

---

*Sommaire*

Introduction générale .....	01
<b><i>Chapitre I : Théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT)</i></b>	
I.1. Introduction .....	04
I.2. Equation de Schrödinger .....	04
I.3. L'approximation de Born-Oppenheimer .....	06
I.4. L'approximation de Hartree .....	07
I.4.1. formulation du potentiel effectif .....	08
I.4.2 L'équation d'onde dans l'approche de Hartree .....	09
I.5. L'approximation de Hartree-Fock.....	09
I.5.1. Le principe d'exclusion de Pauli et échange.....	09
I.6. la théorie de la fonctionnelle de la densité.....	11
I.6.1 L'approche de Thomas-Fermi .....	12
I.6.2. Les théorèmes de Hohenberg et Kohn.....	12
I.6.3. Les équations de kohn-Sham.....	14
I.6.4 La résolution des équations de Kohn-sham .....	16
I.6.5. La fonctionnelle d'échange-corrélation.....	16
I.7. L'approximation de la densité locale (LDA) .....	17
I.7.1. La méthode $X\alpha$ .....	18
I.7.2. L'approximation de Ceperley et Alder.....	19
I.7.3. L'approximation de Hedin et Lunqvist.....	19
I.7.4. La généralité de L'approximation LDA (LSDA).....	20
I.8. L'approximation de gradient généralisé (GGA) .....	21
I.8.1. L'approximation EV-GGA.....	21
I.9. L'auto-cohérence dans les calculs.....	22

<b>Chapitre II : La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW)</b>		25
II.1. Introduction .....		24
II.2. La méthode des ondes planes augmentées (APW).....		25
II.3.1 La méthode des ondes planes augmentées linéarisées (FP-LAPW) .....		27
II.3.1 Les bases de la méthode (FP-LAPW). .....		27
II.4. Les rôles des énergies de linéarisation $E_i$ .....		28
II.5. Constructions des fonctions radiales.....		28
II.5.1. Les fonctions radiales non relativistes.....		29
II.5.2. Les fonctions radiales relativistes.....		30
II.6. Résolution de l'équation de Poisson.....		32
II.7. Amélioration de la méthode (FP-LAPW).....		33
II.7.1. Les fenêtres d'énergie multiples.....		33
II.7.2. Développement en orbital local (LAPW+LO).....		34
II.8. Traitement des effets de spin-orbit.....		34
II.9. le code Wien2k.....		35
<b>Chapitre III : Résultats et discussions</b>		
III.1. Introduction .....		38
III.2. La structure cristalline des composés $\text{CrO}_2$ .....		38
III.3. Détails de calcul .....		41
III.4. Les Propriétés Structurales et transition de phase .....		42
III.4.1. Détermination des paramètres structuraux.....		42
III.4. Etude de la stabilité de phase de composé $\text{CrO}_2$ .....		43
III.4.3. Transformation structurales des phases à haute pression .....		49
III.4.3.1. Rappel de la thermodynamique.....		49
III.4.3.2. Détermination de la pression de transition .....		50
III.5. les Propriétés électroniques du composé $\text{CrO}_2$ .....		55
III.5.1. La structure des bandes .....		57
III.5.2. La densité d'états électronique.....		64
III.6. Les propriétés magnétiques des composées $\text{CrO}_2$ .....		71
III.6 Rappel de magnétisme.....		71
III.6.2. Différents types de magnétisme.....		71
III.6.2.1. Diamagnétisme .....		71
III.6.2.2. Paramagnétisme.....		72
III.6.2.3. Ferromagnétisme.....		72

III.6.2.4. Antiferromagnétisme.....	72
III.6.2. Moment magnétique des composées CrO <sub>2</sub> .....	72

