

Spécificités des Surfaces d'oxydes

Claudine Noguera

*Groupe de Physique des Solides,
UMR 7588 CNRS-Université Paris 6 et Paris 7,
Campus Boucicaut, 140 rue de Lourmel, 75015 Paris, France*

Résumé

Dans une première partie, ce cours sensibilisera à la richesse de comportements structuraux et compositionnels que peuvent présenter les surfaces d'oxydes : richesse due à la diversité des structures cristallographiques rencontrées dans le volume des composés, richesse associée aux diverses coupes cristallographiques possibles pour une orientation donnée de la surface, complexité provenant des divers états de valence que peuvent présenter les cations de métaux de transition, variété de composition et de structure en fonction des conditions de préparation des surfaces (lacunes et reconstructions) et en fonction de l'environnement extérieur.

Dans ce contexte, on commentera sur la puissance mais aussi sur les limitations des méthodes de simulation *ab initio* qui permettent de prédire et de comprendre ces caractéristiques ainsi que les propriétés électroniques qui leur sont associées. A la lumière d'exemples pris dans les récents travaux de notre groupe, on montrera que de telles techniques, bien que encore aujourd'hui assez coûteuses en temps de calcul numérique, sont indispensables chaque fois qu'un système présente un fort couplage entre ses degrés de liberté électroniques et structuraux.

Finalement, on décrira les principaux processus responsables des modifications des spectres d'excitations électroniques en surface --- ou dans des systèmes de basse coordinence : agrégats, nanoparticules, etc --- par rapport au spectres de volume, et en particulier on insistera sur le gap qui est la plus petite énergie d'excitation, et qui est en relation directe avec la couleur des oxydes. On discutera cette propriété pour des surfaces stoechiométriques ou non stoechiométriques et pour des couches ultra-minces, on indiquera la corrélation avec le concept d'acidité ou de basicité des sites de surface, utilisé par les chimistes, et l'on mentionnera quelques pistes prometteuses du point de vue des applications.

[1] C. Noguera 1996, « Physics and Chemistry at oxide surfaces » Cambridge University Press

[2] C. Noguera 2000 : "Polar Oxide Surfaces" J. Physics Condensed Matter **12**, R367-R410

[3] C. Noguera 2001 : "Insulating Oxides in low dimensionality" Surface Review and Letters **8**, 121-167

[4] C. Noguera 2001: "Clean Oxide Surfaces: a theoretical review" dans "The Chemical Physics of Solid Surfaces", Vol **9** : " Oxide Surfaces " (Editeur P. Woodruff) p35-86 , Elsevier