

Proposition de stage M2 Chimie

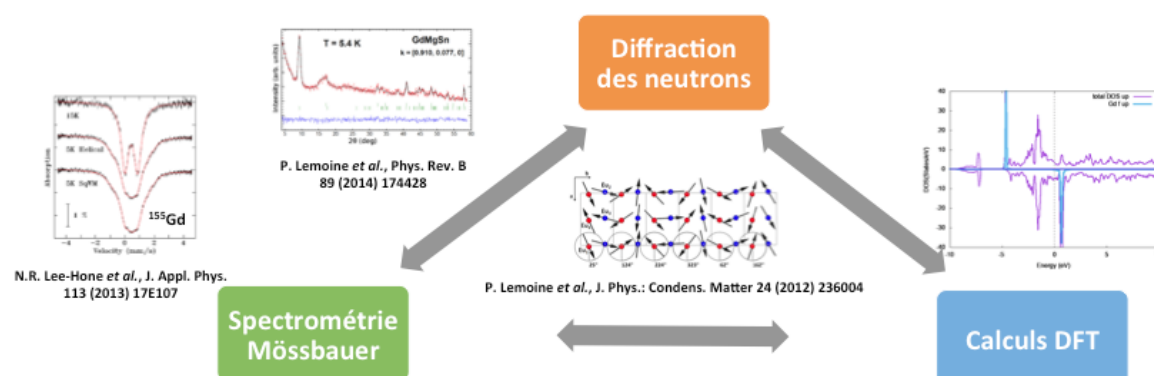
Titre du stage : Résolution de structures magnétiques complexes de composés intermétalliques à base de gadolinium par une approche multi-échelle couplant diffraction des neutrons, spectrométrie Mössbauer et calculs DFT

Équipes d'accueil : CTI & CSM

Responsables du stage : Xavier Rocquefelte et Pierric Lemoine

E-mail : xavier.rocquefelte@univ-rennes1.fr, pierric.lemoine@univ-rennes1.fr

L'objectif de ce stage est de modéliser les propriétés électroniques et magnétiques de matériaux solides périodiques. Ce projet de recherche fondamental original porte sur la résolution des structures magnétiques des composés intermétalliques GdNiX (X = Si, Ge, Sn, Pb) et sur la compréhension des interactions et des couplages magnétiques mis en jeu dans ces composés. Il s'appuie sur une approche multi-échelle couplant des données expérimentales (diffraction des neutrons et spectrométrie Mössbauer du ^{155}Gd) à des calculs théoriques basés sur le formalisme de la DFT (*Density Functional Theory*).



Ces composés ont déjà fait l'objet de mesures expérimentales complémentaires (diffraction des neutrons et spectroscopie Mössbauer). Cependant, il reste de réelles ambiguïtés ne permettant pas de conclure quant à la nature exacte des structures magnétiques de ces composés. L'objectif de ce stage est de réaliser des calculs basés sur le formalisme de la DFT (*Density Functional Theory*) afin de comprendre le lien existant entre la structure cristallographique et les propriétés magnétiques et ainsi lever les doutes existants.

La finalité de cette étude fondamentale associant des données expérimentales uniques à des calculs théoriques approfondis est d'étendre la compréhension des relations structure-propriété magnétique en étudiant l'influence de l'élément X (Si, Ge, Sn, Pb) sur les distances interatomiques, les structures magnétiques et les couplages magnétiques des atomes de

gadolinium dans cette série de composés de structure $TiNiSi$. La démarche innovante développée lors de cette étude pourra ensuite être appliquée à des systèmes magnétiques plus complexes et/ou d'intérêts applicatifs tels que l'étude de matériaux magnéto-caloriques à base de gadolinium.

Ce projet innovant s'appuie sur les compétences expérimentales en diffraction des neutrons et en spectrométrie Mössbauer de Pierric Lemoine et en calculs théoriques basés sur le formalisme de la DFT de Xavier Rocquefelte. Les résultats obtenus feront l'objet de publications dans des journaux à haut facteur d'impact et de présentations orales lors de conférences nationales et internationales.