



Poste de maître de conférences

robert.tetot@u-psud.fr

<http://www.icmmo.u-psud.fr/Labos/LEMHE/>

Profil : Méthodes *ab initio* appliquées à la modélisation de la croissance et des propriétés dynamiques de couches minces d'oxydes.

Les propriétés physico-chimiques des matériaux en couche à base d'oxydes dépendent à la fois des contraintes épitaxiales, de la composition chimique et de la structure aux différentes échelles (nano, micro et macroscopique). La compréhension des liens entre ces différents facteurs, les conditions d'élaboration (présence ou non de vapeur d'eau par exemple) et les transitions de phases en dimensions réduites est une question fondamentale. Pour contrôler l'élaboration de ces matériaux il est nécessaire d'étudier les tout premiers stades de la croissance, c'est-à-dire de déterminer les énergies d'interactions gaz/substrat, le rôle des défauts de surface, les énergies d'activation cinétique ... Le développement de calculs *ab initio* pour déterminer ces grandeurs énergétiques s'intègre dans une thématique de dérivation de potentiels empiriques réalistes à l'échelle atomique avec pour objectif général l'étude de systèmes de grandes dimensions comprenant des interfaces métal/oxyde et oxyde/oxyde (structure d'équilibre et cinétiques de croissance).

Par ailleurs, la spectroscopie infrarouge s'avère être un outil d'investigation très sélectif et complémentaire des DRX capable de renseigner de façon dynamique sur les phases présentes dans les premiers stades d'oxydation ainsi que dans les couches d'oxydes et aux interfaces. L'une des spécificités de ce projet est de coupler des expériences de spectroscopie infrarouge (IR) et des simulations par les méthodes DFT pour comprendre l'apparition pour les matériaux en couches minces, de phases différentes de celles des matériaux massifs, liées aux contraintes épitaxiales et aux conditions de croissance. Le LEMHE/ICMMO est équipé d'un spectromètre permettant de couvrir la gamme de fréquences de l'IR proche et moyen et des expériences sont programmées sur la ligne AILES (IR lointain) à SOLEIL, dans laquelle le LEMHE/ICMMO est fortement impliqué. Or, il est reconnu que l'exploitation optimum de ces expériences nécessite de les coupler à des modélisations de spectres, celles-ci ne pouvant se concevoir qu'au niveau *ab initio*. Le candidat devra donc avoir de solides compétences en spectroscopie.