

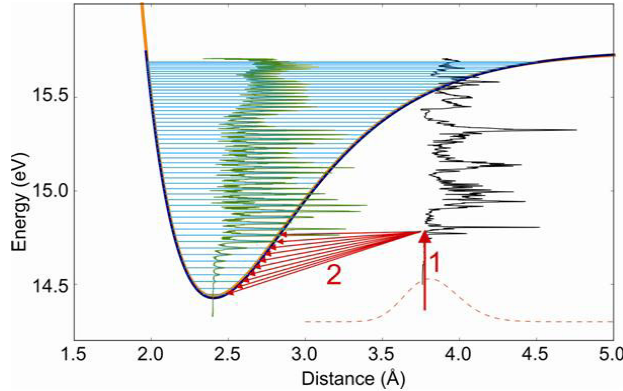


Lever la voile sur les états vibrationnels des molécules ionisées

Contacts : Lionel Poisson : lionel.poisson@cea.fr ; T : 01.69.08 /5161

Les molécules ionisées interviennent dans beaucoup de réactions chimiques, en particulier dans la haute atmosphère ou les nuages interstellaires. Connaître leur spectroscopie vibrationnelle permet de mieux comprendre leur réactivité. La spectroscopie de photoélectron est une méthode de choix pour mesurer les niveaux vibrationnels des molécules, mais elle apporte rarement la précision nécessaire. Pour gagner en précision, on a recours à une méthode dérivée qui ne s'intéresse qu'aux électrons de seuil (PFI-ZEKE), mais qui ne permet pas d'atteindre tous les niveaux. Avec le Laboratoire Modélisation et Simulation Multi Echelle (U. Paris-Est Marne-La-Vallée) nous avons mis au point une nouvelle méthode particulièrement précieuse lorsque la structure de la molécule neutre est très différente de celle de l'ion. Cette méthode appelée SPES utilise l'auto-ionisation des états de Rydberg de ces molécules pour accéder à l'ensemble des niveaux vibrationnels des molécules (Figure). Nous avons testé cette méthode sur le

dimère d'argon lors d'expériences réalisées sur la ligne DESIRS du synchrotron SOLEIL. L'argon ayant toutes ses couches électroniques complètes, il ne peut participer qu'à des liaisons de type van der Waals. En revanche, en retirant un électron de valence, ses états de Rydberg et son ion peuvent former des liaisons moléculaires. En appliquant la méthode SPES à ce dimère, nous avons pu observer directement pour la première fois les plus bas états vibrationnels de Ar_2^+ . La comparaison des courbes d'énergie potentielle de l'ion Ar_2^+ obtenues avec les méthodes de calculs *ab initio* actuelles à celle obtenue par reconstruction (méthode RKR) ouvre la voie à de nouvelles investigations théoriques. Nous avons également obtenu les probabilités d'ionisation relatives vers tous ses niveaux vibrationnels depuis chacun des états relais.



Principe de la méthode appliquée à Ar_2 . Courbe bleu foncé : reconstruction RKR de la courbe de potentiel. Courbe orange : courbe de potentiel calculée. Pointillé rouge : distribution de la distance dans le dimère atomique. Etape 1= Absorption vers un état de Rydberg, Etape 2 = Auto-ionisation vers les niveaux vibrationnels accessibles.

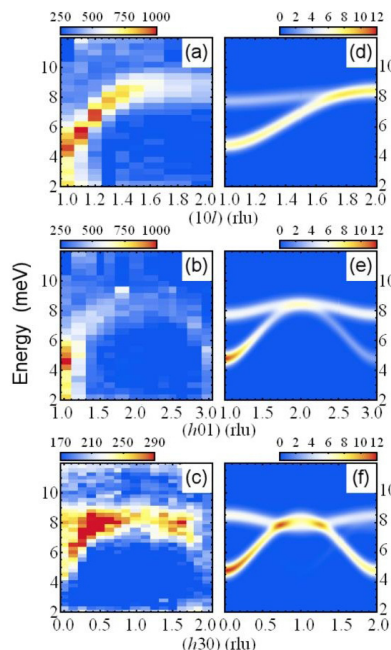


Ordre paradoxal et dynamique de spin anisotrope dans $CeRu_2Al_{10}$

Contact : Jean-Michel Mignot : jean-michel.mignot@cea.fr ; T : 01.69.08 /8708. Julien Robert : julien.robert@cea.fr ; T : /3449. Sylvain Petit : sylvain.petit@cea.fr ; T : /6039

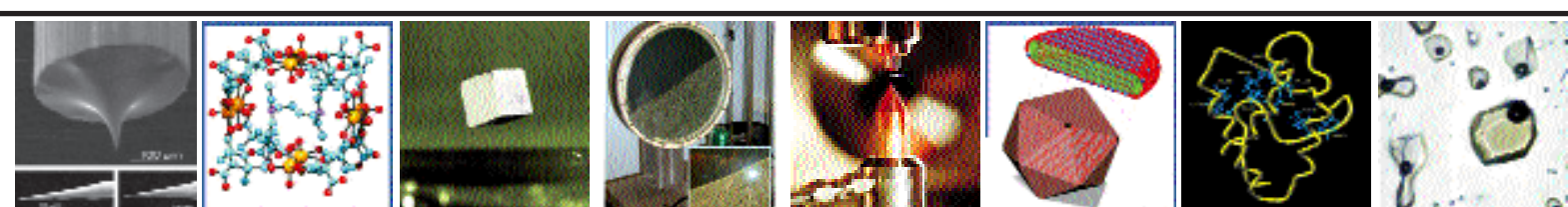
Les composés CeM_2Al_{10} (M = Ru, Os, Fe) ont d'abord été présentés comme de nouveaux membres de la famille des « isolants-Kondo », c'est-à-dire des systèmes d'électrons fortement corrélés développant à basse température un gap électronique dû à l'hybridation des états 4f localisés avec ceux de la bande de conduction. Mais rapidement, la découverte d'un état d'ordre antiferromagnétique, inhabituel dans ce type de système, a soulevé de nouvelles questions. Ni la valeur élevée de la température d'ordre ($T_0 = 27K$ dans $CeRu_2Al_{10}$, contre seulement 16K dans $GdRu_2Al_{10}$), ni la direction des moments ordonnés, contraire à l'anisotropie observée dans la phase paramagnétique, ni leur réorientation dans un champ magnétique extérieur, ne s'expliquent simplement dans une

modèle classique associant le champ cristallin et les interactions d'échange RKKY. Grâce aux monocristaux préparés par l'équipe de M. Sera à l'université de Hiroshima, nous avons



Courbes de dispersions mesurées (à gauche) et calculées (à droite) des excitations magnétiques dans $CeRu_2Al_{10}$. Le code de calcul, mis au point au LLB par S. Petit, repose sur un modèle de champ cristallin avec interactions d'échange anisotropes traité dans l'approximation RPA. L'accord global obtenu laisse subsister des différences attribuées à des effets d'hybridation directionnels des orbitales 4f du cérium.

pu caractériser la structure, puis sonder la dynamique de spin de $CeRu_2Al_{10}$ dans la phase ordonnée ainsi qu'au voisinage de la transition. L'utilisation de neutrons polarisés nous a permis de mettre en évidence une anisotropie très particulière des couplages entre les moments magnétiques de Ce, que nous avons attribuée à une hybridation directionnelle des états 4f avec ceux des ligands (Al notamment) formant une « cage » autour du site de la terre rare. Les expériences se poursuivent notamment sur les effets de substitution du ruthénium par le rhodium, afin d'étudier comment ces propriétés apparaissent à partir d'un composé présentant un magnétisme plus conventionnel.





CiMap

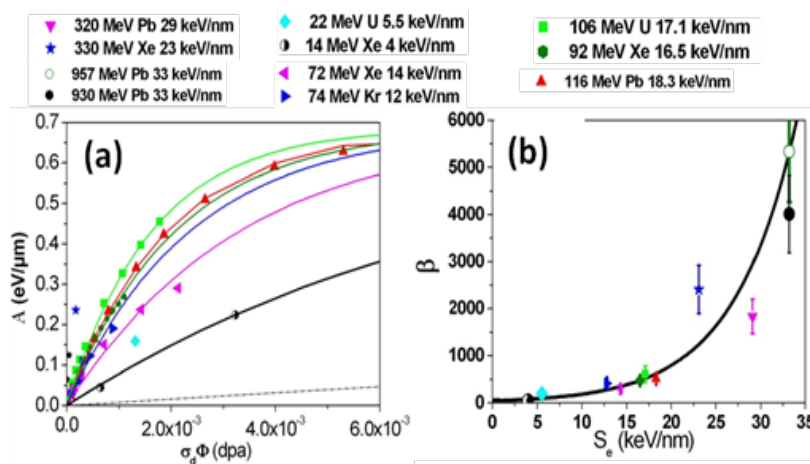
Après un diplôme d'ingénieur et un Master II recherche INSA, Mamour Sall a rejoint l'équipe MADIR au CIMAP en novembre 2010. Il y effectue une thèse avec Isabelle Monnet, portant sur « l'étude des modifications des propriétés physiques et structurales des semi-conducteurs III-V de structure wurtzite sous irradiation aux ions lourds ».

sall@ganil.fr. T : 02 31 45 44 23

Création de défauts absorbants dans le nitrure d'aluminium : synergie entre les excitations électroniques et les chocs nucléaires

Au cours des dernières années, les matériaux semi-conducteurs de structure wurtzite (AlN, GaN, InN) se sont révélés des candidats prometteurs pour des applications phares en opto- et micro-électronique (émission et détection, électronique hyperfréquence et de grande puissance...). Du fait de leur bonne résistance chimique et thermique, on envisage de les utiliser dans l'espace où ils peuvent être soumis à l'action des ions lourds rapides issus des vents solaires ou du rayonnement cosmique. Le but de mon travail de thèse est donc d'explorer les modifications physiques et structurales induites par les ions lourds dans ces matériaux. L'analyse *in-situ*, par absorption optique, des modifications induites par les ions lourds rapides dans l'AlN montre la création d'une bande d'absorption à 4.7 eV. Cette dernière est attribuée, dans la littérature, à des lacunes d'azote. Ce type de défaut est généralement créé par chocs nucléaires dans les matériaux insen-

sibles à la radiolyse. Bien que l'AlN soit plutôt connu pour être insensible aux effets des excitations électroniques, nous avons montré que celles-ci jouent un rôle très important dans la création des défauts responsables de la bande d'absorption à 4.7 eV. Cette création a été modélisée en rajoutant un coefficient de synergie, β , dans la loi classiquement utilisée pour décrire la formation de défauts par chocs nucléaires. Notre modèle permet d'ajuster l'évolution de la concentration de défauts absorbants dans l'AlN (Figure 1 (a)) en fonction du nombre de déplacements par atome (dpa). Par ailleurs, le coefficient de synergie β dépend très fortement du pouvoir d'arrêt électronique (Figure 1(b)), ce qui est en soi un mécanisme complètement nouveau dans la création de défauts ponctuels.



(a) Evolution de l'aire de la bande à 4.7 eV en fonction du nombre de dpa pour différents ions. Les lignes continues représentent l'ajustement par le modèle de synergie ($A=A_{\infty}(1-\exp(-k\beta\text{ dpa}))$) avec A_{∞} et k des constantes). (b) Evolution du coefficient de synergie β en fonction du pouvoir d'arrêt électronique S_e , la ligne continue sert de guide pour l'œil. Par le seul effet du S_e , β peut être augmenté de trois ordres de grandeur.

La vie des labos

Malgré les courants tourbillonnants et parfois contraires, vous avez su « pagaiare* » avec force et enthousiasme et, grâce à votre dynamisme, la page 2012 se referme sur de nombreux et beaux succès. Les derniers résultats connus de l'appel InterLabEx indiquent que nous avons su nous mobiliser, la mise en place des équipements d'excellence (ATTOLAB, CILEX, GENESIS ou encore TEMPOS) se poursuit à un très bon rythme, indéniablement ils structureront l'Institut dans les années à venir. Malgré une rude compétition, notre taux de succès à l'ANR dépasse les 21% en 2012 avec plusieurs motifs de satisfaction supplémentaires comme le doublement de notre nombre d'ANR partenariales acceptées. Les montants de contrats industriels décrochés sont aussi en forte croissance. D'autres projets pluriannuels émergent aussi : le bâtiment Ultrabasbruit est sorti de terre, le mésoXcope est commandé, l'instrumentation autour du LLB se modernise du fait du contrat franco-suédois.... Ces succès vont naturellement orienter nos actions en 2013. Je souhaite que l'année qui s'ouvre soit aussi celle d'intenses réflexions pour préparer l'évaluation de nos différentes unités par l'AERES et pour définir ensemble le contour et les objectifs futurs de notre institut. Je vous souhaite à vous et à vos proches une très heureuse année 2013.

Didier NORMAND



* En italien dans le texte.