

ملخص

ان دراسة المواد تسمح لنا بتنبأ الخصائص المطلوبة في عدة مجالات , وفي هذا الاتجاه نحاول دراسة الخصائص البنيوية والالكترونية لهذه المركبات مثل GdN .

يتمثل هذا العمل في الدراسة النظرية للخصائص البنيوية و الالكترونية ل GdN , وقد درسوا باستعمال طريقة FP-LMTO باستخدام الطريقة التقريبية LDA. وتحصلنا على نتائج موافقة للنتائج التجريبية والنظرية .

كما درسنا المقادير التالية : ثابت الشبكة , الطاقة الكلية , و الحجم للشبكات الأعظمية

$(GdN/YN)1$, $(GdN/ScN)1$, $(GdN/LaN)1$, $(GdN/YN)2$, $(GdN/ScN)2$,
 $(GdN/LaN)2$.

الكلمات المفتاحية : الخصائص الالكترونية , ثابت الشبكة , الشبكة الاعظمية

Résumé

L'étude des matériaux permet de prédire des propriétés recherchés dans de nombreux domaines, c'est dans ce sens que nous avons étudié les propriétés structurales et électroniques des composés à base de Gadolinium tel que le GdN dans ses différentes phases.

Ces composés ont été étudiés en utilisant La méthode linéaire des orbitales muffin-tin (LMTO) basée sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Le calcul des propriétés structurales, constantes de réseaux, bulk modulus et la dérivée du bulk moulus sont raisonnablement en bon accord avec résultats cités. Comme on a étudié les super-réseaux à base de Gadolinium $(GdN/YN)1$, $(GdN/ScN)1$ et $(GdN/LaN)1$ et $(GdN/YN)2$, $(GdN/ScN)2$ et $(GdN/LaN)2$.

Mots clé : propriétés électroniques, paramètre de réseau , super-réseau