

المخلص

في هذا العمل قمنا بالحساب من أجل مختلف البنيات الهندسية ل PZT المركبات PZO و PTO و ذلك باستخدام Quantum Espresso. البنية الإلكترونية لكل من هذه المركبات تظهر فجوة الطاقة. هناك إستقطاب قد يتطور من أجل البنيات التي ليس لها مركز إنعكاس و يتم حساب الثوابت الكهروضغطية من أجل البنيات *tétragonale* و *monoclinique*. القيم التي تم الحصول عليها متوافقة مع النتائج التجريبية. الخصائص الفيزيائية للمحلول PZT يمكن تقييمها من خلال مزيج لخصائص هذين المركبين.

Résumé

Dans ce travail on a calculé pour les différentes structures géométriques du PZT les composés PZO et PTO en utilisant le code Quantum Espresso. La structure électronique de chaque'un de ces composés montrent un gap énergétique.

Une polarisation peut se développer pour les structures sans centre d'inversion et les constantes piézoélectriques sont calculés pour les structures tétragonale et monoclinique.

Les valeurs obtenues sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Les propriétés physiques de la solution PZT peut être évalué par un mélange des caractéristiques de chaque'un de ces deux composés.

Abstract

In this work we have calculated, for the different geometrical structures of the PZT compounds, the PZO and PTO using the Quantum Espresso code. The electronic structure of each of these compounds shows an energy gap.

A polarization may be developed for structures without inversion symmetry and the piezoelectric constants are calculated for the tetragonal and monoclinic structures.

The values obtained are in good agreement with experimental results. The physical properties of the PZT solution can be evaluated by mixing characteristics from each one the of these two compound.