

2012

INFLUENCE DE L'ÉCHANGE ET LA CORRÉLATION SUR L'ÉTUDE DES SURFACES FERROÉLECTRIQUES

N. Iles, A. Kellou, K. Driss Khodja

Abstract : Les pérovskites nano structurées de type ABO_3 présentent des propriétés très différentes de celles de l'état massif. La ferroélectricité est la principale propriété affectée par la dimension du système et la qualité de l'interface en dépend. La surface est un cas particulier d'interface entre la pérovskite et le milieu environnant, elle peut s'étendre sur quelques monocouches atomiques. La modélisation des propriétés ferroélectriques en surface nécessite un cadre théorique adéquat, la théorie de la fonctionnelle de densité (DFT) permet une bonne estimation de la liaison chimique moyennant des approximations pour le traitement de l'échange et les corrélations électronique pour ce type d'oxydes. Les plus utilisés sont l'approximation de la densité locale (LDA) et l'Approximation du Gradient Généralisé (GGA). Dans ce travail nous utiliserons ces deux approximations et une nouvelle approximation la GGA-WC pour examiner la polarisation des états de surfaces pour les deux ferroélectriques typiques $BaTiO_3$ et $PbTiO_3$ orientés (001) pour les terminaisons TiO_2 et AO ($A=Ba, Pb$). Cette dernière approximation est la mieux adaptée comparé à la LDA et la GGA, car elle donne de meilleurs résultats pour les propriétés de l'état massif et la surface comparé à la LDA et la GGA.

Keywords : Ferroélectricité, surface, LDA, GGA, GGA-WC, $BaTiO_3$, $PbTiO_3$