



Proposition d'un sujet de stage de Master de Recherche en Physique*

Titre du Stage : Modélisation par la théorie de la fonctionnelle de la densité des propriétés physiques d'un composé type pérovskite

Encadrant(s) : Ghalla Houcine **Email :** houcineghalla@yahoo.fr **Etablissement :** Institut Préparatoire aux Etudes d'ingénieurs de Monastir

Structure de Recherche : LR18ES18

Le Stage sera suivi par une thèse : oui

Résumé du travail :

- Ce travail consiste à :
- Faire une étude bibliographique approfondie sur les composés de type pérovskite et les propriétés structurales et électroniques qui en découlent.
 - Faire un aperçu général sur les méthodes du calcul quantique, en particulier la théorie de la fonctionnelle de la densité DFT, ainsi que les différentes techniques d'analyses moléculaires.
 - Savoir et maîtriser les logiciels adéquats à la modélisation de ce type de système moléculaire.
 - Etudier les propriétés physiques d'un composé de type pérovskite.
 - Etude de leur stabilité en se basant sur des grandeurs énergétiques et topologiques.

*NB :

- L'étudiant doit contacter l'encadrant pour plus d'information.
- L'étudiant ne peut commencer son stage qu'après accord de la commission du Master (signature de la fiche du stage par les différentes parties).