

Étude par spectroscopie infrarouge de films minces d'oxydes fonctionnels intégrés sur silicium : apport des modélisations *ab initio*

Yoann PEPPERSTRAETE

(Institut de Chimie Moléculaire et de Matériaux d'Orsay et Synchrotron SOLEIL, Gif sur Yvette, France)

Vendredi 21 juin 2019 – 9h30

Salle E. Lederer, bâtiment 430, Université Paris-Sud, Orsay

Le $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ (PZT) est une pérovskite mixte possédant de nombreuses propriétés, dont certaines sont déjà utilisées dans l'industrie, ce qui en fait un matériau encore très étudié à l'heure actuelle, malgré la toxicité du plomb et de ses oxydes. Nous nous sommes intéressés à la spectroscopie d'absorption IR de ce composé, tant au niveau expérimental que théorique. Pour cela, nous avons réalisé des modélisations, en utilisant la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) périodique, afin d'aider à l'interprétation des spectres expérimentaux réalisés sur la ligne AILES du synchrotron SOLEIL.

Nous avons commencé par modéliser les composés de base du PZT : le PbTiO_3 (PT) et le PbZrO_3 (PZ). Nos résultats reproduisant très bien les données de la littérature sur ces deux composés, nous avons pu faire une analyse de leur spectre d'absorption IR. D'autre part, leur modélisation nous a permis de déterminer des paramètres de calcul transférables et de les appliquer au PZT en utilisant la méthode de la supermaille, couplée à une analyse statistique. Les résultats obtenus sont prometteurs pour l'interprétation, car comparables aux spectres expérimentaux. Enfin, nous nous sommes intéressés à la modélisation de couches ultraminces et de lacunes d'oxygène, dans le but de voir leur effet sur le spectre IR du PT.

Les membres du jury sont :

| | |
|-----------------------|---|
| Mme Isabelle BARAILLE | Professeure à l'Université de Pau et des pays de l'Adour (rapporteur) |
| M. Philippe D'ARCO | Professeur à Sorbonne Université (rapporteur) |
| Mme Isabelle DEMACHY | Professeure à l'Université Paris-Sud (examinatrice) |
| Mme Paola GIURA | Maître de conférence à Sorbonne Université (examinatrice) |
| M. Bertrand VILQUIN | Maître de conférence à l'École Centrale de Lyon (examinateur) |
| Mme Émilie AMZALLAG | Maître de conférence à l'Université Paris-Sud (examinatrice et co-encadrante) |
| Mme Pascale ROY | Directrice de recherche au synchrotron SOLEIL (directrice de thèse) |
| M. Robert TETOT | Directeur de recherche Émérite à l'Université Paris-Sud (invité) |



Vous êtes cordialement invités au pot qui suivra

Formalités d'entrée : accès libre.

SYNCHROTRON SOLEIL

L'Orme des merisiers - Saint-Aubin - BP48 - 91192 GIF S/YVETTE cedex

www.synchrotron-soleil.fr/fr/evenements

CONTACT : sandrine.vasseur@synchrotron-soleil.fr

THÈSE