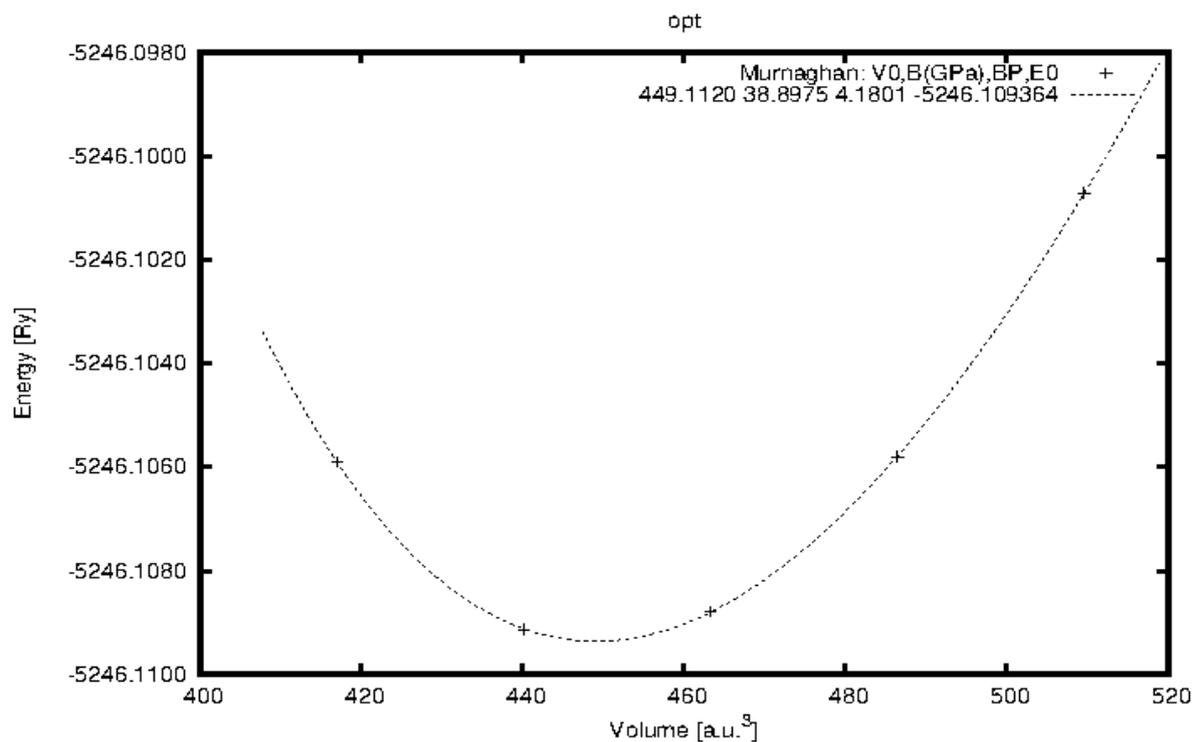


Figure II-3 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de NaMgAs.

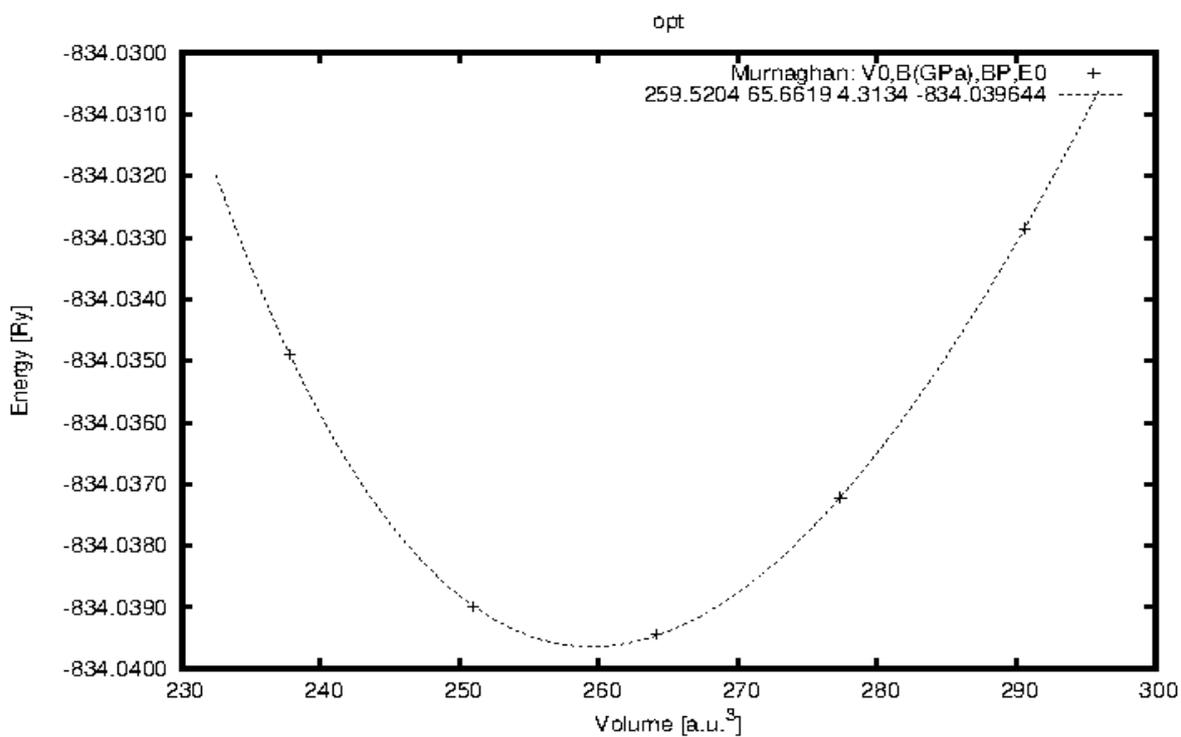


Figure II-4 : Variation de l'énergie totale en fonction du volume de NaMgN.

Nos résultats sont regroupés dans le tableau II-1 avec les autres résultats théoriques précédents.

À partir de ce tableau, on peut voir que les paramètres de réseaux que nous avons calculé concordent raisonnablement avec les autres calculés précédemment.

Le paramètre de réseaux (a) augmente dans la séquence suivante $a_{\text{NaMgN}} < a_{\text{NaMgP}} < a_{\text{NaMgAs}}$, donc il augmente au fur et à mesure que le numéro atomique de l'atome Z ($Z = \text{N, P et As}$) augmente.

Notons ici qu'il n'y a pas des mesures expérimentales des paramètres de réseau et des modules de compressibilité de demi Heusler NaMgX ($X = \text{P, As et N}$) pour les comparer avec nos résultats.

Le module de compressibilité (B) est une mesure de la compressibilité d'un matériau, et donc plus le module de compressibilité (B) est élevé, plus la compressibilité de ce matériau est faible et vice versa.

Selon les valeurs du module de compressibilité (B) mentionnées dans le tableau II.1, le module de compressibilité (B) augmente de la manière suivante $B_{\text{NaMgAs}} < B_{\text{NaMgP}} < B_{\text{NaMgN}}$.

Donc on constate que l'alliage demi Heusler NaMgN est le moins compressible et l'alliage demi Heusler NaMgAs est le plus compressible, puisque les alliages NaMgN et NaMgAs présentent le plus grand et le plus petit module de compressibilité respectivement.

Tableau II-1 : Valeurs du paramètre de réseau (a), module de compressibilité (B) et sa dérivé première (B') des demi Heusler NaMgN, NaMgAs et NaMgP calculées par l'approximation WC- GGA et d'autres calculées précédemment.

Matériaux	a (Å)			B (GPa)		B' (GPa)	
	Nos résultats	Autre résultats	Exp	Nos résultats	Autre résultats	Nos résultats	Autre résultats
NaMgN	5,358	5,448 [8]	/	65,7764	71,976[8]	4,2676	4,058[8]
		5,39[9]			81,33[9]		3,6566[5]
		5,45[10]			76,705[5]		
NaMgP	6,256	6,369 [8]	/	44 ,7311	45,337[8]	4,1683	4,021[8]
		6,33[9]			46,74[9]		
NaMgAs	6,433	6,556 [8]	/	38,9267	39,245[8]	4,1154	3,994[8]
		6,50 [9]			40,86 [9]		

II.4.Propriétés élastiques

Dans cette partie nous présentons les résultats obtenus des propriétés élastiques des alliages demi-Heusler qui font l'objet de notre étude.

Nous commençons la découverte du comportement élastique de ces alliages par le calcul des constantes élastiques (C_{ij}). Le nombre des constantes élastiques dépend de la structure dans laquelle le matériau se cristallise, dans notre cas tous les matériaux se cristallisent dans une structure cubique, alors, il faut déterminer les trois constantes C_{11} , C_{12} et C_{44} . Pour cela, nous avons calculé ces trois constantes avec l'approximation WC-GGA pour chaque alliage demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs, les valeurs obtenues sont regroupées dans le tableau II.2 avec d'autres valeurs théoriques disponibles dans la littérature.

Tableau II-2 : Valeurs calculées de C_{11} , C_{12} et C_{44} (en GPa) des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs, comparées à d'autres théoriques disponibles dans la littérature.

Matériaux	C_{11} (GPa)	C_{12} (GPa)	C_{44} (GPa)
NaMgN	93,3802 187,27 [9]	52,329664 -4 [9]	86,182817 26,71[9]
NaMgP	66,7748 87.27 [9]	35,9278 10.61 [9]	51,79255 27.84 [9]
NaMgAs	53,49669 97.79 [9]	32,052734 38.20 [9]	43,804605 41.82 [9]

La stabilité mécanique d'un cristal cubique sous pression isotrope pourrait être jugée en utilisant les trois conditions suivantes II.3, II.4, II.5 et II.6 [18]

$$C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad \text{II.3}$$

$$C_{11} - C_{12} > 0 \quad \text{II.4}$$

$$C_{44} > 0 \quad \text{II.5}$$

$$C_{11} > 0 \quad \text{II.6}$$

D'après ce tableau II-2, les alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs obéissent aux critères de stabilité mécanique, donc ils sont mécaniquement stables.

Pour les cristaux cubiques, il existe deux modules de cisaillement, C_{44} et C' (II.7) correspondant au cisaillement selon les plans $\{1\ 0\ 0\}$ et $\{1\ 1\ 0\}$ respectivement [19].

$$C' = \frac{C_{11} - C_{12}}{2} \quad \text{II.7}$$

On remarque que la diminution des deux modules de cisaillement C_{44} (tableau II-2) et C' (tableau II-3) suit l'ordre suivant $\text{NaMgN} > \text{NaMgP} > \text{NaMgAs}$, ceci signifie que la résistance au cisaillement selon les plans $\{1\ 0\ 0\}$ et $\{1\ 1\ 0\}$ augmente lorsqu'on va de NaMgN à NaMgAs.

Afin d'avoir un aperçu sur l'anisotropie élastique de nos cristaux nous avons calculé le facteur d'anisotropie de Zener (A) par l'expression (II.8).

$$A = \frac{2C_{44}}{(C_{11}-C_{12})} \quad \text{II.8}$$

Nous avons trois cas:

- Premier cas $A = 1$: Le matériau est élastiquement isotrope avec une déformation uniforme dans toutes les directions.
- Deuxième cas $A > 1$: Le matériau élastiquement anisotrope est plus rigide le long de la direction diagonale $\langle 111 \rangle$.
- Troisième cas $A < 1$: Le matériau élastiquement anisotrope est plus rigide le long des axes $\langle 100 \rangle$.

Pour les trois alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs le facteur d'anisotropie de Zener A est très supérieur à 1, donc NaMgN, NaMgP et NaMgAs sont élastiquement anisotrope et ils plus rigides le long de la direction diagonale $\langle 111 \rangle$.

Nous avons aussi calculé le module de Young (E) et le coefficient de Poisson (ν) avec les expressions II.9 et II.10 respectivement, ainsi que rapport de Pugh (B/G).

$$E = \frac{9GB}{3G+B} \quad \text{II.9}$$

$$\nu = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad \text{II.10}$$

Avec,

B : Est le module de compressibilité qui peut être calculé en fonction des constantes élastiques C_{11} et C_{12} avec l'expression II.11 [17]:

$$B = (1/3)(C_{11} + 2C_{12}) \quad \text{II.11}$$

G : Et le module de cisaillement dans l'approximation de Voigt – Reus – Hill, il peut être calculé avec l'expression II.12 [9] :

$$\mathbf{G} = \frac{G_V + G_R}{2} \quad \text{II.12}$$

Où, G_V et G_R sont le module de cisaillement de Voigt qui correspond à la limite supérieure des valeurs de G et du module de cisaillement de Reuss qui correspond à la limite inférieure des valeurs de G respectivement.

G_V et G_R peuvent être calculés par les expressions II.13 et II.14 respectivement :

$$G_V = \frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} \quad \text{III. 13}$$

$$G_R = \frac{5C_{44}(C_{11} - C_{12})}{4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})} \quad \text{III. 14}$$

Les valeurs du module de Young (E), du module de cisaillement (G), des modules de cisaillement C' selon les plans $\{1\ 1\ 0\}$, du coefficient de Poisson (ν) et du rapport de Pugh (B/G) des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs sont mentionnées dans le tableau II-3.

Le module de Young (E), le module de cisaillement (G), le facteur d'anisotropie de Zener (A) et le coefficient de Poisson (ν) sont les propriétés élastiques les plus intéressantes pour les applications, et sont souvent mesurées pour les matériaux poly-cristallins lors de l'étude de leur dureté.

Le module de Young (E) ou module d'élasticité, est défini comme le rapport de la contrainte normale à la déformation normale linéaire [14, tant que la valeur du module de Young est très élevée, le matériau est très rigide. Selon les valeurs du module de Young E regroupées dans le tableau II-3 la valeur du module de Young (E) de NaMgN est la plus grande par rapport à celle de NaMgP et NaMgAs, ce qui signifie que NaMgN est le plus rigide.

Les valeurs du module de compressibilité (B) calculées avec l'expression II.11 de NaMgN, NaMgP et NaMgAs sont respectivement 66,01 GPa, 46,210 GPa et 39,20 GPa on remarque que ces valeurs sont presque les mêmes valeurs que celles obtenues dans l'optimisation structurale.

Le coefficient de Poisson (ν) permet de déterminer le caractère du matériau, ductile ou fragile :

- Si ν est inférieure à 0.26 le matériau est fragile.
- Si ν est supérieur à 0.26 le matériau est ductile.

Les valeurs du coefficient de Poisson ν des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs regroupées dans le tableau II.3 sont inférieure à 0.26, ceci indique que les alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs sont fragiles.

Le rapport de Pugh (B/G) aussi permet de déterminer le caractère du matériau, ductile ou fragile :

- Si B/G est inférieure à 1.75 le matériau est fragile
- Si B/G est supérieure à 1.75 le matériau est ductile.

Dans notre cas, toutes les valeurs des B/G mentionnées dans le Tableau II-3 sont inférieures à la valeur critique 1.75 ceci confirme que les alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs sont fragiles.

Tableau II-3 : Valeurs calculées du facteur d'anisotropie A, du module de cisaillement G, du module de Young E, du coefficient de poisson ν , du module de compressibilité B, et Le rapport de Pugh (B/G), comparées aux résultats de la littérature

Matériaux	C'	G	E	A	ν	B/G
NaMgN	20,5	48,8632	136,5482	4,1988	0,2031	1 ,35
		45,96 [9]	109,60 [9]	0,27 [9]	0,19 [9]	1,29 [9]
NaMgP	15,4	31,949	93,535	3,358	0,219	1,44
		45.96 [9]	73.48 [9]	0.72 [9]	0.05 [9]	1.16 [9]
NaMgAs	10,7	25,0889	77,327	4 ,085	0,236	1,562
		36.50 [9]	90.60 [9]	1.40 [9]	0.24 [9]	1.59 [9]

II.5. Propriétés électroniques

L'étude des propriétés électroniques d'un matériau, présente un intérêt majeur car la plupart des différentes propriétés des matériaux ont une relation directe aux propriétés électroniques.

Pour cela nous avons présenté dans cette partie les résultats obtenus des propriétés électroniques des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs, nous commençons par les structures de bandes puis nous passons aux densités d'états électroniques.

Les calculs ont été réalisés en utilisant les paramètres du réseau optimisés précédemment et les deux approximations WC-GGA TB-mbj-LDA.

II.5.1 .Structures de bandes

Les structures de bande nous permettent de déterminer le caractère électronique du matériau, c'est-à-dire la valeur et la nature du gap, puisque ces deux dernières déterminent l'application appropriée pour le matériau.

On définit le gap comme la différence d'énergie entre le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence.

Dans les semi-conducteurs on peut distinguer deux types de gap :

- **Gap direct** : Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se situent au même point de la zone de Brillouin.
- **Gap indirect** : Le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence ne se situent pas au même point de la zone de Brillouin.

Les calculs des structures de bandes pour nos alliages NaMgN, NaMgP et NaMgAs ont été effectués avec les deux approximations WC-GGA et TB -mbj-LDA en utilisant le paramètre du réseau optimisés précédemment.

Les figures II.5, II.6 et II.7 représentent les structures de bandes d'énergie des alliages demi-Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs, respectivement.

Il est bien clair que les alliages demi-Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs possèdent des gaps directs, puisque le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont dans le même Γ .

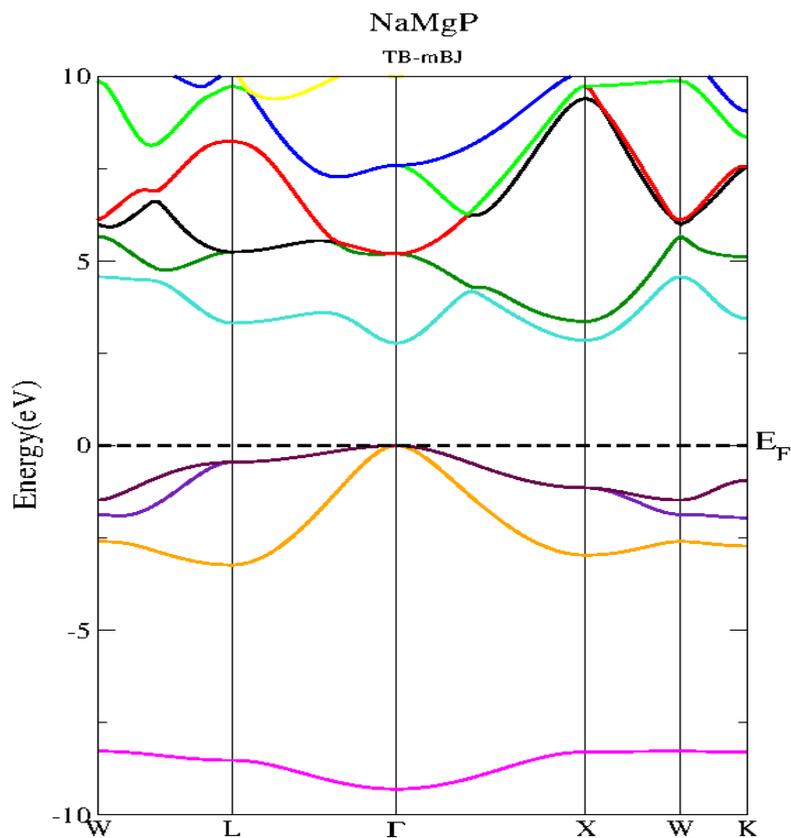


Figure II.5 : Structures de bandes d'énergies de NaMgP obtenues par TB-mBJ

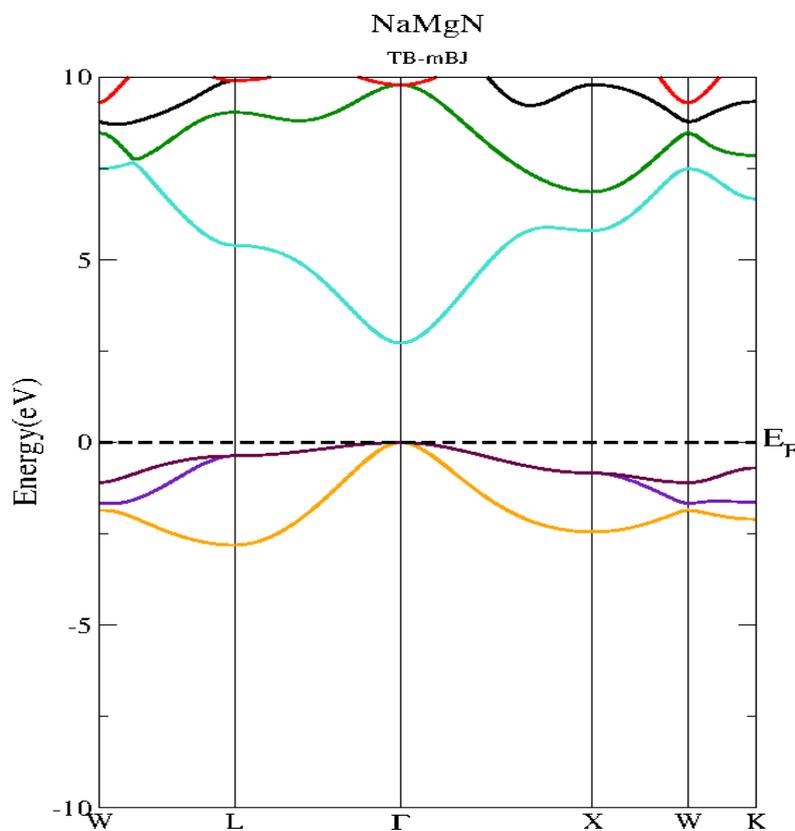


Figure II.6: Structures de bandes d'énergies de NaMgN obtenues par TB-mBJ

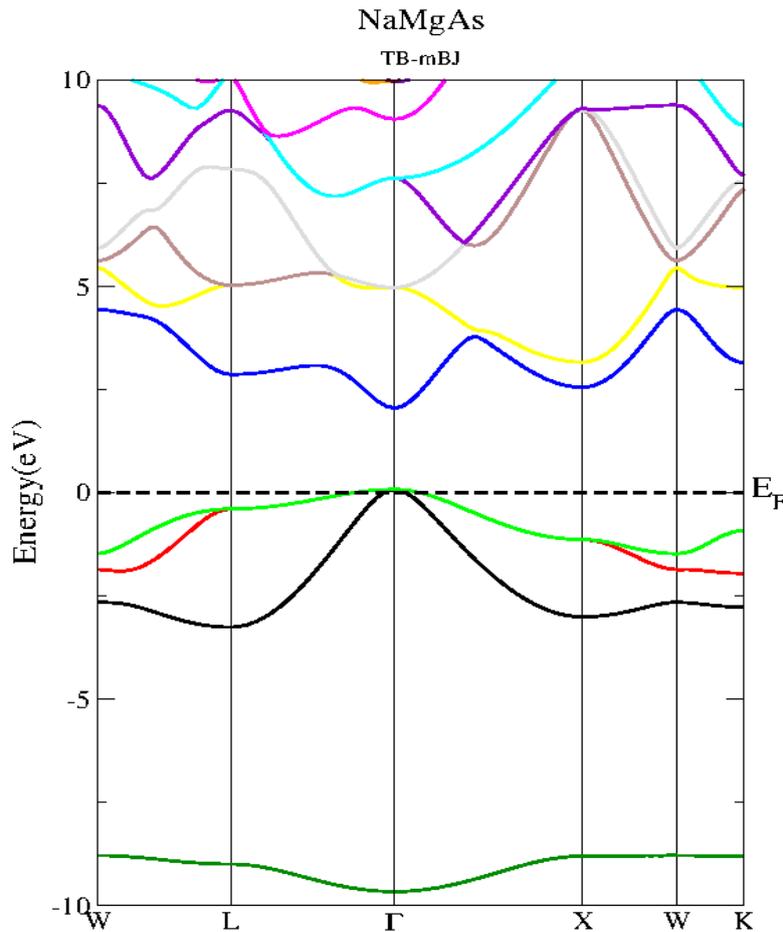


Figure II.7 : Structures de bandes d'énergies de NaMgAs obtenues par TB-mBJ

Les valeurs des gaps des demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs obtenues par les deux approximations sont groupées dans le tableau II-4 avec d'autres valeurs théoriques disponibles dans la littérature.

On remarque que pour tous les demi-Heusler étudiés ici, les valeurs des gaps calculés par l'approximation TB-mBJ-LDA sont supérieures à celles obtenues par l'approximation WC- GGA.

Lorsqu'on compare nos résultats avec d'autres résultats calculés théoriquement par d'autres groupes, on remarque qu'elles sont en bon accord.

Tableau II-4 : Valeurs calculées des gaps des demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs comparées aux autres valeurs théoriques disponibles dans la littérature.

Matériaux	Gaps (eV)		
	WC-GGA	TB-MBJ	Autre résultat
NaMgN	1,093	2,773	0,762 [15] ; 2,193[15] ^{TB-MBJ} 0,770[16] ; 2,4 [9] ^{TB-MBJ}
NaMgP	1,444	2,782	1,481 [15] ; 2,62 [15] ^{TB-MBJ} 1,470[16] ; 2,7 [9] ^{TB-MBJ}
NaMgAs	0,686	1,992	0,83 [15] ; 1,922 [15] ^{TB-MBJ} 2 ,1[9] ^{TB-MBJ}

II.5.2 .La Densité d'états électronique

Pour la compréhension des propriétés électroniques, il est nécessaire de déterminer la densité d'état électronique (DOS), puisque elle nous permet de mieux comprendre la structure de bande électronique et connaître la contribution de chaque atome et chaque orbital dans la création des différentes bande de la structure de bande.

Alors nous avons calculé la densité d'états électroniques totales (TDOS) et partielles (PDOS) pour chacun des trois alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs en utilisant l'approximation TB-mBJ-LDA.

Les courbes obtenues TDOS et PDOS sont représentées aux Figures ci-dessous.

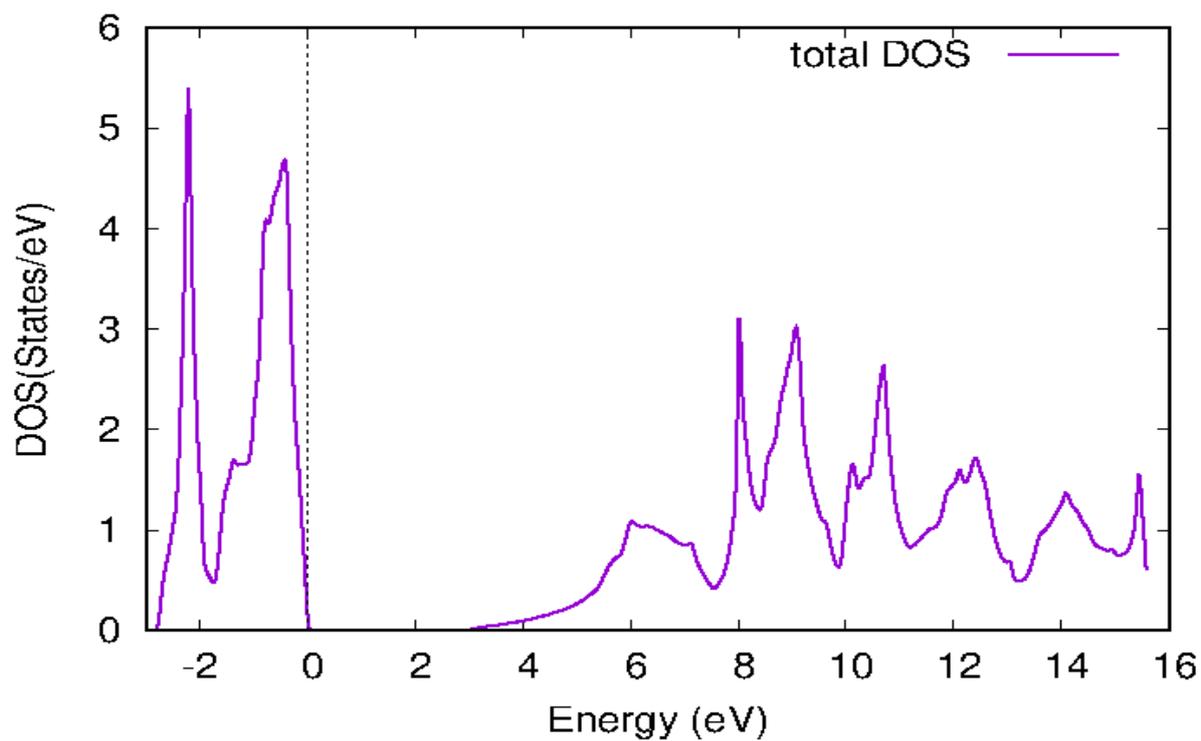


Figure II.8 : Densité d'états totale de NaMgN

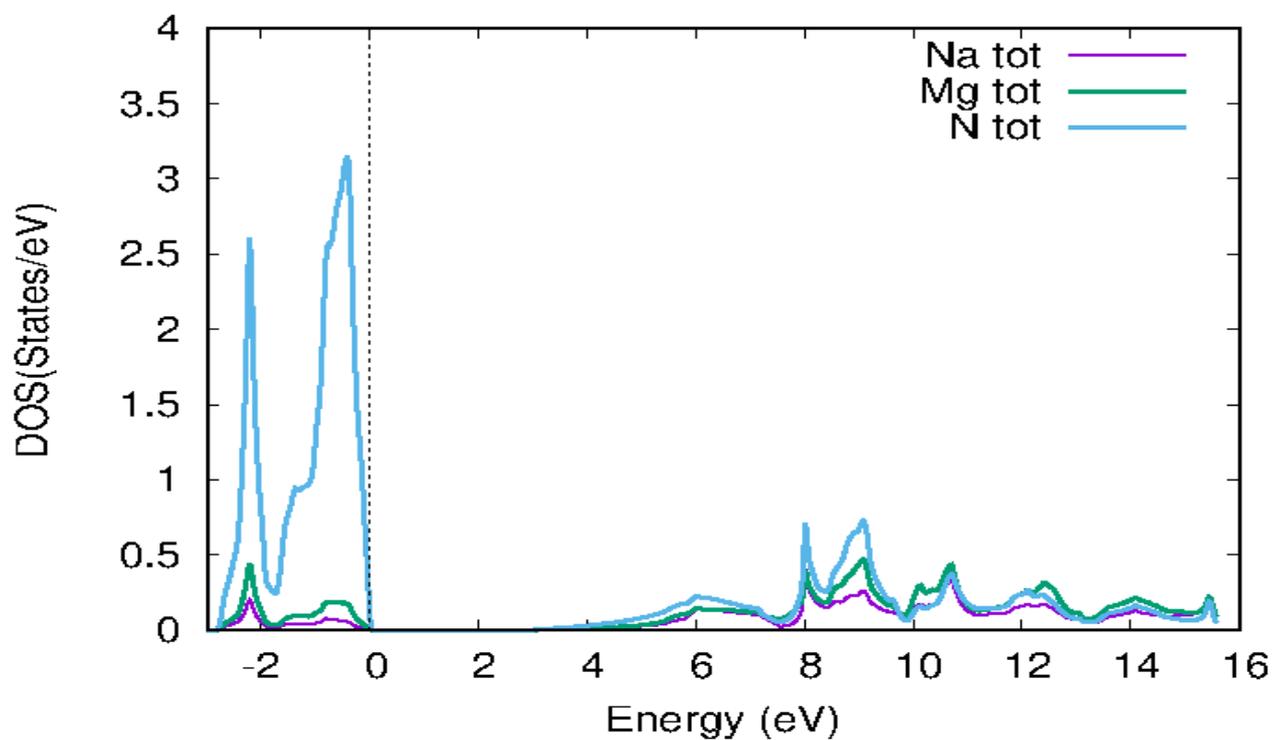


Figure II. 9: Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et N.

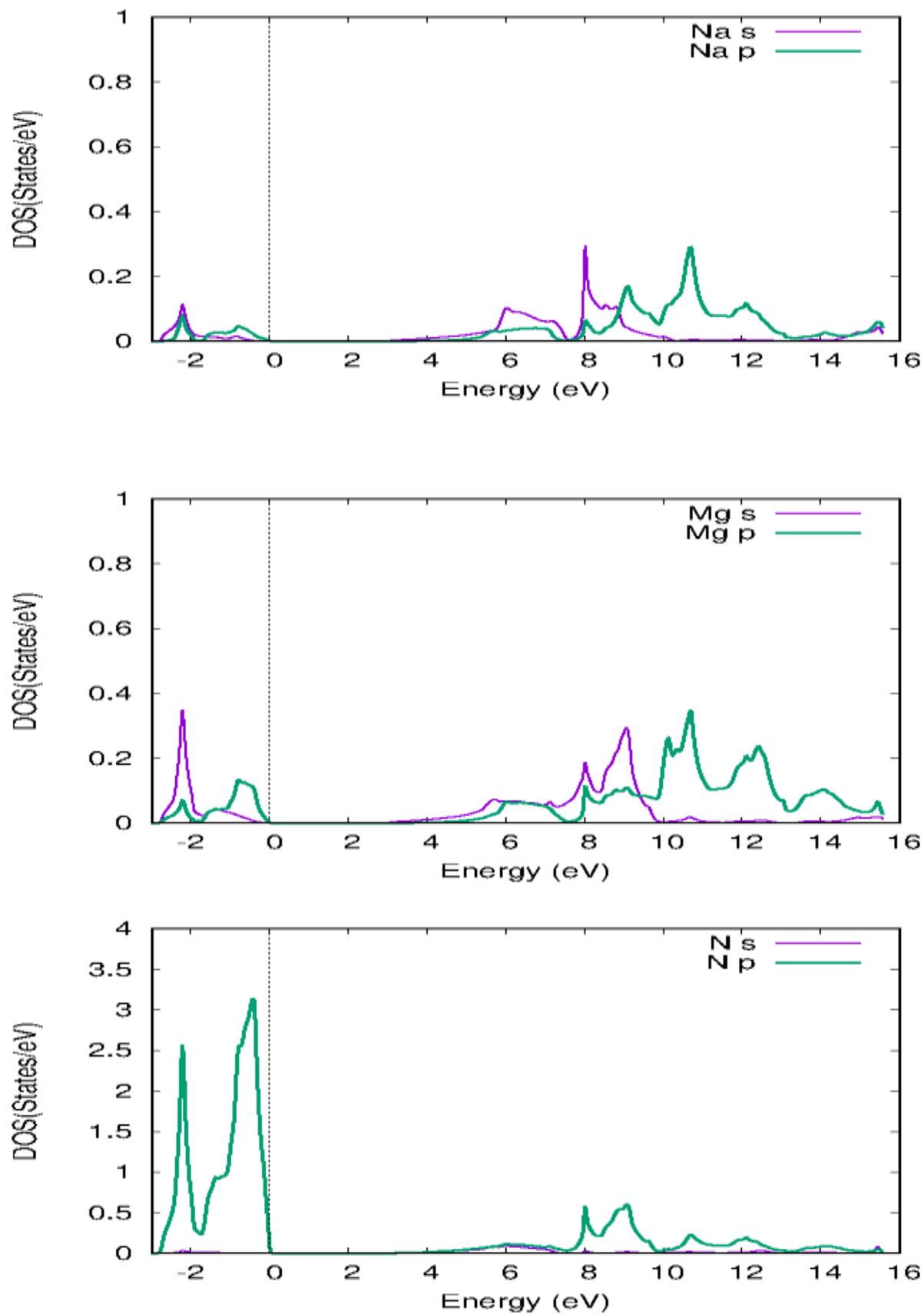


Figure II. 10: Densité d'états partielle de chaque atome Na, Mg et N.

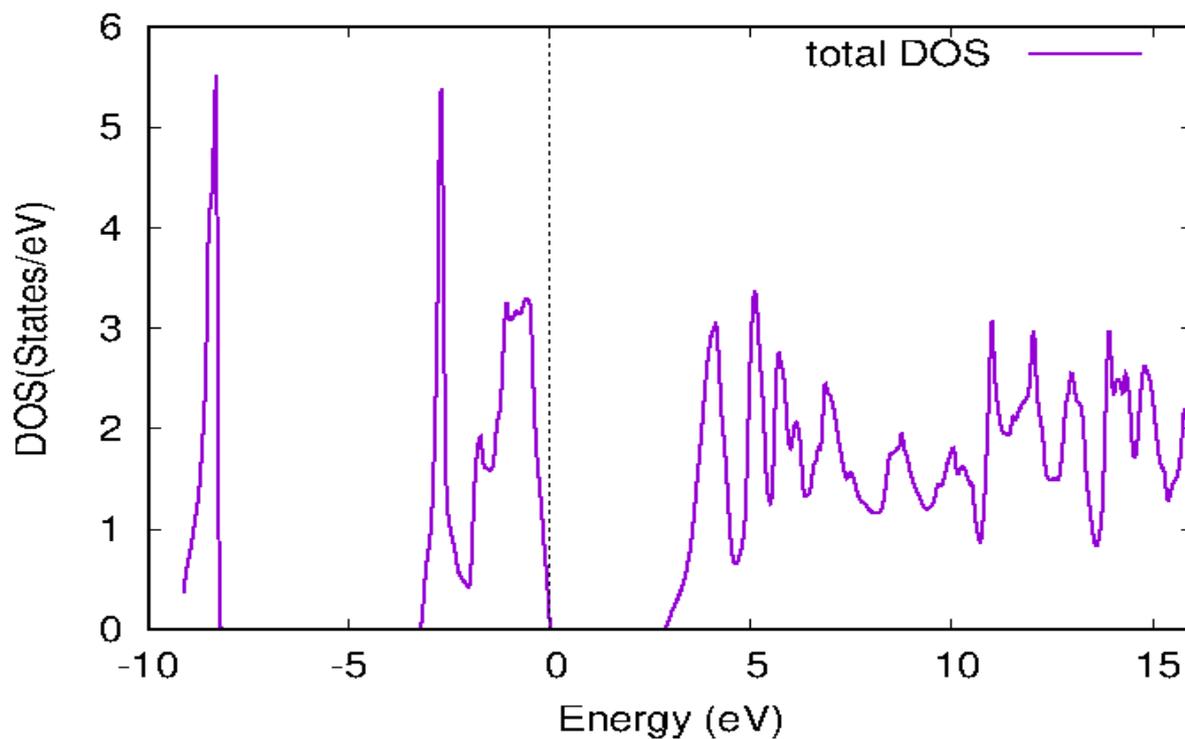


Figure II.11 : Densité d'états totale de NaMgP

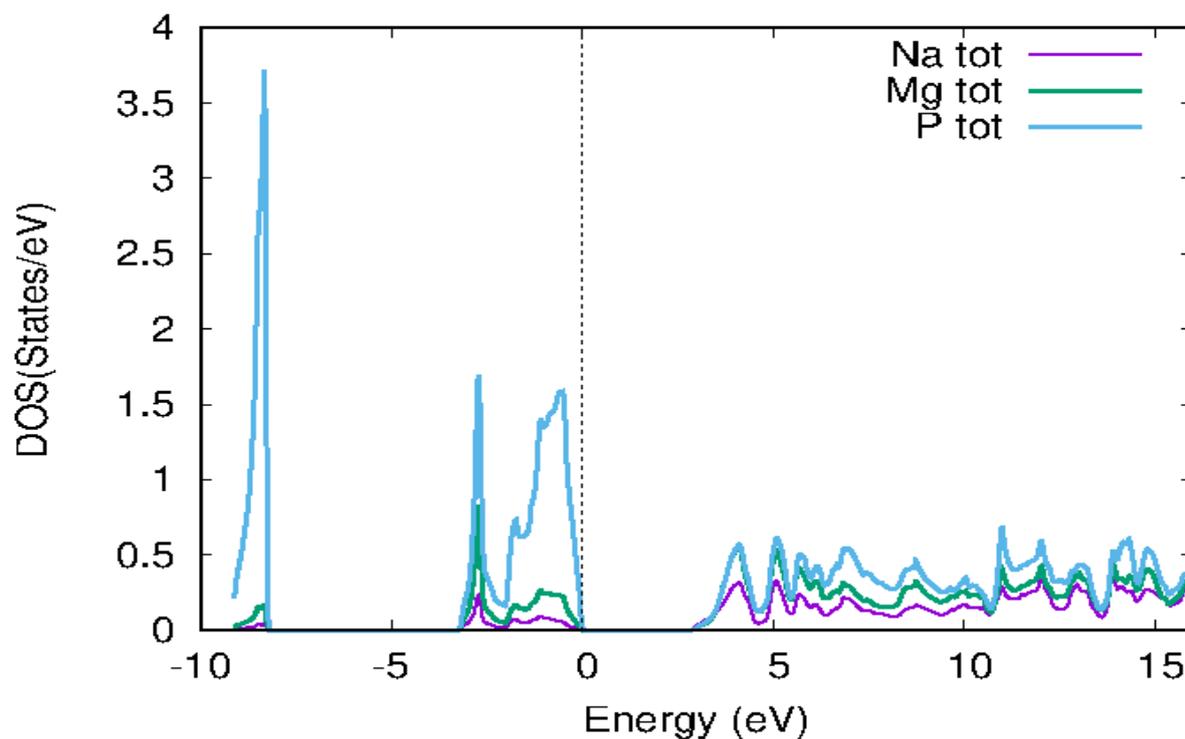


Figure II.12 : Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et N.

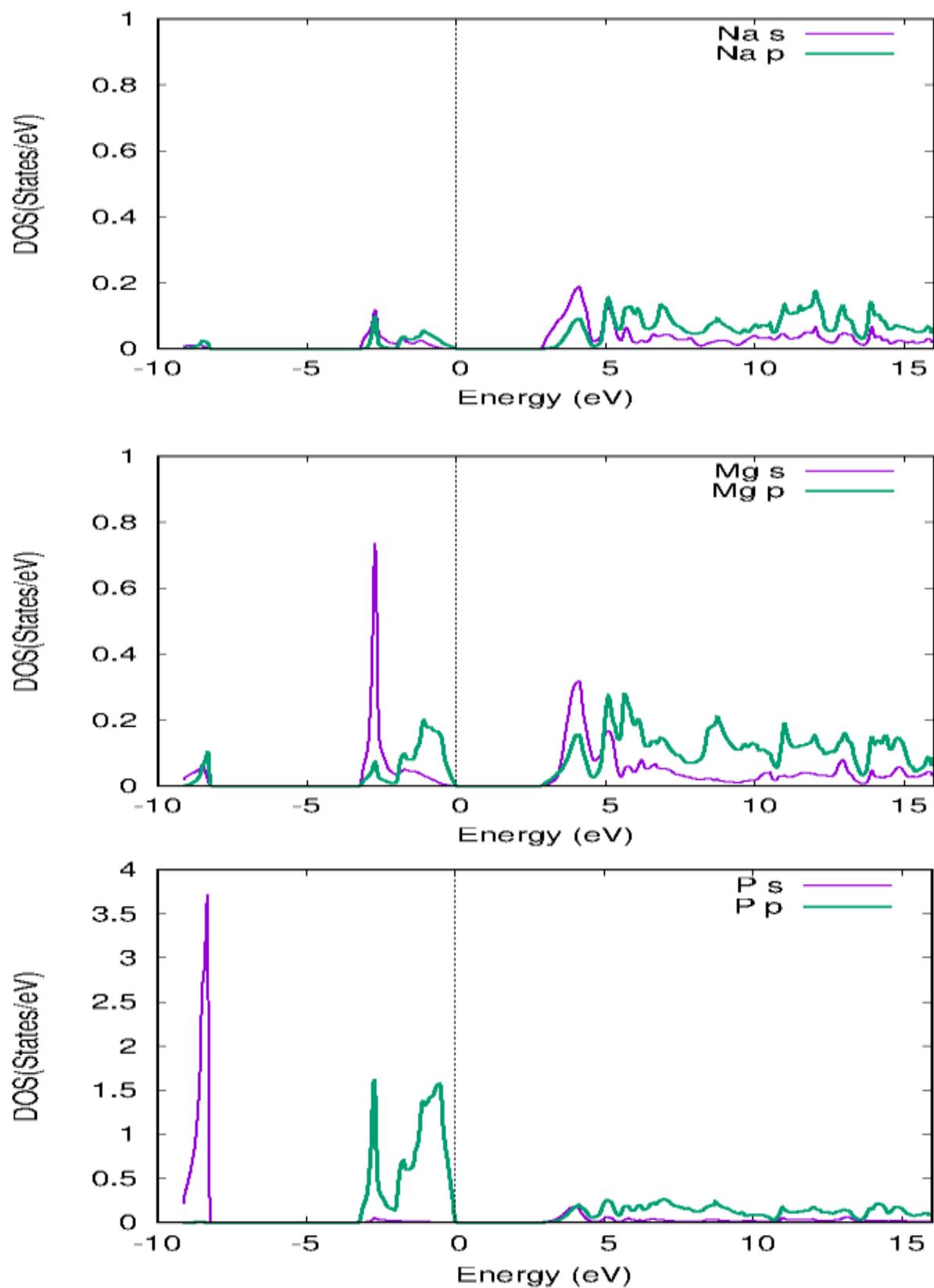


Figure II.13 : Densité d'états partielle de chaque atome Na, Mg et P.

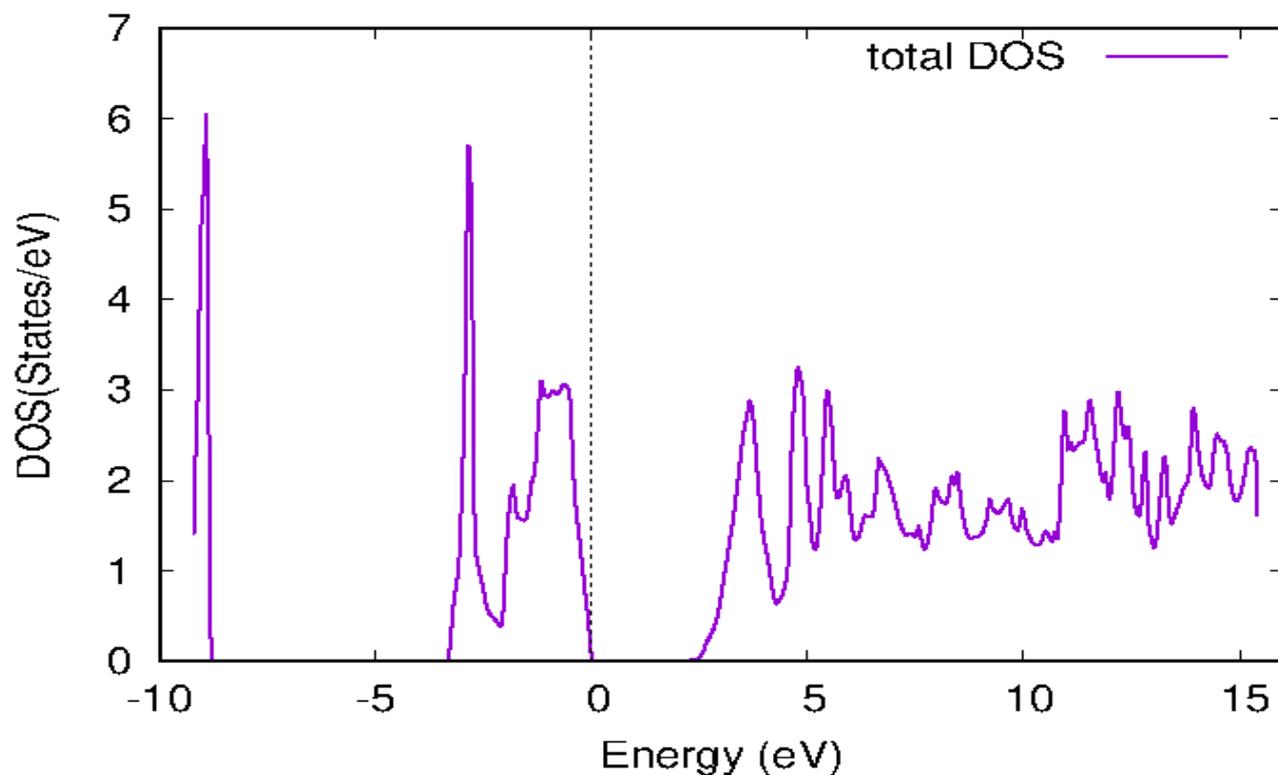


Figure II.14 : Densité d'états totale de NaMgAs

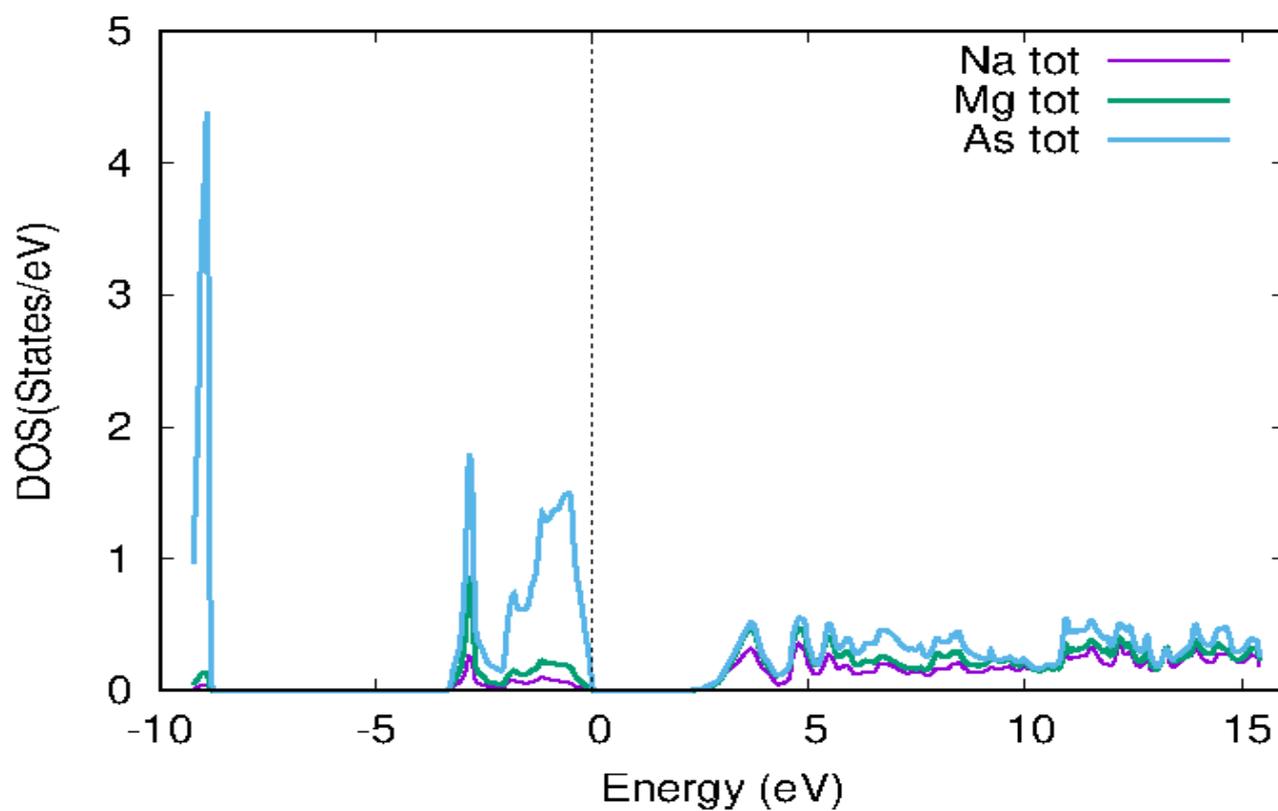


Figure II.15 : Densité d'états totale de chaque atome Na, Mg et As.

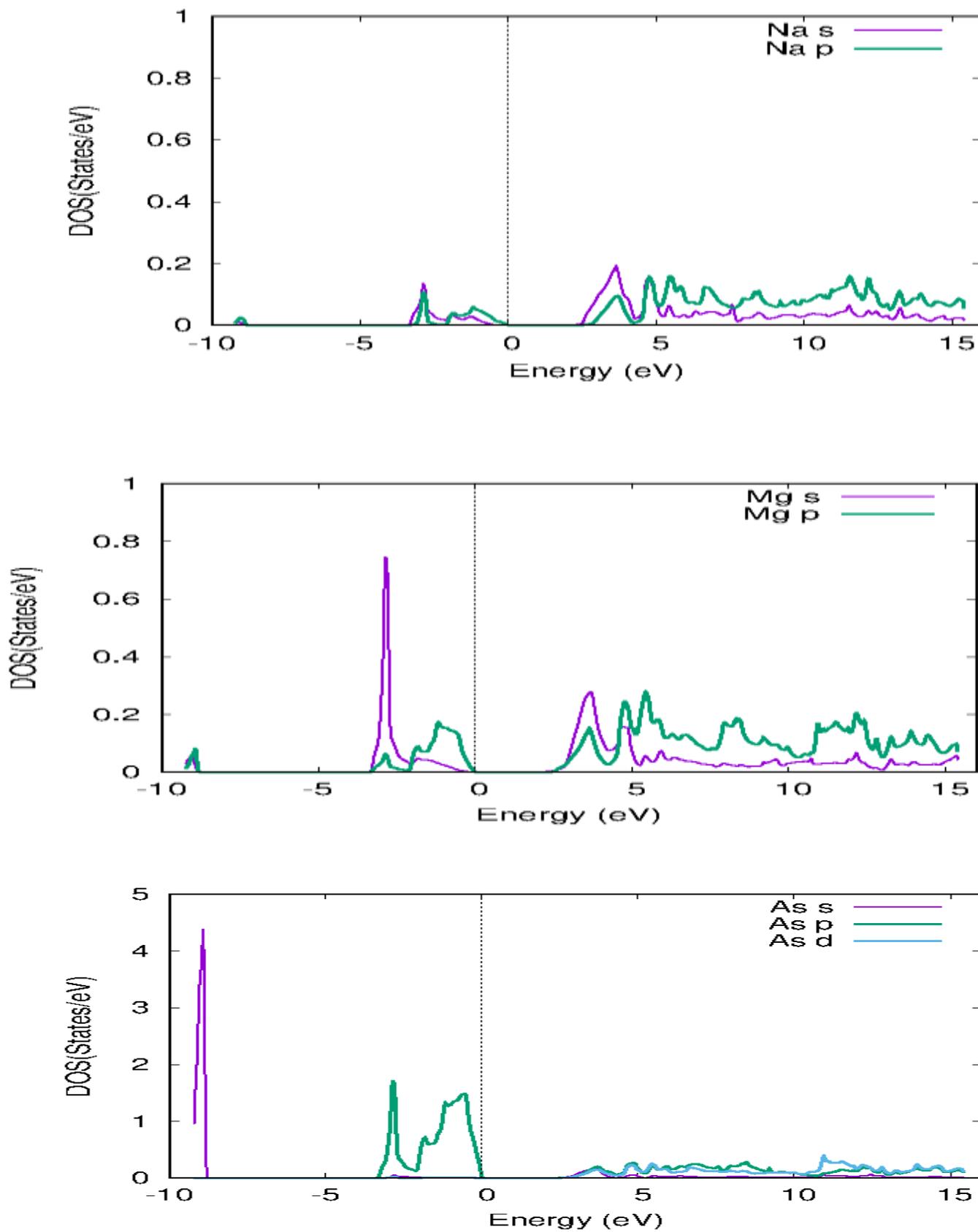


Figure II.16 : Densité d'états partielle de chaque atome Na, Mg et As.

Pour le demi Heusler NaMgN :

- L'intervalle énergétique [-3 eV ; 0 eV] est formé principalement par les états P de l'atome N.
- L'intervalle énergétique [3 eV ; 10 eV] est formé principalement par les états p de l'atome N et s de l'atome Mg avec une négligeable contribution des états s de l'atome Na.

Pour le demi-Heusler NaMgP :

Autour de -8.5 eV se situe les états s de l'atome P.

- L'intervalle énergétique [-3 eV ; 0 eV] est dominé par les états p de l'atome P avec une faible contribution des états s et p de l'atome Mg et une très faible contribution états s et p de l'atome Na.
- L'intervalle énergétique [3 eV ; 15,6 eV] est formé par les états p de l'atome P avec une contribution considérable des états p de l'atome Mg et les états p de l'atome Na.

Pour le demi Heusler NaMgAs :

Autour de -8.5 eV se situe les états s de l'atome As.

- L'intervalle énergétique [-3 eV ; 0 eV] est dominé par les états p de l'atome As avec une faible contribution des états s et p de l'atome Mg et une très faible contribution états s et p de l'atome Na.
- L'intervalle énergétique [2,5 eV ; 15 eV] est dominé par les états d de l'atome As avec une faible contribution des états p de l'atome Mg et p de atome Na.

Références

- 1- Ahmed, R., Masuri, N. S., Haq, B. U., Shaari, A., AlFaifi, S., Butt, F. K., ... & Tahir, S. A. (2017). Investigations of electronic and thermoelectric properties of half-Heusler alloys XMgN (X= Li, Na, K) by first-principles calculations. *Materials & Design*, 136, 196-203.
- 2- Singh, D. J., & Nordstrom, L. (2006). Planewaves, Pseudopotentials, and the LAPW method. Springer Science & Business Media.
- 3- Blaha, P., Schwarz, K., Madsen, G. K., Kvasnicka, D., & Luitz, J. (2001). wien2k. An augmented plane wave+ local orbitals program for calculating crystal properties, 60.
- 4- Wu, Z., & Cohen, R. E. (2006). More accurate generalized gradient approximation for solids. *Physical Review B*, 73(23), 235116.
- 5- Masuri, N. S., Ahmed, R., Shaari, A., Haq, B. U., Mohamad, M., Hussain, A., & Muhamad, M. N. (2016). First principles study of structural, electronic and optical properties of half-Heusler alloys LiMgN, NaMgN and KMgN. *Jurnal Teknologi*, 78(3).
- 6- Tran, F., & Blaha, P. (2009). Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. *Physical review letters*, 102(22), 226401
- 7- Birch, F. (1978). Finite strain isotherm and velocities for single-crystal and polycrystalline NaCl at high pressures and 300 K. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*, 83(B3), 1257-1268
- 8- Mehnane, H., Bekkouche, B., Kacimi, S., Hallouche, A., Djermouni, M., & Zaoui, A. (2012). First-principles study of new half Heusler for optoelectronic applications. *Superlattices and Microstructures*, 51(6), 772-784.
- 9- Arif, M., Murtaza, G., Ali, R., Khenata, R., Takagiwa, Y., Muzammil, M., & Omran, S. B. (2016). Elastic and electro-optical properties of XYZ (X= Li, Na and K; Y= Mg; Z= N, P, As, Sb and Bi) compounds. *Indian Journal of Physics*, 90(6), 639-647.
- 10- Mehnane, H., Bekkouche, B., Kacimi, S., Hallouche, A., Djermouni, M. and Zaoui, A. 2012. First-Principles Study of New Half Heusler for Optoelectronic Applications. *Superlattices and Microstructures*. 51(6): 772-784.

- 11- Hamidani, A., Bennecer, B., & Boutarfa, B. (2009). Structural and elastic properties of the half-Heusler compounds IrMnZ (Z= Al, Sn and Sb). *Materials Chemistry and Physics*, 114(2-3), 732-735.
- 12- Wu, H. Y., Chen, Y. H., Deng, C. R., Han, X. Y., & Liu, Z. J. (2015). Electronic, elastic and dynamic properties of the filled tetrahedral semiconductor LiMgN under pressures. *Journal of Solid State Chemistry*, 231, 1-6.
- 13- Mishra, A. R., & Pal, S. (2021). First-principles calculations to investigate electronic structure and magnetic, mechanical and thermodynamic properties of d0 half-Heusler LiXN (X= Na, K, Rb) alloys. *Solid State Sciences*, 118, 106633.
- 14- Marmier, A., Lethbridge, Z. A., Walton, R. I., Smith, C. W., Parker, S. C., & Evans, K. E. (2010). EIAM: A computer program for the analysis and representation of anisotropic elastic properties. *Computer Physics Communications*, 181(12), 2102-2115
- 15- Kacimi, S., Mehnane, H., & Zaoui, A. (2014). I-II-V and I-III-IV half-Heusler compounds for optoelectronic applications: Comparative ab initio study. *Journal of Alloys and Compounds*, 587, 451-458.
- 16- Kieven, D., Klenk, R., Naghavi, S., Felser, C., & Gruhn, T. (2010). I-II-V half-Heusler compounds for optoelectronics: Ab initio calculations. *Physical Review B*, 81(7), 075208.
- 17- Wu, Y., Wu, B., Wei, Z., Zhou, Z., Zhao, C., Xiong, Y., ... & Shao, Y. (2014). Structural, half-metallic and elastic properties of the half-Heusler compounds NiMnM (M= Sb, As and Si) and IrMnAs from first-principles calculations. *Intermetallics*, 53, 26-33.
- 18- Sin'ko, G. V., & Smirnov, N. A. (2002). Ab initio calculations of elastic constants and thermodynamic properties of bcc, fcc, and hcp Al crystals under pressure. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(29), 6989.
- 19- Poirier, J. P. (2000). *Introduction to the Physics of the Earth's Interior*. Cambridge University Press.

Conclusion générale

Nous avons calculé les propriétés structurales, élastiques et électroniques des alliages demi Heusler NaMgN, NaMgP et NaMgAs. Les calculs ont été effectués en utilisant la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées avec le potentiel total (FP-LAPW) implémentée dans le code WIEN2K basé sur le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Pour les propriétés structurales et élastiques nous avons utilisé l'approximation WC-GGA tandis que pour les propriétés électroniques nous avons utilisé l'approche TB-mBJ-LDA en plus de WC-GGA.

Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés structurales, nous avons déterminé le paramètre de réseau (a) le module de compressibilité (B) et sa dérivée première (B') de chaque alliage, nos résultats sont en bon accord avec d'autres calculs théoriquement disponibles dans la littérature. Ensuite, nous avons calculé les propriétés élastiques de nos alliages demi Heusler, les résultats obtenus montrent que les trois alliages étudiés ici sont mécaniquement stables, anisotropes et fragiles. Enfin, nous avons étudié le comportement électronique de ces alliages, nous constatons qu'ils sont des semi-conducteurs à gap direct, leurs gaps est de l'ordre de 2 eV, donc ils peuvent être de bons candidats pour les applications optoélectroniques.