La science des surfaces et des interfaces a connu ces dernières années un effort de recherche intense. Les objectifs assignés sont de mieux comprendre les rôles joués par la structure électronique, le transfert de charge et les défauts de surface. Pour situer le sujet, il est à rappeler que l'étude d'interfaces de type oxyde présente un intérêt particulier car elles sont utilisées dans de nombreux domaines tels la catalyse, les revêtements optiques, thermiques ou mécaniques et la microélectronique. Dans ce contexte, tenter d'expliquer la nature des interactions à l'interface métal/oxyde en prenant en compte les phénomènes à l'échelle atomique est un enjeu capital. L'étude de la nature des interactions à l'interface métal/oxyde passe en premier lieu par la détermination par le calcul et l'expérience des propriétés structurales et électroniques de ces interfaces. L'une des difficultés rencontrée à ce niveau est le manque de résultats expérimentaux lié aux difficultés de préparation des échantillons en particulier, les substrats oxydes. Il est connu que leur réactivité superficielle dépend du mode de préparation choisi pour le solide qu'il est donc fondamental de pouvoir contrôler. Il est donc très important, lors d'études de la réactivité de surfaces d'oxydes de maîtriser leur stoechiométrie, paramètre susceptible d'influencer grandement leur réactivité. L'autre limitation expérimentale est les limites des techniques de caractérisation. Par exemple, l'utilisation des spectromètres à particules chargées sur un substrat oxyde devient destructive. L'utilisation de méthodes de simulation numérique s'avère donc une alternative pour la caractérisation de ces interfaces. Cette simulation fait généralement appel aux méthodes quantiques dites ab initio (approches Hartree Fock (HF) et la Théorie de la Fonctionnelle Densité (DFT)).