

Université de Monastir Faculté des Sciences Département de Physique



stage de Master de Recherche en Physique Parcours:

PQ

<u>suiet:</u> Etude des propriétés structurales des oxydes de fer par des models

quantiques

Proposé par: Ben El Hadj Rhouma Mounir Contact(email): mbelhajrhouma@yahoo.fr Structure de recherche: EMIR IPEIM

Directeur de la structure de recherche: Ben Najma Faicel

Le sujet sera suivi par une thèse: Oui

Résumé:

:Dans ce travail, nous étudierons les propriétés structurales des nanoparticules (Fe2O3)n. Dans ce cadre, nous développerons des potentiels modèles décrivant les interactions O-O, Fe-Fe etFe-O. La méthode d'optimisation Basin-Hoping sera utiliser pour explorer les surfaces des énergies potentielles de ces nanoparticules dans le but de déterminer leurs structures stables. Ces agrégats (Fe2O3)n possèdent quatre phases : Phase α : L'hématite. Phase β : Phase β : Phase β : Maghémite **Références**: