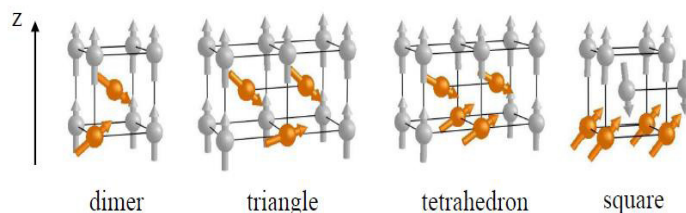




## Un modèle simple et efficace pour décrire l'alliage magnétique Fe-Cr

Cyrille Barreteau : tél : 01.69.08/38.56, [cyrille.barreteau@cea.fr](mailto:cyrille.barreteau@cea.fr)

Malgré son apparente simplicité cristallographique, l'alliage Fer-Chrome est un système d'une complexité redoutable du fait des interactions magnétiques antagonistes (ferromagnétisme du fer et antiferromagnétisme du chrome) et du couplage très fort entre ses propriétés structurales et magnétiques. C'est également un alliage aux applications multiples. L'acier qui contient plus de 10% de chrome est à la fois résistant à la corrosion, à l'irradiation et au gonflement, ce qui en fait un excellent candidat pour les cuves des futurs réacteurs nucléaires. Dans le domaine de la spintronique, la magnétorésistance géante a été mise en évidence dans des multicouches Fe/Cr. Une des difficultés pour modéliser correctement ce système est qu'il est indispensable de décrire ses propriétés magnétiques avec une grande précision (ce qui implique de prendre en compte la structure électronique) tout en gardant une simplicité suffisante pour espérer simuler des systèmes de grande taille présentant un désordre structural, chimique ou magnétique (incluant les effets



Exemples de configurations magnétiques non colinéaires pour des petites inclusions de fer dans le chrome.

de température par exemple). Nous avons mis au point un modèle de liaisons fortes, magnétique, semi-empirique, en base minimale, pour décrire l'alliage Fe-Cr. Ses paramètres sont ajustés uniquement sur des données de calculs ab-initio des éléments purs en volume. Ce modèle simple et généralisable à d'autres matériaux prend en compte le magnétisme non colinéaire et permet de décrire, avec une précision proche des méthodes ab-initio, aussi bien les configurations magnétiques complexes émergeant dans l'alliage bimétallique que l'énergétique subtile intimement liée aux interactions magnétiques, et ceci pour des géométries variées sur toute la gamme de concentration. Ce travail est le fruit d'une longue collaboration entre l'IRAMIS/SPEC et la DEN/DMN/SRMP. Nous envisageons à présent d'utiliser intensivement ce modèle pour étudier l'alliage Fer-Chrome dans des conditions s'approchant autant que possible des conditions réelles de fonctionnement de ce matériau.

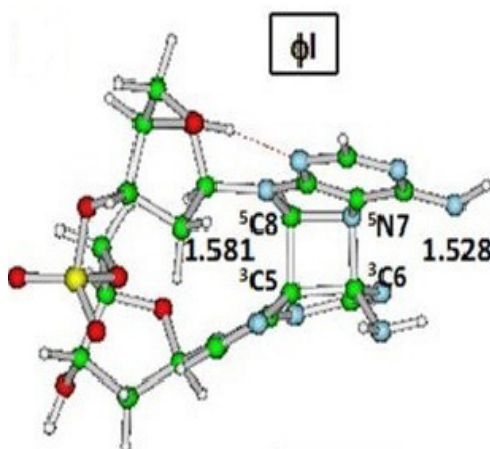


## Chemin réactionnel de photo-dimérisation des adénines

Dimitra Markovitsi : tél : 01.69.08/46.44, [dimitra.markovitsi@cea.fr](mailto:dimitra.markovitsi@cea.fr). Akos Banyasz : tél : /12.07, [akos.banyasz@cea.fr](mailto:akos.banyasz@cea.fr)

L'absorption d'un photon UV par des bases d'ADN peut induire des réactions chimiques qui altèrent le code génétique. Parmi les différents photo-produits isolés et caractérisés, on trouve deux types de dimères d'adénine, dans lesquels les deux bases sont liées ensemble par des liaisons covalentes, en ayant perdu leur identité. Des travaux, menés il y a une quarantaine d'années, avaient postulé que ces deux dimères possédaient un précurseur commun. Cette hypothèse vient d'être vérifiée grâce à une étude combinant la chimie théorique et la spectroscopie d'absorption résolue en temps. Dans un premier temps, des simulations de dynamique moléculaire sur des simples brins ont permis de déterminer l'orientation réciproque de deux adénines successives susceptibles de subir une dimérisation. Ensuite, des calculs de chimie quantique (PCM/TD-DFT) effectués sur de petits fragments comportant seulement deux adénines

avec l'orientation appropriée ont identifié la formation d'un intermédiaire de réaction ( $\phi I$ ) à partir d'un état excité singulet. Les expérimentateurs du groupe DICO ont pu détecter la signature spectrale de cet intermédiaire de réaction  $\phi I$  pour des simples brins comportant vingt adénines. Ils ont également montré qu'il se forme avant 50 ns, et que sa conversion vers des dimères finaux a lieu entre 0.1 s et 5 min. Ce travail a été effectué en collaboration avec Roberto Improta (CNR, Naples) qui vient d'obtenir une Chaire d'Alembert IDEX. Il sera accueilli au sein du groupe DICO du LIDYL pour une durée de 9 mois à partir de 2017.



Structure de l'intermédiaire de la réaction entre deux adénines en conformation syn-anti, obtenue par la méthode TD-DFT. Les valeurs représentent les distances (en Angström) entre les atomes  ${}^5\text{C}8$ - ${}^3\text{C}5$  et  ${}^5\text{N}7$ - ${}^3\text{C}6$  où les nouvelles liaisons se sont formées.

