

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE



وزارة التعليم العالي و البحث العلمي

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE
LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

جامعة عمار تليدي - الاغواط

UNIVERSITE AMAR TELIDJI LAGHOUAT

كلية العلوم

FACULTE DES SCIENCES

قسم علوم المادة

DEPARTEMENT DES SCIENCES DE LA MATIERE



Mémoire de MASTER

Domaine : Sciences de la matière

Filière : Physique

Option : Physique Appliquée

Présenté Par:

Mr.BEN MAGRI Khoulif

THEME

**Etude théorique des effets de
pression sur la solution solide**

$Cd_{1-x}Mn_xO$

Soutenu publiquement devant le jury composé de:

Mr. LAGOUN Brahim

Université de Laghouat

Président

Mr. CHERIET Abderrahmane

Université de Laghouat

Examineur

Mr. DJAILI Salim

ENS de Laghouat

Encadreur

Melle. KRIBAA Imane

Université de Laghouat

Co-Encadreur

Année Universitaire 2020/2021



شكر وتقدير

قال الله تعالى: {لَئِن شَكَرْتُمْ لَأَزِيدَنَّكُمْ} (7) ابراهيم

قال النبي ﷺ: «لا يَشْكُرُ اللهُ مَنْ لا يَشْكُرُ النَّاسَ» حديثٌ صحيحٌ.

الحمد لله الذي علم بالقلم، علم الإنسان ما لم يعلم، والصلاة والسلام على معلم البشر، وعلى آله وصحبه أجمعين.

أولا وقبل كل شيء أتقدم بأسمى عبارات الشكر والامتنان والتقدير إلى من يعجز لساني عن إيجاد العبارات المناسبة لشكركه، إلى من سدّد خطاي وأنار طريقي، إلى واهبي الحياة، إلى ربي، رب العزة جلا جلاله.

اما بعد:

أتقدم بالشكر الجزيل إلى الأستاذ الغالي المشرف " جايلى سليم " على قبوله تأطيري والذي لم يبخل علينا

بتوجيهاته ونصائحه القيمة والشمينة طوال مراحل إنجازنا لهذا العمل .

كما أتوجه بجزيل الشكر إلى الأساتذة "كربيع ايمان" التي كان لها الفضل في توفير كل الإمكانيات في المخبر التي

نحتاجها في بحثنا هذا، ولم تبخل علينا من توجيهاتها ووقتها، وكذلك اشكر الزميلة

" بن ميلود رقية " على ما قدمته لي من مساعدة.

كذلك أتوجه بشكري إلى الأستاذ " العقون ابراهيم " والأستاذ " شريط عبد الرحمان " على قبولهما

المشاركة في لجنة المناقشة.

كما أتوجه بالشكر أيضا إلى كل أساتذة قسم علوم المادة الذين لم يبخلوا علينا بوقتهم ولا يبجدهم في تكويننا و تأطيرنا،

وإلى طاقم إدارة الكلية .

كما أتقدم بالشكر الخالص إلى جميع أفراد دفعتي وأتمنى لهم جميعا كل التوفيق والنجاح.



إهداء

الحمد لله الذي وفقني في عملي هذا وما كنت لأوفق لولاه وأعانني في دراستي وما كنت لأستعين بسواه والصلاة والسلام على أشرف خلق الله.

الى من أوصى الله بهما خيراً ، وكان رضاه من رضاهما ، وسعياً لإسعادي وسهراً على راحتني : والديّ العزيزين ، أطال الله في عمرها وأسأل الله ان يجازيها عني خير الجزاء.

الى أصدقاء الطفولة.

الى زملائي أساتذة التعليم المتوسط في المؤسسة.

الى زملائي ورفاقي في قسم علوم المادة دفعة 2021 فيزياء تطبيقية.

الى طلبة قسم علوم المادة وبالأخص دفعة ماستر فيزياء تطبيقية 2022.

الى أساتذة قسم علوم المادة وإدارته.

الى كل من أعانني على عملي هذا.

أهدي عملي هذا راجياً من الله -عزّ وجلّ- أن يجعله مفتاحاً لآفاقي وخيراً لغيري.

بن مقري خليف



SOMMAIRE

Introduction générale.....	01
----------------------------	----

Chapitre I : La théorie de la fonction de densité (DFT)

I.1.Introduction.....	03
I.2.Equation de Schrödinger.....	03
I.2.1.Approximation de Born-Oppenheimer.....	04
I.2.2.Approximation de Hartree-Fock.....	05
I.2.3.Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	06
I.2.4.Théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	06
I.2.5.Les équations de Kohn et Sham.....	07
I.2.6.La fonctionnelle d'échange-corrélation.....	08
I.2.6.a.L'approximation de la densité locale (LDA).....	09
I.2.6.b.L'approximation du gradient généralisé (GGA).....	10
I.2.7.Résolution des équations de Kohn-Sham.....	10
I.3. Les différentes méthodes ab-initio.....	13
I.3.1.Méthode des ondes planes augmentées (Augmented Plane Waves APW).....	13
I.3.2.Méthode des ondes planes augmentées linéarisés.....	15
I.3.3.Méthode FP-LAPW (Full Potential Linéarised Augmented PlaneWaves).....	16
I.4.Le code de calcul Wien2k.....	17
I.5.Les références.....	19

Chapitre II : Revue bibliographique

II.1.Introduction.....	20
II.2.l'oxyde de cadmium (CdO).....	20
II.3.L'oxyde de manganèse MnO	22
II.4.Les références.....	24

Chapitre III :Résultats et discussion

III.1.Introduction.....	25
III.2.Détails de calcul.....	25
III.3.Les Propriétés.....	25
III.3.1. Propriétés cristallines et structurales.....	25
III.3.1.1.Les résultats de l'optimisation.....	25
III.3.1.2.CdO.....	27
III.3.1.3.MnO.....	27
III.3.1.4.Cd _{0.75} Mn _{0.25} O.....	28
III.3.1.5.Cd _{0.5} Mn _{0.5} O.....	28

III.3.1.6.Cd _{0.25} Mn _{0.75} O.....	29
III.3.2. Propriétés magnétique.....	29
III.3.3. Propriétés électronique:(pression nulle).....	31
III.3.3.1.CdO.....	31
III.3.3.1.a/ Les densités d'états (DOS).....	31
III.3.3.1.b/ La structure de bande d'énergie	31
III.3.3.1.c/ Densité de charges.....	32
III.3.3.2.MnO	32
III.3.3.2.a/ Les densités d'états (DOS).....	32
III.3.3.2.b/ La structure de bande d'énergie.....	33
III.3.3.1.c/ Densité de charges.....	33
III.3.3.3.Cd _{0.75} Mn _{0.25} O.....	34
III.3.3.3.a/ Les densités d'états (DOS).....	34
III.3.3.3.b/ La structure de bande d'énergie	34
III.3.3.1.c/ Densité de charges.....	35
III.3.3.4.Cd _{0.5} Mn _{0.5} O.....	35
III.3.3.4.a/ Les densités d'états (DOS).....	35
III.3.3.4.b/ La structure de bande d'énergie.....	36
III.3.3.1.c/ Densité de charges.....	36
III.3.3.5.Cd _{0.25} Mn _{0.75} O.....	37
III.3.3.4.a/ Les densités d'états (DOS).....	37
III.3.3.5.b/ La structure de bande d'énergie.....	37
III.3.3.5.c/ Densité de charges.....	38
III.3.4. Propriétés électronique:(P=40GPa).....	38
III.3.4.1.CdO.....	38
III.3.4.1.a/ Les densités d'états (DOS).....	38
III.3.4.1.b/ La structure de bande d'énergie.....	39
III.3.4.2.MnO.....	39
III.3.4.1.a/ Les densités d'états (DOS).....	39
III.3.4.2.b/ La structure de bande d'énergie.....	40
III.3.4.3.Cd _{0.5} Mn _{0.5} O.....	40
III.3.4.3.a/ Les densités d'états (DOS).....	40
III.3.4.3.b/ La structure de bande d'énergie.....	41
III.3.5. Propriétés électronique:(P=80GPa).....	41
III.3.5.1.CdO.....	41
III.3.5.1.a/ Les densités d'états (DOS).....	41

III.3.5.2.b/ La structure de bande d'énergie.....	42
III.3.5.2.MnO.....	42
III.3.5.2.a/ Les densités d'états (DOS).....	42
III.3.5.2.b/ La structure de bande d'énergie.....	43
III.3.5.3.Cd _{0.5} Mn _{0.5} O.....	43
III.3.5.3.a/ Les densités d'états (DOS).....	43
III.3.5.3.b/ La structure de bande d'énergie.....	44
III.4.Discussions:.....	45
III.4.1. Propriétés cristallines et structurales.....	45
III.4.2. Propriétés électronique (E _g).....	46
III.5.Conclusion générale.....	47
III.6.Les références.....	50

LA LISTE DES FIGURES

Chapitre I : La théorie de la fonction de densité (DFT)

Figure I-1: Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).....	12
Figure I-2: Division d'une maille élémentaire de deux atomes en deux régions.....	13
Figure I-3 : L'organigramme des programmes du code wien2k.....	18

Chapitre II : Revue bibliographique

Figure II-1: Diagramme de densité de charge électronique de valence calculé de la nanofeuille de CdO.....	21
Figure II-2-a : structure compacte de MnO.....	22
Figure II-2-b: Structure cristalline de MnO.....	22

Chapitre III : Résultats et discussion

Figure III-1: La variation de l'énergie totale en fonction du volume obtenue par l'approximation WC-GGA.....	26
Figure III-1: structure cristalline de CdO.....	27
Figure III-2: structure cristalline de MnO.....	27
Figure III-3: structure cristalline de Cd _{0.75} Mn _{0.25} O.....	28
Figure III-3: structure cristalline de Cd _{0.5} Mn _{0.5} O.....	28
Figure III-5: structure cristalline de Cd _{0.25} Mn _{0.25} O.....	29
Figure III-7: Le moment magnétique en fonction concentration de Mn.....	30
Figure III-8: Le moment magnétique en fonction de pression.....	30
Figure III-9: densité d'états du CdO en P=3GPa par TB-mBJ.....	31
Figure III-10: Structure de band du CdO en P=0GPa par TB-mBJ.....	31
Figure III-11: densité de charge du CdO en P=0GPa par TB-mBJ.....	32
Figure III-12: densité d'états du MnO en P=0GPa par TB-mBJ.....	32
Figure III-13: Structure de band du MnO en P=0GPa par TB-mBJ.....	33
Figure III-14: densité de charge du MnO en P=0GPa par TB-mBJ.....	33
Figure III-15: densité d'états du Cd _{0.75} Mn _{0.25} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	34
Figure III-16: Structure de band du Cd _{0.75} Mn _{0.25} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	34
Figure III-17: densité de charge du Cd _{0.75} Mn _{0.25} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	35
Figure III-18: densité d'états du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	35
Figure III-19: Structure de band du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	36
Figure III-20: densité de charge du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	36
Figure III-21: densité d'états du Cd _{0.25} Mn _{0.75} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	37

Figure III-22: Structure de band du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	37
Figure III-23: densité de charge du Cd _{0.25} Mn _{0.75} O en P=0GPa par TB-mBJ.....	38
Figure III-24: densité d'états du CdO en P=40GPa par TB-mBJ.....	38
Figure III-25: Structure de band du CdO en P=40GPa par TB-mBJ.....	39
Figure III-26: densité d'états du MnO en P=40GPa par TB-mBJ.....	39
Figure III-27: Structure de band du MnO en P=40GPa par TB-mBJ.....	40
Figure III-28: densité d'états du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=40GPa par TB-mBJ.....	40
Figure III-29: Structure de band du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=40GPa par TB-mBJ.....	41
Figure III-30: densité d'états du CdO en P=80GPa par TB-mBJ.....	41
Figure III-31: Structure de band du CdO en P=80GPa par TB-mBJ.....	42
Figure III-32: densité d'états du MnO en P=80GPa par TB-mBJ.....	42
Figure III-33: Structure de band du MnO en P=80GPa par TB-mBJ.....	43
Figure III-34: densité d'états du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=80GPa par TB-mBJ.....	43
Figure III-35: Structure de band du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O en P=80GPa par TB-mBJ.....	44
Figure III-36: Paramètre de maille en fonction de l'évolution de (X).....	45
Figure III-37: a en fonction de l'évolution de pression P.....	46
Figure III-38: E _g en fonction de l'évolution de (X).....	47
Figure III-39: E _g en fonction de l'évolution de P.....	47

La liste des tableaux

Tableau II-1 : Propriétés structurales à l'équilibre expérimental.....	20
Tableau II- 2 : Contributions et paramètre de champ cristallin en eV.....	23
Tableau III- 3 : Détails de calcul.....	25
Tableau III- 4 : Les résultats de l'optimisation.....	27
Tableau III- 5 :Les moments magnétiques.....	29
Tableau III- 6 : L'états contributeurs dans CdO en P=0GPa.....	31
Tableau III- 7 : L'états contributeurs dans MnO à P=0GPa.....	33
Tableau III- 8 : L'états contributeurs dans Cd _{0.75} Mn _{0.25} O à P=0GPa.....	34
Tableau III- 9 : L'états contributeurs dans Cd _{0.5} Mn _{0.5} O à P=0GPa.....	35
Tableau III- 10 : L'états contributeurs dans Cd _{0.25} Mn _{0.75} O à P=0GPa.....	37
Tableau III- 11 : L'états contributeurs dans CdO à P=40GPa.....	39
Tableau III- 12 : L'états contributeurs dans MnO à P=40GPa.....	40
Tableau III- 13 : L'états contributeurs dans Cd _{0.5} Mn _{0.5} O à P=40GPa.....	41
Tableau III- 14 : L'états contributeurs dans CdO à P=80GPa.....	42
Tableau III- 15 : L'états contributeurs dans MnO à P=80GPa.....	43
Tableau III- 16 : L'états contributeurs du Cd _{0.5} Mn _{0.5} O à P=80GPa.....	44
Tableau III- 17 : a en fonction du x à P=0GPa.....	45
Tableau III- 18 : a en fonction du x à P=40GPa.....	45
Tableau III- 19 : a en fonction du x à P=80GPa.....	45
Tableau III- 20 : Eg en fonction du x à P=40GPa.....	46
Tableau III- 21 : Eg en fonction du x à P=0GPa.....	46
Tableau III- 22 : Eg en fonction du x à P=80GPa.....	46

Introduction générale:

La physique des matériaux continue de jouer un rôle fondamental dans le développement de notre société moderne en permettant l'émergence de nombreuses applications technologiques. Electronique, le stockage de données, les communications, les capteurs et les transducteurs nécessitent l'utilisation de matériaux avec propriétés spécifiques qui, par leur propre comportement, pourront jouer un rôle actif dans les appareils et y effectuer une certaine fonction. Souvent, l'existence de plusieurs dispositifs en plus du développement fréquent de leurs performances (vitesse, sensibilité, réduction de volume) dépend essentiellement de la découverte de nouveaux matériaux avec des propriétés exacerbées.

Les technologues ont toujours montré un intérêt très particulier pour les semi-conducteurs, qui sont à la base de nombreuses technologies de pointe en électronique, quantique, spatiale et solaire. En conséquence, l'importance de leur rôle dans les industries futures continuera de croître.

Les composés semi-conducteurs à bande interdite II-VI sont des matériaux très utiles pour les dispositifs électroniques optiques à haute performance tels que les diodes électroluminescentes organiques et les diodes laser fonctionnant dans la région spectrale bleue ou ultraviolette. De plus, les propriétés ioniques élevées de ces composés en font de bons candidats pour un couplage électromécanique et électromécanique élevé [1] [2].

La combinaison de deux ou plusieurs produits chimiques lorsque cela est possible aboutit généralement à une nouvelle substance aux propriétés complètement nouvelles. Cela donne aux chercheurs un domaine utile pour développer de nouveaux matériaux avec des qualités spécifiques souhaitées.

Récemment, il y a eu un grand intérêt pour les semi-conducteurs II-VI et leurs alliages en raison de leur application dans les dispositifs photovoltaïques, tels que le CdO et le MnO, ce qui a suscité de nombreux théoriciens pour étudier ces décalages et leurs propriétés structurelles et thermodynamiques dans cette famille et leurs alliages et de passer en revue plusieurs des propriétés physiques de base.

De nos jours, la modélisation physique par simulation numérique joue un rôle de plus en plus important dans de nombreux domaines de la physique, grâce à son succès dans la description et la prédiction des propriétés des matériaux.

Dans le présent travail, nous avons réalisé une étude ab-initio basée sur la théorie de la densité fonctionnelle (DFT) en approximation de densité locale (GGA) afin d'étudier la structure et les propriétés électroniques (constante du réseau d'équilibre, module de compression et son dérivés par rapport à la pression, et divers écarts énergétiques). Cette modeste étude est venue découvrir certaines des propriétés physiques de la molécule **Cd_{1-x}Mn_xO** sous le titre "Etude de quelques propriétés

physiques de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$ alliages "Nous avons suivi en cela un plan qui a commencé par une introduction, qui a donné un vue d'introduction de notre étude, puis passer à trois chapitres.

Le premier chapitre contenait une étude de la théorie de la densité fonctionnelle DFT, qui montre un ensemble de méthodes ou d'approximations différentes utilisées pour calculer les propriétés électroniques corps solides. Après avoir présenté les limites d'approximations qui dépendent directement du fonction d'onde avec N corps, la théorie de la fonction DFT basée sur la théorie de Hohenberg et Kohn (Hohenberg - Kohn) a été présenté et qui servira de aspect théorique de ce travail. Quant au deuxième chapitre, il traitait de l'aspect chimique de la recherche. Nous avons parlé sur les deux composés CdO et MnO et tout ce qui y est lié, à partir de le réseau cristallin aux différentes propriétés élastiques, électriques et enfin optiques du point de vue des études précédentes.

Au final, nous constatons que le troisième chapitre reposait sur la simulation, car nous avons utilisé le Win2K programme pour étudier les différentes propriétés du composé $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$, afin d'obtenir plus des résultats précis. Nous avons suivi ces résultats avec une analyse et une discussion pour conclure in Ce dernier se termine par une conclusion générale sur l'intégralité de l'étude.

References:

- [1] C. G. Van de Walle (Ed.), Wide band-gap semiconductors, Physica. 185 (1993)
- [2] S. Kasap, P. Capper (Eds.), Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials, (2007)

Chapitre I:

Cadre Théorique :

La théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)

I.1. Introduction:

La physique de la matière condensée et la science des matériaux sont concernées fondamentalement par la compréhension et l'exploitation des propriétés des systèmes d'électrons et de noyaux atomiques interagissant. Ceci est bien connu depuis le développement de la mécanique quantique. Avec ceci vient la reconnaissance presque toutes les propriétés des matériaux peuvent être étudiées par des outils de calcul convenable pour résoudre ce problème particulier de la mécanique quantique. Malheureusement, les électrons et les noyaux qui composent les matériaux constituent un système à plusieurs corps fortement interagissant et ceci rend la résolution de l'équation de *Schrödinger* extrêmement difficile, et comme l'a déclaré *Dirac* (en 1929) [1] le progrès dépend du développement des techniques approximées suffisamment précises. Ainsi le développement de la théorie de la fonctionnelle de densité la (DFT) avec l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA) ont joué un rôle important dans la physique de la matière condensée.

I.2. Equation de Schrödinger:

Les solides sont constitués par une association de particules élémentaires: les ions et les électrons. Le problème théorique fondamental de la physique des solides est de comprendre l'organisation intime de ces particules à l'origine de leurs propriétés. Mais dans ce cas, la mécanique classique s'avère être insuffisante et il faut faire appel à la mécanique quantique dont la base est la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H}\psi = E\psi \dots \dots \dots (I.1)$$

Où :

E : est l'énergie totale du système

Ψ : sa fonction d'onde (fonction propre)

\hat{H} : son Hamiltonien.

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 : soit répulsion ou attraction suivant la charge des particules (ions, électrons) [2].

$$H_T = T_n + T_e + V_{n-n} + V_{n-e} + V_{e-e} \dots \dots \dots (I.2)$$

$$T_n = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} (\nabla_i)^2 : \text{L'énergie cinétique des noyaux.}$$

$T_e = -\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} (\nabla_i)^2$: L'énergie cinétique des électrons.

$V_{n-n} = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}$: L'énergie potentielle d'interaction entre les noyaux.

$V_{n-e} = -\sum_{ij} \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}$: L'énergie potentielle d'attraction noyaux-électrons.

$V_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{i < j} -\frac{1}{2} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|}$: L'énergie potentielle de répulsion entre les électrons.

Donc on peut écrire l'équation de Schrödinger sous la forme suivante :

$$H \Psi = \left(-\sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} (\nabla_i)^2 - \sum_i \frac{\hbar^2}{2m_i} (\nabla_i)^2 + \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \sum_{ij} \frac{Z_i e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{i < j} -\frac{1}{2} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_j|} \right) \Psi \dots (I.3)$$

La solution de l'équation (I.2) conduit à la résolution d'un problème à N corps qui n'est accessible qu'au prix de certaines approximations. Ces dernières doivent refléter une certaine réalité physique.

I.2.1. Approximation de Born-Oppenheimer:

Selon *Born* et *Oppenheimer* [3], du fait que les noyaux sont plus lourds que les électrons et donc plus lents, on commence par négliger le mouvement des noyaux par rapport à celui des électrons et l'on ne prend en compte que celui des électrons dans le réseau rigide périodique des potentiels nucléaires. On néglige ainsi l'énergie cinétique des noyaux et l'énergie potentielle noyaux-noyaux devient une constante qu'on peut choisir comme la nouvelle origine des énergies, et l'équation (II.2) devient [3] :

$$H_T = T_e + V_{n-e} + V_{e-e} \dots \dots \dots (I.4)$$

L'approximation de *Born-Oppenheimer* est qualifiée d'*adiabatique* car elle consiste à séparer le problème électronique de celui des vibrations du réseau. La fonction d'onde du système, solution de l'équation de *Schrödinger* dans l'approximation adiabatique, peut donc s'écrire sous la forme suivante :

$$\psi(R, r) = \psi_n(R) \Psi_e(r) \dots \dots \dots (I.5)$$

Où :

ψ_n est la fonction d'onde nucléaire.

Ψ_e est la fonction d'onde électronique.

A ce niveau, il existe plusieurs méthodes de résolution de l'équation (I.4) dont les premières sont celles de *Hartree* [4] et *Hartree-Fock* [5] basées sur l'hypothèse des électrons libres. Ces méthodes

sont plus utilisées en chimie quantique pour traiter les atomes et les molécules. Cependant il existe une méthode moderne et certainement plus puissante qui est la *Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT)*.

I.2.2. Approximation de Hartree-Fock:

En 1930 Fock [5] a montré que les solutions de l'Hamiltonien (I.2) violent le principe d'exclusion de Pauli car elles ne sont pas antisymétriques par rapport à l'échange de deux électrons quelconques. L'antisymétrisation de la fonction d'onde électronique s'écrit, en permutant deux électrons par exemple :

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_i, \dots, \vec{r}_j, \dots, r_{Ne}) = -\phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_j, \dots, \vec{r}_i, \dots, r_{Ne}) \dots \dots \dots (I.6)$$

Une telle description obéit donc au principe d'exclusion de Pauli qui impose à deux électrons de mêmes nombres quantiques de ne pouvoir occuper simultanément le même état quantique, ainsi qu'à l'indiscernabilité des électrons. Or, dans la formulation de Hartree de la fonction d'onde, cela n'est pas le cas, car l'électron *i* occupe précisément l'état *i*.

Hartree et Fock ont généralisé ce concept en montrant que le Principe de Pauli est respecté si l'on écrit la fonction d'onde sous la forme d'un « *déterminant de Slater* »

$$\phi(\vec{r}_1\sigma_1, \vec{r}_2\sigma_2, \dots, \vec{r}_i\sigma_i, \dots, \vec{r}_j\sigma_j, \dots, \vec{r}_{Ne}\sigma_{Ne}) = \frac{1}{\sqrt{N_e!}} \begin{vmatrix} \phi_1(\vec{r}_1\sigma_1) & \phi_1(\vec{r}_2\sigma_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_{Ne}\sigma_{Ne}) \\ \phi_2(\vec{r}_1\sigma_1) & \dots & \dots & \phi_2(\vec{r}_{Ne}\sigma_{Ne}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_{Ne}(\vec{r}_1\sigma_1) & \dots & \dots & \phi_{Ne}(\vec{r}_{Ne}\sigma_{Ne}) \end{vmatrix} \dots \dots \dots (I.7)$$

où σ représente le spin.

La fonction ϕ donnée par l'équation (I.6) conduit aux équations de Hartree-Fock pour un système à une particule :

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_i + V_{ext}(\vec{r}) + \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \int d^3\vec{r}' \frac{|\phi_j(\vec{r}')|^2}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \right) \phi_i(\vec{r}) - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N_e} \delta\sigma_i\sigma_j \int d^3\vec{r}' \frac{\phi_j^*(\vec{r}')\phi_i(\vec{r})}{|\vec{r}-\vec{r}'|} \phi_j(\vec{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\vec{r}) \dots (I.8)$$

Ces équations *de Hartree-Fock* sont difficiles à résoudre quand le système étudié comporte un grand nombre d'électrons.

Les interactions électrons-électrons produisent des termes d'énergie supplémentaires en plus de ceux de l'approximation *de Hartree-Fock (AHF)*, qui sont appelés termes d'énergie de corrélation selon Wigner [6].

Toute une catégorie de méthodes, dites d'interaction de configurations (CI, Configuration Interaction) s'est construite sur cette base. Leur objectif est d'aboutir à une solution exacte de l'équation de *Schrödinger*. Malheureusement le nombre de configurations croît rapidement avec le nombre d'électrons mis en jeu, ce qui limite la portée des calculs à de tous petits systèmes.

En principe l'*AHF* pose un problème du fait du caractère non local du potentiel d'échange. De plus, cette méthode ne tient pas compte des effets de corrélation entre électrons de spins antiparallèles.

I.2.3. Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT):

Résoudre l'équation de Schrödinger avec N électrons doit utiliser des méthodes approximatives qui permettent de reproduire le plus exactement possible les quantités physiques contenant le plus d'informations. La théorie de la fonctionnelle de la densité (*DFT*) offre ainsi des perspectives intéressantes puisque (en principe) elle permet d'obtenir la densité électronique ρ et l'énergie totale du système exactement.

La méthode est basée sur le postulat proposé par Thomas et Fermi [7,8] à la fin des années 30. Il stipule que les propriétés électroniques peuvent être décrites en terme de fonctionnelles de la densité électronique ρ définie sur l'espace usuel \mathbb{R}^3 .

La densité électronique $\rho(r)$ étant la probabilité de présence d'un électron dans un volume unitaire en r . Cette quantité est définie de la façon suivante [9] :

$$\rho(\vec{r}) = N \int_{\text{tout l'espace}} \dots \int_{\text{tout l'espace}} \Psi^*(\vec{r}, \dots, \vec{r}_n) \Psi(\vec{r}, \dots, \vec{r}_n) d\vec{r}_1 \dots d\vec{r}_n \dots \quad (\text{I.9})$$

et

$$N = \int_{\text{tout l'espace}} \rho(\vec{r}) \dots \dots \dots \quad (\text{I.10})$$

Cette propriété, sur laquelle se base les techniques du calcul DFT, a été démontré par *Pierre Hohenberg* et *Walter Kohn* (prix Nobel de chimie en 1998).

I.2.4. Théorèmes de Hohenberg et Kohn:

Le formalisme de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) est basé sur les deux théorèmes de Hohenberg et Kohn [10].

Premièrement, Hohenberg et Kohn ont montré qu'il existe une correspondance biunivoque entre le potentiel extérieur et la densité électronique $\rho(r)$ permettant de représenter le premier comme une fonctionnelle de l'état fondamental de la deuxième. Par conséquent, l'énergie totale du système à l'état fondamental est également une fonctionnelle de la densité électronique, soit :

$$E = E[\rho(\vec{r})] \dots \dots \dots \quad (\text{I.11})$$

Ce théorème est à la base de la théorie de la fonctionnelle de la densité et explique l'appellation qui

lui a été donnée. Ceci diffère de la méthode **Hartree-Fock**, dans laquelle l'énergie totale du système est fonctionnelle de la fonction d'onde.

Une conséquence immédiate de ce théorème est que la densité électronique détermine de façon unique l'opérateur Hamiltonien du système. Ainsi, en connaissant la densité électronique, l'opérateur Hamiltonien peut être déterminé et à travers ce Hamiltonien, les différentes propriétés du matériau peuvent être calculées.

Deuxièmement, **Hohenberg et Kohn** ont montré que : pour un potentiel et un nombre d'électrons N donnés, l'énergie totale du système atteint sa valeur minimale lorsque la densité $\rho(r)$ correspond à la densité exacte de l'état fondamental $\rho_0(r)$

$$E(\rho_0) = \min E(\rho) \dots \dots \dots (I.12)$$

La fonctionnelle de l'énergie totale de l'état fondamental s'écrit comme suit :

$$E[\rho(\vec{r})] = F[\rho(\vec{r})] + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3\vec{r} \dots \dots \dots (I.13)$$

Où $V_{ext}(r)$ représente le potentiel externe agissant sur les particules et $F[\rho(r)]$ représente la fonctionnelle universelle de **Hohenberg et Kohn**, avec :

$$F[\rho(\vec{r})] = \langle \Psi | T + V | \Psi \rangle \dots \dots \dots (I.14)$$

La connaissance de cette fonctionnelle permet de déterminer l'énergie totale et la densité de charge de l'état fondamental pour un potentiel externe donné, en utilisant le principe variationnel. Malheureusement, le théorème de Hohenberg et Kohn ne donne aucune indication de la forme de $F[\rho(r)]$

I.2.5. Les équations de Kohn et Sham:

Kohn et Sham [11] ont introduit un développement supplémentaire qui consiste à remplacer le système réel interactif en un système fictif non interactif. Cette approche réalise une correspondance exacte entre la densité électronique, l'énergie de l'état fondamental d'un système électrons en interaction soumis au potentiel réel. De ce fait, la densité électronique et l'énergie du système réel sont conservées dans ce système fictif. Constitué de fermions non interactifs placés dans un potentiel effectif et le système réel à plusieurs. Pour ce système fictif, les théorèmes de **Hohenberg et Kohn** s'appliquent également. La fonctionnelle de la densité $E_{V_{ext}}[\rho]$ pour le système interactif peut être exprimée par l'expression suivante :

$$E_{V_{ext}}[\rho] = T_0[\rho] + V_H[\rho] + V_{xc}[\rho] + V_{ext}[\rho] \dots \dots \dots (I.15)$$

T_0 : est l'énergie cinétique du système sans interaction,

V_H : désigne le terme de Hartree (l'interaction de Coulomb classique entre les électrons),

V_{xc} : le terme qui comprend les effets de l'échange et de la corrélation,

V_{ext} : inclut l'interaction coulombienne des électrons avec les noyaux et celle des noyaux entre eux.

Le terme de Hartree et celui de l'énergie cinétique jouent un rôle important dans la description des états des électrons libres. Ces termes sont les plus importants dans le traitement de l'interaction des électrons. La différence entre l'énergie cinétique réelle et celle des électrons non interagissant ainsi que la différence entre l'énergie d'interaction réelle et celle de Hartree sont prises en compte dans l'énergie d'échange et corrélation $E_{xc}[\rho]$

L'équation de Schrödinger s'écrit alors :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_i^2 + V_{eff}(\vec{r}) \right] |\varphi_i(\vec{r})\rangle = \varepsilon_i |\varphi_i(\vec{r})\rangle, i = 1, \dots, N \dots\dots\dots(I.16)$$

où le potentiel d'échange et de corrélation est donné par la fonctionnelle dérivée:

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \dots\dots\dots(I.17)$$

et la densité de l'état fondamental est donnée par une somme sur l'ensemble des orbitales occupées donné par la relation:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(\vec{r})|^2 \dots\dots\dots(I.18)$$

Le déterminant de l'état fondamental du système revient alors à résoudre, de manière auto cohérente, l'ensemble des équations (I.16), appelés équations de **Kohn et Sham**. La somme des trois termes $VH + Vxc + Vext$ constitue un potentiel effectif V_{eff} qu'on peut qualifier de local, car il ne dépend que de r . Cette méthode est formellement exacte, mais pour le calcul pratique, l'énergie d'échange et de corrélation, qui est une fonctionnelle de la densité, nécessite d'introduire certaines approximations.

I.2.6. La fonctionnelle d'échange-corrélation:

Le fait que la DFT ne donne aucune information sur la forme de la fonctionnelle échange corrélation, l'approximation introduite pour sa détermination doit être applicable pour différents systèmes. Les effets qui résultent des interactions entre les électrons sont de trois catégories :

- L'effet d'échange, encore appelé corrélation de fermi, résulte de l'antisymétrie de la fonction d'onde totale. Il correspond au fait que deux électrons de même spin ont une probabilité nulle de se trouver au même endroit. Cet effet est directement relié au principe de Pauli et ne fait absolument pas intervenir la charge de l'électron. L'approximation de **Hartree-Fock** [12] le prend en compte de manière naturelle, à cause de l'antisymétrie du déterminant de Slater représentant la fonction d'onde Φ .

- La corrélation de coulomb est due à la charge de l'électron. Elle est reliée à la
- répulsion des électrons en $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ Contrairement à l'effet d'échange, elle est indépendante du spin. Cet effet est négligé par la théorie *de Hartree-Fock*.
- La correction de "*self interaction*", le troisième effet provient du fait que les fonctions d'onde électroniques sont formulées en termes de particules indépendantes, et doit conduire à un comptage correct du nombre de paires d'électrons.
- L'approche *de Kohn-Sham* [11] impose au terme d'échange- corrélation de prendre en charge, en plus de tout cela, la correction du terme d'énergie cinétique. En effet, même si la densité du système fictif considéré est la même que celle du système réel, l'énergie cinétique déterminée est différente de l'énergie réelle, à cause de l'indépendance artificielle des fonctions d'onde. Le calcul de l'énergie et du potentiel d'échange-corrélation repose sur un certain nombre d'approximations.

I.2.6.a. L'approximation de la densité locale (LDA):

L'approximation de la densité locale (*Local Density Approximation LDA*) repose sur l'hypothèse que les termes d'échange-corrélation ne dépendent que de la valeur locale de $\rho(\vec{r})$; C'est-à-dire qu'elle traite un système non homogène comme étant localement homogène.

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

$$E_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \int \rho(\vec{r}) \varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] d^3\vec{r} \dots\dots\dots(I.19)$$

Où :

$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ est l'énergie d'échange-corrélation par particule du gaz d'électrons homogène avec une densité constante ρ , où le potentiel d'échange-corrélation V_{xc} est obtenu par l'équation (I.20).

L'énergie d'échange-corrélation du gaz d'électrons homogène est connue avec grande précision.

$$V_{xc}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_{xc}[\rho(\vec{r})] + \rho(\vec{r}) \frac{\delta \varepsilon_{xc}}{\delta \rho} \dots\dots\dots(I.20)$$

L'approximation de la densité locale suppose que la fonctionnelle $\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})]$ est purement local.

Cette énergie est divisée en deux termes :

$$\varepsilon_{xc}^{LDA}[\rho(\vec{r})] = \varepsilon_x[\rho(\vec{r})] + \varepsilon_c[\rho(\vec{r})] \dots\dots\dots(I.21)$$

Où

$\varepsilon_x[\rho(\vec{r})]$:est l'énergie d'échange.

$\varepsilon_c[\rho(\vec{r})]$:est l'énergie de corrélation.

La fonctionnelle ε_{xc} peut être constante, mais généralement, elle est déterminée par des procédures de paramétrage comme celles de *Wigner* [12], *Ceperly et Alder* [13] *Perdew et Zunger*[14], *Kohn et Sham* [11], *Hedin et Lundqvist* [15]et *Perdew et Wang* [16]. Pour les systèmes magnétiques, la LDA

doit être étendue à l'Approximation de la Densité Locale de Spin (LSDA : Local Spin Density Approximation).

I.2.6.b. L'approximation du gradient généralisé (GGA):

Dans plusieurs cas, la LDA a donné des résultats fiables, mais dans d'autres, elle a été moins exacte avec les résultats expérimentaux. La plupart des corrections qui ont été introduites à la LDA reposent sur l'idée de tenir en compte les variations locales de la densité.

Pour cette raison le gradient de la densité électronique a été introduit conduisant à l'approximation du gradient généralisé (**GGA**, *Generalized Gradient Approximations*), dans laquelle l'énergie d'échange et de corrélation est en fonction de la densité électronique et de son gradient :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho(r)] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}[\rho(r), |\nabla\rho(r)|] d^3r \dots\dots\dots(I.22)$$

Cette relation étant la fonction d'échange et de corrélation dépendante de la densité électronique et son gradient, et si on tient compte du spin, l'équation (I.22) s'écrit :

$$E_{xc}^{GGA}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}] = \int d^3 \epsilon_{xc}[\rho_{\uparrow}, \rho_{\downarrow}, \nabla\rho_{\uparrow}, \nabla\rho_{\downarrow}] \dots\dots\dots(I.23)$$

Les paramétrisations utilisées pour la GGA sont différentes. Parmi elles celles de Perdew et al. (1992) [11], et Perdew et al. (1996) [16]. Il existe plusieurs versions de la GGA les plus utilisées sont celles de Perdew et Wang [17] et Perdew [18].

I.2.7. Résolution des équations de Kohn-Sham:

La résolution des équations de *Kohn et Sham* (I.15) nécessite le choix d'une base pour les fonctions d'onde que l'on peut prendre comme une combinaison linéaire d'orbitales appelées orbitales *de Kohn-Sham (KS)* écrites sous la forme :

$$\Psi_i(\vec{r}) = \sum C_{ij} \phi_j(\vec{r}) \dots\dots\dots(I.24)$$

Où les $\phi_j(\vec{r})$ sont les fonctions de base et les C_{ij} les coefficients de développement.

La résolution des équations de *Kohn et Sham* revient à déterminer les coefficients C_{ij} pour les orbitales occupées qui minimisent l'énergie totale. La résolution des équations de *KS* pour les points de symétrie dans la première zone de *Brillouin* permet de simplifier les calculs. Cette résolution se fait d'une manière itérative en utilisant un cycle d'itérations autocohérent illustré par l'organigramme de la **Figure I.1**. On commence par injecter la densité de charge initiale ρ_{in} pour diagonaliser l'équation séculaire :

$$(H - \epsilon_i S) C_i = 0 \dots\dots\dots(I.25)$$

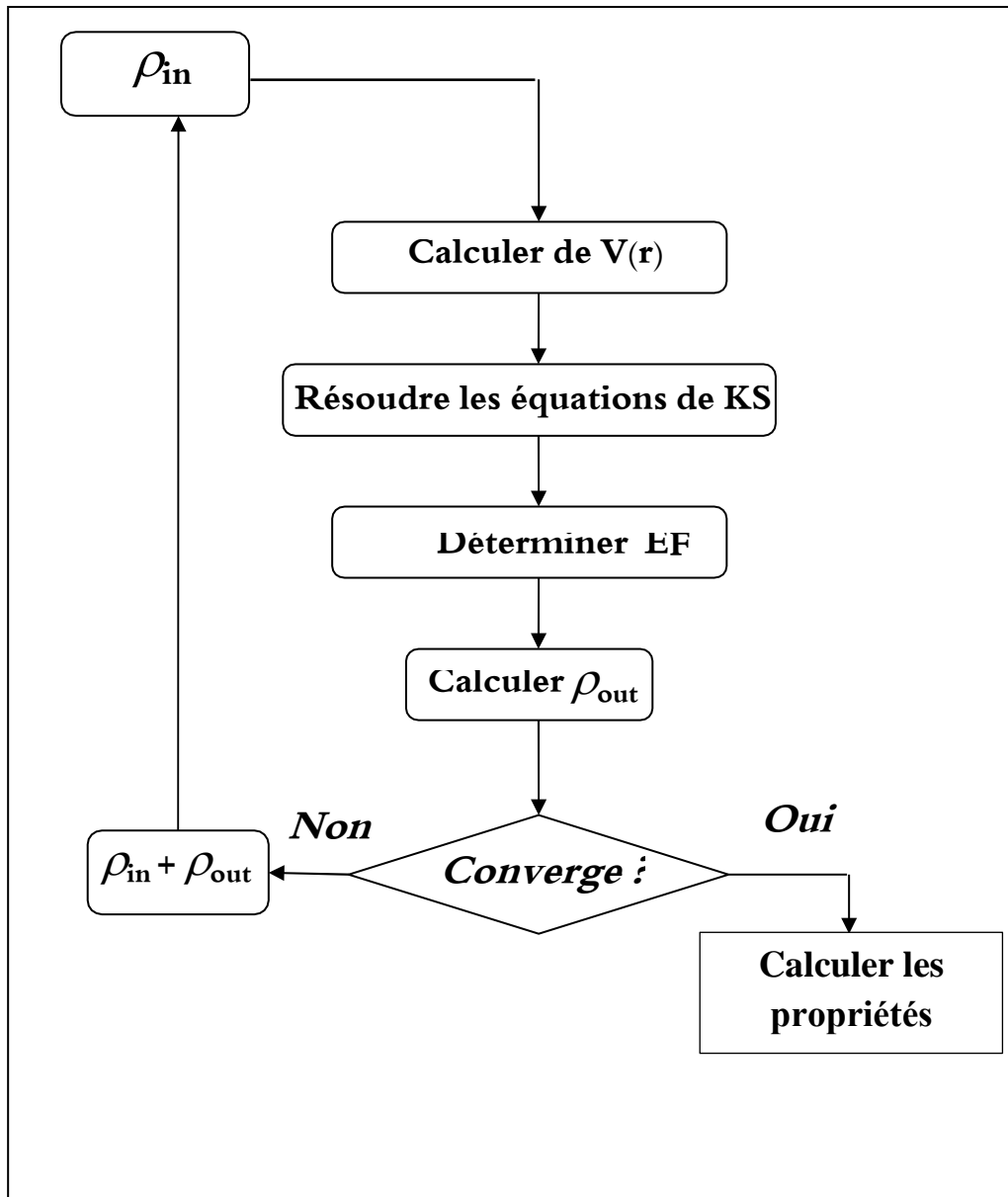
Où H représente la matrice Hamiltonienne et S la matrice de recouvrement.

Ensuite, la nouvelle densité de charge ρ_{out} est construite avec les vecteurs propres de cette équation séculaire en utilisant la densité de charge totale qui peut être obtenue par une sommation sur toutes les orbitales occupées (I.18).

Si les calculs ne concordent pas, on mélange les deux densités ρ_{in} et ρ_{out} de la manière suivante :

$$\rho^{i+1} = (1-\alpha)\rho_{in}^i + \alpha\rho_{out}^i \dots\dots\dots(I.26)$$

"i" représente la "i^{ème}" itération et α un paramètre de mixage. Ainsi la procédure itérative peut être poursuivie jusqu'à ce que la convergence soit réalisée.



Figure(I.1): Cycle auto cohérent de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)

I.3. Les différentes méthodes ab-initio :

La méthode des ondes planes augmentée linéarisé **LAPW** (Linéarisé Augmented Plane Waves) est une procédure utilisée pour résoudre les équations de **Kohn-Sham** de la densité de l'état fondamentale, l'énergie totale, et les valeurs propre d'un système électronique, en utilisant un ensemble de base utile pour résoudre ce problème. L'origine de ce procédé est la méthode des ondes planes augmentées **APW** (Augmented Plane Waves) [19].

I.3.1.Méthode des ondes planes augmentées (Augmented Plane Waves APW):

Cette méthode est introduite par Slater (1937), elle est basée sur l'idée suivante : Dans un atome, les électrons de la région loin du noyau sont plus ou moins libres, et les fonctions d'onde sont décrites par des ondes planes, Cependant dans la région proche du noyau les électrons se comportent exactement comme ils sont dans un atome libre donc les fonctions d'ondes dans ce cas sont décrites par des fonctions atomiques. D'après cette idée on peut diviser l'espace d'un atome en deux régions [19]: - Région autour de chaque atome représenté par une sphère appelé Sphère Muffin Tin (S_α) (Figure II-1) de rayon R_α ;

- Région de l'espace restant en dehors de la sphère (I) appelé région interstitielle (Figure I- 2).

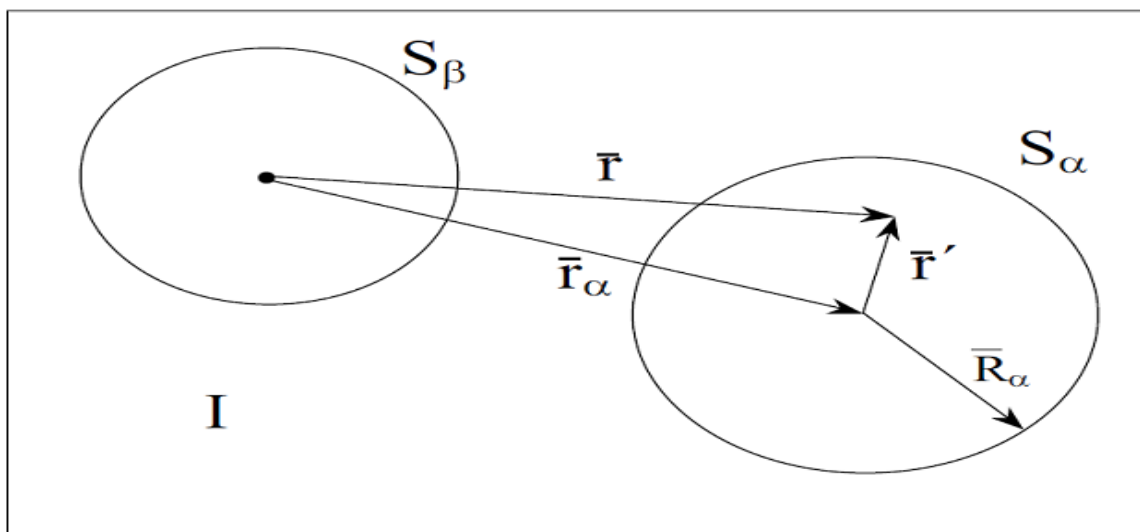


Figure I-2: Division d'une maille élémentaire de deux atomes en deux régions : région Muffin Tin et région interstitielle I.

Donc la fonction d'onde est définie par l'équation suivante [19]:

$$\phi_{\vec{k}}^{\vec{k}'}(\vec{r}, \varepsilon) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} \dots\dots\dots \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} u_l^\alpha(r', \varepsilon) Y_{lm}(r') \dots\dots\dots \vec{r} \in S_\alpha \end{array} \right\} \dots\dots\dots \text{I.27}$$

Où V représente le volume de la maille élémentaire, \vec{k} et \vec{k}' . représentent respectivement le vecteur de la zone de Brillouin et le vecteur du réseau réciproque, et le vecteur \vec{r}' de longueur r' représente la position à l'intérieur des sphères donnée par rapport au centre de chaque sphère c'est-à-dire $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{r}_\alpha$ (Figure II-1)

$Y_{lm}(\hat{r}')$ Sont les harmoniques sphériques où \hat{r}' indique la longueur r' et l'angle de direction Θ' de \vec{r}' , en coordonnées sphériques.

$A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$ est le coefficient correspondant à l'onde plane, et $u_l^\alpha(r', \varepsilon)$. sont les solutions numériques de la partie radiale de l'équation de Schrödinger dans un potentiel sphérique donné pour une énergie particulière ε .

Pour que la fonction d'onde soit continue sur la surface des sphères, nous devons considérer que l'onde plane en dehors de la sphère Muffin Tin correspond à la fonction à l'intérieur de la sphère, sur toute la surface. Pour rendre ce concept possible, nous développons l'onde plane en harmoniques sphériques de l'origine de la sphere α . :

$$\frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} = \frac{4\pi}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} \sum_{lm} i^l j_l \left(|\vec{k} - \vec{k}'| r \right) Y_{lm}^* (\vec{k} + \vec{k}') Y_{lm}(r') \dots\dots\dots \text{I.28}$$

Où j_l est la fonction Bessel de l'ordre l. nous écrivons cette équation aux limites de la sphère ($\vec{r}' = \vec{R}_\alpha$) pour qu'elle correspond à la partie de l'équation(I.28) :

$$A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} = \frac{4\pi i^l e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V} u_l^\alpha(R_\alpha, \varepsilon)} j^l \left(|\vec{k} - \vec{k}'| R_\alpha \right) Y_{lm}^* (\vec{k} + \vec{k}') \dots\dots\dots \text{I.29}$$

Cette équation définit uniquement $A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$ même si ε est encore indéfini. Dans l'équation(I.29) , il existe un nombre infini de termes donc nous devons utiliser un nombre infini de $A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$.

Pour déterminer les états propres $\phi_{\vec{k}}^n(\vec{r})$ il faut d'abord déterminer la valeur propre de l'énergie

de cet état, pour cela nous supposons que $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k^n$ ce qui permet de déterminer la base APW et de construire les éléments de la matrice de l'hamiltonien donc est la solution, sinon nous devons proposer une autre valeur jusqu'à l'obtention de la racine appelée $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k^{n=1}$, la même procédure se répète pour $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k^{n=2}$.

Les problèmes de la méthode APW se trouvent aux difficultés de la résolution de la fonction d'état propre recherché de $u_l^\alpha(r', \mathcal{E})$ l'équation (I-27), à une valeur d'énergie $\mathcal{E} = \mathcal{E}_k^n$, sachant que cette énergie est pour l'instant inconnue. Pour résoudre ce problème il faut déterminer $u_l^\alpha(r', \mathcal{E})$ à des énergies connues [19].

I.3.2. Méthode des ondes planes augmentées linéarisés (Linearised Augmented Plane Waves LAPW):

Plusieurs solutions de problème de la méthode APW été mise au point, la première solution qui a été vraiment réussi est le concept de linéarisation introduit par Anderson [20,21]. Cette méthode est appelée la méthode des ondes planes augmentées linéarisées (Linearised Augmented Plane Waves LAPW).

Par cette méthode on peut déterminer la valeur de u_l^α au voisinage d'une énergie en utilisant un développement de Taylor :

$$u_l^\alpha(r', \mathcal{E}_k^n) = u_l^\alpha(r', \mathcal{E}_0) + (\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_k^n) \dot{u}_l^\alpha(r', \mathcal{E}_0) + O(\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_k^n)^2 \dots\dots\dots I.30$$

Avec

$$\dot{u}_l^\alpha(r', \mathcal{E}_0) = \left. \frac{\partial u_l^\alpha(r', \mathcal{E})}{\partial \mathcal{E}} \right|_{\mathcal{E}=\mathcal{E}_0} \dots\dots\dots I.31$$

Pour définir la base LAPW nous remplaçons les deux premiers termes de ce développement dans l'équation de la base APW pour une énergie \mathcal{E}_0 fixe :

$$\phi_{\vec{k}}^{\vec{k}'}(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} \dots\dots\dots \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} \left(A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} u_l^\alpha(r', \varepsilon_0) + B_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} \dot{u}_l^\alpha(r', \varepsilon_0) \right) Y_{lm}(r') \dots\dots\dots \vec{r} \in S_\alpha \end{array} \right\} \dots\dots\dots \text{I.32}$$

Afin de déterminer à la fois $A_{l=1,m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$ et $B_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$, nous considérons que la fonction à l'intérieur de la sphère correspond à l'onde plane, en utilisant une équation similaire à l'équation(I.32) et sa dérivée radiale.

Pour avoir la définition finale de la base LAPW nous supposons une description d'un état propre qui possède un caractère principale (l=1) de l'atome, cela signifie que dans le développement LAPW de cet état le coefficient $A_{l=1,m}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'}$ est large, donc pour minimiser ces coefficients il est intéressant de choisir proche du centre de la bande p dans ce cas le terme d'énergie $O(\varepsilon_0 - \varepsilon_k^n)^2$ de l'équation(I.32) reste faible. Donc on peut répéter cette étape pour chaque cas de (les états s, p d et f jusqu'à l=3) et pour chaque atome. Par la suite nous devons choisir un ensemble $\varepsilon_{1,l}^\alpha$ jusqu'à l=3 pour avoir la définition finale de LAPW [19] :

$$\phi_{\vec{k}}^{\vec{k}'}(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} \dots\dots\dots \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} \left(A_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} u_l^\alpha(r', \varepsilon_{1,l}^\alpha) + B_{lm}^{\alpha, \vec{k}+\vec{k}'} \dot{u}_l^\alpha(r', \varepsilon_{1,l}^\alpha) \right) Y_{lm}(r') \dots\dots\dots \vec{r} \in S_\alpha \end{array} \right\} \dots\dots\dots \text{I.33}$$

I.3.3. Méthode FP-LAPW (Full Potential Linearised Augmented PlaneWaves):

La méthode FP-LAPW est une amélioration de la méthode LAPW, elle représente une technique de résolution de l'équation de Poisson qui sert à déterminer le potentiel de corrélation V_c . Comme son nom indique (Full Potential) cette méthode elle assure la continuité du potentiel à la surface de la sphère Muffin Tin défini comme suit [22]:

$$V(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{l} \sum_k V_k e^{i(\vec{k}+\vec{k}')\cdot\vec{r}} \dots\dots\dots \vec{r} \in I \\ \sum_{lm} V_{lm}(\vec{r}) Y_{lm}(\vec{r}) \dots\dots\dots \vec{r} \in S_\alpha \end{array} \right\} \dots\dots\dots \text{I.34}$$

Et les fonctions de base de cette méthode à l'intérieur de la sphère Muffin Tin sont définies par la méthode LAPW comme une combinaison linéaire des fonctions radiales $U_l(\vec{r})Y_{lm}(\vec{r})$ et leurs dérivées par rapport à l'énergie $\dot{U}_l(\vec{r})Y_{lm}(\vec{r})$.

I.4. Le code de calcul Wien2k:

Dans ce travail, nous avons utilisé la méthode FP-LAPW, implémentée dans le code Wien2k. Le code Wien2k consiste en différents programmes indépendants (voir la figure I.2) qui sont liés par un script C. Shell :

NN : C'est un programme qui donne les distances entre plus proches voisins, qui aide à déterminer le rayon atomique de la sphère.

SGROUP : calcule les points de symétrie et le groupe d'espace de la structure introduite.

SYMMETRY : Il 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.

INSTGEN LAPW : permet de définir la polarisation du spin de chaque atome. Ceci est très important pour les calculs en spins polarisés et en particulier pour les cas anti-ferromagnétique ; ou il est demandé d'inverser le spin des atomes AFM et/ou de fixer le spin des atomes non-magnétique.

LSTART : Un programme qui génère les densités atomiques et détermine comment les différentes orbitales sont traitées dans le calcul de la structure de bande, comme des états de valence ou du cœur avec ou sans orbitales locales.

KGEN : Il génère une maille k dans la zone de Brillouin.

DSTART : Il génère une densité de départ pour le cycle SCF par la superposition des densités atomiques générées dans LSTART.

Alors un cycle self consistant est initialisé et répété jusqu'à ce que le critère de convergence soit vérifié. Ce cycle s'inscrit dans les étapes suivantes :

LAPW0 : Génère le potentiel pour la densité.

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

LAPW2 : Calcul les densités de valence pour les vecteurs propres.

LCORE : Calcul les états du cœur et les densités.

MIXER : Mélange les densités d'entrée et de sortie.

I.5. Structure du code Wien2k:

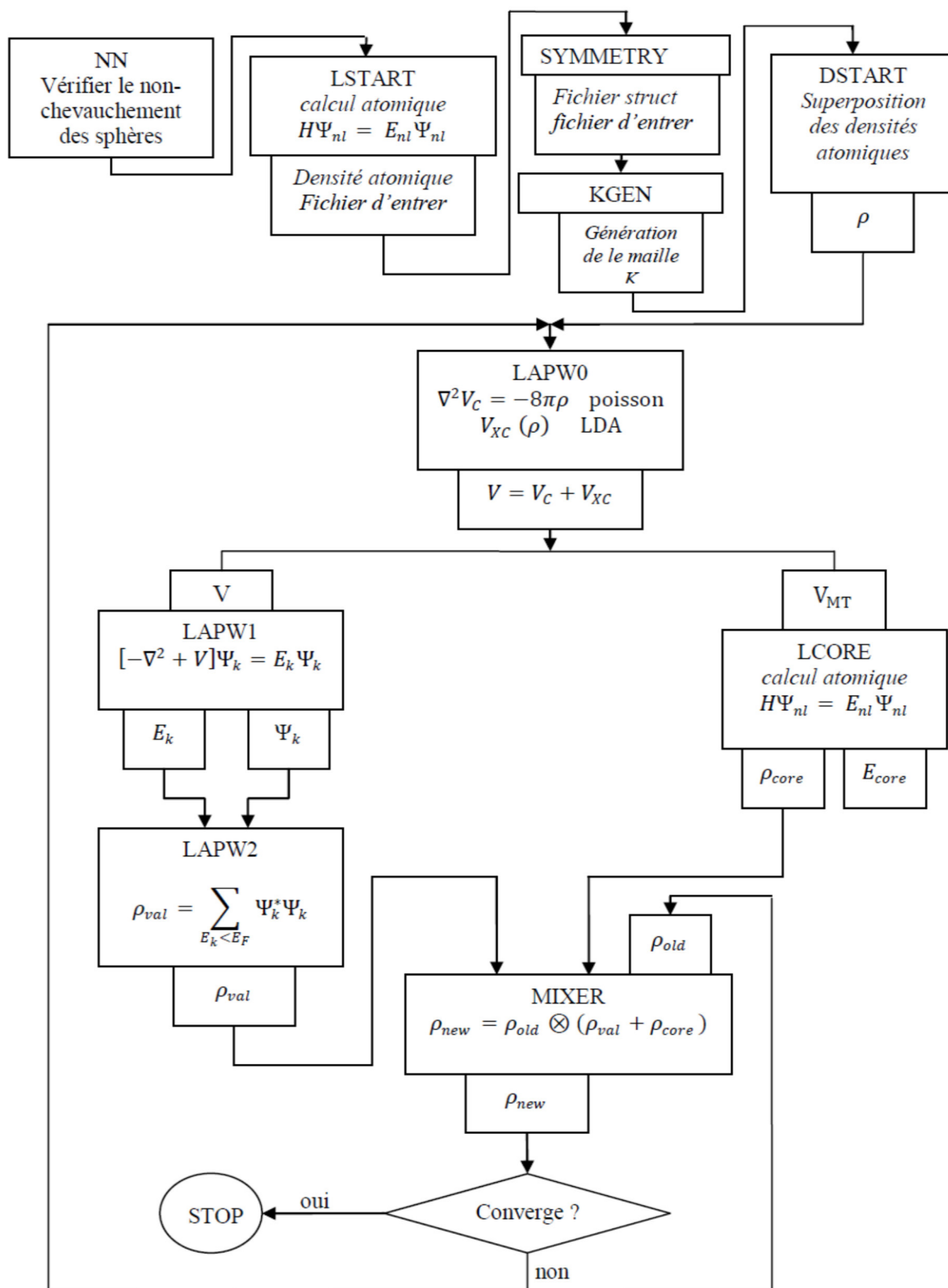


Figure I-3 : L'organigramme des programmes du code wien2k.

I.6.References

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc (London) 123, 714, (1929)
- [2] E. Schrödinger, Ann.phys,79, 489, (1926); E.Schrodinger, Ann.Phys.,79, 361,(1926)
- [3] M. Born, J.R. Oppenheimer, Ann. Phys. 87, 457 (1927)
- [4] D.R. Hartree, Proc. Cambridge Philos. Soc. 24, 89 (1928)
- [5] V. Fock, Z. Phys. 61, 126(1930) ; 62, 795 (1930)
- [6] J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981)
- [7] L. H. Thomas, The calculation of atomic fields, Proc. Cambridge Phil. Soc., 23, 542, (1927)
- [8] E. Fermi, Un metodo satatistico per la determinazione di alcune priorieta dell'atome, Rend.Accad. Naz. Lincei, 6, (1927) 602
- [9] R. G. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford Science Publication), (1989)
- [10] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964)
- [11] W. Kohn L.J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965)
- [12]E. Wigner , *Phys. Rev.* 46, 1001 (1934)
- [13] D. M. Ceperly and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. 45, 566 (1980)
- [14]J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B 23, 5048 (1981)
- [15]L. Hedin and B. Lundqvist, J. Phys. C 4, 2064 (1971)
- [16]J. P. Perdew and Y.Wang, Phys. Rev. B 45, 13244 (1992)
- [17]J. P. PERDEW, S. BURKE AND M. ERNZERHOF, PHYS. REV. LETT. 77, 3865 (1996)
- [18] J. P. PERDEW AND Y. WANG, PHYS. REV. B 33, 8800 (1986)
- [19] : S. Cottenier. Density Functional Theory and the Family of (L) APW-methods: a step-bystep introduction, (2004).
- [20]: K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen. Comp. Phys. Com. 147 (2002). [9]: P. Blaha, Institute of Materials Chemistry, TU Vienne, Australia.
- [21]: K. Schwarz, Institute of Materials Chemistry, TU Vienne, Australia.
- [22]: P. Blaha, k. Schwarz, G. K. H. Madsen, D. kvasnicka, J. LUITZ : WIEN2k, an Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for calculating Cristal Properties (Karlheinz Schwarz, Tech. Universitat Wien, Austria), 2001. ISBN 3-950131-1-2.

Chapitre II:

Revue bibliographique

II.1.Introduction:

L'électronique et le stockage de données nécessitent l'utilisation de matériaux aux propriétés spécifiques caractérisé par (vitesse, sensibilité, réduction de volume) et cela nécessite la découverte de nouveaux matériaux aux propriétés uniques ou exacerbâtes.

Récemment, les semi-conducteurs II-VI et leurs alliages ont suscité beaucoup d'intérêt en raison de leur application dans les dispositifs photovoltaïques, tels que CdO et MnO, et cela a incité de nombreux théoriciens pour étudier ces décalages et leurs propriétés structurales et thermodynamiques dans cette famille et leurs alliages et de passer en revue plusieurs des propriétés physiques de base.

II -2 l'oxyde de cadmium (CdO):

Les travaux sur l'oxyde de cadmium (CdO) ont été d'un grand intérêt technologique en raison de ses propriétés électriques et optiques de haute qualité. Le CdO peut être utilisé dans le domaine des dispositifs optoélectroniques tels que les cellules solaires, les phototransistors et les diodes, les électrodes transparentes et les capteurs de gaz [1].

II -2.1 Structure cristalline du l'oxyde de cadmium (CdO):

À pression ambiante, le CdO diffère des autres semi-conducteurs II-VI et cristallise dans la phase B1 (NaCl), il est nécessaire de comprendre le comportement de la structure CdO dans les hautes pressions. Afin d'étudier le changement de phase entre la structure NaCl (B1) et la structure CsCl (B2) du matériau CdO, Liu et al. ont développé expérimentalement une méthode pour étudier ce changement, il a été observé que la transformation de phase de CdO de la structure NaCl à la structure CsCl se produit à une pression d'environ 86,6 GPa [2], 90,6GPa [3]

Malgré les différences structurales, les propriétés électroniques du CdO sont étroitement liées à celles des autres semi-conducteurs II b-VI [4]. L'état fondamental du CdO est présent dans les structures B1 (NaCl)

	Stable phase	a(A°)
l'oxyde de cadmium	B1	4.6890(theo)[4]
	B1	4.770(exp)[3]
	B1	4.779(exp)[5]

Tableau II-1 : Propriétés structurales à l'équilibre expérimental [6]

II-2.3 Propriétés électroniques du CdO:

Pour expliquer avec précision la nature de la liaison dans le matériau étudié, il est important de calculer la densité de charge électronique (DCE), qui est obtenue à partir de la fonction d'onde de convergence. Donc, pour comprendre la nature de la liaison de la nanofeuille de CdO, nous avons calculé la distribution de la densité de charge dans le plan cristallographique (001) comme le montre la figure II-2. Le tracé de contour montre une liaison principalement partielle, c'est-à-dire qu'une liaison ionique-covalente mixte existe entre Atomes Cd et O . Cela ressort clairement de la densité de charge de couleur où la couleur bleue (+1,0000) communique avec le site d'accumulation de charge maximale. il est clair que la densité de charge autour de l'atome O est beaucoup plus élevée que celle de l'atome Cd. La différence d'électronégativité entre Cd (1,7) et O (3,5) expose 38,71 % d'ionicté.[7]

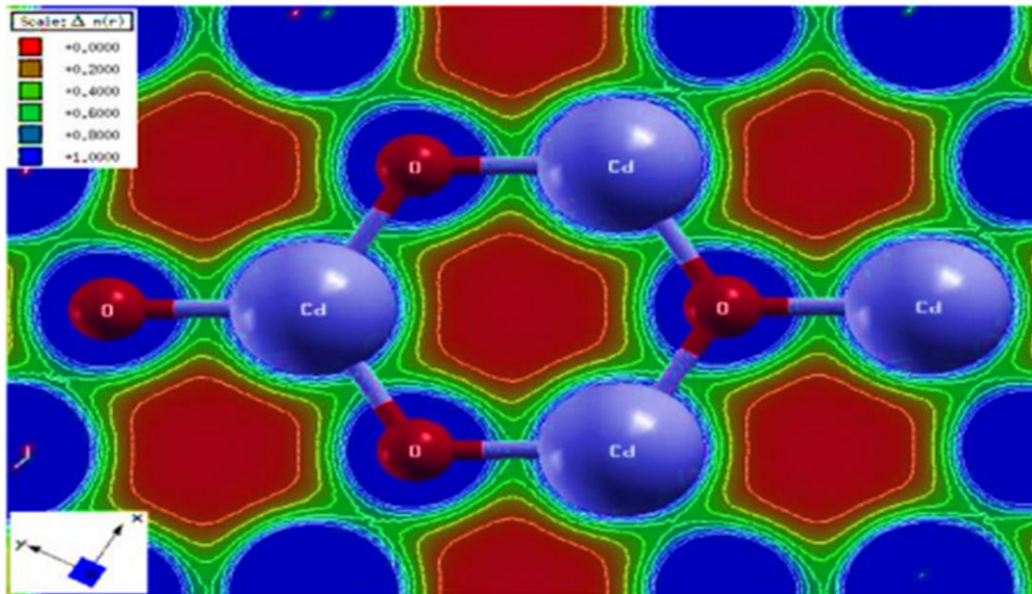


Figure II-1: Diagramme de densité de charge électronique de valence calculé de la nanofeuille de CdO .[5]

La structure de bande et la densité d'états du rock-salt CdO sont illustrées à la Figure II-3 et II- 4. Le maximum de la bande de valence est pris comme le zéro d'énergie. Il est clair que le bande interdite directe apparaît au point avec une énergie de 0,55eV.

L'approximation du gradient généralisé (GGA) prédit correctement une bande interdite indirecte de **Rocksalt** CdO avec des bandes de parité maximales au point R et des maxima au-dessus du niveau inférieur limite de la bande de conduction au point, résultant en une bande interdite négative indirecte de environ -0,51eV De RVB à CB, indiquant que la roche solide CdO est un semi-minéral matériel. De plus, le rock-salt CdO peut agir comme un matériau conducteur transparent car la partie inférieure de la bande de conduction dans le modèle est diffusée avec une bande passante de

5,52eV fluctuant significativement à partir de 1,38 eV au sommet de la bande de valence. Avec cela, on peut considérer que le comportement de liaison de Rocksalt CdO est un mélange des ions ioniques les plus faibles et les plus forts. Il contribue principalement à l'orbite de O 2p et Cd 4d lors de la formation de CdO [8].

II -3.L'oxyde de manganèse MnO :

L'oxyde de manganèse (II), ou monoxyde de manganèse, est un corps composé chimique inorganique, solide ionique, normalement composé en proportion équivalente d'ions oxyde et de cations manganoux ou manganèse à l'état II, de formule MnO, il forme des cristaux verts. Le composé est produit à grande échelle en tant que composant d'engrais et d'additifs alimentaires.[9]

II-3.1. Structure cristalline du MnO :

Comme de nombreux monoxydes, le MnO adopte la structure du **Rocksalt** et cristallise dans une phase (*B1*), dans laquelle les cations et les anions sont coordonnés sous une forme octaédrique, $a=4.445 \text{ \AA}$. Aussi comme de nombreux oxydes, l'oxyde de manganèse (II) est souvent inégal : sa composition peut varier de MnO à $MnO_{1,045}$ [10]

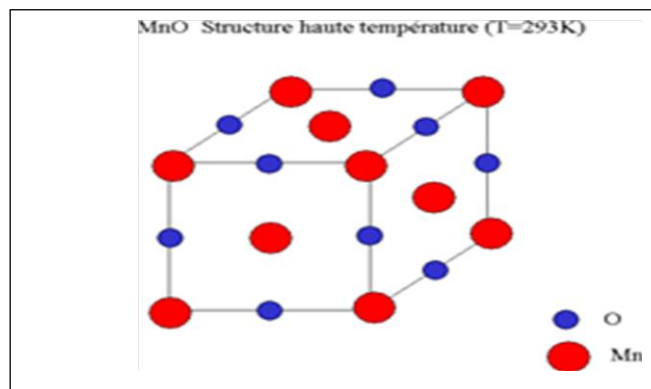
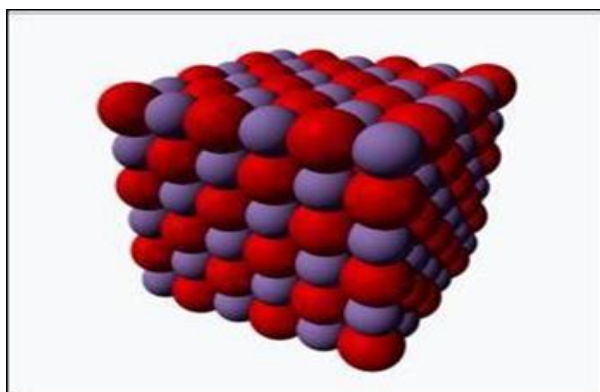


Figure II-2-a : structure compacte de MnO [7]

Figure II-2-b : Structure cristalline de MnO [7]

En dessous de 118 K, le MnO est antiferromagnétique. MnO a la particularité d'être l'un des premiers composés à avoir sa structure magnétique déterminée par diffraction neutronique, le rapport paru en 1951. Cette étude a montré que les ions Mn^{2+} forment un sous-réseau magnétique cubique face centrée où se trouvent des feuillets couplés ferromagnétiquement qui sont anti-parallèle aux feuilles adjacentes [11].

II-3.2. Propriétés électroniques du MnO:

Le calcul de la structure de bande est effectué en deux étapes décrites par Hugel et al. [10]. La première étape est la plus importante et est consacrée à l'obtention d'orbitales localisées pour les ions manganèse et oxygène. Pour cela, des équations de Schrödinger couplées avec des hamiltoniens locaux sont résolues de manière auto-cohérente. Le potentiel cristallin local est le résultat de la superposition de potentiels ioniques individuels. La procédure fait intervenir deux paramètres, le rayon de la sphère de potentiel R_0 et la valeur du potentiel constant V_0 à l'extérieur de celle-ci. Dans la présente demande $R_0=2.92\text{au}$. et $V_0 = 1.20 \text{ au}$. Pour le manganèse et $R_0=2.96 \text{ au}$. et $V_0 = 0.2\text{a.u}$. pour l'oxygène, le paramètre de maille étant de 8.381 au . La deuxième étape utilise les orbitales localisées afin de calculer simultanément les bandes de valence et de conduction les plus basses. Un L.C.A.O. méthode due à l'élimination du potentiel constant en dehors de la sphère potentielle lorsque l'on construit le potentiel cristallin permet d'atteindre cet objectif [11].

La différence de bande d'énergie E_g et $t2g$ est donnée par [12]:

$$A = D_0 + \frac{1}{2}(\Delta_\delta - \Delta_\sigma) - \frac{1}{2}\Delta_\pi$$

Les paramètres Δ_δ , Δ_σ et décrivent le chevauchement et la covalence entre les orbitales d des métaux et les orbitales s et p de l'oxygène. La différence $E_0 - D_0$ est la somme de la division bien connue entre les niveaux d dans un champ cubique plus la contribution de l'intégrale du champ cristallin. La contribution des intégrales du champ cristallin est négligeable pour MnO(0.04 eV) et la contribution ionique donne une séparation d'environ 0.32 eV. La contribution covalente est d'environ 0.85 eV comme on peut le déduire du tableau II-4.

Parametres	Mattheiss
E_0-D_0	-0.20
Δ_s	0.71
Δ_π	0.41
$\Delta_s- \Delta_\sigma$	2.3
Δ	0.77

Tableau II- 2 : Contributions et paramètre de champ cristallin en eV [12]

Il en résulte que l'origine de la séparation du champ cristallin dans le MnO est principalement due aux effets de covalence qui sont trois fois plus importants que les contributions de charge ponctuelle. [12]

II.4.References:

- [1] Shiori A., Jpn. Pat., No. 7 .909. (1997)
- [2] A,G,R,M.Structural,Electonic and Elastic Properties of ZnO and CdO: A First Principles study . N.M.S.S.V.N college, India .(2014).
- [3] H.Z. Liu, H.K. Mao, M. Somayazulu, Y. Ding, Y. Meng, D. Hausermann , Phy. Rev. B, 70 (2004) 094114
- [4] Boettger J. C. and Kunz A. B., Phys. Rev. B, 27 .1359. (1983)
- [5] Y. FEI, , Ame. Min. 84, (1999) 272-276
- [6] O. M. Madelung, Semiconductors: Data Handbook, 3rd ed. Springer, Berlin, (2004)
- [7] R. Hoffman, Rev. Mod. Phys. 60 .601–628. (1988)
- [8] Gang Yao,.. . Electronic and Optical Properties of Rocksalt CdO: a first-Principles Density-Functional Theory Study.China.(2012).
- [9] wikipedia.org/wiki/Manganese(II)_oxide at 17:06 , 01/10/2020
- [10] Earnshaw, Alan. Chemistry of the Elements (2nd ed.). [ButterworthHeinemann](#). ISBN 978-0-08-037941-8. (1997).
- [11] . Hugel and C. Carabatos. BAND STRUCTURE AND OPTICAL PROPERTIES OF MnO. Braitin. Vol. 60, No. 4, pp. 369-372, (1986).
- [12] L.F. Mattheiss, Phys. Rev. B2, 3918 (1970).

Chapitre III:

Résultats

et

discussions

III.1. Introduction :

Dans cette partie de la recherche, nous avons étudié les propriétés physiques (propriétés structurales et électroniques) des matériaux à des valeurs variables de pression (0,40,80) et déduit comment la pression affecte les propriétés physiques, en utilisant les méthodes approximatives de cette recherche sont WC-GGA et TB-mBJ .

On obtient les résultats suivants :

III.2. Détails de calcul:

groupe des espaces	N°:	Rk _{max}	K _{points}	N° les points	RMT (A°)	Conf-électronique
Fm3m	225	7	11*11*11	56	Cd : 2,000 Mn: 2,000 O: 1,700	Cd:[Kr]4d ¹⁰ 5s ² Mn:[Ar]3d ⁵ 4s ² O:[He] 2s ² 2p ⁴

Tableau III- 3 : Détails de calcul

III.3.Les Propriétés:

III.3.1. Propriétés cristallines et structurales :

III.3.1.1.Les résultats de l'optimisation :

Nous avons étudié les changements de l'énergie totale en termes de volume cellulaire afin d'obtenir le point auquel le système est plus stable. La longueur a (paramètre de maille) de chacune des substances étudiées peut être calculée. L'équation utilisée dans ce calcul est l'équation de **Murnaghan**

$$E = E_0 + \frac{B \times V}{B'} \times \left[\left(\frac{\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'}}{B' - 1} + 1 \right) - \frac{B \times V_0}{B' - 1} \right] \times \frac{1}{14703.6}$$

E: L'énergie total

E₀: L'énergie

B: Le module de masse de la cellule unitaire aux conditions standard

B': La dérivée du module de masse à pression nulle

V: Le volume de la cellule unitaire à pression P

V₀: Le volume de la cellule unitaire aux conditions standard

Le changement de pression en termes de volume est donné par la relation mathématique suivante:

$$P = \frac{B}{B' \left(\left(\frac{V_0}{V} \right)^{B'} - 1 \right)}$$

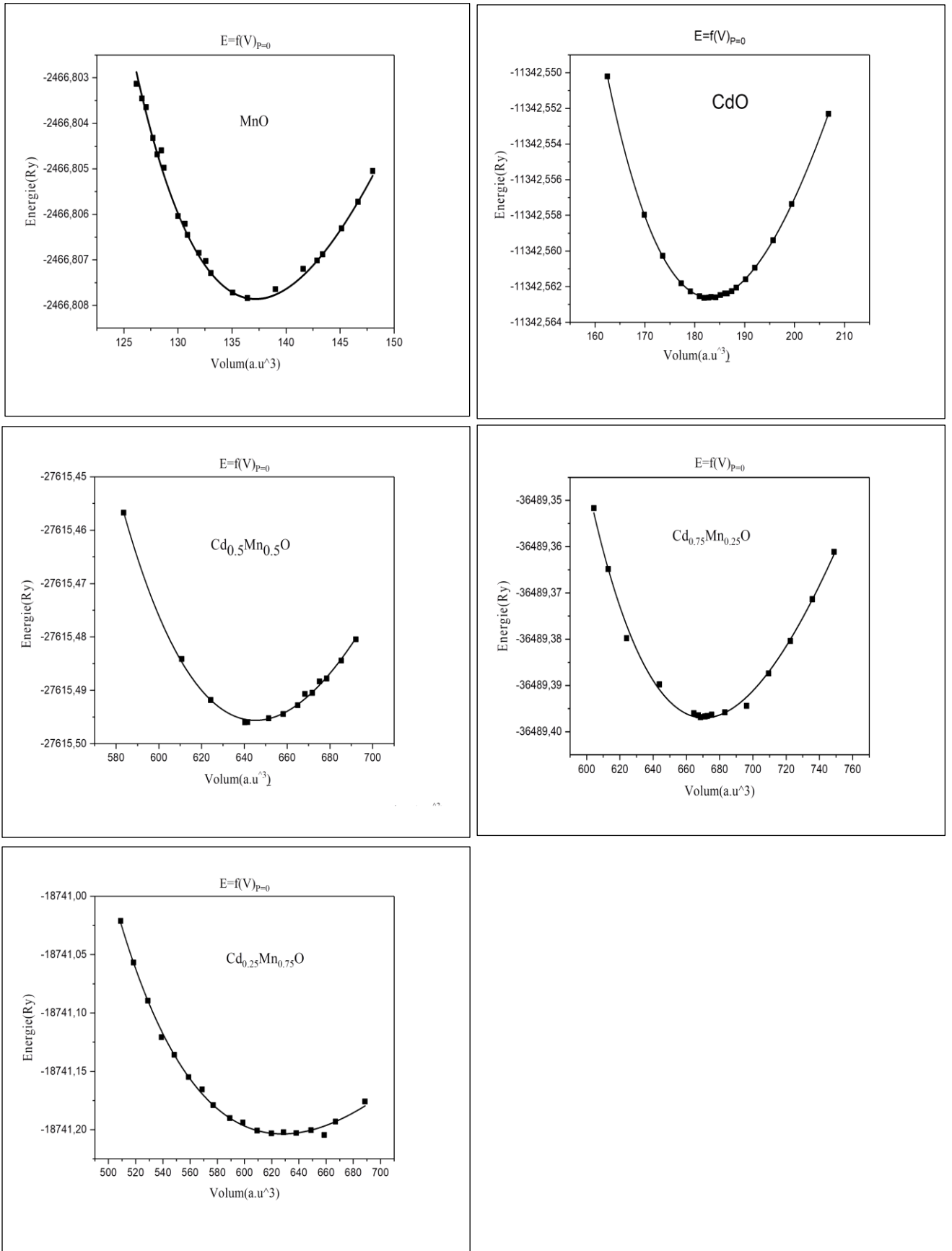


Figure III-1: La variation de l'énergie totale en fonction du volume obtenue par l'approximation WC-GGA.

	$a(\text{Å}^\circ)$	$a_{\text{exp}}(\text{Å}^\circ)$	$a_{\text{theo}}(\text{Å}^\circ)$	B	B'
CdO	4,69	4.770[1],4.777[2]	4.77[3,4]	124.26	4.78
Cd0.75Mn0.25O	4,6329	/		150.00	6.74
Cd0.5Mn0.5O	4,5722	/		154.46	5.76
Cd0.25Mn0.75O	4,5307	/		146.13	5.44
MnO	4,23	4.42[5]	4.44[6]	120.18	9.73

Tableau III- 4: Les résultats de l'optimisation

III.3.1.2. CdO:

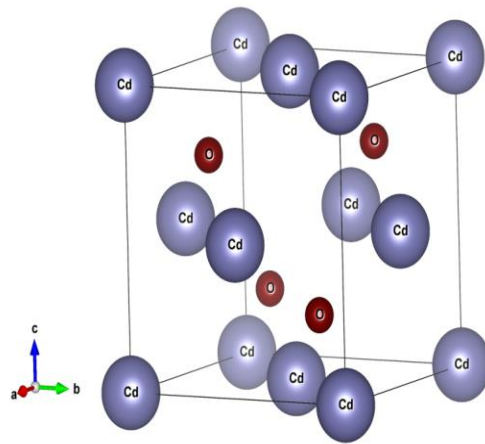


Figure III-1: structure cristalline de CdO

L'application des corrélations d'échange GGA en utilisant les calculs de l'approche FP montre que la molécule de CdO a une structure cristalline cubique et un groupe spatial de 225 FM-3M. Aussi, les paramètres de maille $a = b = c = 4,69\text{Å}^\circ$, par rapport à la résultat expérimental des paramètres de maille $a = b = c = 4.770\text{Å}^\circ$ [6,7]. on constate que le taux d'erreur est d'environ 1.6%

III.3.1.3. MnO:

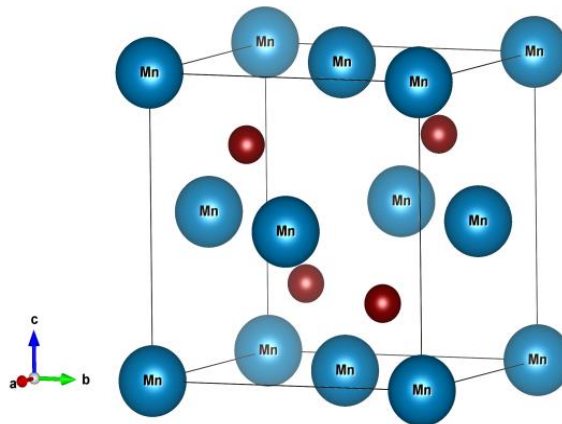


Figure III-2: structure cristalline de MnO

L'application des corrélations d'échange GGA en utilisant les calculs de l'approche FP montre que la

molécule de MnO a une structure cristalline cubique et un groupe spatial de $225 Fm3m$. Aussi, les paramètres de maille $a = 4,23 \text{ \AA}$, par rapport à la valeur théorique des paramètres de maille $a = 4.445 \text{ \AA}$ [6], nous trouvons que le taux d'erreur est d'environ 4,39 %. Et ce resultat est proche de celui expérimental 4.29 \AA [8]

III.3.1.4. $Cd_{0,75}Mn_{0,25}O$:

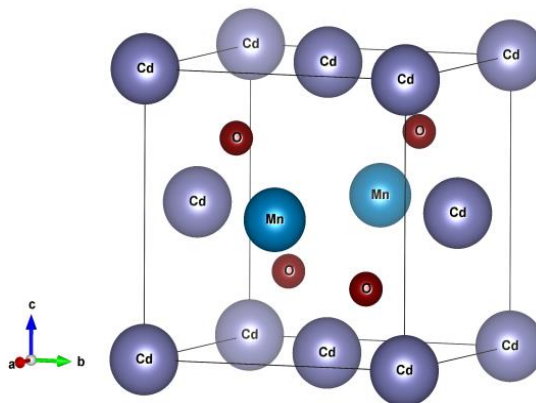


Figure III-3: structure cristalline de $Cd_{0,75}Mn_{0,25}O$

L'application des corrélations d'échange GGA à l'aide des calculs de l'approche FP montre que la molécule $Cd_{0,75}Mn_{0,25}O$ a une structure cristalline cubique et un groupe spatial de $Pm-3m$ (221). De plus, les paramètres de réseau $a = 4,6329 \text{ \AA}$.

III.3.1.5. $Cd_{0,5}Mn_{0,5}O$:

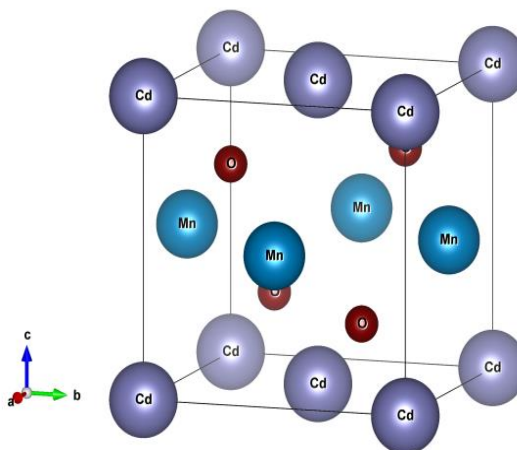


Figure III-3: structure cristalline de $Cd_{0,5}Mn_{0,5}O$

L'application des corrélations d'échange GGA en utilisant les calculs de l'approche FP montre que la molécule $Cd_{0,5}Mn_{0,5}O$ a une structure cristalline cubique et un groupe spatial de $Pm-3m$ (221). De plus, les paramètres de réseau $a = 4,5722 \text{ \AA}$

III.3.1.6. $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{O}$:

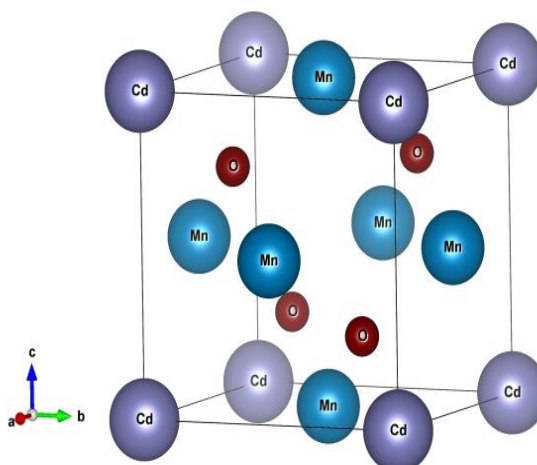


Figure III-5: structure cristalline de $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.25}\text{O}$

L'application des corrélations d'échange GGA en utilisant les calculs de l'approche FP montre que la molécule $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{O}$ a une structure cristalline cubique et un groupe spatial de Pm-3m (221). De plus, les paramètres de réseau $a = 4,5307 \text{ \AA}$.

III.3.2. Propriétés magnétique :

Mn%	L'atome	MMI(BM)	MMtotal(BM)
0%	Cd	0	0
	O	0	
25%	Cd	0,0109	4,9720
	Mn	4,1549	
	O	0,0473	
50%	Cd	0,02578	9,9569
	Mn	4,1607	
	O	0,1022	
75%	Cd	0,0461	14,9749
	Mn	4,1745	
	O	0,1608	
100%	Mn	4,1806	19,9667
	O	0,2249	

Tableau III- 5: Les moments magnétiques

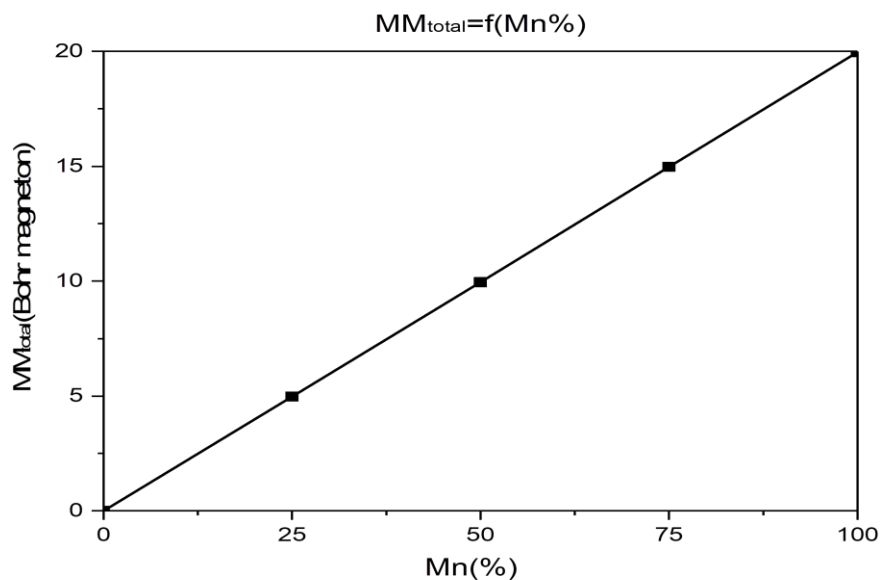


Figure III-7: Le moment magnétique en fonction concentration de Mn

Figure III-7: On note que le moment magnétique est directement proportionnel à la concentration de manganèse (Mn), et cela est dû à l'augmentation des éléments magnétiques dans le système

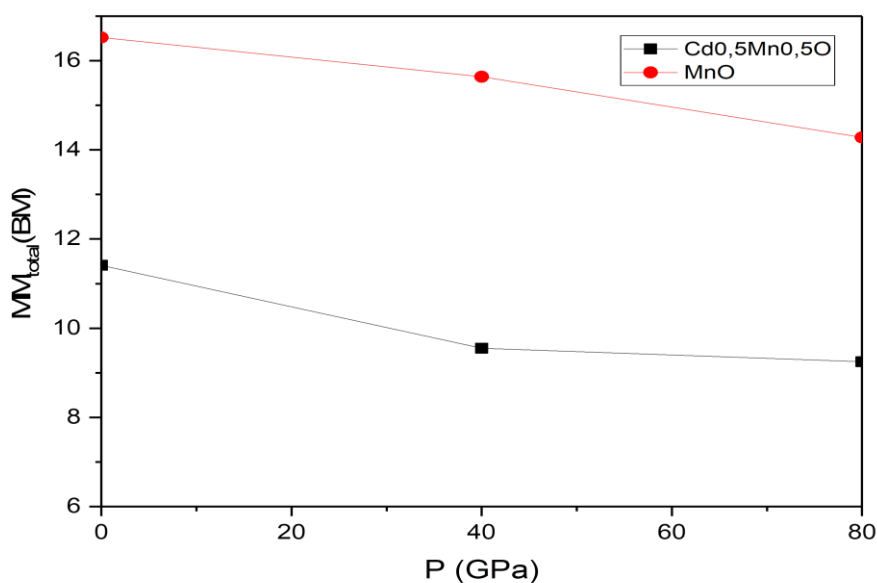


Figure III-8: Le moment magnétique en fonction de pression

Figure III-8 : On note que le moment magnétique est inversement proportionnel à la pression

III.3.3. Propriétés électronique:(pression nulle):

III.3.3.1. CdO:

III.3.3.1.a/ Les densités d'états (DOS):

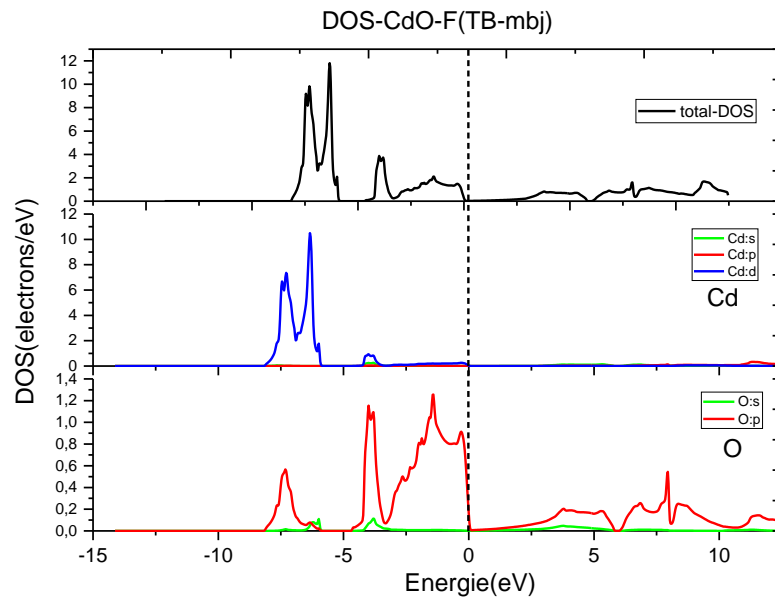


Figure III-9:densité d'états du CdO en P=0GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-8,-6]	Cd:d et O:p
BV2	[-4.2,0]	Cd:d et O:p

Tableau III- 6: L'états contributeurs dans CdO en P=0GPa

III.3.3.1.b/ La structure de bande d'énergie :

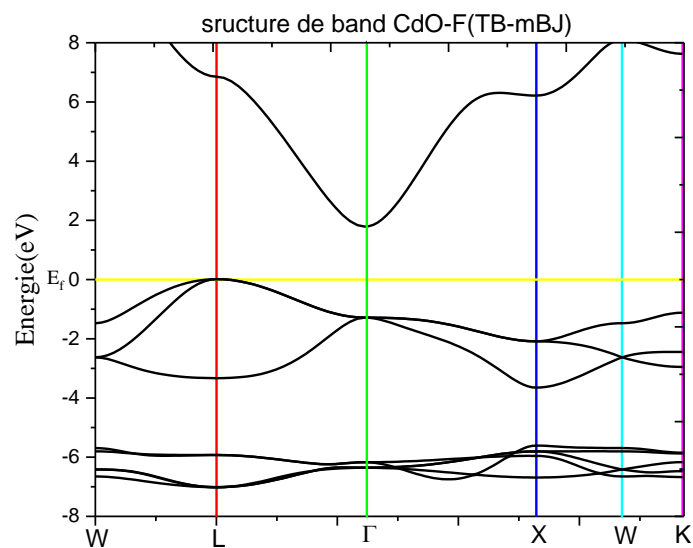


Figure III-10: Structure de band du CdO en P=0GPa par TB-mBJ

Figure III-10: Elle nous montre que CdO a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1.789 - 0 = 1.789 \text{ eV.}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur.

En comparant les résultats expérimentaux $E_g(\text{exp}) = 1.35 \text{ eV}$ [7], avec les résultats que nous avons obtenus, nous constatons que le taux d'erreur est d'environ 32.5%

III.3.3.1.c/ Densité de charges

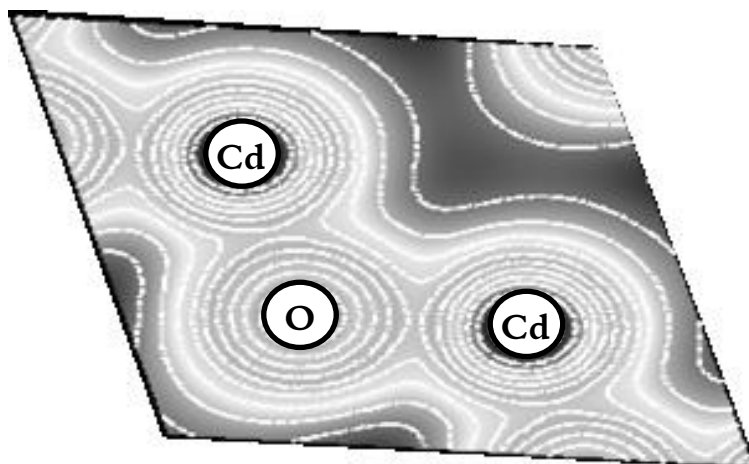


Figure III-11: densité de charge du CdO en P=0GPa par TB-mBJ

Figure III.11: La nature des liaisons entre les atomes peut être déterminée:

La nature de liaison entre Cd et O est liaison covalente

III.3.3.2.MnO :

III.3.3.2.a/ Les densités d'états (DOS)

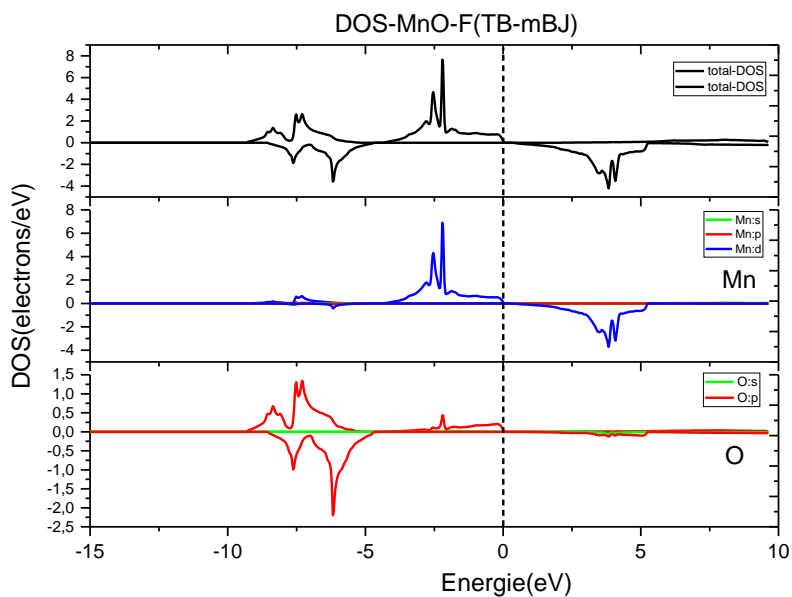


Figure III-12:densité d'états du MnO en P=0GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-9,-4.6]	Mn:d et O:p
BV2	[-4.6,0]	Mn:d(up) et O:p

Tableau III- 7: L'états contributeurs dans MnO à P=0GPa

III.3.3.2.b/ La structure de bande d'énergie :

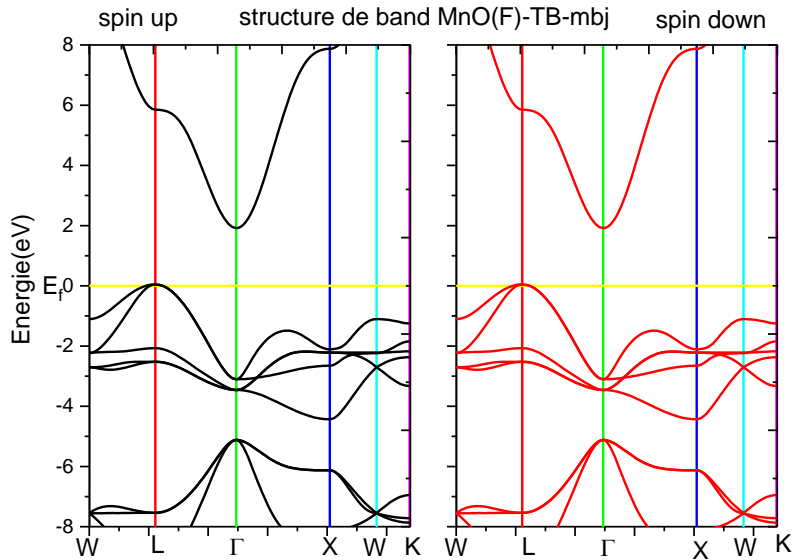


Figure III-13: Structure de band du MnO en P=0GPa par TB-mBJ

Figure III-13: Elle nous montre que MnO a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1.9156 - 0.04 = 1.8756 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur.

En comparant les résultats expérimentaux $E_{g, \text{exp}} = 3.9 \text{ eV}$ [8] avec les résultats que nous avons obtenus, nous constatons que le taux d'erreur est d'environ 51.2%

III.3.3.1.c/ Densité de charges:

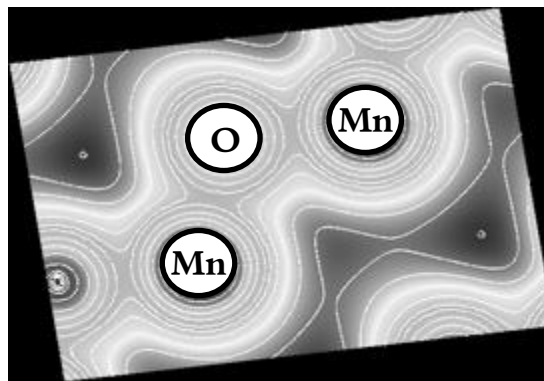


Figure III-14: densité de charge du MnO en P=0GPa par TB-mBJ

Figure III.14: La nature des liaisons entre les atomes peut être déterminée:
La nature de liaison entre Mn et O est liaison covalente

III.3.3.3. Cd_{0.75}Mn_{0.25}O :

III.3.3.3.a/ Les densités d'états (DOS):

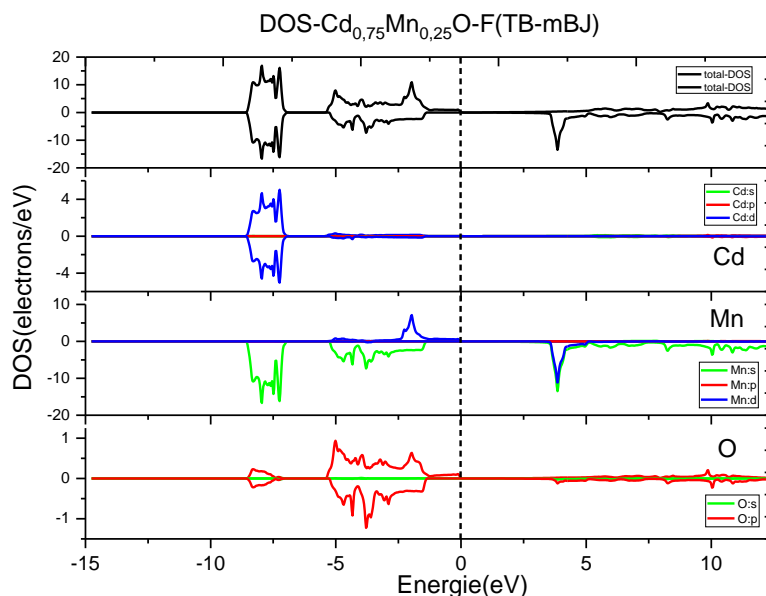


Figure III-15: densité d'états du Cd_{0.75}Mn_{0.25}O en P=0GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-8.55,-7]	Cd:d avec Mn:s(dn)
BV2	[-5.4,-1.3]	Mn:s(dn) avec O:p

Tableau III- 8: L'états contributeurs dans Cd_{0.75}Mn_{0.25}O à P=0GPa

III.3.3.3.b/ La structure de bande d'énergie :

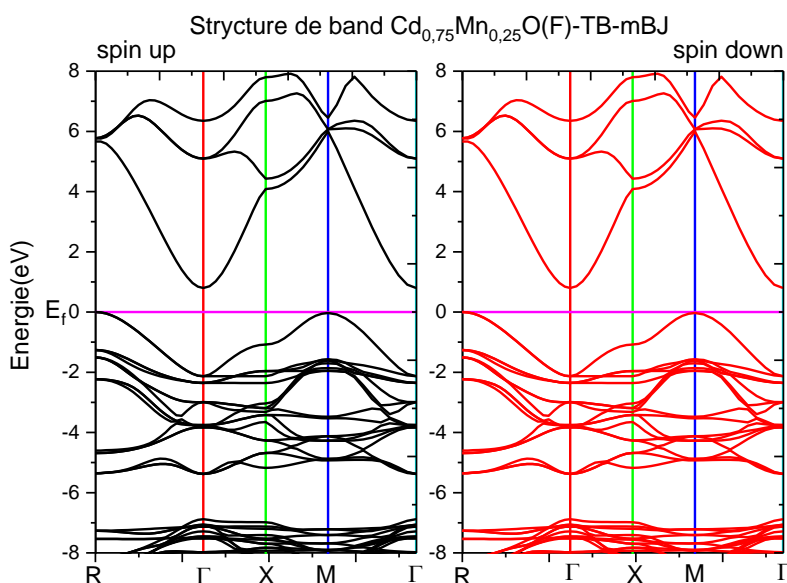


Figure III-16: Structure de band du Cd_{0.75}Mn_{0.25}O en P=0GPa par TB-mBJ

Figure III-16: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point R et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :
 $E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$
 $E_g = 0.8 - 0.0 = 0.8 \text{ eV}$
 Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur.

III.3.3.1.c/ Densité de charges:

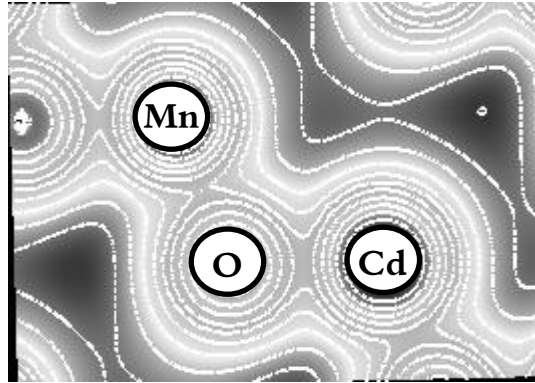


Figure III-17: densité de charge du $\text{Cd}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III.17: La nature des liaisons entre les atomes peut être déterminée:

- La nature de liaison entre Cd et O est liaison covalente
- La nature de liaison entre Mn et O est liaison covalente

III.3.3.4. $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$:

III.3.3.4.a/ Les densités d'états (DOS):

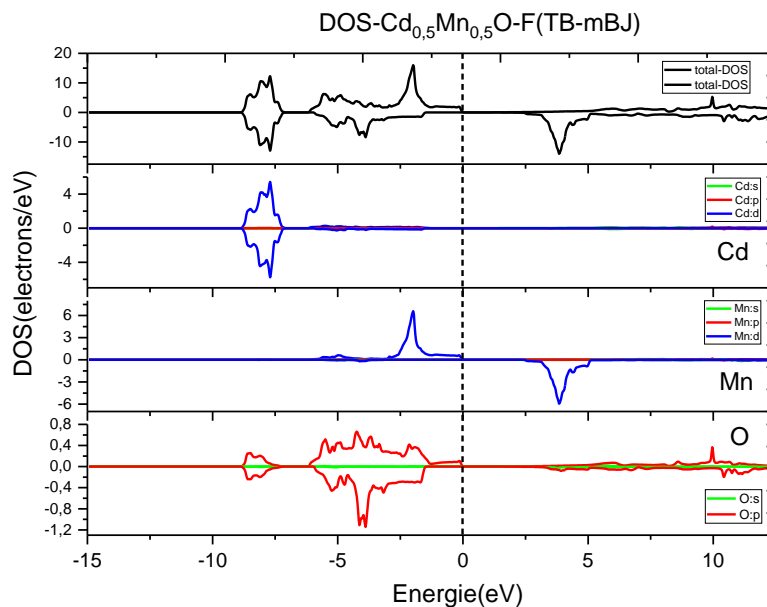


Figure III-18: densité d'états du $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-8.8,-7]	Cd:d avec O:p
BV2	[-6,-2.8]	Cd:d avec Mn:d(up) et O:p
BV3	[-2.8,0]	Mn:d(up) avec O:p

Tableau III- 9: L'états contributeurs dans $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ à $P=0\text{GPa}$

III.3.3.4.b/ La structure de bande d'énergie :

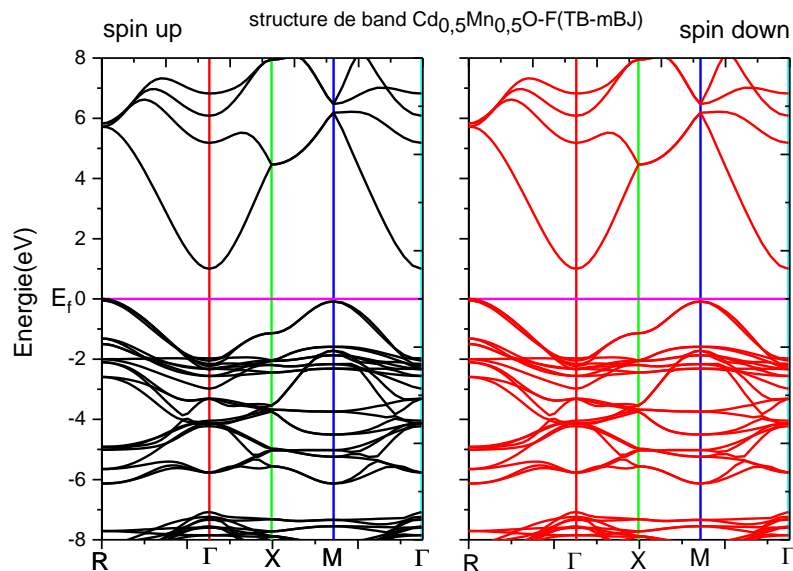


Figure III-19: Structure de band du $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III-19: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point R et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante:

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1 - 0.0 = 1 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur.

III.3.3.1.c/ Densité de charges:

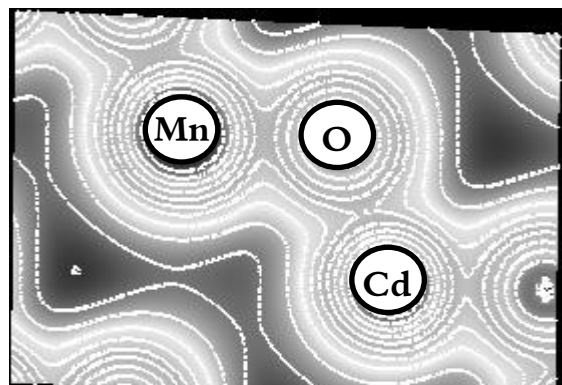


Figure III-20: densité de charge du $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III.20: La nature des liaisons entre les atomes peut être déterminée:

- La nature de liaison entre Cd et O est liaison covalente
- La nature de liaison entre Mn et O est liaison covalente

III.3.3.5. $\text{Cd}_{0,25}\text{Mn}_{0,75}\text{O}$:

III.3.3.4.a/ Les densités d'états (DOS):

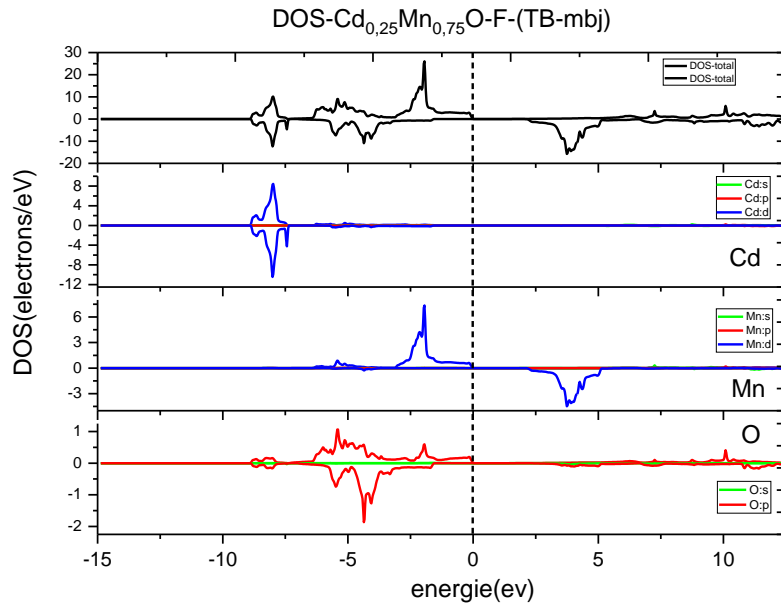


Figure III-21: densité d'états du $\text{Cd}_{0,25}\text{Mn}_{0,75}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-9,-7]	Cd:d avec O:p
BV2	[-7,-3]	Cd:d avec Mn:d(up) et O:p
BV3	[-3,0]	Mn:d(up) avec O:p

Tableau III- 10: L'états contributeurs dans $\text{Cd}_{0,25}\text{Mn}_{0,75}\text{O}$ à $P=0\text{GPa}$

III.3.3.5.b/ La structure de bande d'énergie:

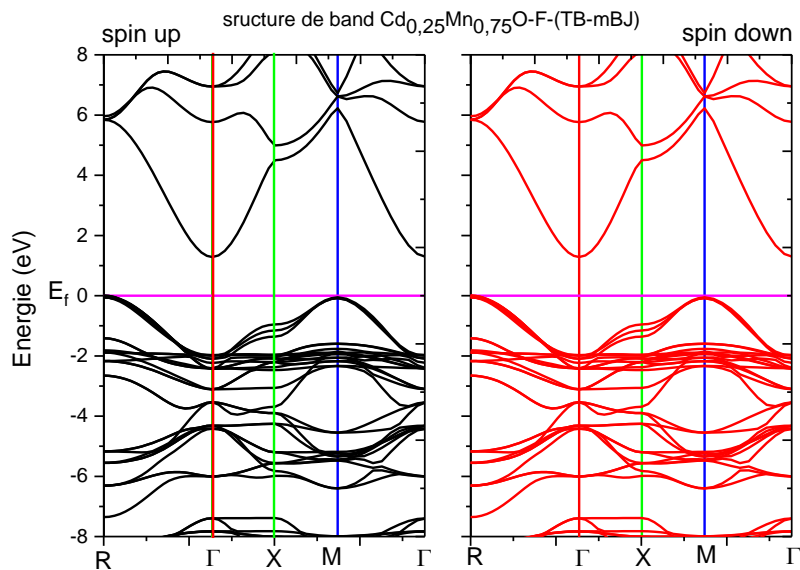


Figure III-22: Structure de band du $\text{Cd}_{0,25}\text{Mn}_{0,75}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III-22: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point R et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1.2855 - 0.0 = 1.2855 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur.

III.3.3.5.c/ Densité de charges:

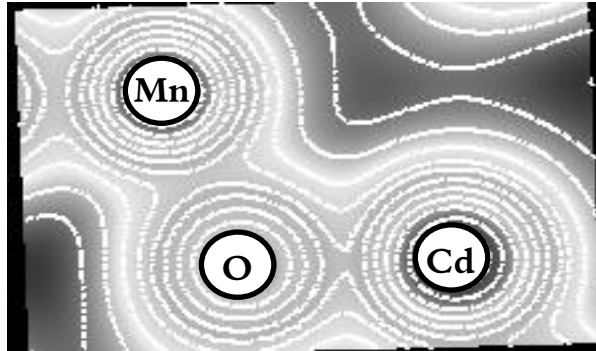


Figure III-23: densité de charge du $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{O}$ en $P=0\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III.23: La nature des liaisons entre les atomes peut être déterminée:

- La nature de liaison entre Cd et O est liaison covalente
- La nature de liaison entre Mn et O est liaison covalente

III.3.4. Propriétés électronique:($P=40\text{GPa}$):

III.3.4.1.CdO:

III.3.4.1.a/ Les densités d'états (DOS):

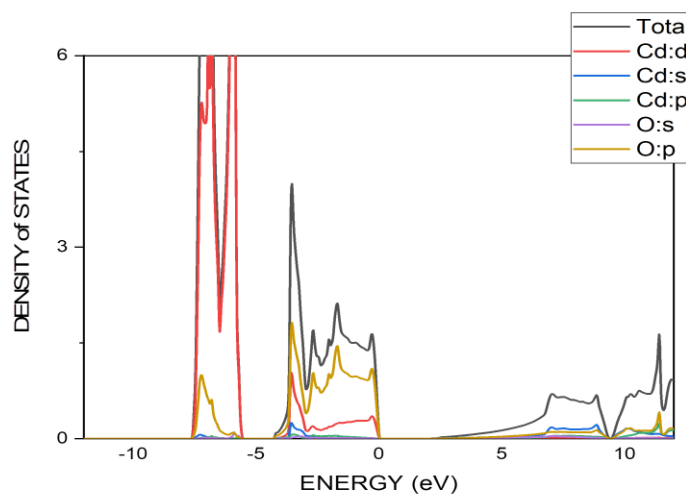


Figure III-24: densité d'états du CdO en $P=40\text{GPa}$ par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-7.5,-5.5]	Cd:d avec O:p
BV2	[-4.5,0]	Cd:d avec avec O:p

Tableau III- 11: L'états contributeurs dans CdO à P=40GPa

III.3.4.1.b/ La structure de bande d'énergie:

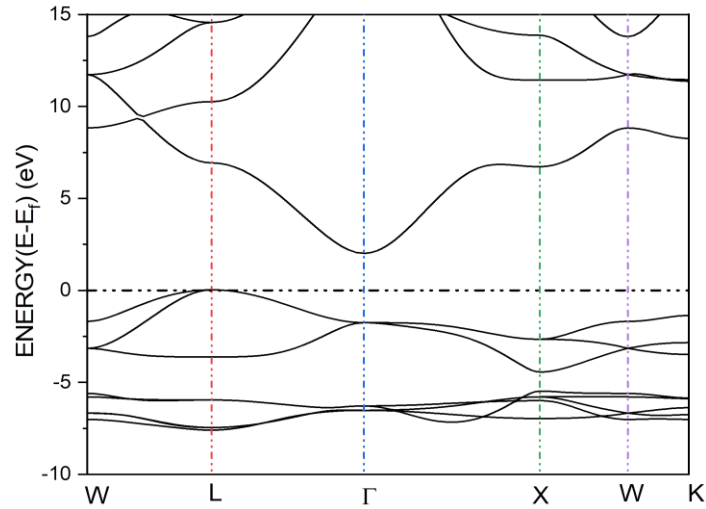


Figure III-25: Structure de band du CdO en P=40GPa par TB-mBJ

Figure III-25: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0.25}\text{Mn}_{0.75}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point R et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 2 - 0.0 = 2 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.3.4.2.MnO :

III.3.4.1.a/ Les densités d'états (DOS)

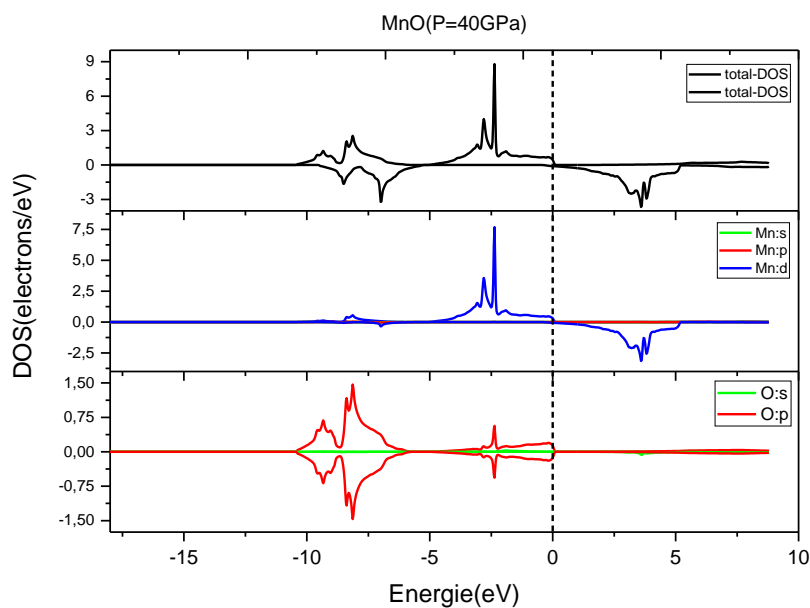


Figure III-26: densité d'états du MnO en P=40GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-7.5,-5.5]	Cd:d avec O:p
BV2	[-4.5,0]	Cd:d avec avec O:p

Tableau III- 12: L'états contributeurs dans MnO à P=40GPa

III.3.4.2.b/ La structure de bande d'énergie:

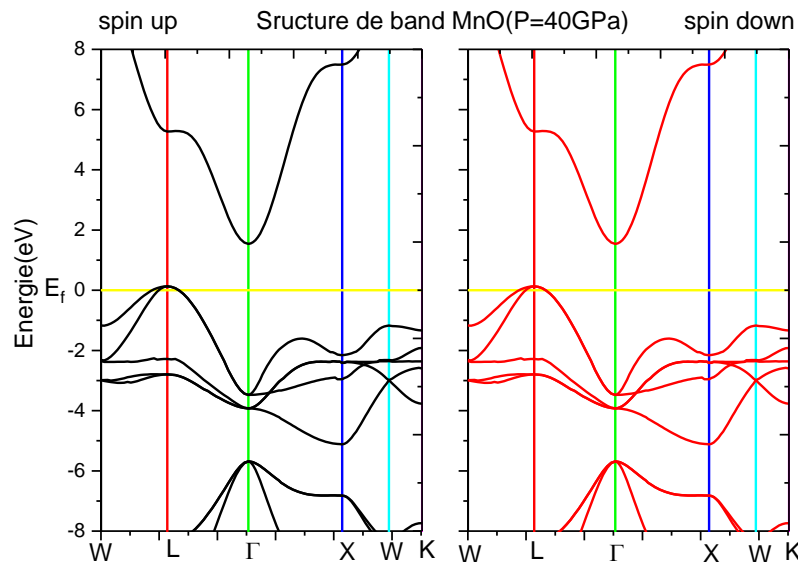


Figure III-27: Structure de bande du MnO en P=40GPa par TB-mBJ

Figure III-27: Elle nous montre que $Cd_{0.25}Mn_{0.75}O$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(BC_{min}) - E(BV_{max})$$

$$E_g = 1.5046 - 0.129 = 1.4116 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.3.4.3. $Cd_{0.5}Mn_{0.5}O$:

III.3.4.3.a/ Les densités d'états (DOS)

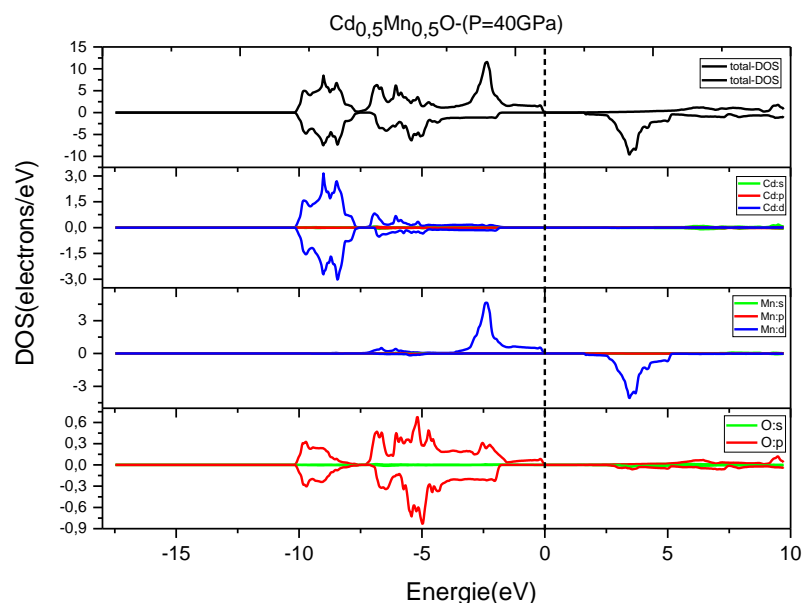


Figure III-28: densité d'états du $Cd_{0.5}Mn_{0.5}O$ en P=40GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-10,-7.6]	Cd:d avec O:p
BV2	[-7.6,-3.8]	Cd:d avec Mn:d(up) et O:p
BV3	[-3.8,0]	Mn:d(up) avec O:p

Tableau III- 13: L'états contributeurs dans $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ à $P=40\text{GPa}$

III.3.4.3.b/ La structure de bande d'énergie:

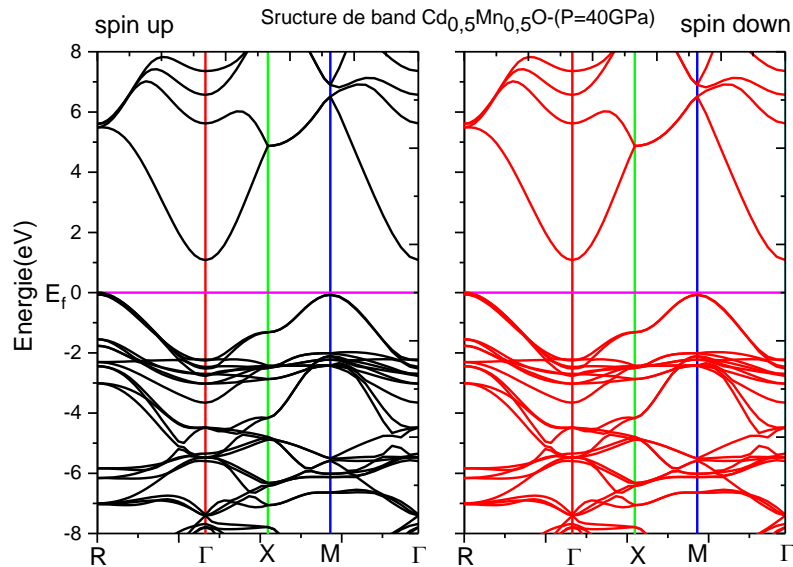


Figure III-29: Structure de bande du $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ en $P=40\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III-29: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0.5}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point R et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1.0794 - 0.0 = 1.0794 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.3.5. Propriétés électronique:($P=80\text{GPa}$):

III.3.5.1.CdO:

III.3.5.1.a/ Les densités d'états (DOS):

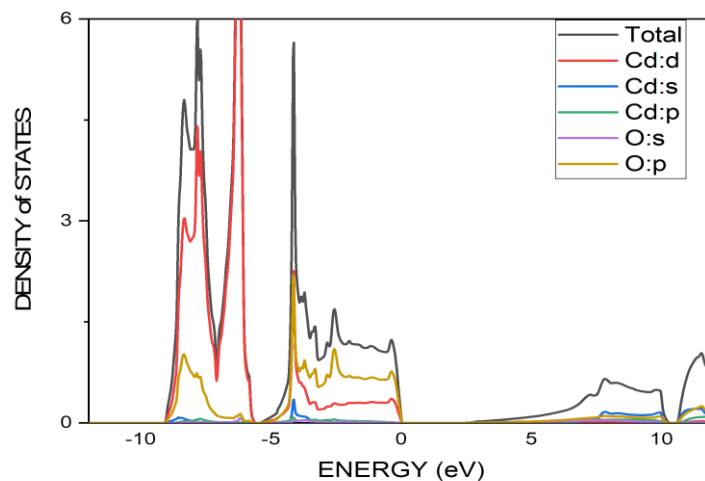


Figure III-30: densité d'états du CdO en $P=80\text{GPa}$ par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-9,-5.25]	Cd:d avec O:p
BV2	[-5.25,0]	Cd:d avec avec O:p

Tableau III- 14: L'états contributeurs dans CdO à P=80GPa

III.3.5.2.b/ La structure de bande d'énergie:

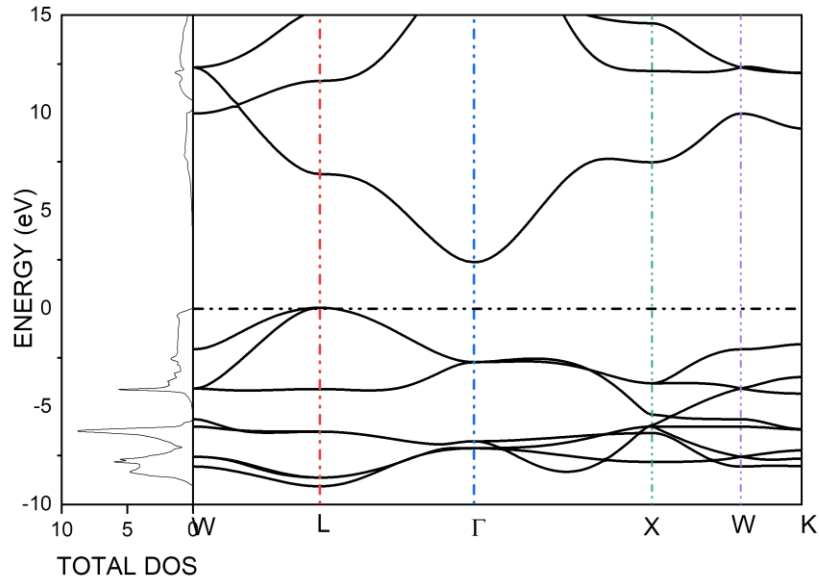


Figure III-31: Structure de band du CdO en P=80GPa par TB-mBJ

Figure III-31: Elle nous montre que CdO a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante:

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 2.45 - 0.0 = 2.45 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.3.5.2.MnO :

III.3.5.2.a/ Les densités d'états (DOS):

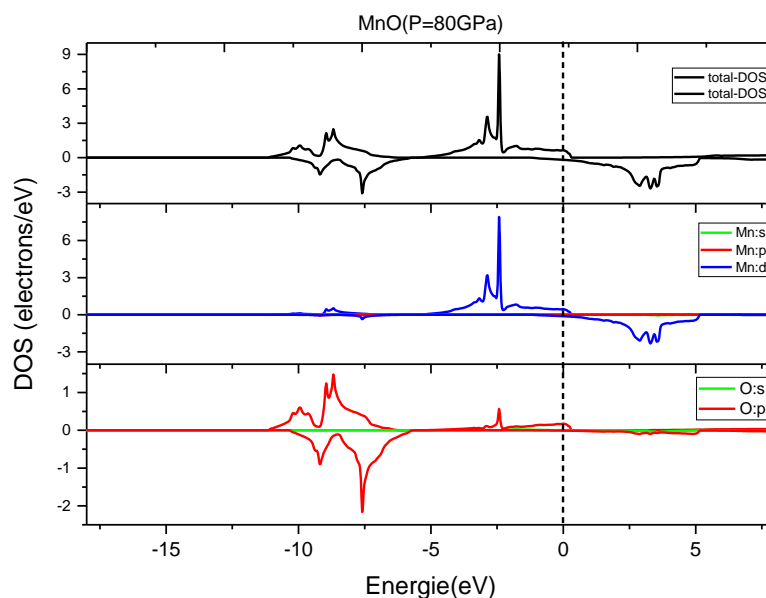


Figure III-32: densité d'états du MnO en P=80GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-10.8,-5.3]	Mn:d avec O:p
BV2	[-5.3,0]	Mn:d(up) avec avec O:p

Tableau III- 15: L'états contributeurs dans MnO à P=80GPa

III.3.5.2.b/ La structure de bande d'énergie:

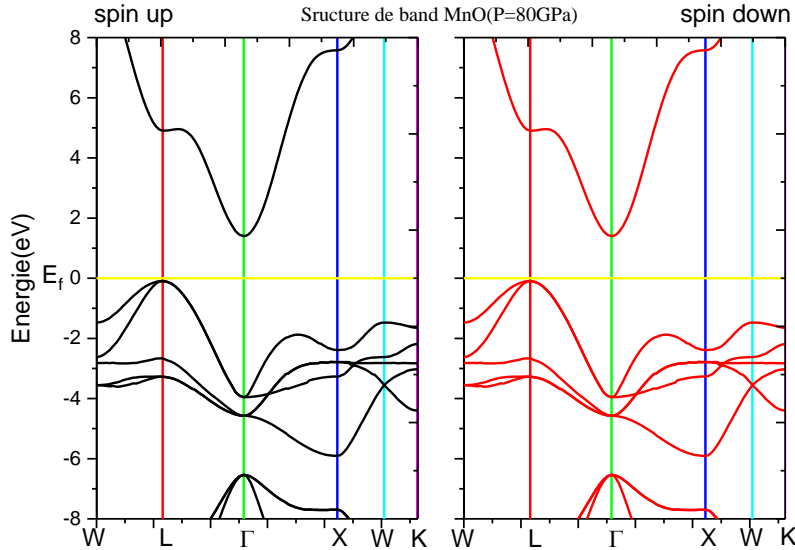


Figure III-33: Structure de band du MnO en P=80GPa par TB-mBJ

Figure III-33: Elle nous montre que MnO a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(BC_{min}) - E(BV_{max})$$

$$E_g = 1.4011 - (-0.0916) = 1.4927 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.3.5.3.Cd_{0,5}Mn_{0,5}O :

III.3.5.3.a/ Les densités d'états (DOS):

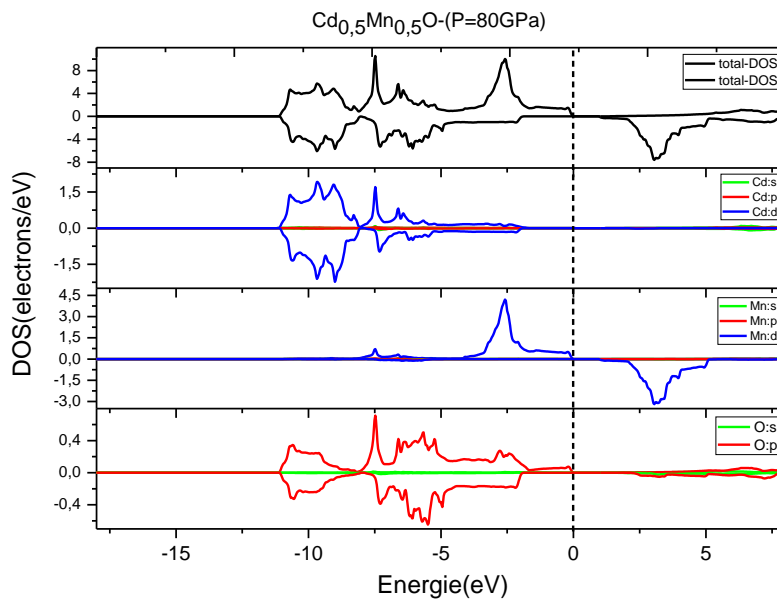


Figure III-34: densité d'états du Cd_{0,5}Mn_{0,5}O en P=80GPa par TB-mBJ

La zone	L'intervalle de l'énergie	L'états
BV1	[-11,-8]	Cd:d avec O:p
BV2	[-8,-4]	Cd:d avec Mn:d(up) et O:p
BV3	[-4,0]	Mn:d(up) avec O:p

Tableau III- 16: L'états contributeurs du $\text{Cd}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}$ à $P=80\text{GPa}$

III.3.5.3.b/ La structure de bande d'énergie:

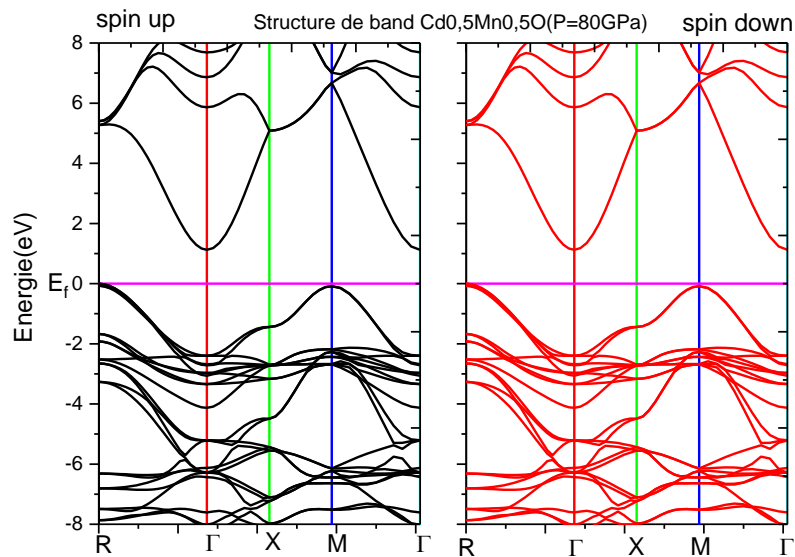


Figure III-35: Structure de band du $\text{Cd}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}$ en $P=80\text{GPa}$ par TB-mBJ

Figure III-35: Elle nous montre que $\text{Cd}_{0,5}\text{Mn}_{0,5}\text{O}$ a un gap indirect, entre la bande de valence maximale au point L et la bande de conduction minimale au point gamma, qui a la valeur suivante :

$$E_g = E(\text{BCmin}) - E(\text{BVmax})$$

$$E_g = 1.1234 - 0.0 = 1.1234 \text{ eV}$$

Cette valeur montre que cette structure est un gap semi-conducteur

III.4. Discussions:

III.4.1. Propriétés cristallines et structurales:

III.4.1. 1. Pour P=0GPa:

X	0	0.25	0.5	0.75	1
a(A°)	4.69	4.6329	4.5722	4.5307	4.23

Tableau III- 17: a en fonction du x à P=0GPa

III.4.1. 2. Pour P=40GPa:

x	0	0.5	1
a(A°)	4.6	4.34	4.13

Tableau III- 18: a en fonction du x à P=40GPa

III.4.1. 3. Pour P=80GPa:

x	0	0.5	1
a(A°)	4.28	4.05	4.22

Tableau III- 19: a en fonction du x à P=80GPa

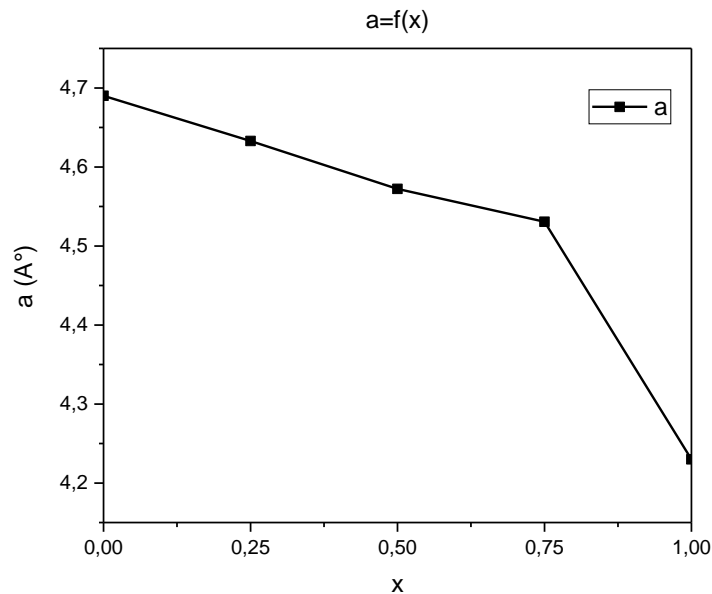


Figure III-36: Paramètre de maille en fonction de l'évolution de (X).

D'après les résultats précédents, il ressort clairement que les alliages $Cd_x Mn_{1-x}O$ ont une structure cubique, à l'exception de $Cd_{0.5} Mn_{0.5}O$ qui a une structure tétragonale.

On note également que les valeurs calculées expérimentalement de (a) correspondent approximativement aux valeurs calculées précédemment, avec un très faible taux d'erreur, où :

$$\Delta a_{CdO}=0.02\% \text{ et } \Delta a_{MnO}=4.39\%$$

La figure III-36 montre que CdO a le plus grand paramètre de maille $a = 4,69 \text{ \AA}$. Cette longueur diminue au fur et à mesure que nous substituons un pourcentage de CdO par du MnO jusqu'à ce que nous atteignons enfin le plus petit paramètre de maille $a = 4,23 \text{ \AA}$.

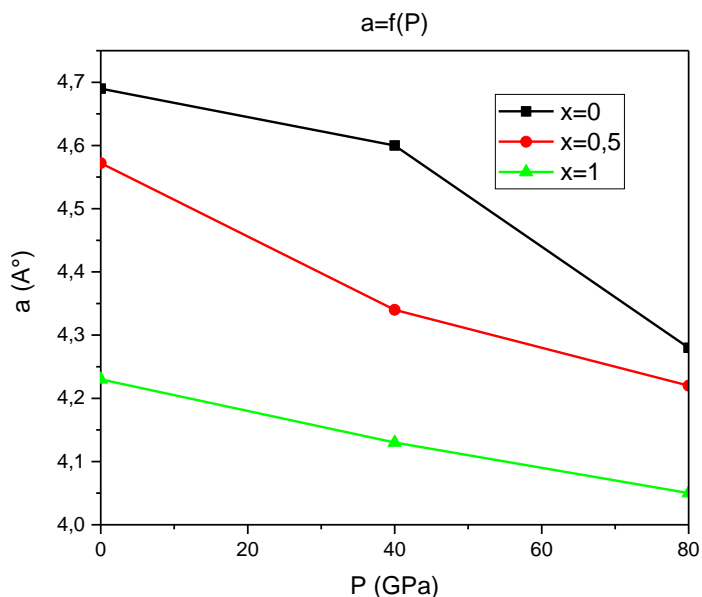


Figure III-37: a en fonction de l'évolution de pression P.

On remarque que plus la pression est élevée, plus a est faible. P et a sont inversement proportionnels

III.4.2. Propriétés électronique (E_g):

III.4.2.1. Pour P=0GPa:

X	0	0.25	0.5	0.75	1
$E_g(eV)$	1.789	1.8	1	1.2855	1.8756

Tableau III- 20: E_g en fonction du x à P=40GPa

III.4.2. 2. Pour P=40GPa:

x	0	0.5	1
$E_g(eV)$	2	1.0794	1.4116

Tableau III- 21: E_g en fonction du x à P=0GPa

III.4.2. 3. Pour P=80GPa:

x	0	0.5	1
$E_g(eV)$	2.45	1.1232	1.4927

Tableau III- 22: E_g en fonction du x à P=80GPa

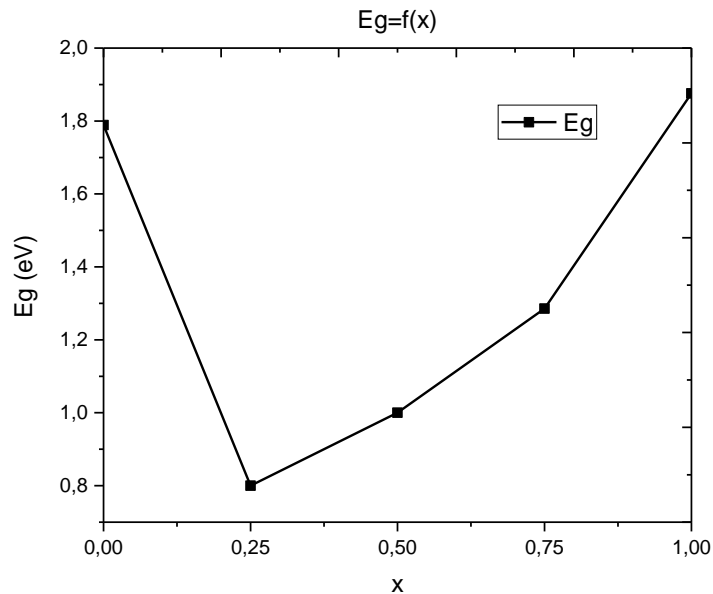


Figure III-38: Eg en fonction de l'évolution de (X).

A partir des résultats précédents, nous remarquons que les alliages $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$ (avec $0 \leq x < 1$) ont DOS up et DOS down en raison de la présence d'un pourcentage de Mn, signifiant la présence d'un spin, et on remarque également un décalage du DOS up par rapport au DOS down En raison de l'effet magnétique.

La figure III-38 montre que l'énergie de l'écart augmente à mesure que nous substituons les rapports de CdO par MnO jusqu'à ce que nous atteignons le plus grand écart énergétique $E_{g_{\text{MnO}}} = 1.87 \text{ eV}$

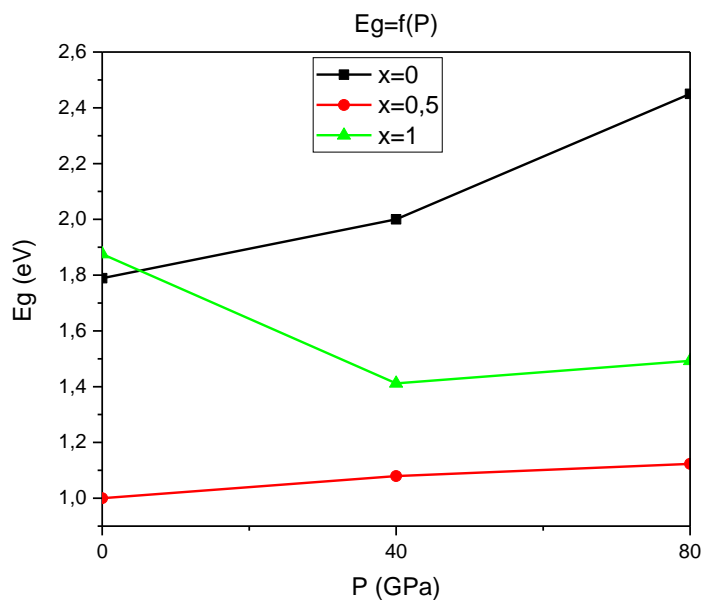


Figure III-39: Eg en fonction de l'évolution de P.

A travers les résultats précédents, on peut observer l'effet de la pression sur Eg. Sur la figure III.39, on remarque que plus la pression est élevée, plus la valeur de Eg est croissance, et c'est alors que x prend la valeur 0 et 0.5 .Mais ce n'est pas très clair quand x prend la valeur 1

III.5. Conclusion générale:

Au cours de ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des alliages $Cd_{1-x}Mn_xO$. Les calculs ont été effectués par la méthode abinitio connue sous le nom d'ondes planes améliorées linéaires (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la densité fonctionnelle (DFT). Nous avons suivi un plan composé de trois chapitres :

Le premier chapitre contenait une étude de la théorie de la densité fonctionnelle DFT, qui montre un ensemble de différentes méthodes ou approximations utilisées pour calculer les propriétés électroniques des corps solides. Après avoir présenté les limites des approximations qui dépendent directement de la fonction d'onde à N corps, la théorie de la fonction DFT basée sur la théorie de Hohenberg et Kohn (Hohenberg - Kohn) a été présentée et qui sera utilisée comme aspect théorique dans ce travail

Quant au deuxième chapitre, il traitait de l'aspect chimique de la recherche. Nous avons parlé des deux composés CdO et MnO et de tout ce qui s'y rapporte, à partir du réseau cristallin jusqu'aux différentes propriétés électriques du point de vue des études précédentes.

Au final, nous constatons que le troisième chapitre reposait sur la simulation, puisque nous avons utilisé le programme Win2K pour étudier les différentes propriétés du composé $Cd_{1-x}Mn_xO$, puis nous avons tracé les courbes à l'aide de logiciel graphique.

Nous sommes arrivés aux résultats suivants :

- Les alliages $Cd_{1-x}Mn_xO$ ont une structure cubique, à l'exception du $Cd_{0.5}Mn_{0.5}O$ qui a une structure tétragonale.
- CdO a le plus grand paramètre de maille $a = 4,69 \text{ \AA}$. Cette longueur diminue au fur et à mesure que nous substituons un pourcentage de CdO par du MnO jusqu'à ce que nous atteignons enfin le plus petit paramètre de maille $a = 4,23 \text{ \AA}$.
- que les alliages $Cd_{1-x}Mn_xO$ (avec $0 \leq x < 1$) ont DOS up et DOS down du fait de la présence d'un pourcentage de Mn, signifiant la présence d'un spin, et on remarque aussi un décalage de la DOS bas par rapport au DOS haut En raison de l'effet magnétique.
- Les alliages $Cd_{1-x}Mn_xO$ sont des semi-conducteurs, leur énergie de gap augmente à mesure que nous substituons les rapports de CdO par MnO jusqu'à ce que nous atteignons le plus grand gap énergétique $E_{g_{MnO}} = 1.88 \text{ eV}$
- La pression affecte le E_g , plus la pression est élevée, plus le E_g est grand - la pression est directement proportionnelle au E_g -
- Plus la concentration de manganèse est élevée, plus le moment magnétique total est élevé.

- le moment magnétique est inversement proportionnel à la pression
- En utilisant la méthode de WC-GGA , les résultats obtenus sont que le type de matériau étudié est un conducteur

III.6. Les references

- [1] Y. Fei, *Ame. Min.* 84, (1999) 272-276.
- [2] H.Z. Liu, H.K. Mao, Y. Ding, , *Phy. Rev. B* 70, (2004) 094114.
- [3] B.B. Karki, J.L. Stixrude, S.J. Clark, M.C. Warren, G.J. Ackland, J. Crainj, *Ame. Min.* 82, (1997) 51-60.
- [4] A.J. Cinthia, G. Sudhaprinyanga, R.R. Chamy, M. Santhosh, , *Proc. Mat. Sien.* 5,(2014) 1034-1042.
- [5] Moumita Ghosh, Kanishka Biswas, A. Sundaresan ,C. N. R. , *J. Mater. Chem.*, 2006,16, 106
- [6] Earnshaw, Alan. *Chemistry of the Elements* (2nd ed.). ButterworthHeinemann. ISBN 978-0-08-037941-8. (1997).
- [7] J. KOCKA, C. KONAK, The Structure of the Indirect Absorption Edge of CdO, *Physica Status Solidi B*, (1971) 43-731.
- [8] J. van Elp, R. H. Potze, H. Eskes, R. Berger, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* 44, 1530 (1991). (1972) 11-1687.

ملخص

بواسطة برنامج **WIEN2K** الذي يستخدم نظرية **FP-LAPW** و التي تركز على نظرية دالة الكثافة (**DFT**) قمنا بحساب الخصائص البنيوية و الالكترونية للسبائك $Cd_{1-x}Mn_xO$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$) , بحيث تم استعمال نظرية التدرج المعمم (**WC-GGA**) لحساب الخصائص البنيوية , أما لحساب الخصائص الالكترونية فقد استعملنا لحسابها التقريب **TB-mBJ** . وقد تم اجراء هذا الحساب تحت عدة ضغوط من بينها: $P=0GPa$ و $P=40GPa$ و $P=80GPa$

Abstract

*By using the **WIEN2K** program that uses the **FP-LAPW** theory and is based on the density function theory (**DFT**), we calculated the structural and electronic properties of the alloy $Cd_{1-x}Mn_xO$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$), so that the generalized gradient theory was used (**WC-GGA**) to calculate the structural properties, but to calculate the electronic properties, we used the **TB-mBJ** approximation to calculate them. This calculation was carried out under several pressures, including: $P=0GPa$, $P=40GPa$, and $P=80GPa$.*

Résumé

*En utilisant le programme **WIEN2K** qui utilise la théorie **FP-LAPW** et est basé sur la théorie de la fonction de densité (**DFT**), nous avons calculé les propriétés structurales et électroniques de l'alliage $Cd_{1-x}Mn_xO$ ($x=0,0.25,0.5,0.75,1$), de sorte que la théorie généralisée du gradient a été utilisée (**WC-GGA**) pour calculer les propriétés structurales, mais pour calculer les propriétés électroniques, nous avons utilisé l'approximation **TB-mBJ** pour les calculer. Ce calcul a été réalisé sous plusieurs pressions dont : $P=0GPa$, $P=40GPa$ et $P=80GPa$.*

Mots Clés: effets de pression , **DFT** , **FP-LAPW** , **CdO** , **MnO**