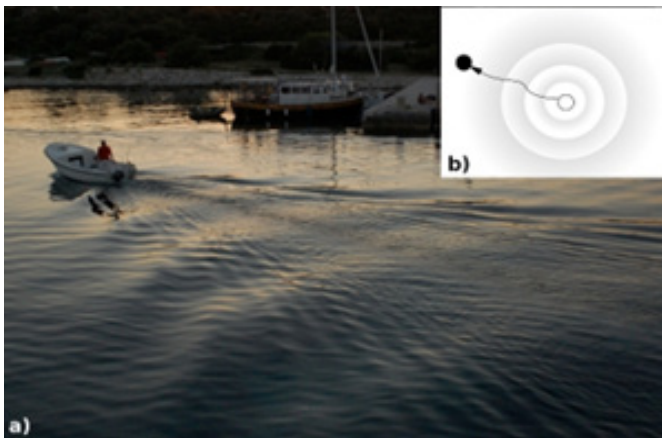
Institut Rayonnement Matière de Saclay
Brèves de l'IRAMIS
N° 242 - Avril 2015
iramis-i.cea.fr

Sur la trace des transitions de phase dans les oxydes de métaux de transition

Matteo Gatti : tél : 01.69.33/45.38, matteo.gatti@polytechnique.edu
Lucia Reining : tél : 01.69.33/45.53, lucia.reining@polytechnique.edu

Les matériaux fortement corrélés, tels que les oxydes de métaux de transition, sont caractérisés par une interaction intriquée entre les différents acteurs (la charge électronique, le spin, le réseau cristallin, etc.). Ces matériaux, très prometteurs en vue d'applications technologiques, posent un défi majeur pour la compréhension des effets de la corrélation électronique et donc du couplage entre excitations. Dans certains cas, on peut formuler le problème en termes de couplage électron-boson. Dans des semiconducteurs simples (silicium, graphite), les bosons sont des plasmons. Dans le cas de l'oxyde de vanadium, un matériau fortement corrélé prototypique, les bosons sont des excitations localisées. Cependant, grâce à une étude réalisée à partir des principes premiers, les physiciens du groupe de Spectroscopie Théorique du LSI ont montré que l'image électron-boson reste valable. Les effets de la corrélation électronique lors de la transition de phase de l'oxyde de vanadium peuvent toujours être compris de façon simple comme un couplage dynamique entre une quasiparticule et une excitation localisée autour des atomes de vanadium. Ce couplage se manifeste comme une empreinte particulière (ce que l'on appelle une «structure satellite») dans les spectres mesurés par la spectroscopie de photoémission. Il s'agit d'un effet typique de la corrélation électronique : pour le comprendre il faut tenir compte d'au moins deux excitations élémentaires et du couplage entre elles. L'explication théorique de cet effet en termes de couplage électron-boson permet un progrès réel vers la possibilité de démêler les effets dus à l'interaction entre les différents acteurs en jeu dans ces matériaux.

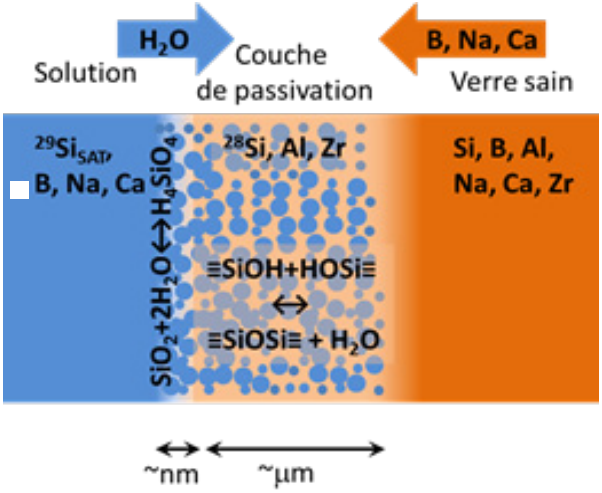


Perturbation d'un milieu par un objet qui s'y propage.
a) Une particule qui se propage dans un système perturbe ce dernier, comme un bateau crée des ondes dans l'eau (permission L. Sponza).
b) Dans un système d'électrons, des ondes de densité de charge apparaissent quand on éjecte un électron, ce qui crée un trou qui se propage (cercle blanc).

Comment le verre se protège-t-il des agressions de l'eau ?

Thibault Charpentier : tél : 01.69.08/57.02, thibault.charpentier@cea.fr

Comprendre l'interaction de l'eau avec la matière est une question scientifique qui intéresse des domaines aussi divers que les sciences de la terre, la médecine, la préservation du patrimoine mais aussi l'industrie. Dans le cadre des études sur le stockage des déchets nucléaires vitrifiés en couches géologiques profondes, il est connu depuis une vingtaine d'années que l'interaction de l'eau avec le verre de confinement conduit à la formation d'une couche externe enrichie en silice, dite couche passivante car elle conduit à une diminution de plusieurs ordres de grandeur de la vitesse de dissolution des espèces solubles. Elle pourrait alors devenir une couche protectrice du colis pour des durées géologiques.
L'élucidation des mécanismes à l'échelle atomique qui expliquent cette passivation reste aujourd'hui une question scientifique ouverte. Grâce à l'élaboration d'une couche passivante de plus d'un micromètre d'épaisseur (au lieu de quelques dizaines de nanomètres jusque là obtenus pour une expérience de 25 ans !), des équipes de DEN/DTCD et de DSM/IRAMIS ont montré pour la première fois qu'elle ne résultait pas d'une reprécipitation de la silice en solution. En effet, la RMN a permis de mettre en évidence une réorganisation locale du réseau vitreux, suite au départ des espèces solubles, qui conduit à la formation de pores sub-nanométriques. Ces derniers piègent l'eau ce qui limite alors considérablement son pouvoir d'hydrolyse. Favoriser la formation et la stabilité de telles couches offre donc de nouvelles perspectives pour augmenter la durabilité des verres de stockage.



Représentation schématique de la formation d'une couche passivante à la surface d'un verre