Contribution à l'étude des propriétés physiques des pérovskites dans différentes phases structurales.

Abderrahim HADJ LARBI

Soutenue en:

(Thèse en préparation)

Abstract: Les matériaux de structure pérovskite ont été et font toujours l'objet de nombreuses études (les condensateurs diélectriques, dispositifs piézo-électriques, les cellules photovoltaïques). Les différentes études effectuées sur les matériaux de type pérovskite démontrent la richesse de cette famille. Peu de composées pérovskites présentent la structure idéale cubique, la maille est en fait plus ou moins déformée. Notre travail est motivé par le manque de travaux concernant différentes phases structurales des pérovskites (cubiques, orthorhombiques, hexagonales,...etc.) ainsi que la possibilité de transition entre eux. La recherche de la phase fondamentale et les propriétés physiques appropriées représentent en fait l'objectif global de la thèse. Pour accomplir ce travail, on va utiliser une méthode ab initio. La méthode repose sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Keywords : Perovskite, DFT, ab-initio, FP-LAPW.