

Une nouvelle technique pour calculée l'intensité de masquage des trous d'etas de cœur est crée pour effectuer des simulations précises de la spectroscopie de perte d'énergie des électrons (spectroscopie EELS) des matiereux lithium. La methode est appliquée pour verifier la validité de conduire la spectroscopie EELS à 30 keV pour minimizer les dommages de la faisceau d'électron. Des spectres EELS sont calculées pour  $\text{Li}_2\text{O}$ ,  $\text{LiF}$  et le lithium metalique et une meilleur accordance avec les resultats expérimentals est reconnue pour tous les matérieux. Des meillures caractéristiques quantitatives et prédictives sont aussi obtenues. La technique est bassée sur la théorie de la réponse linéaire et rélie la densité des électrons aux effets de masquage. Ces effets sont par la suite représentés avec une trou non-entière dans des calculations théorie de la fonctionnelle de la densité.