

Les oxydes de métaux de transition possèdent un vaste éventail de propriétés physiques telles que le ferromagnétisme, la ferroélectricité ou la supraconductivité, coexistant au sein d'un nombre restreint de familles structurales. En particulier, la structure pérovskites ABO<sub>3</sub> a suscité le plus d'efforts de la communauté de par sa grande flexibilité structurale, mais aussi car elle est relativement simple à élaborer sous forme de couches minces, qui peuvent ainsi être assemblée en hétérostructures combinant plusieurs matériaux présentant de forts couplages entre eux et des propriétés inédites aux interfaces.

Au-delà des pérovskites au sein desquelles les ions de métaux de transition sont entourés d'une cage octaédrique d'ions oxygènes et organisés en trois dimensions dans la structure, plusieurs types d'oxydes présentent une organisation bidimensionnelle des cations et des oxygènes, et c'est le cas par exemple des composés du type « infinite-layer » de formule ABO<sub>2</sub>. Ces matériaux constituent la brique de base des cuprates supraconducteurs à haute température critique (SrCuO<sub>2</sub>) [Nature **351**, 549 (1991)], une fois convenablement dopés. Ils restent cependant moins étudiés que les pérovskites.

Très récemment, une nouvelle phase de la famille « infinite-layer » a été identifiée comme un nouveau supraconducteur [Nature **572**, 624 (2019)]. Il s'agit du matériau NdNiO<sub>2</sub> dopé en Sr. Cette découverte vient couronner dix ans de recherche d'une supraconductivité dans des oxydes à base de Ni [PRL **100**, 016404 (2008)] et elle ouvre une nouvelle direction de recherche dans les matériaux quantiques à base d'oxydes.

Le sujet de thèse proposé vise à comprendre la physique des composés (Nd,Sr)NiO<sub>2</sub> et l'origine de la phase supraconductrice. Selon les résultats obtenus, d'autres pérovskites, impliquant des matériaux similaires aux nickelates de terre-rare RNiO<sub>3</sub> (R=Lu-La, Y) pourront être explorées dans leur phase « infinite layer ». La thèse s'organisera en deux volets. Le **premier volet** sera théorique et réalisé principalement au laboratoire de Cristallographie et Sciences des Matériaux (**CRISMAT, W. Prellier, J. Varignon**, <http://www-crismat.ensicaen.fr>). Cette partie sera basée sur des simulations de structure électronique réalisée dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT) qui permettront de déterminer les propriétés structurales, magnétiques et électroniques du NdNiO<sub>2</sub> dans sa phase massive et sous effets du dopage au strontium. La **seconde partie** sera expérimentale et sera principalement menée à l'Unité Mixte de Physique CNRS/Thales (**UMPHY, M. Bibes**, <http://oxitronics.cnrs.fr>). Cette partie concernera l'élaboration des phases « infinite layer » sous forme de couches minces par la technique d'ablation laser pulsée, suivie d'un recuit *ex situ* sous atmosphère riche en hydrogène par décomposition de CaH<sub>2</sub> dans des ampoules scellées. Les échantillons seront caractérisés en diffraction de rayons X, magnéto-transport et spectroscopie de rayons X à l'UMPhy.

Le candidat devra posséder une fort bagage en physique de la matière condensée et être familier avec les simulations numériques. Des connaissances en résolution du problème électronique (DFT) sont fortement souhaitées. Par ailleurs, des connaissances en élaboration de couches minces et leur caractérisation structurale seraient un plus.

### Contact :

- Wilfrid Prellier, CRISMAT, Directeur Recherche CNRS, [wilfrid.prellier@cnrs.fr](mailto:wilfrid.prellier@cnrs.fr)
- Julien Varignon, CRISMAT, Maître de Conférences ENSICAEN, [julien.varignon@ensicaen.fr](mailto:julien.varignon@ensicaen.fr)
- Manuel Bibes, Unité Mixte de Physique CNRS/Thales, Directeur Recherche CNRS, [manuel.bibes@cnrs-thales.fr](mailto:manuel.bibes@cnrs-thales.fr)