

Dédicace

*A tous ceux qui me
sont chers*

Remerciement

Tout d'abord, je remercie Dieu le tout
puissant pour la volonté la santé et la
patience et ma famille pour leur aide et leur
soutiens et leur disponibilité

Je tiens à remercier particulièrement mon
encadreur Melle. Fatiha Saadaoui qui a
accepté de superviser mon modeste de travail
qui a fourni des conseils précieux et ainsi
mon exigence de rigueur, et de l'orientation
et qui a largement attribué à la réalisation
et à l'achèvement de ce travail

Table des figures

2.1	Schéma de la partition de la maille unité en des sphères atomiques (région (I)) et une région interstitielle (région (II))	18
3.1	Variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k de $AlNTi_3$	25
3.2	Variation de l'énergie totale en fonction du $R_{MT}K_{max}$ de $AlNTi_3$	25
3.3	structure cristalline $AlNTi_3$	26
3.4	Variation du volume relatif de $AlNTi_3$ avec GGA-PBEsol, GGA-PBE et LDA	27
3.5	Structure de bande $AlNTi_3$	30
3.6	La densité d'états $AlNTi_3$	31
3.7	La densité de charge $AlNTi_3$	32

Liste des tableaux

- 3.1 Propriété structurales de $AlNTi_3$ avec $GGA - PBE$, $GGA - PBEsol$ et LDA 27
- 3.2 Paramètres élastiques de la phase monocristalline : constantes élastiques (C_{11} , C_{12} et C_{44} , en GPa), module de compression (B , en GPa), module de cisaillement ($G = C_{44}$, en GPa), compressibilité (β , en GPa^{-1}), pression de Cauchy (CP, en GPa) et facteur d'anisotropie de Zener (A), $P = 0$ et $T = 0$ 29

Table des matières

Introduction	7
CHAPITRE 1 – la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)	9
1.1 Introduction	9
1.2 la théorie de la fonctionnelle de la densité	9
1.2.1 Equation de Schrödinger	9
1.2.2 Approximation de Born-Oppenheimer	10
1.2.3 L'approximation de Hartree	11
1.2.4 L'approximation de Hartree-Fock	12
1.2.5 Les Théorèmes de Hohenberg et Kohn	13
1.2.6 La fonctionnelle d'échange et de corrélation	13
CHAPITRE 2 – la méthode des ondes planes linéairement augmentées	17
2.1 Introduction	17
2.2 La méthode de l'ondes planes augmentées	17
2.2.1 la base de APW	18
2.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)	19
2.3.1 Principe de la méthode LAPW	19
2.4 La base LAPW avec les orbitales locales (LAPW+Io)	20
2.4.1 La méthode LAPW+Io	20
2.4.2 La méthode APW+Io	21
CHAPITRE 3 – Propriétés structurales, élastiques et électroniques	23
3.1 Calculs	24
3.1.1 Texte de convergence	24
3.2 structure cristalline	26
3.3 Résultats et discussion	26
3.3.1 Propriétés structurales	26
3.3.2 Les propriétés élastiques	28
3.3.3 Propriétés électroniques	30
Conclusion	35

INTRODUCTION

Les matériaux de l'anti pérovskite sont de nouveaux matériaux de formule générale AXM_3 où A et M sont des métaux et ($X = C, N$) .constitue un domaine très actif de la Recherche et de la technologie. Plusieurs auteurs ont étudié les propriétés physiques de ces matériaux avec différentes méthodes base sur la théorie fonctionnelle de la densité (DFT) et de différentes approximations. Dans ce travail, nous avons concentré principalement sur l'étude des propriétés des anti-pérovskites $AlNTi_3$ en utilisant la méthode des ondes planes augmentées linéairement (*LAPW*) basée sur la théorie fonctionnelle de la densité implémentée dans le code wien2k les plus précises et la plus utilisée avec les trois approximations l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (*GGA – PBE*) et (*GGA – PBEsol*). Pour traiter le potentiel d'échange et de corrélation utilisés pour calcul les propriétés structurales. D'autre côté, nous avons calculé les propriétés électroniques et élastiques avec l'approximation du gradient généralisé (*GGA-PBEsol*) en donnant des résultats de paramètres de réseau plus proches des mesures expérimentales. Notre travail étant basé sur la comparaison entre les données expérimentales et celles d'autres calculs théoriques. Le but de cette thèse s'intéresse à l'étude de la nature du matériau $AlNTi_3$ c.-à-d. les propriétés structurales, élastiques et les propriétés électroniques

Cette thèse se compose de trois chapitres. Dans le premier chapitre nous représentons la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT nous rappelons l'équation de Schrödinger avec l'approximation de Born-Oppenheimer, Hartree et Hartree Fock et les approximations de la densité locale et du gradient. Le deuxième chapitre représente la méthode des ondes planes augmentées linéairement, Généralisée... etc. Le troisième chapitre est consacré aux résultats obtenus avec discussions globales aux propriétés structurales, électroniques et élastiques du matériau $AlNTi_3$ ainsi qu'une comparaison avec les travaux théoriques et expérimentaux disponibles. Enfin, les conclusions de nos résultats sont résumées dans la Section 4.

LA THÉORIE DE LA FONCTIONNELLE DE LA DENSITÉ (DFT)

1.1 Introduction

La compréhension des différentes propriétés physique des matériaux consiste à étudier le système d'électrons en interaction entre eux et avec les ions. Le calcul de ses propriétés à l'état fondamental d'un système à N électrons dans un cristal est très difficile, du fait que chaque particule interagit avec toutes les autres particules. L'équation de Schrödinger devient de ce fait mathématiquement insoluble. Plusieurs approximations ont été faites pour pallier à cette situation difficile. Une des méthodes utilisées est la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) développée par Hohenberg et Kohn^[1]. La (DFT) est la méthode la plus efficace pour

1.2 la théorie de la fonctionnelle de la densité

1.2.1 Equation de Schrödinger

Le problème général peut être posé sous la forme d'une équation du mouvement de toutes les particules présentes dans le cristal. L'hamiltonien exact du cristal (non relativiste) résulte de la présence des forces électrostatiques d'interaction : Répulsion ou attractions suivant la charge des particules (ions, électrons).

$$T_n = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{R}_i}{M_n} \quad (1.1)$$

$$V_{n-e} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.2)$$

$$T_e = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{R}_i}{M_e} \quad (1.3)$$

$$V_{e-e} = -\frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (1.4)$$

$$V_n = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1.5)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{M_n} - \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{M_e} - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (1.6)$$

Généralement l'hamiltonien H est donné par :

$$H = T_n + T_e + V_{e-n} - V_{e-e} + V_n \quad (1.7)$$

T_n : est l'énergie cinétique des noyaux.

V_n : L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

V_{e-n} : L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

V_{e-e} : L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

T_e : L'énergie cinétique des électrons.

M_e : masse de l'électron i.

M_n : la masse du noyau.

Z_i : sa charge.

L'équation fondamentale à résoudre pour décrire la structure électronique d'un système à plusieurs noyaux et électrons est l'équation établie par Erwin Schrödinger (1887-1961) en 1925, appelée depuis équation de Schrödinger, et qui s'écrit :

$$H\Psi = E\Psi \quad (1.8)$$

1.2.2 Approximation de Born-Oppenheimer

L'approximation de Born-Oppenheimer [2] consiste à simplifier la résolution de l'équation de Schrödinger en séparant la partie électronique de la partie nucléaire dans la fonction d'onde. Cette approximation est basée sur le fait que les électrons étant plus légers que les noyaux (la masse d'un proton est égale à 1836 fois celle de l'électron), ils se déplacent plus rapidement et par conséquent réagissent instantanément à toute modification de la position des noyaux.

$$T_n = 0$$

$$V_{n-n} = \text{constante}$$

L'équation de Schrödinger peut ainsi être séparée en une partie nucléaire et une partie électronique. La fonction d'onde approchée du système, solution de cette équation, s'écrit alors sous la forme d'un produit de deux fonctions :

$$\Psi(R, r) = \Psi_e(r, R) \quad (1.9)$$

$\Psi_e(r, R)$ la fonction d'onde électronique pour des positions données des noyaux figés.

Les positions des électrons et des noyaux sont désignées respectivement par r et R .

L'hamiltonien dans ce cas s'écrit :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_i \frac{\nabla^2 \vec{r}_i}{M_e} - \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i,j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{8\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i \neq j} \frac{e^2 Z_i}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} = cte \right) \quad (1.10)$$

$\hat{H}_e$ l'opérateur électronique.

Par suite, l'équation de Schrodinger électronique s'écrit :

$$\hat{H}_e(r, R) \Psi_e(r, R) = \epsilon(R) \Psi_e(r, R) \quad (1.11)$$

Pour résoudre cette équation de Schrödinger il ya autre approximation

1.2.3 L'approximation de Hartree

Partant du constat-presque trivial-qu'un atome avec un cortège électronique pouvant atteindre une centaine d'électrons est un système complexe à étudier, et sachant que l'on ne sait exactement traiter que le cas d'un atome avec un seul électron (l'atome d'hydrogène), il devient presque intuitif de chercher une méthode permettant de résoudre le problème de l'atome réel complexe sur la base du cas mono-électronique.

Dans l'approximation de Born-Oppenheimer découplant le mouvement des électrons de celui des noyaux ; la fonction d'onde électronique s'écrit :

$$\Psi(r_1, r_2, \dots, r_Z) = \Phi(r_1) \Phi(r_2) \dots \Phi(r_Z) \quad (1.12)$$

Les équations de Schrödinger mono-électronique dans l'approche de Hartree [3] s'écrivent :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_i(r) + V_e f f(r) = E_i \Psi_i(r) \quad (1.13)$$

Les vecteurs r et R expriment les positions spatiales de l'électron et du noyau respectivement. Dans l'équation (1.8) le premier terme correspond à l'énergie cinétique et $V_e f f(r)$ est le potentiel que subit l'électron, dit effectif. Le choix de ce potentiel est tel que l'équation (1.8) à une solution. Celle-ci est basée sur le principe variationnel. En outre, ce potentiel doit tenir compte de l'interaction électron-noyau :

$$V_N(r) = -Z_e^2 \sum_R \frac{1}{|r - R|} \quad (1.14)$$

Dans l'approximation de Hartree on considère que les autres électrons forment une distribution de charge négative $\rho(r')$.

En outre, l'électron se déplace dans un potentiel électrostatique moyen $V_e(r)$ provenant de l'ensemble des électrons voisins exprime par :

$$V_H(r) = -e \int d^3r' \rho(r') \frac{1}{|r-r'|} \quad (1.15)$$

Enfin on exprime le potentiel effectif comme la somme de ces deux contributions :

$$V_{eff}(r) = V_H(r) + V_N(r) \quad (1.16)$$

Il est important de signaler que le terme (1.9) est a un seul centre, en r , alors que (1.10) est a deux centres, en r et r' . nous en verrons la conséquence dans les approches suivantes. les fonctions propres résultant de la solution de l'équation (1.8) permettant de calculer une nouvelle densité électronique :

$$\rho(r) = \sum_i \Psi_i^*(r) \Psi_i(r) \quad (1.17)$$

La relation densité -potentiel est obtenue par l'équation de poisson :

$$\Delta V_h(r) = \rho(r)/\epsilon_0 \quad (1.18)$$

On $V_H(r)$ est le potentiel de Hartree en r et $\rho(r)$ est la densité électronique ϵ_0 est le constant diélectrique du vide. ceci sous-tend bien le cycle auto-cohérent, puisque la fonction d'onde et la densité électronique (et donc le potentiel) sont inter-dépendantes. un grand mérite de cette approche est donc d'avoir propose une solution auto-cohérente au problème du système électronique.

1.2.4 L'approximation de Hartree-Fock

La théorie utilise le principe variationnel et se base sur le fait que l'énergie calculée pour un état électronique donne d'un système d'écrit par une fonction d'onde de type variationnelle est toujours supérieurs a l'énergie que l'on obtiendrait ce même état en utilisant une fonction d'onde exacte Equations de Hartree-fock [4] :

La fonction d'onde $\psi_i = |r_1, r_2, \dots, r_n|$ construite sous la forme d'un déterminant de Salter est utilisée pour résoudre l'équation (1.2,1.3) et calculer l'énergie électronique correspondante :

(1.19)

Si on fait l'hypothèse que ces orbitales correspondent à un minimum de l'énergie, on doit vérifier qu'une petite modification apportée à une orbitale quelconque, qui n'en modifie ni l'orthogonalité aux autres orbitales, n'entraîne pas de variation de l'énergie. Cette

condition impose aux orbitales d'être fonctions propres d'un opérateur F appelé opérateur de Fock. les équations de Hartree-Fock (2) correspondantes déterminent ces orbitales :

$$F(1)\Psi_i(1) = \varepsilon_i\Psi_i(1) \quad (1.20)$$

$$F(1) = H^C(1) + \sum_i J_i(1) - K_i(1) \quad (1.21)$$

$$J_i(1) = \int_{(2)} \Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_i(2) d\tau_2 \quad (1.22)$$

$$K_i(1)\Psi_i(1) = \Psi_i(1) \int_{(2)} \Psi_i^*(2) \frac{1}{r_{12}} \Psi_i(2) d\tau_2 \quad (1.23)$$

Les opérateurs J et K portent le nom d'opérateur colombien et d'opérateur d'échange. ε_i : l'énergie de l'orbitale i correspondante.

Dans la théorie de la fonctionnelle de densité, les propriétés de l'état fondamental d'un système de particule interagissant entre-elle sont exprimées en fonction de la densité électronique.

Notons cependant que la DFT a été réellement établie avec l'approximation des théorèmes fondamentaux escalés d'Hohenberg et Kohn en 1964 () qui relie l'énergie de l'état fondamental et sa densité de façon unique.

1.2.5 Les Théorèmes de Hohenberg et Kohn

Le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est basé sur deux Théorèmes de Hohenberg et Kohn [1].

L'utilisation de la densité de charge comme fonction principale permet de reformuler le problème de la résolution de l'équation Schrödinger électronique dans un langage de type champ moyen classique qui conduit néanmoins en principe à la solution exacte pour l'état fondamental.

Le premier théorème de hohenberg et Kohn :

Si on considère un gaz d'électrons, le potentiel externe agissant sur ces particules de termine l'état fondamental de ce système et la densité de charge correspondent.

L'énergie totale d'un système à l'état fondamental est également une fonctionnelle unique universelle de la densité électronique.

Le deuxième théorème de hohenberg et Kohn :est un principe vibrationnel analogue à celui propose initialement dans l'approche Hartree-Fock pour une de la fonction d'onde $\partial E(\psi)/\partial E$, mais applique cette fois à une fonctionnelle de la densité électronique ()

1.2.6 La fonctionnelle d'échange et de corrélation

à résolution des équations de Kohn et n'est possible qu'en donnant une forme analytique à l'énergie d'échange et de corrélation. Les approximations les plus utilisées sont :

L'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA).

L'approximation de la densité locale (LDA)

L'approximation de la densité locale (LDA)[5] consiste à traiter un système inhomogène, comme localement homogène (gaz uniforme d'électrons en interaction où ρ est constante) ; par suite l'énergie d'échange et de corrélation dépend uniquement de la densité électronique en un point r , négligeant toute influence de l'inhomogénéité du système (on considère que la densité varie très lentement).

$$V_{XC}^{LDA}(\vec{r}) = \frac{\delta(\rho(\vec{r})\epsilon_{XC}^{LDA}[\rho(\vec{r})])}{\delta\rho(\vec{r})} \quad (1.24)$$

L'énergie d'échange pour un gaz d'électrons uniforme est donnée par la formule de Dirac :

$$E_X^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -C_X \int \rho^{4/3}(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.25)$$

$$E_X^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -C_X \rho^{1/3}(\vec{r}) \quad (1.26)$$

Dans le cas des matériaux magnétiques, le spin électronique fournit un degré supplémentaire et la LDA doit alors être étendue à l'approximation de la Densité de Spin Locale (LSDA : Local Spin Density approximation)

$$E_X^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -2^{1/3} C_X \int \left[\rho_{\downarrow}^{4/3}(\vec{r}) + \rho_{\uparrow}^{4/3}(\vec{r}) \right] d\vec{r} \quad (1.27)$$

$$\epsilon_x^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -2^{1/3} C \left[\rho_{\downarrow}^{4/3}(\vec{r}) + \rho_{\uparrow}^{4/3}(\vec{r}) \right]_x \quad (1.28)$$

L'approximation LSDA peut également être formulée à partir de la densité totale et de la polarisation de Spin :

$$\epsilon_X^{LDA}[\rho(\vec{r})] = -\frac{1}{2} C_X \rho^{1/3} \left[(1 + \epsilon)^{4/3} \right]_X \quad (1.29)$$

L'approximation du gradient généralisé (GGA)

L'approximation du gradient généralisé a été introduite pour améliorer la précision des résultats de la LDA.

Elle consiste à écrire l'énergie d'échange et de corrélation non seulement en fonction de la densité électronique mais aussi de son gradient $\nabla\rho$ pour prendre en compte le caractère non uniforme du gaz d'électrons.

Elle s'écrit :

$$E_{XC}^{GGA}[\rho(\vec{r})] \approx \int \epsilon_{XC} \left[\rho(\vec{r}), \left| \nabla\rho(\vec{r}) \right| \right] \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (1.30)$$

$\epsilon_{XC} \left[\rho(\vec{r}), \left| \nabla\rho(\vec{r}) \right| \right] \rho(\vec{r}) d\vec{r}$ l'énergie d'échange -corrélation par électron dans le système d'électron en interaction mutuelle de densité non uniforme. l'utilisation d'une

fonctionnelle de type GGA permet en effet d'accroître de façon significative la précision des calculs comparativement à la description fournie par la LDA, en particulier pour l'énergie de liaison des molécules.

Bibliographie

- [1] P.Hohenberg, W.Kohn, *phys.Rev. B* 136,864(1964).
- [2] M.Born, J.R.Oppenheimer, *Ann. Phys.* 87, 457(1927).
- [3] :D.R.Hartree, *Proc Cambridge Phil Soc*, 24 1928 89
- [4] :V.Fock, *Z.Phys.* 61,126 (1930), 62,795 (1930)
- [5] :L.J.Sham, W.Kohn, *Phys.Rev.*, 145,561(1966).

LA MÉTHODE DES ONDES PLANES LINÉAIREMENT AUGMENTÉES

2.1 Introduction

La théorie de la fonctionnelle de la densité est une approche puissante pour le traitement du problème à plusieurs corps. Cependant il est important de faire le choix convenable d'une base de fonctions d'onde pour la résolution des équations de Kohn-Sham. Il existe plusieurs méthodes qui permettent de résoudre l'équation de *Schrödinger*. Ces méthodes diffèrent par la forme utilisée du potentiel et par les fonctions d'onde prises comme base. Parmi elles, les métaux de transitionnels méthodes des ondes, planes orthogonales (OPW) et leurs dérivées applicables aux bandes de conduction de caractère "s-p" des métaux simplets les méthodes cellulaires du type ondes planes augmentées (APW). Les méthodes linéarisées mises au point par Andersen[1] : ondes planes augmentées linéarisées (LAPW) et orbitales "muffin-tin" (LMTO), permettent de gagner plusieurs ordres de grandeur dans les temps de calcul.

2.2 La méthode de l'ondes planes augmentées

Au voisinage d'un noyau atomique, le potentiel et les fonctions d'onde sont de la forme 'Muffin-Tin' (MT) présentant une symétrie sphérique à l'intérieur de la sphère MT de rayon $R\alpha$. Entre les atomes, le potentiel et les fonctions d'onde peuvent être considérés comme étant lisses.

En conséquence, les fonctions d'ondes du cristal sont développées dans des bases différentes selon la région considérée : solutions radiales de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la sphère MT et ondes planes dans la région interstielle.

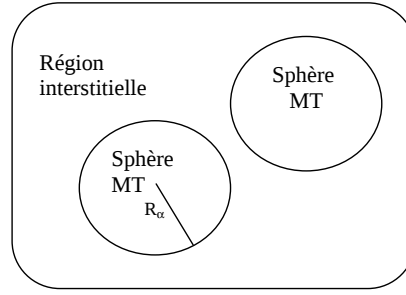


FIG. 2.1 – Schéma de la partition de la maille unitaire en des sphères atomiques (région (I)) et une région interstitielle (région (II))

2.2.1 la base de APW

L'utilisation d'une base d'onde planes combinée à un pseudo-potentiel, développée auparavant, représente une méthode sans doute très utile, cependant elle peut se révéler insuffisante quant à la description des informations contenues dans la région proche des noyaux.

La première alternative est la base APW introduite par Slater [2],[3], cette méthode en soi n'intervient dans aucune application de nos jours, cependant des améliorations apportées à cette dernière l'ont rendue plus intéressante.

La méthode des ondes planes augmentées et linéarisées (LAPW) représente une amélioration de la méthode APW. Cette méthode utilise une base mixte, plus efficace qu'une base d'onde planes.

Alors la fonction :

$$\Phi_{\vec{k}}^{\vec{r}}(\vec{r}, E) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}'). \cdot \vec{r}} \\ \sum_{l,m} A_{lm}^{\alpha} u_l^{\alpha}(r, E) Y_{lm}(\vec{r}) \end{cases} \quad (2.1)$$

où Ω est le volume de la cellule, S est la sphère et I est l'interstitielle ; $G_{\vec{k}}$ et A_{lm}^{α} les coefficients du développement en harmoniques sphériques Y_{lm} et la fonction $u_l(r)$ est une solution régulière de l'équation de Schrödinger pour la partie radiale qui s'écrit sous la forme :

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V^{\alpha}(\vec{r}) - E_l \right\} u_l^{\alpha}(r, E) = 0 \quad (2.2)$$

$V^{\alpha}(\vec{r})$ la composante sphérique du potentiel à l'intérieur de la sphère "Muffin-Tin".
 E_l l'énergie de linéarisation.

Les fonctions radiales définies selon cette équation sont orthogonales à tout état propre du cœur.

Cette orthogonalité disparaît en limite de sphère comme on peut le remarquer à partir de l'équation de Schrödinger suivante :

$$(E_2 - E_1) u_1 u_2 = u_2 \frac{d^2 u_1}{dr^2} - u_1 \frac{d^2 u_2}{dr^2} \quad (2.3)$$

u_1 et u_2 sont des solutions radiales pour les énergies E_2 et E_1

Slater a justifié l'utilisation de ces fonctions en remarquant que :

1-les ondes planes sont les solutions de l'équation de Schrödinger lorsque le potentiel est constant.

2-les fonctions radiales sont solutions de l'équation de Schrödinger dans un potentiel sphérique lorsque E_1 est égale à une valeur propre.

De manière à assurer la continuité de fonction $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}, E)$ une condition doit être appliquée, elle correspond à exprimer les coefficients A_{lm}^α en fonction des $G_{\vec{k}}$ à partir du développement en harmoniques sphériques des ondes planes. Cette procédure conduit à la condition.

$$A_{lm}^\alpha = \frac{4\pi i^l}{\Omega^{1/2} u_l^\alpha(R_\alpha)} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}} \left(\left| \vec{k} + \vec{k} \right| R_\alpha \right) Y_{lm}^*(\vec{k} + \vec{k}) \quad (2.4)$$

A_{lm}^α sont complètement déterminées par les coefficients $G_{\vec{k}}$ et les paramètres E_l qui constituent les coefficients vibrationnels dans cette méthode. Les fonctions individuelles étiquetées par k deviennent ainsi des ondes planes ajustées à des fonctions radiales dans les sphères "Muffin-Tin" et correspondent de ce fait à des ondes planes augmentées (Augmented Plane Wave).

La méthode LAPW fournit une base plus flexible et plus précise pour le calcul de la structure de bandes des réseaux cristallins. Cette procédure reprend la partition de l'espace en deux zones. L'amélioration apportée dans ce formalisme comparativement à la méthode APW concernant le fait que les fonctions de base dans les sphères MT sont des combinaisons linéaires des fonctions radiales multipliées par des harmoniques sphériques.

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V(\vec{r}) - E_l \right\} r u_l(r) = r u_l(r) \quad (2.5)$$

Dans un traitement non-relativiste, les fonctions radiales u_l assurent, à la surface de la sphère MT, la continuité avec les ondes planes.

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}, E) = \begin{cases} \frac{1}{\Omega^{1/2}} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}) \cdot \vec{r}} R_\alpha(\vec{r} \in II) \\ E_{lm} [A_{lm}^\alpha u_l(\vec{r}) + B_{lm}^\alpha u_l(r)] Y_{lm}(\vec{r}) R_\alpha(\vec{r} \in I) \end{cases} \quad (2.6)$$

2.3 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)

2.3.1 Principe de la méthode LAPW

Le code qui a été utilisé pour obtenir les résultats présentés dans cette thèse est le code Wien2K[4]. Si l'organisation de ce code et principe de fonctionnement, il est préférable d'introduire d'ores et déjà la méthode (c'est-à-dire la base de fonctions mono-électroniques utilisées pour résoudre les équations de Kohn et Sham) sur laquelle ce code repose. Wien2K est un code Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave (FP-LAPW) qui

permet d'étudier un cristal infini et périodique .la méthode FP-LAPW consiste a partitionner l'espace en deux parties : $S\alpha$ une région à l'intérieure de sphères atomiques (V qui entourent les noyaux (d'indice) et ne se chevauchent pas, $S\alpha$ a région hors des sphères ,appelée région interstitielle . si l'on considère que dans une région éloignée des noyaux (dans la région (I), les électrons sont plus ou moins libres ,et qu'a proximité du noyau (dans la région (S),ils se comportent plus ou moins comme s'ils étaient dans un atome isolé ,il possible de décrire les fonctions d'onde électronique différemment à l'intérieur et à l'extérieur des sphère.

L'application des différentes méthodes et approximations décrite jusqu'à présent va en effet reposer sur un développement de ces fonction d'onde sur une base de fonctions, les (L) APW,le choix de cette base comme cruciale pour la précision des résultats et le temps de calcul requis .

Méthodes de calcul de la structure électronique contrairement aux codes utilisant des pseudo-potentiels et une base entièrement d'ondes planes ,l'utilisation de la méthode (L)APW revient à utiliser une expression des fonction de base différente dans les deux région ($S\alpha$)et (I) définies précédemment.

Les fonctions d'onde sont développées sur une base d'harmonique sphérique dans ($S\alpha$) et sur une base d'onde planes dans (I).

Cette base peut de plus .être augmentée grâce à ajout de nouvelles fonctions Io (local orbital) entièrementcontenues dans les sphères atomiques et qui permettent de mieux décrire les états de semi-cour. le code Wien2K propose un choix entre les base APW(+ Io) et LAPW(Lo).

2.4 La base LAPW avec les orbitales locales (LAPW+ Io)

2.4.1 La méthode LAPW+ Io

Dans notre cas développement de la méthode LAPW en orbitales locales consiste à modifier les orbitales de sa base pour éviter l'utilisation de plusieurs fenêtres ,en utilisant une troisième catégorie de fonction de base .L'idée principale est traiter toutes des bandes avec une seule fenêtre d'énergie .Singh[5] a proposé une combinaison linéaire de deux fonction radiales correspondant à deux énergies différentes et de la dérivée par rapport à l'énergie de l'une de ces fonctions ce qui donne naissance à la méthode LAPW+ Lo :

$$\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{if } \vec{r} \in I \\ \left(\alpha^{1,LO} u_1^{\alpha'}(r, E_I) + B_{lm}^{\alpha'LO} u_1^{\alpha'}(r, E_I) + C_{lm}^{\alpha',LO} u_I^{\alpha'}(r, E_{LO}) \right) Y_{lm}(\vec{r}) & \text{if } \vec{r} \in I \end{cases} \quad (2.7)$$

Ou les coefficients sont de la même nature que les coefficient et définis précédemment. par ailleurs, cette modification diminue l'erreur commise dans le calcul des bandes de conduction et de valence.

2.4.2 La méthode APW+Io

Une base APW+Io et donc définie par association des fonctions suivantes :

1-Des fonctions APWs pour un jeu d'énergies fixées E :

$$\Phi_{\vec{k}} = \begin{cases} \frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}} G_{\vec{k}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}).\vec{r}} \\ \sum_{l,m} A_{lm}^{\alpha} u_1^{\alpha}(r, E_l) Y_{lm}(\vec{r}) r R_{\alpha}(\vec{r} \in I) \end{cases} \quad (2.8)$$

2-Des orbitales locales :

$$\Phi_{\vec{k}} = \begin{cases} 0 r R_{\alpha}(\vec{r} \in II) \\ \left(A_{lm}^{\alpha', LO} u_1^{\alpha'}(r, E_l) + B_{lm}^{\alpha' LO} u_1^{\alpha'}(r, E_l) \right) Y_{lm}(\vec{r}) r R_{\alpha}(\vec{r} \in I) \end{cases} \quad (2.9)$$

Les orbitales locales ne sont plus notée Lo comme dans le cadre de la méthode LAPW+Lo mais Io de manière à les différencier .les orbitales locales Io sont relativement similaires aux orbitales Lo mais elles se distinguent de ces dernières par le fait que les coefficients et ne dépendent plus de K et sont désormais déterminés par la condition que ces orbitales Io sont nulles en limite sphère et normalisées. Ainsi, les orbitales APW et les orbitales Io sont tous deux continues en limite de sphère tandis que leurs dérivées premières son discontinues.

Cette base donne des résultats aussi satisfaisant que la méthode LAPW+Lo tout en permettant de réduire le produit R K d'une valeur environ égale à un .ce la correspondà une diminution de la taille de base d'environ 50 qui permet d'abaisser le temps de calcul d'un ordre de grandeur comparativement à la méthode LAPW+Lo.

Bibliographie

- [1] :O.K.Andersen, Phys.Rev.B12,3060(1975)
- [2] :J.C.Slater, QuantumTheory of Molecules and solids, Vol.2, Chp.8(1965).
- [3] :J.C.Slater, Adv, Quantum Chem, 1,35(1964)
- [4] :P.Blaha, K.Schwarz, G.K.H.Madsen, D.Kvasnicka and J.Luiz, Wien2K, an Augmented Plane Wave Plus Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria (2001)
- [5] : D. Singh, Phys. Rev. B 43, 6388 (1991).

PROPRIÉTÉS STRUCTURALES, ÉLASTIQUES ET ÉLECTRONIQUES

3.1 Calculs

Dans ce travail nous avons réalisées le calcul de la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT [1] basé sur la méthode des ondes planes linéairement augmentés implémente dans le code Wien2K [2] avec l'approximation gradient généralisé GGA[3] et l'approximation de la densité local LDA[4] et GGA-PBEsol [5] pour détermine le potentiel d'échange et corrélation Nous avons étudié les propriété structurales (paramètre de réseau a ; module de compressibilité B et leur dérivée B' . les propriété électroniques tell que la densité d'état ; structure de bande et la densité de charge . les propriété élastiques consiste les constantes élastiques C_{11} , C_{12} , C_{44} ; le module de compressibilité , le module de cisaillement ,le rapport de poisson , le facteur d'anisotrope et la pression de Cauchy pour le matériaux antiperovskite $AlNTi_3$

3.1.1 Test de convergence

La premier étape de nos calcul teste de convergence pour le choix de nombre de point K et $R_{mt} * K_{max}$ pour calcule les propriétés : structurales, électroniques et élastiques. La figure (3.1) : montre la variation de l'énergie en fonction de nombre de point K : en remarque bien que l'énergie converge à nombre de point K égale 2000 La figure (3.2) : montre la variation de l'énergie en fonction de $R_{mt} * K_{max}$ on note que l'énergie converge a $R_{mt} * K_{max}$ égale à 8 , alors dans notre calcul nous avons utilisé le nombre de point K 2000 correspond à $12 \times 12 \times 12$ le nombre de point de Monkhorft [6] dans la première zone de Brillouin R_{mt} : est le plus petit rayon de la sphère K_{max} : est le plus grand vecteur d'onde avec un critère de convergence 10^{-5} Ry Ce que concernons le rayons muffin-tin utilise pour les atomes $AlNTi_3$ sont 2.5 ; 1.72 et 1.94 respectivement

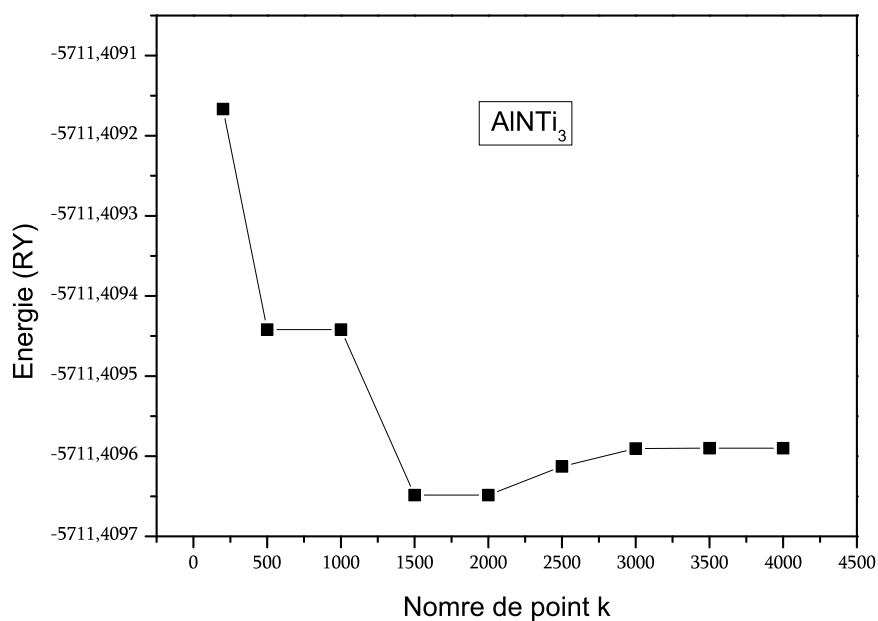


FIG. 3.1 – Variation de l'énergie totale en fonction du nombre de points k de $AlTi_3$.

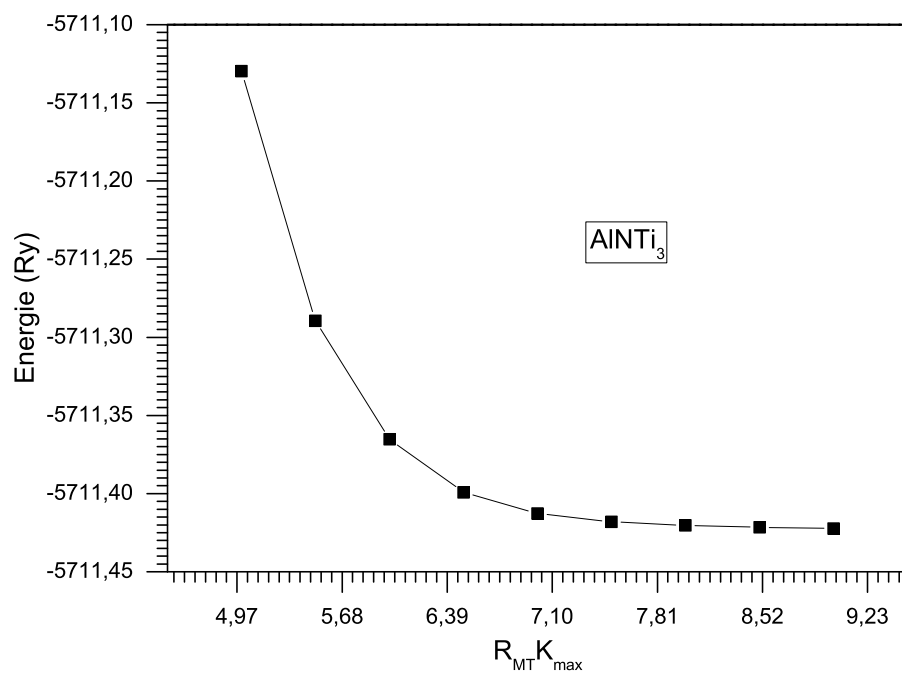


FIG. 3.2 – Variation de l'énergie totale en fonction du $R_{MT} K_{max}$ de $AlTi_3$.

3.2 structure cristalline

Le matériaux $AlNTi_3$ possède la structure cubique avec groupe spécial pm-3m classe (221) dans le tableaux cristallographie . les atomes Al situe au coin de cube de position (0,0,0) les atomes N situe au centre de cube et les atomes Ti occupés les centres des faces

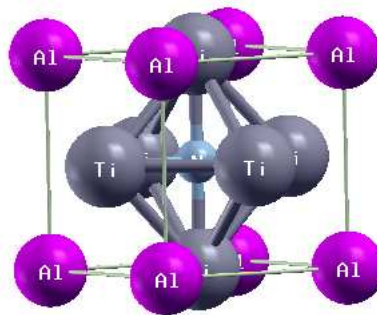


FIG. 3.3 – structure cristalline $AlNTi_3$

3.3 Résultats et discussion

3.3.1 Propriétés structurales

Dans la partie des propriétés structurales on calcul l'énergie totale de $AlNTi_3$ pour différentes valeurs des volumes avec un ajustés a l'équation Brich Murnagham [7] qui sont écrit sous la forme suivant :

$$E(V) = E_0 + (9V_0B)/16 \{ [(V_0/V)^{(2/3)} - 1]^3 B' + [(V_0/V)^{(2/3)} - 1]^2 [6 - 4(V_0/V)^{(2/3)}] \} \quad (3.1)$$

E : l'énergie

E_0 : l'énergie d'équilibre

B : le module de compressibilité

B' : la première dérivée de module de compressibilité

le module de compression B est déterminée à partir de l'équation :

$$B = -V(\partial P / \partial V)_{(P=0)} \quad (3.2)$$

La dérivée du module de compression B' est déterminée à partir de l'équation :

$$B' = (\partial B / \partial P)_{(P=0)} \quad (3.3)$$

La figure (3.4) montre la variation de l'énergie totale en fonction du volume avec l'approximation gradient généralisé GGA-PBE , GGA-PBEsol et l'approximation de la densité local LDA pour traité le potentiel du change et du corrélation Les résultats obtenus sont inclus dans le tableau (3.1) suivant avec les données expérimentales et d'autre calcul théorique

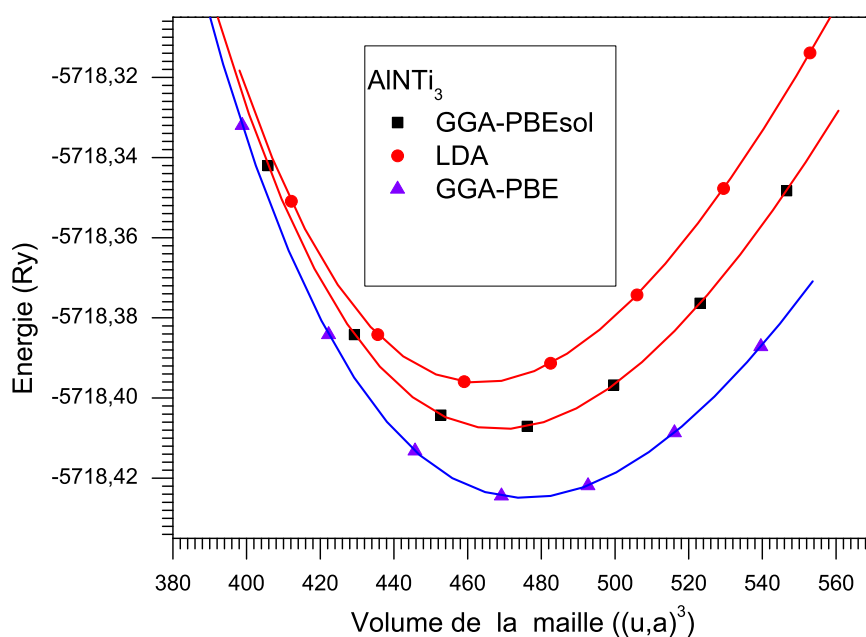


FIG. 3.4 – Variation du volume relatif de $AlNTi_3$ avec GGA-PBEsol, GGA-PBE et LDA

TAB. 3.1 – Propriété structurales de $AlNTi_3$ avec GGA – PBE, GGA – PBEsol et LDA

$AlNTi_3$	Paramètres	Notre travail			(.0cmAutre travail		Experience [9]
		GGA-PBE	GGA-PBEsol	LDA	LDA[8]	GGA-PBE [8]	
	a	4,1314	4,0903	4,0549	4,051	4,1123	4,112
	B_0	161,7061	174,7608	185,9162	$183,41 \pm 0,21$	$162,88 \pm 0,13$	
	B'_0	4,1708	4.12	4,2158	$4,027 \pm 0,02$	$4,054 \pm 0,01$	

D'après les résultats présentés dans le tableau en ce qui concerne le composé $AlNTi_3$, le paramètre du réseau a été trouvé égale à : 4.112 à l'aide de GGA et à 4.051 à l'aide de la LDA. On sait bien que la GGA surestime le paramètre de réseau et surestime le module de compressibilité par contre la LDA sous-estime le paramètre de réseau et sous-estime le module de compressibilité et dans nos calculs nous pouvons voir que le paramètre de réseau avec la GGA est surestimé. D'autre part le paramètre de réseau avec la LDA est sous-estimé par rapport aux données expérimentales et [9] la valeur obtenue avec la GGA-PBEsol est intermédiaire entre celle obtenue avec la GGA et la LDA et bon accord aux valeurs expérimentales par Djellal Cherrad et al [8] et d'autre calcul théorique. D'autre côté le résultat obtenu avec la LDA est bon accord aux résultats théoriques avec la LDA par Djellal Cherrad et al [8]. Pour le résultat de module de compressibilité avec l'approximation gradient généralisé GGA et LDA est presque proche au calcul théorique [8] et aucune donnée expérimentale pour la comparaison généralement la valeur obtenue de module de compressibilité avec GGA-PBEsol est intermédiaire entre celle obtenue avec la GGA et la LDA.

3.3.2 Les propriétés élastiques

Les matériaux $AlNTi_3$ à symétrie cubique possèdent seulement trois constantes d'élasticité indépendante à savoir C_{11} , C_{12} et C_{44} . Les paramètres élastiques ci-dessus sont obtenus à partir avec la méthode des ondes plan linéairement augmentées FP-LAPW qui est basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT avec l'approximation du gradient généralisé GGA – PBEsol calculs de monocristaux $AlNTi_3$.

Pour un cristal cubique, le module de compression est donné sous la forme suivante :

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (3.4)$$

La compressibilité β est définie par :

$$\beta = \frac{1}{B} = \frac{3}{C_{11} + 2C_{12}} \quad (3.5)$$

Le module de cisaillement G est lié aux constantes élastiques par les relations suivantes [10] :

$$G = \frac{1}{2} \left[\frac{C_{11} - C_{12} + 3C_{44}}{5} + \frac{5C_{44}C_{11} - 5C_{44}C_{12}}{4C_{44} + 3C_{11} - 3C_{12}} \right] \quad (3.6)$$

Et le module de Young E qui exprime la résistance du matériau à la déformation unidirectionnelle, le rapport de Poisson les coefficients de Lamé λ et μ sont calculés à l'aide des formules [11] :

$$E = \frac{9BG}{3B + G} \quad (3.7)$$

$$\lambda = \frac{\sigma E}{(1 + \sigma)(1 - 2\sigma)} \quad (3.8)$$

$$\sigma = \frac{3B - E}{6B} \quad (3.9)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \sigma)} \quad (3.10)$$

Nous avons aussi calculé le facteur d'anisotropie avec la formule suivante :

$$A = \frac{2C_{44}}{C_{11} - C_{12}} \quad (3.11)$$

Les valeurs calculées et déduites de $C_{11}, C_{12}, C_{44}, \sigma, B, G, \beta, \lambda$ et μ pour monocristallin de composé $AlNTi_3$ sont incluses dans le tableau 2 :

TAB. 3.2 – Paramètres élastiques de la phase monocristalline : constantes élastiques (C_{11}, C_{12} et C_{44} , en GPa), module de compression (B , en GPa), module de cisaillement ($G = C_{44}$, en GPa), compressibilité (β , en GPa^{-1}), pression de Cauchy (CP, en GPa) et facteur d'anisotropie de Zener (A), $P = 0$ et $T = 0$.

$AlNTi_3$	Paramètres	Notre travail	Autre travail		Experience
		GGA-PBEsol	LDA [8]	GGA-PBE [8]	
	C_{11}	232,66	$199,42 \pm 3,4$	$239,94 \pm 2,3$	
	C_{12}	146,65	$146,86 \pm 1,1$	$156,60 \pm 0,4$	
	C_{44}	63,45	$50,72 \pm 0,4$	$57,91 \pm 0,4$	
	B	175,32	$164,38 \pm 1,4$	$184,38 \pm 0,8$	
	β				
	A	2,951	1,9299	1,389	
	G	54,2912			
	E	147.6343	74,851	116,240	
	σ	0,3577	0,3901	0,3739	
	λ	136.6682	97,987	124,108	
	μ	54.3692	50,720	57,916	
	C_p	83.2			

On note que le paramètre élastique C_{11} est légèrement supérieur à partir de calculs de premiers principes APW-GGA et les valeurs de C_{12} et C_{44} sont en bon accord de calcul théorique par Djellal Cherrad et al [8] avec la GGA. D'autre cote, le résultat de module de compressibilité de nos calculs est presque plus proche aux calculs théoriques trouvés par la référence [8]. Globalement, le résultat de notre travail par la GGA-PBEsol des constantes élastiques sont légèrement supérieur de calcul théorique par LDA de la même référence. Récemment, les constantes élastiques et les stabilités mécaniques des cristaux ont d'intérêt beaucoup par des physiciens [12]. Globalement, pour un cristal cubique, la stabilité mécanique est jugée à partir des conditions suivantes : $(C_{11}C_{12}) > 0$; $(C_{11} + 2C_{12}) > 0$; $C_{11} > 0$; $C_{44} > 0$. Pettifor [13] a suggéré que le caractère angulaire de

liaisons atomiques dans les métaux et les composés pourraient être décrites par la pression de Cauchy $C_{12} - C_{44}$. Si la liaison de caractère est métallique, la pression de Cauchy est typiquement positive. Si la liaison de caractère est directionnelle et avec faible mobilité, la pression de Cauchy est typiquement négative. Les valeurs calculées de la pression de Cauchy $C_{12} - C_{44}$ de $AlNTi_3$. En raison des valeurs typiquement positives de la pression de Cauchy, $AlNTi_3$ devrait appartenir à liaison métallique.

3.3.3 Propriétés électroniques

Structure de bande $AlNTi_3$

La structure de bande de $AlNTi_3$ représentée dans la figure (3-5), nous avons calculé la structure de bande du composé le long des directions $[X, R, M, \Gamma]$ de haute symétrie dans la première Zone de Brillouin à l'aide de l'approximation de densité de gradient généralisée GGA-PBEsol. On a utilisé nos calculs 3000 points K correspondant à $15 \times 15 \times 15$. On note un chevauchement entre la bande de valence et la bande de conduction dû principalement des orbitales d de l'atome Ti et l'orbitale p de l'atome N et Al, et des bandes croisées au niveau de Fermi ce qui indique l'absence d'un gap. Ceci permet de dire que le matériau $AlNTi_3$ est de nature métallique et une bande quasi plate suivant les directions R, résulte essentiellement des orbitales Ti-d et une bande autour de -2 eV correspond au pic situé à -2 eV dans la densité d'état résulte des orbitales principalement Ti-d et partiellement Al-p.

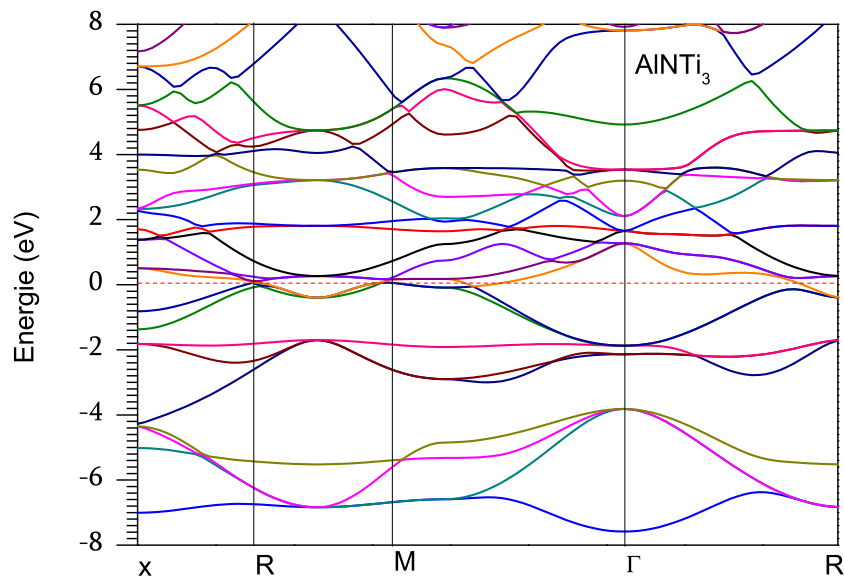


FIG. 3.5 – Structure de bande $AlNTi_3$

La densité d'états $AlNTi_3$

Nous avons tracé les densité d'états total et partielles , le résultat représenté sur la figure (3-6) en regroupé la courbe :

- 1^{er} région : situé entre -7,61 et -6,33 due principalement des états p de l'atome N avec une faible hybridation de l'état s de l'atome Al
- 2^{eme} région : existe entre -6,33 et -4 due partiellement l'état s de l'atome Al avec une faible mélange de l'état d de l'atome Ti et partielle l'état p de l'atome N
- 3^{eme} région : qui situé à -4 jusqu'à niveau de Fermi due l'état principale p de l'atome Al et l'état d de l'atome Ti et une pik principale autour de -2 eV due principalement de état Ti-d et l'état Al-p
- 4^{eme} région : [0 , 4 eV] on remarque bien une mélange de l'état d de l'atome Ti et l'état p de l'atome Al et l'atome N-P, et dans la région qui s'entend de 4 à 8 eV principalement due de l'atome Ti-d est faible mélange des états s-p des atomes A,N

le résultat obtenue de notre travail et bon accord au calcul théorique Djalal- cherrad et all [8]

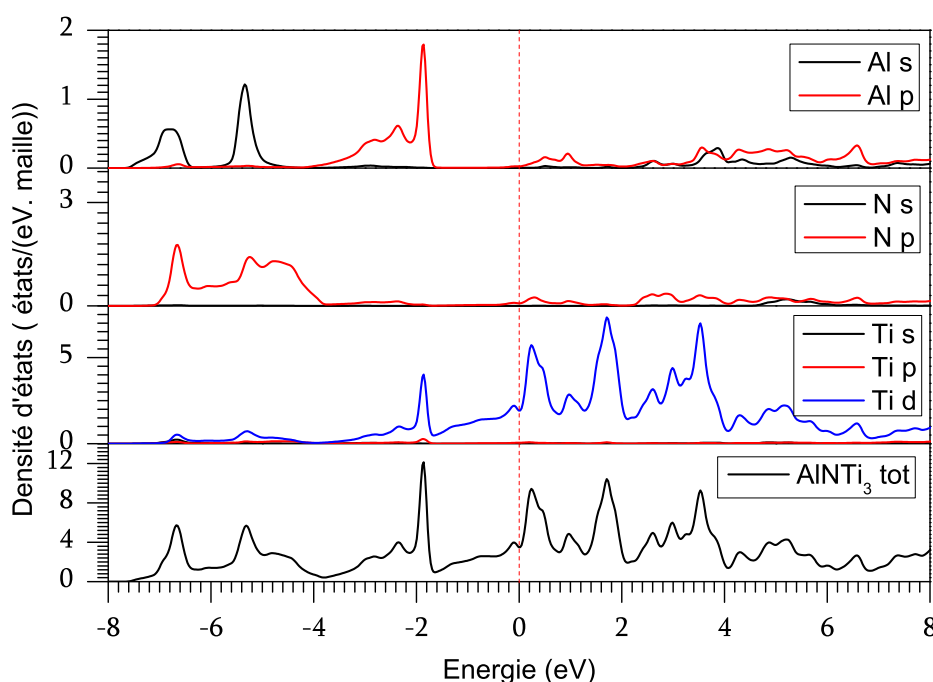


FIG. 3.6 – La densité d'états $AlNTi_3$

La densité de charge $AlNTi_3$

La densité de charge est définie par la différence entre la densité de charge totale du solide et la superposition des différentes densités de charge atomiques placées sur

les sites atomiques de la matière solide . La figure (3.7) présente la densité de charge de deux démissions pour $AlNTi_3$ dans le plan (110) avec l'approximation du gardien généralisé $GGA - PBE_{sol}$. Nous pouvons voir que la charge est accumulée dans la région intermédiaire entre les atomes N et Ti a cause de la forte hybridation entre les deux atomes ce qui indique que la liaison N et Ti est de caractère covalentes. D'autre part, la liaison ionique se trouve entre les atomes Al et Ti ce que indique une liaison ionique entre c'est atomes.

Nous avons aussi constate la nature de la lisions métallique entre les atomes Al-Al et la déférence valeur de densités de charge entre les region a cause d'électronégativité. Notre résultat est bon accord a d'autre calcul théorique[8]

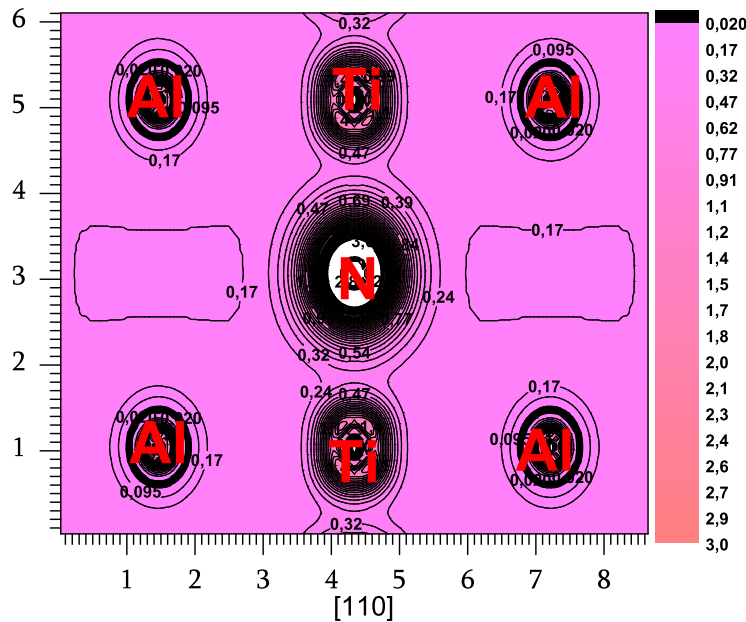


FIG. 3.7 – La densité de charge $AlNTi_3$

Bibliographie

- [1] W. Kohn and L.J. Sham, Phys. Rev. 140, A1 133(1965).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. Kvasnicka and J. Luitz, Wien2k, an Augmented Plane Wave Plus Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Vienna University of Technology, Austria (2001).
- [3] J.P. Perdew, S. Burke, M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 3865
- [4] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Phys. Rev. B 13 (1976) 5188
- [5] J.P. Perdew, A. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke, Phys. Rev. Lett. 100 (2008) 136406(1)- 136406(4)
- [6] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, Phys. Rev. B 13 (1976) 5188.
- [7] F. D. Monaghan, Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 30, 5390(1944).
- [8] Djellal Cherrad, L. Selmani, D. Maouche, M. Maamache Journal of Alloys and Compounds 509 (2011) 4357–4362
- [9] J.C. Schuster, J. Bauer, J. Solid State Chem. 53 (1984) 260–265.
- [10] J.F. Nye, Propriétés Physiques Des Matériaux, Dunod, 1961.
- [11] E. Schreiber, O.L. Anderson, N. Soga, Elastic Constants and their Measurement, McGraw-Hill, New York, 1973.
- [12] J. Wang, S. Yip, S.R. Phillpot, D. Wolf, Phys. Rev. Lett. 71 (1993) 4182.
- [13] D. Pettifor, Mater. Sci. Technol. 8 (1992) 345.

CONCLUSION

Dans ce travail nous avons calcul les Propriété structurales ,élastiques et électroniques avec la méthode des ondes planes linéairement augmentés de l'anti-pérovskites $AlNTi_3$ le résultat obtenus sont résume comme suit :

- le paramètre de réseau avec la GGA est surestime. D'autre part le paramètre de réseau avec la LDA est sous-estime par apport aux donnée expérimentale et la valeur obtenus avec la $GGA - PBEsol$ est intermédiaire entre celle obtenue avec la GGA et la LDA.
- pour les Propriétés élastiques on note que $AlNTi_3$ devrait appartenir à liaison métallique d'autre part le matériau $AlNTi_3$ est Vérifie les conduction de stabilité mécanique alors est stable mécanique
- $AlNTi_3$ est de nature métallique
- $AlNTi_3$ est Contiens des liaisons mixtes covalentes métalliques et ioniques.