DE LA RECHERCHE À L'INDUSTRIE

www.cea.fr

Sujet de Stage (Master 2):

Interactions électroniques et magnétisme dans l'oxyde de Fer et implications pour les propriétés thermodynamiques et élastiques du manteau terrestre inférieur.

Le manteau terrestre inférieur représente 50% du volume de la terre, et est composé essentiellement de ferropericlase (Mg,Fe)O et de la perovskite (Mg,Fe,Al)(Si,Al)O3 [1]. Dans ces composés, lorsque la pression devient très importante (jusqu'à un million de fois la pression atmosphérique), une transition de phase magnétique apparaît à une certaine profondeur. La discontinuité des propriétés des phases avant et après la transition pourrait expliquer la réflexion de certaines ondes sismiques [1].
Cette transition de phase est due à la compétition entre d'une part l'existence de fortes interactions entre électrons des couches électroniques d du Fer et d'autre part à l'augmentation de la liaison entre atomes lorsqu'ils se rapprochent les uns des autres. C'est cette compétition qui conduit sous pression à l'apparition d'une transition de phase avec une forte diminution du magnétisme.
L'objectif du travail sera d'étudier la transition par des calculs ab-initio ("DFT+DMFT"), qui prennent en compte les effets d'interactions entre électrons au delà du champ moyen. Dans un premier temps, on se focalisera sur les propriétés magnétiques, spectroscopiques, élastiques et thermodynamiques de l'oxyde de Fer, qui est un système modèle à la fois pour la physique de la matière condensée et pour la géophysique.

S'il le souhaite, le stagiaire pourra s'impliquer dans le développement informatique du code de calcul ab-initio DFT+DMFT développé au laboratoire [2,3].

Le stage aura lieu au CEA de Bruyères le Châtel. Ce centre est facilement accessible depuis Paris ou la région parisienne par des bus affrétés par le CEA ou en voiture. Il héberge le très grand centre de calcul (TGCC). Le stagiaire aura donc à sa disposition des moyens de calculs importants, nécessaires pour mener à bien cette étude.

[1] D. Antonangeli, J. Siebert, C. M. Aracne, D. L. Farber, A. Bosak, M. Hoesch, M. Krisch, F. J. Ryerson, G. Fiquet, and J. Badro, Science 331, 64 (2011), Marquart et al Science, 324, 224 (2009).
[2] B. Amadon, F. Lechermann, A. Georges et al Phys. Rev. B 77, 205112 (2008).
[3] B. Amadon, J. Phys. Condens. Matter 24, 075604 (2012).
[cf aussi : http://iopscience.iop.org/0953-8984/labtalk-article/48584]

Contact : bernard.amadon@cea.fr, 01 69 26 74 63
Ce stage peut se poursuivre en thèse.

Commissariat à l'énergie atomique et aux énergies alternatives
Centre de Bruyères le Châtel | 91297 Arpajon Cedex
T. +33 (0)1 69 26 40 00 |
bernard.amadon@cea.fr
Etablissement public à caractère industriel et commercial | RCS Paris B 775 685 019