

---

# LES PREMIERS PRINCIPES DE CALCULS DES PROPRIETES STRUCTURALES ET ELECTRONIQUES DES FLUORIDES A STRUCTURE PEROVSKITE: LiMgF<sub>3</sub> ET KBaF<sub>3</sub>

Amara Korba Sabiha\*<sup>†1,5</sup>, Chouit Nassima<sup>‡2,6</sup>, Slimani Menouba<sup>§3,7</sup>, and Meradji Hocine<sup>¶4,8</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire de Physique de rayonnements – Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Annaba, Algérie

<sup>5</sup>Université Badji-Mokhtar Annaba – France

<sup>2</sup>Laboratoire de Physique de rayonnements – Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Annaba, Algérie

<sup>6</sup>Université Badji-Mokhtar Annaba – France

<sup>3</sup>Laboratoire de Physique de rayonnements – Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Annaba, Algérie

<sup>7</sup>Université Badji-Mokhtar Annaba – France

<sup>4</sup>Laboratoire de Physique de rayonnements – Département de Physique, Faculté des Sciences, Université de Annaba, Algérie

<sup>8</sup>Université Badji-Mokhtar Annaba – France

## Résumé

Dans ce travail nous présentons les premiers principes de calculs des propriétés structurales et électroniques des composés LiMgF<sub>3</sub> et KBaF<sub>3</sub> qui sont deux fluorides à structure pérovskite et à large gap énergétique. Nous avons utilisé dans nos calculs la méthode des ondes planes augmentées et linéarisées FP-LAPW et pour déterminer le potentiel d'échange et de corrélation nous avons utilisé l'approximation de la densité locale (LDA) et l'approximation du gradient généralisé (GGA). Nous avons déterminé aussi les propriétés électroniques pour les deux composés. La contribution des différentes bandes d'énergie a été analysée par des courbes de densité d'états totales et partielles. Nos calculs de structures de bandes électroniques montrent un gap indirect pour les deux composés.

**Mots-Clés:** FP, LAPW, pérovskite, fluorure

---

\*Intervenant

<sup>†</sup>Auteur correspondant: tahar23000@yahoo.fr

<sup>‡</sup>Auteur correspondant: tahar23000@yahoo.fr

<sup>§</sup>Auteur correspondant: tahar23000@yahoo.fr

<sup>¶</sup>Auteur correspondant: tahar23000@yahoo.fr