Université de Monastir
Faculté des Sciences
Département de Physique

stage de Master de Recherche en Physique
Parcours:
MNS, PQ

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

Proposé par: Ghalla Houcine
Contact(email): houcineghalla@yahoo.fr
Structure de recherche: Laboratoire de Physique Quantique et Statistique

Directeur de la structure de recherche: Gazzah Hichem
Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:
Ce travail consiste à :
1- Faire une étude bibliographique approfondie sur les composés de type pérovskite et les propriétés structurales et électroniques qui en découlent.
2- 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.
3- Savoir et maîtriser les logiciels adéquats à la modélisation de ce type de système moléculaire.
4- Etudier les propriétés physiques d'un composé de type pérovskite.
5- Etude de leur stabilité en se basant sur des grandeurs énergétiques et topologiques.

Références: