

Conclusion générale:

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales telles que la stabilité des phases, la constante du réseau, le module de rigidité ainsi que l'énergie totale d'équilibre, et les propriétés électroniques telles que (structure de bandes, densité d'états) des composés CeX (X=N, P, As, Sb et Bi)

Les calculs ont été effectués par la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé plusieurs approximations à savoir l'approximation LDA, l'approximation (GGA) et enfin celle de Engel-Vosko (EV-GGA).

L'objectif de ce travail consiste à étudier les propriétés structurales, électroniques, magnétique et thermique des CeX (X=N, P, As, Sb et Bi)

Nos résultats concernant les propriétés structurales telles que la constante de réseau, le module de compressibilité et l'énergie totale d'équilibre, qui sont obtenus par l'approximation GGA et LDA dans le cas magnétique, sont en excellent accord avec les résultats théoriques et les données expérimentales.

Nos résultats montrent que les CeBi se cristallisent dans la structure NaCl(B1) et subissent une transition vers la phase (B2) sous l'effet de la pression.

Nous utilisons les approximations GGA, EV-GGA, pour les calculs des propriétés électroniques.

Tous les composés CeX (N, P, As, Sb et Bi) sont des métaux pour le spin up, et pour le spin down nous avons les résultats suivantes:

- Les composés CeX (N, P et As), manifeste la phase B1 comme des métaux pour le spin up et down.
- Le composé CeBi se manifeste dans les deux phases B1 et B2 comme un métal pour le spin up et comme un demi-métal pour le spin down.
- Le composé CeSb se manifeste dans la phase B1 comme un métal pour le spin up et comme un demi-métal pour le spin down.

Parmi les grandeurs que nous avons les calculs figurent les densités d'états totales (DOS) et partielles (PDOS). Nous avons remarqué que les courbes des densités d'états

obtenus sont presque similaires pour les composés CeX (N, P, As, Sb et Bi) et que la contribution de l'atome Ce (précisément l'orbital f) est le beaucoup plus au niveau de fermi.

En utilisons la GGA, Le moment magnétique a été trouvé dans l'intervalle $[0.8\mu_B - 1\mu_B]$ pour les alliages CeX (N, P, As, Sb et Bi) et il a été conclu que l'atome X n'a aucun effet sur le moment magnétique.

Les propriétés thermiques sont prédites par le modèle quasi harmonique de Debye dans la gamme de pression de 0 à 10 GPa et de température de 0 à 1000 K. Cette étude nous a permis d'avoir une idée globale sur l'effet de la température et de la pression sur certains paramètres macroscopiques comme les capacités calorifiques C_v et C_p .

Le calcul des propriétés thermiques des CeX (X=N, P, As, Sb et Bi) en fonction de la température et de la pression montre le même comportement pour tous ces composées. Les résultats thermiques obtenus pour le composés binaires sont prédictifs vu l'absence de données expérimentales et théoriques relatives à ces propriétés dans la littérature

Cette étude nous a permis d'avoir une idée globale sur les propriétés étudiées de ces composées. Alors en raison de l'absence de données expérimentales concernant ces composées, ce travail sera certainement une contribution importante à littérature.