

Prédiction théorique de l'effet de pression sur les propriétés structurales, électroniques et mécaniques des pérovskites $XZnF_3$ ($X=Li, K, Rb$)

Abderrahim HADJ LARBI

Soutenu en: 2014

Abstract : En utilisant la méthode ab-initio FP-LAPW, notre travail consiste à calculer les propriétés structurales, élastiques, électroniques, thermodynamiques et optiques avec et sans pression des trois matériaux $XZnF_3$ ($X=Li, K, Rb$). Le potentiel d'échange-corrélation est traité par l'approximation du gradient généralisé GGA. Les résultats obtenus par la fonctionnelle GGA-PBEsol sont les plus proches des valeurs expérimentales, ce qui montre l'importance et l'accord avec ce qui est connu pour cette fonctionnelle dans la prédiction de ces paramètres dans les matériaux solides.

Keywords : DFT, wien2k, Perovskite, GGA