

Résumé :

Le présent travail entre dans le cadre des Semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS). Dans la première partie nous avons étudié les semi-conducteurs binaires CdTe et ZnTe en utilisant des méthodes de premiers principes basées sur la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (*DFT*) à travers de la méthode des Ondes Planes Augmentées Linéarisées (*FP-LAPW*) implémentée dans le code de calcul *Wien2k*. En utilisant l'Approximation de la Densité Locale (*LDA*) pour l'échange et corrélation, nous avons déterminé les propriétés structurales et électroniques de CdTe et ZnTe. Les résultats sont en très bon accord avec les valeurs expérimentales et avec d'autres calculs théoriques.

Dans une deuxième partie, nous avons étudié les propriétés structurale, électroniques et magnétiques du semi-conducteurs magnétiques dilués (DMS) CdMnTe et ZnMnTe dans la structure chalcopyrite (0.5% de Mn injecté). Nous avons trouvé que notre petite cellule le CdMnTe peut être données un moment magnétique local en bon accord avec les super cellules de 16 atomes étudié dans les autre théories. Les résultats obtenus sont très satisfaisants et nous ne pouvons que témoigner de la fiabilité du code *Wien2k* et la puissance de la méthode *FP-LAPW*. Ceci nous encourage à étudier le CdTe et le ZnTe injecté par d'autres éléments magnétiques à haute concentration.

Mots-clefs : CdTe, ZnTe, CdMnTe, ZnMnTe, DFT, FP-LAPW , LDA, DMS.

Abstract :

In the present work we studied the Cadmium telluride (CdTe) and Zinc telluride (ZnTe) in the first part using the first-principles calculations based on the density functional theory (*DFT*) via the Full-Potential Linear Augmented Plan Waves (*FP-LAPW*) method implemented in the *Wien2k* code. The Local Density Approximation (*LDA*) is used for the exchange-corrélation function. We calculated the structural parameters and the electronic properties. The results are in good agreement with experiment and other theoretical calculations.

In a second part, the structural, electronic and magnetic properties are calculated for both diluted magnetic semiconductors CdMnTe and ZnMnTe, with 50% of Mn in its ordered chalcopyrite phase. We demonstrated that our small super cell can give local magnetic moment in good agreement with first principles calculations using 16-atom super cells. We obtained the good results by using the FP-LAPW method and Wien2k code. This is we encourage to continued our studied in the high concentration of the injected magnetic materials

Key-words: CdTe, ZnTe, CdMnTe, ZnMnTe, DFT, FP-LAPW , LDA, DMS.

الملخص:

يدخل العمل المقدم في هذا البحث في إطار جديد للفيزياء و هو الإلكترونيك المغناطيسية. في الفقرة الأولى قمنا بدراسة المركبات النقية CdTe و ZnTe باستعمال طرق المبادئ الأولى المبنية على نظرية *DFT* بواسطة طريقة *FP-LAPW* المتوفرة في برنامج المحاكاة *Wien2k* تم استعمال النظرية التقريبية *LDA* في حساب الخواص البنيوية و الخواص الكهربائية للمركب.

في فقرة ثانية قمنا بدراسة الخواص البنيوية، الكهربائية و المغناطيسية للمركبين المقويين بالمنغنيز *DMS* *ZnMnTe* و *CdMnTe* حيث تم استبدال ذرات الألمنيوم بذرات المنغنيز بنسبة 50%. تحصلنا على نتائج مرضية مقارنة مع الدراسات النظرية الأخرى مما يدل على جودة البرنامج ومما يحفزنا على القيام بحسابات أخرى مماثلة، و بنسب منخفضة في تركيز الذرات المغناطيسية.

الكلمات المفتاح : *CdTe*، *ZnTe*، *ZnMnTe*، *CdMnTe*، *DFT*، *FP-LAPW*، *LDA*، *DMS*.