

APPLICATION DES METHODES *AB INITIO* A L'ETUDE DES PROPRIETES ELECTRONIQUES ET THERMODYNAMIQUES DES MATERIAUX ET ALLIAGES.

Laurent PEDESSEAU

Laboratoire FOTON-INSA, UMR 6082 au CNRS, INSA de Rennes, 20 Avenue des Buttes de Coësmes, CS 14315, 35043 Rennes Cedex, France

Les méthodes *ab initio* ont largement contribué à la compréhension des propriétés des matériaux et alliages. Ainsi, le calcul prospectif des raccordements de bandes donne une idée du type de jonction pour les futurs matériaux. De même, l'étude de transition de phase et plus généralement de stabilité mécanique a permis d'identifier des comportements instables. De plus, cette approche est aussi couplée à d'autres méthodes moins fines mais permettant de traiter des nano objets dans leur quasi globalité et donc d'en simuler la physique. Dans ce dernier cas, l'*ab initio* sert par exemple pour calculer les coefficients piézoélectriques linéaire et non linéaire et d'en appréhender l'effet à l'échelle du nano objet.

E-mail : laurent.pedesseau@insa-rennes.fr

Keywords: simulation *ab initio*, propriétés de matériaux.