

*M<sup>er</sup> AMIRI BENAMEUR*

*Spécialité : Physique*

*Option: Nano-sciences des Matériaux, Nano-technologie et Nano-Métrie*

*THÈME*

*Etude ab-initio de la structure électronique  
et les propriétés magnétiques des composés  
Gd-pnictures*

*Email: amiri.benameur@yahoo.fr*

(FP-LAPW)  
 \$ % # " ! DFT  
 \* ) ( (GdX: X = N, P, As, Sb) ' ( &  
 LSDA+U GGA , LSDA ) ( ' +, : \$  
 ' \$" \$ ' ' B2 B1 -  
 5(Gd)& \$ 4 2 31-1 0 # / ( .

## Résumé

Les propriétés structurales, électroniques et magnétiques ont été calculées par la méthode de premier principe ab-initio (FP-L APW) qui se base sur la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT dans la structure rocslt NaCl B1 et CsCl B2. Nous avons utilisé l'approximation de la densité locale polarisée en spin (GGA), (LSDA) et (LSDA+U) pour les binaires **GdX (X = N, P, As, Sb)**. Alors nous avons calculé les paramètres du réseau, les modules de compressibilité, l'énergie de l'état fondamentale, les structures de bande et les densités d'états totales et partielles. Nous avons ainsi calculé les moments magnétiques, nous avons trouvé que la majeure partie de ces derniers inclut dans les sites terres rares.

## Abstract

The structural, electronic and magnetic properties have been investigated using the full-potential (Linearized) augmented plane-wave (FP-L APW) within density functional theory DFT in the phase B1 and B2. We employed the Local Spin Density Approximation (LSDA) and the local spin density approximation with Hubbard-U corrections (LSDA+U) for the binary **GdX (X= N, P, As, Sb)**. Then we calculated the parameter of lattice, the buck modulus and fundamental energy, the electronic structures, total and partial densities of states. We so calculated the magnetic moment, we found that the major party of these last ones Includes in rare earths.