



Topologie de la polarisation ferroélectrique à la surface de BaTiO₃(001) par calculs ab initio et microscopie-spectroscopie d'électrons

Jelle Dionot

Soutenance de thèse

Mardi 15 septembre 2015 à 14h00

Salle Itzykson, Bât. 772, Orme des Merisiers, CEA-Saclay



La discontinuité de la polarisation à la surface d'un matériau ferroélectrique induit des charges fixes qui peuvent déstabiliser l'état ferroélectrique. La structuration en domaines écrante naturellement le champ dépolarisant et maintient la stabilité ferroélectrique. À la surface d'un oxyde ferroélectrique, la structuration en domaines se combine aux réarrangements atomiques pour minimiser l'énergie libre du système. Ainsi, la combinaison de la structuration en domaines avec la reconstruction atomique et les mécanismes de relaxation donnent lieu à une topologie ferroélectrique de surface particulière.

Dans cette thèse, des calculs ab initio basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité ont été menés pour explorer le rôle et les interactions de la terminaison de surface, de la contrainte élastique, de l'épaisseur, des lacunes d'oxygène et de la largeur des domaines sur la topologie ferroélectrique de couches ultraminces de BaTiO₃(001). Les résultats théoriques sont comparés avec des études de microscopie d'électrons lents et de photoélectrons menés sur des surfaces de monocristaux de BaTiO₃(001). Le rôle spécifique de la chimie et de la structure de surface apparaît clé dans la détermination de la topologie ferroélectrique.

