

Conclusion générale

Dans ce travail, nous avons étudié les propriétés structurales telles que la stabilité des phases, la constante du réseau, le module de rigidité ainsi que l'énergie totale d'équilibre, et les propriétés électroniques telles que la (structure de bandes, la densité d'états, du composé CrO_2 .

Les calculs ont été effectués par la méthode des ondes planes linéarisées (FP-LAPW) dans le cadre de la fonctionnelle de la densité (DFT), et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation, on a utilisé plusieurs approximations à savoir l'approximation LDA, l'approximation (GGA) et enfin celle de Engel-Vosko (EV-GGA).

- Les principaux résultats obtenus sont:

1. Propriétés structurales:

- pour les paramètres de réseau du composé CrO_2 , on remarque un bon accord avec les résultats théoriques et expérimentaux, quel que soit la phase, et quel que soit l'approximation utilisée.
- Nous trouvons que le paramètre du réseau du CrO_2 diminue lors du passage de la phase orthorhombique vers la phase zinc-blende et même du passage de la phase tétragonale vers zinc-blende quel que soit l'approximation utilisée.
- pour le module de compressibilité, on a trouvé une grande différence entre nos résultats par les deux approximations (LDA) et (GGA) les résultats théoriques.
- Concernant le module de compressibilité une augmentation lors du passage de la phase orthorhombique vers la phase zinc-blende et de la phase tétragonale vers zinc-blende utilisant (LDA), on trouve l'inverse en utilisant la (GGA).
- On a trouvé que composé CrO_2 est plus stable dans la phase orthorhombique.
- Pour les deux méthodes on a trouvé la transition de phase se fait de orthorhombique vers la phase zinc-blende et la phase tétragonale vers zinc-blende

2. Propriétés électroniques:

On a trouvé que le CrO_2 est un semi-conducteur dans la phase zinc-blende et demi métaux pour la phase orthorhombique et tétragonale

Pour la phase zinc-blende (il possède un gap d'énergie direct x-x pour spin up minimum de par contre lors du dwn (il possède un gap d'énergie indirect (Γ -X)).

Pour tétragonale (il possède un gap d'énergie indirect (Γ -X)).

Pour orthorhombique (il possède un gap d'énergie indirect (Γ -U)).

les courbes des densités d'états obtenus sont presque similaires pour le composé CrO_2 et la contribution de l'atome Cr (précisément l'orbital d) est beaucoup plus au niveau de Fermi.

3. Propriétés magnétique:

On a trouvé le moment magnétique égal $4\mu_B$ pour la maille primitive dans les phases tétragonale, orthorhombique et pour la maille primitive du zinc blende égal $2\mu_B$.