

Approches couplées spectroscopie XPS / chimie quantique : applications à l'étude de la réactivité chimique aux interfaces.

G Vallverdu¹, D Flahaut¹, H. Martinez¹, D. Gonbeau¹, I. Baraille¹

¹ CNRS/ UNIV PAU & PAYS ADOUR/ E2S UPPA, IPREM, UMR5254, 64000, PAU, FRANCE

Contact : germain.vallverdu@univ-pau.fr

Parallèlement aux approches expérimentales, ces 20 dernières années, la montée en puissance des moyens informatiques a permis un développement rapide de nouvelles méthodes de simulations numériques, adaptées à l'étude des surfaces, des interfaces et des processus s'y déroulant. Cela a conduit à de nouvelles approches dans le domaine de l'étude des surfaces et interfaces, dans lequel des approches expérimentales et théoriques, complémentaires, permettent d'étudier de manière fine les propriétés structurales, électronique et physico-chimiques des surfaces et interfaces à une échelle atomique. Les approches théoriques sont très souvent des méthodes de choix pour obtenir des informations sur des systèmes parfois difficilement accessibles expérimentalement.

En s'appuyant sur des exemples, cette présentation introduira les méthodes et stratégies calculatoires en chimie théorique pour l'étude des surfaces et interfaces et des processus s'y déroulant. Les systèmes d'études considérés concerneront des matériaux pour accumulateurs lithium ou lithium-ion dans lesquels les phénomènes aux interfaces sont déterminants au niveau des performances ou du vieillissement des systèmes électrochimiques.

-
- (1) Quesne-Turin, A.; Vallverdu, G.; Flahaut, D.; Allouche, J.; Croguennec, L.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Morphology and Surface Reactivity Relationship in the $\text{Li}_{1+x}\text{Mn}_2\text{-XO}_4$ Spinel with $x = 0.05$ and 0.10 : A Combined First-Principle and Experimental Study. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, 9 (51), 44922–44930.
 - (2) Quesne-Turin, A.; Flahaut, D.; Croguennec, L.; Vallverdu, G.; Allouche, J.; Charles-Blin, Y.; Chotard, J.-N.; Ménétrier, M.; Baraille, I. Surface Reactivity of Li_2MnO_3 : First-Principles and Experimental Study. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2017**, 9 (50), 44222–44230.
 - (3) Vallverdu, G.; Minvielle, M.; Andreu, N.; Gonbeau, D.; Baraille, I. First Principle Study of the Surface Reactivity of Layered Lithium Oxides LiMO_2 ($M = \text{Ni, Mn, Co}$). *Surface Science* **2016**, 649, 46–55.
 - (4) Guille, É.; Vallverdu, G.; Tison, Y.; Bégué, D.; Baraille, I. Possible Existence of a Monovalent Coordination for Nitrogen Atoms in $\text{Li}_x\text{PO}_y\text{N}_z$ Solid Electrolyte: Modeling of X-Ray Photoelectron Spectroscopy and Raman Spectra. *J. Phys. Chem. C* **2015**, 119 (41), 23379–23387.
 - (5) Martin, L.; Vallverdu, G.; Martinez, H.; Cras, F. L.; Baraille, I. First Principles Calculations of Solid–Solid Interfaces: An Application to Conversion Materials for Lithium-Ion Batteries. *J. Mater. Chem.* **2012**, 22 (41), 22063–22071.