Nom : *amar bensaber*

Prénom : *fouzia*

Spécialité : *Physique*

Mémoire de Magister

Option **:** *Nanosciences des matériaux, Nanotechnologies, et Nano-Métrologie*

Email : amarbensaberfouzia@yahoo.com

Résumé *: Dans ce travail, nous présentons les résultats obtenus pour les propriétés physiques par la méthode FP-LAPW qui est qui est basé sur la théorie fonctionnelle de la densité(DFT). Nous avons calculé les propriétés structurales, électroniques et magnétique des binaires ReX : (Re= Eu, Tb, Dy, Ho et Er) et (X=As, Sb) qui se cristallisent en type NaCl structure. Dans le cadre des approximations : LSDA, LSDA+U, GGA, GGA+U dans le but de comparer ces approximations et voir l'effet sur nos résultats.*

Abstract: *on this work we have study the physical properties with the FP-LAPW full potential liearized augmanted plane wave aproach based on the density functional theory in the phase NaCl.we employed the local spin density aproximation LSDA, LSDA+U, GGA, GGA+U. we have calculated the properties structural, électronic, and magnetic of the binary ReX (Re= Eu, Tb, Dy, Ho et Er) et (X=As, Sb) .*

ملخص : في هذا العمل قمنا بدراسة الخصائص التركيبية البنيوية ، الإلكترونية و المغناطيسية لثنائيات نوادر الأرض البنكتيرية (ReX) : (Re= Eu, Tb, Dy, Ho et Er) et (X=As, Sb) و التى لها تركيبة بنيوية مشابهة لكلور الصوديوم NaCl. اعتمادا على طريقة الامواج المستوية المتزايدة خطيا لجهد تام FP-LAPW و المرتكزة على نظرية كثافة الدالية (DFT) .لقد قمنا باستعمال تقريب كثافة الموضع LSDA، GGA و تقريب كثافة الموضع المصححة بالعامل U (GGA+U،LSDA+U) و هذا بسبب قوة التداخلات بين f .لقد قمنا بحساب ثابت الشبكة، الطاقة الكلية، عصابات الطاقة، كثافة الحالات ، بالإضافة إلى حساب العزم المغناطيسي ووجدنا أن أغلبيتها تتمركز في نوادر الأرض.