

Nom : Meliani

Prénom : ZAHIA

Spécialité : Physique

**Option : Nanosciences des Matériaux, Nanotechnologies et
nano-métries**

Intitulé :

**Étude de premier-principes des propriétés électroniques et
magnétiques des matériaux à base de lanthanides.**

Email : Meliani_za@yahoo.fr

θ

بواسطة طريقة الأمواج المستوية المتزايدة خطياً (FP-LAPW) والتي تركز على نظرية كثافة الدالية DFT قمنا بحساب الخواص البنيوية و الالكترونية و المغناطيسية للتنائيات أكسيدات نواذر الأرض ReO_2 (Re : Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu) باستعمال طرق القربيات التالية : تقريب كثافة الموضع ب LSDA spin و تقريب كثافة الموضع المصححة بالعامل U (LSDA+U) و لقد حددنا العناصر التالية : ثابت الشبكة ، الطاقة الكلية ، عصابات الطاقة ، كثافة الحالات ، كما قمنا بتحديد العزم المغناطيسي فوجدنا أن أغلبيتها تتمركز في ذرات نواذر الأرض.

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 Fluorite CaF_2 . Nous avons utilisé l'approximation de la densité locale polarisée en spin (LSDA) et (LSDA+U) pour les binaires ReO_2 (Re : Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu). 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 Fluorite CaF_2 . We employed the Local Spin Density Approximation (LSDA) and the local spin density approximation with Hubbard-U corrections (LSDA+U) for the binary ReO_2 (Re: Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu). 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.