

M. MAHTOUT Sofiane
Grade: Professeur
Département de Physique
Faculté des Sciences Exactes
Université A/MIRA de Bejaia

Lyon, le 25 Mai 2017

Lieu du stage:

Institut Lumière Matière
U.M.R. C.N.R.S. n° 5306
Université Claude Bernard Lyon 1
Domaine Scientifique de La Doua
Bat. A. Kastler, 10 rue Ada Byron,
69622 VILLEURBANNE CEDEX – FRANCE

Rapport de stage

Mon stage scientifique du 12 au 26 mars 2017 s'est déroulé à l'Institut Lumière Matière de l'Université Claude Bernard Lyon 1 sur le thème: étude théorique des propriétés structurales, électroniques et magnétiques d'agrégats hétérogènes. Il était notamment question de poursuivre les travaux entrepris récemment sur l'influence du dopage par un atome étranger dans les agrégats métalliques.

Une première étude concerne les propriétés structurales, électroniques et magnétiques des clusters de phosphore purs ensuite dopé par le fer. Ce projet est initié lors d'une collaboration lancée durant mon séjour à Lyon en 2016. Il ressort que les clusters de phosphore purs présentent des propriétés physiques très intéressantes, avec un comportement paire-impair très uniforme sur toute la gamme de taille étudiée, et complètement différentes de celles observées dans le phosphore massif. Après dopage des propriétés encore plus intéressantes sont observées. En plus de l'amélioration de la stabilité des cages de phosphore après substitution d'un atome de fer, les propriétés magnétiques adoptent un comportement oscillatoire avec un pas de taille de 5 atomes. En vue de concrétiser tous ces résultats, un article est rédigé et soumis à la revue « Journal of Cluster Sciences », revue scientifique de rang A.

Le deuxième volet de travail qui s'est inscrit dans le cadre de mon stage est l'étude des propriétés physiques des clusters de germanium dopés avec les nobles. Beaucoup de calculs ont été réalisés sur des clusters de tailles de 2 à 20 atomes. Des résultats très intéressants sont obtenus. Il ressort que la stabilité des cages de germanium dépend de la nature de l'espèce chimique substituée (Cu, Ag ou Au) et la position de l'impureté dans la cage considérée. L'atome de cuivre améliore considérablement la stabilité comparativement aux deux autres espèces. Des propriétés électroniques intéressantes sont observées particulièrement dans les clusters possédant de hautes symétries, à savoir le $\text{CuGe}_{10,12,14}$, AuGe_{14} et $\text{AgGe}_{12,14}$. Un deuxième article est rédigé. Il sera finalisé pour une soumission à publication dans les prochains jours.

Les discussions enrichissantes avec le Docteur Franck RABILLOUD de l'Institut Lumière Matière étaient très constructives. D'autres champs de visions et éventuelles études sur d'autres matériaux sont envisagées pour la suite de cette collaboration.

Mr Sofiane MAHTOUT

