

Nom : BENREKIA

Prénom : Ahmed Redha

Adresse 10, rue Hamidet Mohammed, El Affroun (Blida)

Tel : 05 61 88 11 64.

Email : benrekia.ahmed@yahoo.com

Thèse intitulée : Etude des propriétés Diélectriques, Piézo-électriques et hydrostatiques des matériaux ferroélectriques  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{SrTiO}_3$  et  $\text{KTaO}_3$ .

## ملخص

خلال هذه الرسالة قدمت دراسة البروفسكايت التالية: نوبيات وتنتالات البوتاسيوم وتيتانات السترونتيوم بواسطة نظرية دلالية الكثافة. أظهرت الدراسة محدودية النظرية لدى حساب الفجوة أو الحزمة الممنوعة وقدمت تصحيحا لذلك بواسطة دوال غرين. بعد ذلك حسبت خواص الحالة الأساسية: البنيوية، الالكترونية ... كما شملت الدراسة أثار الضغط المتجانس على الخصائص السابقة.

Durant cette thèse, j'ai caractérisé l'état fondamental des pérovskites  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{KTaO}_3$  et  $\text{SrTiO}_3$  à l'aide de la DFT comme implémentée dans le code VASP. J'ai montré sa limite pour le calcul de la bande interdite et les propriétés associées. J'ai apporté une amélioration à l'aide de la méthode GW au calcul de la bande interdite. Après j'ai calculé les propriétés de l'état fondamental : structurale, vibrationnelle, diélectriques et piézoélectriques. De même j'ai calculé l'influence de la pression hydrostatique sur ces propriétés.

## Abstract.

In this study, I use the DFT as implemented in the VASP package, to calculate the structural, vibrational, dielectric and piezoelectric properties of the following perovskites:  $\text{KNbO}_3$ ,  $\text{KTaO}_3$  and  $\text{SrTiO}_3$ . I prove the limitation of DFT to calculate the gap and associated properties and I give a correction with the GW approximation. The impact of a hydrostatic pressure is also presented.