

## *Conclusion*

Après avoir établi tout un chapitre pour les résultats obtenus, nous allons maintenant faire le bilan de ce travail de mémoire et en établir les différentes conclusions. Pour cela, on va citer les différents points qu'on a traités avec les déductions correspondantes montrant ainsi l'intérêt de notre travail.

La méthode utilisée est une méthode ab-initio dite des ondes plans linéairement augmentées (FP-LAPW) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT). Pour le potentiel d'échange et de corrélation nous avons choisi l'approximation du gradient généralisé (GGA) afin d'étudier les propriétés structurales et électroniques des oxydes ZnO et CdO et leurs alliages ternaires ZnMnO et CdMnO.

Dans une première étape une étude détaillée a été menée sur les propriétés électroniques des éléments binaires ZnO et CdO. La seconde partie est consacrée à l'étude des alliages ternaires ZnMnO et CdMnO avec la concentration  $x = 0.25$ .

A partir du calcul des propriétés structurales des composés binaires dans la phase wurtzite, nous avons pu déterminer les paramètres de réseau d'équilibre, les modules de compressibilité, leurs dérivées et les énergies de cohésion sont en bon accord avec ceux calculés par l'expérience et d'autres travaux théoriques.

Nous avons calculés les propriétés électroniques pour les binaires, on a traité les états d-Zn (Cd) comme états valence pour mieux décrire les propriétés électroniques de ces systèmes près du maximum de la bande de valence. Ces effets impliquent la réduction dans l'énergie gap, en effet nous avons trouvés pour ZnO un gap direct qui est sous-estimés par rapport aux valeurs expérimentales, cette grande sous-estimation est liée d'une part à l'utilisation de l'approximation du gradient généralisé (GGA) pour traiter l'énergie d'échange et corrélation, et d'autre part à la présence des états d dans la région de valence. On remarque bien que l'énergie gap du CdO est très faible qu'on peut dire que c'est un semimétal or le CdO dans la structure rocksalt est un semiconducteur à gap indirect. On peut attribuer cette anomalie de gap à : premièrement la structure wurtzite choisie, deuxièmement l'effet des états Cd-4 d considérés comme états de valence dans notre calcul et l'approximation GGA utilisée.

En ce qui concerne la densité d'états, nous avons pu grâce à la méthode FP-LAPW voir en plus de la densité d'états totale, la contribution partielle de chaque élément constituant les composés binaires.

La deuxième étape de notre travail a été consacrée à l'étude des propriétés structurales, électroniques et magnétiques des alliages ternaires.

En ce concerne les propriétés structurales des alliages ternaires nos résultats sont prédictifs.

Les densités d'états totales et partielles montrent que les composés ZnMnO et CdMnO ont un caractère semi-métallique, et aussi l'hybridation entre les états p de l'anion et les états d de Mn joue un rôle important dans la détermination des propriétés magnétiques. A partir des spectres trouvés, nous avons calculé l'énergie d'échange de spin des états 3d du Mn  $\Delta_x(d)$  définie par la séparation entre les pics des états d calculés pour les spins majoritaires et minoritaires  $\Delta_x(d)$ . Nous avons aussi déterminé l'énergie d'échange des états p et d qui montre la nature d'attraction dans les semi-conducteurs semi-magnétiques dilués  $\Delta_x(pd) = E_v^\downarrow - E_v^\uparrow$ . Nos résultats indiquent que pour ces alliages ternaires le potentiel effectif des spins minoritaires est plus attractif que celui des spins majoritaires.

Un autre point important que nous avons abordé dans ce travail a été de calculer les moments magnétiques totaux et locaux dans les sphères muffin-tin et dans les sites interstitiels pour le ZnMnO et CdMnO. Nos résultats indiquent que l'hybridation p-d des états p de l'anion O avec les états 3d du Mn réduit le moment magnétique du Mn de sa valeur de  $5 \mu_B$  à  $3.97 \mu_B$  pour  $Zn_{0.75}Mn_{0.25}O$  et  $4.04 \mu_B$  pour  $Cd_{0.75}Mn_{0.25}O$ .

Le calcul de la densité de charge de valence a été aussi effectué pour les spins majoritaires et minoritaires afin de voir l'effet des états 3d Mn sur la nature de la liaison. Nos résultats montrent que les cinq états 3d du Mn pour les spins majoritaires sont occupés et participent fortement à la liaison par contre les autres cinq états 3d du Mn pour les spins minoritaires sont inoccupés.

Les résultats obtenus nous encouragent à poursuivre ce travail, où nous étudierons d'autres alliages magnétiques II-Mn-VI et III-Mn-V ou d'étendre l'étude aux supraconducteurs. Comme on peut citer, également comme perspective, l'étude des propriétés magnétiques de nos alliages ternaires sous forme de couches minces avec l'analyse de l'effet de dopage et des défauts structuraux sur leurs propriétés.