

Responsable :  
Fabien BRUNEVAL  
■ 01 69 08 43 49

# SEMINAIRE



**Service de Recherches de Métallurgie Physique**

DEN/DANS/DMN

Salle de réunion du SRMP – Bâtiment 520 – Pièce 109

***Un nouveau modèle à charges variables en liaisons fortes pour les simulations atomiques des surfaces, interfaces et défauts dans les oxydes***

**Robert TÉTOT**

**LABORATOIRE D'ETUDE DES MATERIAUX HORS EQUILIBRE (LEMHE)  
UMR 8182, Université Paris Sud**

Deux types de modèles empiriques sont usuellement utilisés pour simuler les propriétés de volume et de défauts dans les oxydes. Le premier, issu de la description de Born-Madelung des solides ioniques décrit l'énergie de cohésion par un terme purement électrostatique entre ions ponctuels comportant des charges fixes entières (formelles) ou partielles. Une interaction à courte portée répulsive traduit le principe d'exclusion de Pauli. Pour les oxydes, même très ioniques, ce modèle est dans l'incapacité de rendre compte à la fois des propriétés cristallines et énergétiques. Le second type de modèle, dit à charges variables, permet aux charges ioniques de s'adapter à leur environnement, ce qui les rend très attractifs pour décrire les situations hétérogènes, en présence de défauts ponctuels ou étendus. De plus les ions sont décrits par des distributions de charge étendues spatialement, ce qui permet d'écranter la loi de Coulomb à courte portée. Un terme énergétique covalent cohésif peut alors être introduit, ce qui permet une description beaucoup plus réaliste des oxydes. Toutefois, dans les modèles existants, les caractères ionique et covalent de l'oxyde sont traités séparément, ce qui les rend instables par rapport aux fluctuations de charges. Ces aspects seront traités sur un exemple simple, l'oxyde SrO à fort caractère ionique. Nous présenterons ensuite un nouveau modèle à charges variables, dans lequel l'énergie covalente est décrite, dans le cadre du formalisme des liaisons fortes dans l'approximation du second moment, comme une fonction en racine carrée du transfert de charge entre oxygènes et cations voisins. Nous montrerons que ce modèle devient stable vis-à-vis du transfert de charges et transférable entre différents systèmes (SrO, TiO<sub>2</sub>, SrTiO<sub>3</sub>). Nous présenterons ensuite quelques résultats, concernant notamment les propriétés de surface de TiO<sub>2</sub> rutile ainsi que les lacunes se formant à la surface (110).

**Jeudi 20 janvier 2011 à 14h30**

***N.B :*** ***Les visiteurs de nationalité étrangère hors Union Européenne sont priés de bien vouloir avertir impérativement 3 semaines à l'avance – les visiteurs de l'Union Européenne 1 ou 2 jours avant le séminaire le Secrétariat du Service de leur entrée sur le Centre : Tel : 01 69 08 66 64 – Fax : 01 69 08 68 67***

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives  
Centre de Saclay - Bât 520 - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex - France  
Service de Recherches de Métallurgie Physique  
Séminaires - Martine Logé : Tél. : 01 69 08 51 67 – Fax. : 01 69 08 68 67



Etablissement public à caractère industriel et commercial  
R.C.S. PARIS B 775 685 019

