

## **Abstract:**

Using Full potential augmented plane wave plus local orbital's (FP-APW+lo) method, phase transition, mechanical and optoelectronic properties of  $\text{Cu}_2\text{Sb-NaZnX}$  (X=P, As and Sb) compound have been investigated. Where, the exchange-correlation potential was treated with the generalized gradient approximation of Perdew-Burke and Ernzerhof (PBE-GGA) and with the modified Becke-Johnson potential (TB-mBJ) to improve the electronic band structure calculations. The ground state properties, including lattice constants and bulk modulus are in excellent agreement with the available theoretical data. We have found that the  $\text{Cu}_2\text{Sb}$ -phase is the most stable and at high pressure NaZnX undergoes phase transition from  $\text{Cu}_2\text{Sb} \rightarrow \beta\text{-phase} \rightarrow \alpha\text{-phase}$ . The elastic constants and their related quantities such as Young's modulus, shear modulus, Poisson's ratios have been determined in  $\text{Cu}_2\text{Sb}$ -phase by using the variation of the total energy with strain. From the elastic parameters, it is inferred that this compound is brittle in nature. Furthermore, the results of the electronic band structure show that  $\text{Cu}_2\text{Sb-NaZnX}$  has a direct energy band gap ( $\Gamma-\Gamma$ ). The TB-mBJ approximation yields larger fundamental band gaps compared to those of PBE-GGA. Additionally, real and imaginary parts of the dielectric function, reflectivity and energy loss function spectra have been calculated for radiation up to 30.0 eV with an incident radiation polarized parallel to both [100] and [001] crystalline directions.

## Résumé:

En utilisant la méthode full potentiel augmentée des ondes planes plus orbitales local (FP-APW + lo), la transition de phase, les propriétés mécaniques et optoélectroniques des composés Cu<sub>2</sub>Sb-NaZnX (X = P, As et Sb) ont été étudiés, lorsque, le potentiel d'échange-corrélation a été traité avec le rapprochement du gradient généralisé de Perdew-Burke et Ernzerhof (GGA -PBE) et avec le potentiel modifié Becke-Johnson (TB-mBJ) pour améliorer les calculs de structure de bande électronique. Les propriétés structurales, y compris les constantes du réseau et module de compressibilité sont en bon accord avec les données théoriques disponibles. Nous avons trouvé que la phase Cu<sub>2</sub>Sb est la phase la plus stable et à une pression élevée NaZnX subit une transition de phase à partir Cu<sub>2</sub>Sb → β → α. Les constantes élastiques, le module d'Young, le module de cisaillement et le coefficient de Poisson ont été déterminées dans la phase Cu<sub>2</sub>Sb à l'aide de la variation de l'énergie totale avec la contrainte. A partir des paramètres élastiques, il est déduit que ce composé est de nature fragile. En outre, les résultats de la structure de bande électronique montrent que Cu<sub>2</sub>Sb-NaZnX a un gap direct (Γ-Γ). L'approximation TB-mBJ donne de plus grande largeur de bande fondamentale par rapport à GGA – PBE. De plus, nous avons calculé les propriétés optiques telles que les parties réel et imaginaire de la fonction diélectrique, la réflectivité et la fonction de perte d'énergie dans une gamme de rayonnement de 30.0 eV pour deux polarisations différentes des rayonnements incident avec une radiation parallèle polarisée à la fois à les directions cristallines [100] et [001].

## ملخص:

باستخدام أسلوب الموجات المتزايدة (FP-APW+lo) في إطار نظرية الكثافة الوظيفية DFT، المدرجة مباشرة في البرنامج Wien2K حاولنا تحديد الخصائص البنيوية الميكانيكية والبصرية و الإلكترونية لـ Cu<sub>2</sub>Sb-NaZnX (X = P, As, Sb). الخصائص البنيوية المحسوبة في اتفاق ممتازة مع البيانات التجريبية و النظرية المتاحة. وقد وجدنا أن البنية Cu<sub>2</sub>Sb هي الأكثر استقرارا وتحت ضغط عال NaZnX يغير بنيته من Cu<sub>2</sub>Sb ← β ← α. وقد قمنا أيضا بحساب ثوابت المرونة C<sub>ij</sub> باستخدام التباين الكلي للطاقة مقابل تقنية التوتر. بعدها استنتجنا معامل القص، معامل يونغ، ونسبة بواسون. من خلال حساب الخصائص الإلكترونية وجدنا أن Cu<sub>2</sub>Sb-NaZnX لديها إنتقال إلكتروني مباشر (Γ-Γ). بالإضافة إلى ذلك، تم حساب الخصائص البصرية لأطياف الأشعة تصل إلى 30.0 فولت مع الاستقطاب الموازي للإشعاع الحادث إلى كل من [100] و [001] للاتجاهات البلورية.