

# Sommaire

<b>Introduction générale.....</b>	<b>1</b>
<b>Chapitre I : Présentation des matériaux et généralité sur le magnétisme.....</b>	<b>4</b>
I.1 Présentation des matériaux .....	4
I.2. Structure cristalline.....	5
I.3. Magnétisme .....	6
I.3.1 Rappel Historique.....	6
I.3.2. Origine du magnétisme .....	7
I.3.3. Moment magnétique orbital .....	8
I.3.4. Moment magnétique de spin .....	8
I.3.5. Moment magnétique total .....	9
I.3.6. Définition de l'aimantation .....	10
I.3.7. Grandeurs et unités magnétiques .....	10
I.3.8. Classes des matériaux magnétiques .....	11
I.3.8.1. Le diamagnétisme .....	12
I.3.8.2. Le paramagnétisme .....	12
I.3.8.3. Le ferromagnétisme .....	13
I.3.8.4. Le ferrimagnétisme.....	14
I.3.8.5. L'antiferromagnétisme .....	14
I.3.9. L'électromagnétisme .....	15
I.3.10 Propriétés magnétiques du solide .....	15
I-4. Propriétés des impuretés magnétiques .....	18
I.4.1. Les ions Magnétiques .....	18
I.4.2. Manganèse .....	19

I.4.3. Electrons 3d .....	19
I.4.4. Ion magnétique isolé dans le réseau SC .....	20
I.5. Les interactions magnétiques.....	21
I.5.1. Les interactions entre ions magnétiques et porteurs délocalisés.....	21
I.5.2. les interactions d'échange .....	22
I.5.3. Les interactions sp-d .....	22
I.5.4. Les interactions d-d .....	24
Références chapitre I .....	26
<b>Chapitre II : Méthode de calcul .....</b>	<b>27</b>
Introduction :.....	27
II.1.La théorie de la fonctionnelle de densité .....	27
II.1.1.Introduction .....	27
II.1.2.L'approximation de Born-Oppenheimer.....	28
II.1.3.Théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	29
II.1.4.Les équations de Kohn et Sham.....	30
II.1.5.La fonctionnelle d'échange-corrélation.....	31
II.1.5.1.L'approximation de la densité locale (LDA) .....	32
II.1.5.2.L'approximation du gradient généralisé (GGA) :.....	33
II.1.6.Résolution des équations de Kohn-Sham :.....	33
II.2.La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) :.....	35
II.2.1. Introduction .....	35
II.2.2 La méthode des ondes planes augmentés ( APW ) :.....	35
II.2.3.Principe de la méthode LAPW :.....	37
II.2.4.Les rôles des énergies de linéarisation ( $E_l$ ) :.....	39
II.2.5.Le développement en orbitales locales :.....	39

II.2.6. La méthode LAPW+LO :	39
II.2.7. La méthode APW+lo :	40
II.2.7. Le concept de la méthode FP-LAPW	41
Références chapitre II	42
<b>Chapitre III: Résultats et discussions</b>	<b>43</b>
III.1 Détail de calcul	43
III.2 Les Matériaux binaires	44
III.2.1 les propriétés structurales	44
III.2.2 Propriétés électroniques	47
III.2.2.1 Structure de bande	47
III.2.2.2 Densité d'états	50
III.2.2.3 Densité de charge	53
III.3 Les alliages ternaires ZnMnO et CdMnO	55
III.3.1 les propriétés structurales	55
III.3.2 Propriétés électroniques	57
III.3.2.1 Structure de bande	57
III.3.2.2 Densité d'états	61
III.3.2.3 Densités de charges	66
III.3.3 Propriétés magnétiques	68
III.3.3.1 Les interactions d'échange	68
III.3.3.2 Les moments magnétiques	69
Références chapitre III	70
<b>Conclusion</b>	<b>72</b>