## چکیده

خواص ساختاری و الکترونی $CaTiO_3$ در فاز مکعبی مورد محاسبه قرار گرفت. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و تقریب های چگالی موضعی و گرادیان چگالی موضعی انجام گرفت. پس از بهینه سازی ویژگیهای ساختاری و چک کردن توانایی ما در محاسبات ویژگیهای ساختاری و الکترونی ویژگیهای ترمودینامیکی $CaTiO_3$ با استفاده از بسته محاسباتی گیبس محاسبه گردید. مطالعه ویژگیهای ترمودینامیکی مواد از نظربسط دانش ما در خصوص رفتارهای ویژه مواد وقتی که تحت شرایط خاص از جمله فشار و دمای بالاقرارمی گیرند دارای اهمیت است.

به منظور انجام محاسبات ترمودینامیکی باید اطلاعات دقیقی از معادله حالت و ویژگیهای ترمودینامیکی در دست داشت. پس از تست کردن همگرایی های مورد نیاز، انرژی کل محاسبه شده به معادله حالت مورناگان برازش داده می شود. نتایج حاصل از اندازه گیری پارامترهای شبکه و مدول حجمی توافق خوبی با تجربه نشان می دهند. ویژگیهای ترمودینامیکی در بازه دمایی صفر تا ۱۰۰۰ کلوین یعنی محدوده ای که مدل شبه هارمونیک کاملا موفق است اندازه گیری شد. آثار فشار در محدوده صفر تا ٦٠ گیگا پاسکال مطالعه گردید. تغییرات گرمای ویژه بر حسب دما و فشار نشان داد که تغییرات آن در دماهای پایین به صورت $T^3$ و در دماهای بالا به یک حد اشباع می رسد که با تجربه سازگار است.