



AVIS DE SOUTENANCE DE THESE

Le Doyen de la Faculté des Sciences Dhar El Mahraz –Fès – annonce que

Mr **TOUAL Youssef**

Soutiendra : le **Jeudi 19/12/2024 à 10H00**

Lieu : **Centre des Etudes Doctorales - USMBA - Amphi 2**

Une thèse intitulée :

Contribution à l'étude des propriétés physiques des alliages demi-Heusler à base de Lithium LiYZ (Y=Mg, Al, Ca et Z=Si,Ge, N) et des métaux de transition XMnZ (X=Co, Ni et Z=Se, Te, Sb)

En vue d'obtenir le **Doctorat**

FD : **Sciences et Techniques**

Spécialité : **Sciences des matériaux pour l'énergie et l'environnement**

Devant le jury composé comme suit :

Nom et prénom	Etablissement	Grade	Qualité
Pr REZZOUK Abdellah	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Président
Pr FAKRACH Brahim	Faculté des Sciences, Meknès	PES	Rapporteur
Pr CHAHBOUN Adil	Faculté des Sciences et Techniques, Tanger	PES	Rapporteur
Pr MASROUR Rachid	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Rapporteur
Pr RAHMOUNI Abdelaali	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examineur
Pr KHARBACH Jaouad	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examineur
Pr LEMZIOUKA Hamane	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	MCH	Examineur
Pr BENZAKOUR Najib	Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès	PES	Directeur de thèse



Résumé de la thèse

Une investigation des propriétés physiques des alliages demi-Heusler à base de métaux de transition XMnZ (X = Co, Ni et Z = Se, Te, Sb), ainsi que des alliages à base de lithium LiYZ (Y = Al, Mg, Ca et Z = Si, Ge et N), a été réalisée en utilisant la méthode des pseudo-potentiels et ondes planes basée sur la théorie de la fonctionnelle de densité, implémentée dans le code Quantum ESPRESSO. Le code thermo_pw a été utilisé pour estimer les propriétés élastiques et thermodynamiques, tandis que le code BoltzTraP a permis de calculer les propriétés thermoélectriques. La température de Curie de CoMnSe et NiMnSb a été déterminée par simulation Monte Carlo. Les propriétés thermodynamiques ont été obtenues en utilisant le modèle quasi-harmonique de Debye.

Les résultats des propriétés thermiques révèlent que les alliages examinés sont stables du point de vue thermodynamique. Les constantes élastiques, C_{11} , C_{12} et C_{44} calculées pour tous les alliages examinés satisfont aux critères de Born pour la stabilité mécanique, indiquant ainsi que les alliages étudiés sont mécaniquement stables. Les structures de bandes électroniques et les densités d'états montrent que les alliages demi-Heusler à base de lithium LiYZ sont des semi-conducteurs non magnétiques, tandis que les alliages demi-Heusler à base de métaux de transition XMnZ présentent des bandes interdites dans la région de spin-down, ce qui montre leur demi-métallicité et leur éventuelle applicabilité dans les dispositifs spintroniques.

Les alliages LiGaC (LiInSi) ont des bandes interdites électroniques de 0.96 eV (0.25 eV), et présentent la meilleure absorption de la lumière dans les régions ultraviolette et visible, ce qui va améliorer leur efficacité pour les cellules solaires et autres technologies optoélectroniques. Le coefficient de Seebeck élevé et la conductivité électrique des alliages LiMgN et LiCaN rendent ces matériaux prometteurs pour les applications thermoélectriques.

Les températures de transition ferromagnétique-paramagnétiques des alliages NiMnSb et CoMnSe, obtenues par simulation Monte Carlo, sont respectivement de 720 K et 420 K. Ces résultats concordent bien avec les données théoriques et expérimentales. De plus, avec des températures de Curie (T_C) supérieures à la température ambiante, ces alliages sont particulièrement adaptés aux dispositifs de spintronique fonctionnant à température ambiante.

Mots clés : DFT ; demi-Heusler ; Demi-métal ; Correction de Hubbard correction Spintronique ; Optoélectronique ; Photovoltaïque ; Thermoélectrique.



Abstract

A first-principles study was conducted to examine the structural, electronic, magnetic, elastic, thermodynamic, thermoelectric, and optoelectronic properties of transition metal-based half-Heusler alloys, XMnZ (X = Co, Ni and Z = Se, Te, Sb), as well as lithium-based alloys, LiYZ (Y = Al, Mg, Ca and Z = Si, Ge, N). This investigation utilized the plane-wave pseudopotential method based on Density Functional Theory (DFT) implemented in the Quantum ESPRESSO (QE) code. Elastic and thermodynamic properties were estimated using the thermo_pw code, while the BoltzTraP code was employed to calculate thermoelectric properties. The Curie temperatures of CoMnSe and NiMnSb were determined through Monte Carlo simulations within the Ising model. The structural stability of all the studied alloys was assessed using the Birch-Murnaghan equation of state, and thermodynamic properties were derived from the quasi-harmonic Debye model, taking phonon effects into account.

The results of the thermal properties indicate that the alloys examined are thermodynamically stable. The independent elastic constants C_{ij} for all the alloys studied meet the Born criteria for mechanical stability, confirming their mechanical stability. The electronic band structures and density of states reveal that the lithium based half-Heusler alloys LiYZ are non-magnetic semiconductors, whereas the transition metal-based half-Heusler alloys XMnZ show band gaps in the spin-down region, suggesting their demi-metallic nature and potential for use in spintronic devices.

The alloys LiGaC and LiInSi have electronic band gaps of 0.96 eV and 0.25 eV, respectively, and exhibit excellent light absorption in the ultraviolet and visible regions, enhancing their effectiveness for solar cells and other optoelectronic technologies. Additionally, the high Seebeck coefficient and electrical conductivity of LiMgN and LiCaN alloys make these materials promising for thermoelectric applications.

The ferromagnetic-paramagnetic transition temperatures of NiMnSb and CoMnSe alloys, obtained through Monte Carlo simulations, are 720 K and 420 K, respectively. These results are in good agreement with theoretical and experimental results. Moreover, with Curie temperatures (T_C) above ambient temperature, these alloys are particularly suitable for spintronic devices operating at ambient conditions.

Keywords : DFT ; Heusler ; Half-metal ; Hubbard correction; Spintronic ; Optoelectronic ; Photovoltaic ; Thermoelectric.